

摘 要

时域有限差分法 (FDTD) 一方面具有概念简单、编码方便以及时域计算等优点, 另一方面由于稳定性条件的限制, 时间步受到网格尺寸的限制而成为提高计算效率的瓶颈因素。

交替方向隐式时域有限差分法 (ADI-FDTD) 的时间步尺寸则完全没有这一限制, 因而是无条件稳定的。但时间步加大将导致 ADI-FDTD 算法的色散误差增加。本文采用傅里叶分析方法, 研究了空域单色模的增长过程, 在此基础上导出了描述色散误差变化规律的数值色散公式; 并使用数值实验方法验证所得色散公式。通过分析对比发现, 相同条件下 ADI-FDTD 较 FDTD 有更大的色散误差; 在空间网格给定的条件下, 随着时间步的增加, FDTD 算法的色散误差减小 (在稳定范围内), 而 ADI-FDTD 的色散误差增加。

在模拟开区域问题时由于计算机内存有限必须进行计算区域截断, 在截断边界上必须满足吸收边界条件, 以模拟电磁波无反射地通过截断边界向无限远处传播。最近已有一些文献研究适用于 ADI-FDTD 的理想匹配层 (PML) 吸收边界条件, 但采用所提出的方法, 当时间步尺寸增加时 PML 的反射误差成数量级地增加。在分析存在问题的基础上, 本文采用不同的离散方法, 恰当地解决了这一问题, 实现了理想匹配层与 ADI-FDTD 算法有实用意义的结合。

关键词: 时域有限差分法 交替方向隐式算法 色散误差 理想匹配层

ABSTRACT

The finite-difference time-domain (FDTD) method has advantages of concept simplicity, coding convenience, computation in time-domain. On the other hand, time step is restrained from cell size due to stability condition, and it becomes the bottle-neck for more efficient computation.

The alternating direction implicit finite-difference time-domain (ADI-FDTD) method is free from the constraint for time step, and it is unconditionally stable. But a larger time step results in higher numerical dispersion. In this thesis, a Fourier method is employed to check the increasing process of spatial sinusoidal modes, and then a numerical dispersion relation is formulated that characterizes the numerical dispersion errors. To check the theoretical prediction on the numerical dispersion errors, a series of numerical experiments is done. It is found through analysis that the dispersion errors of ADI-FDTD algorithm are larger than that of the standard FDTD algorithm when using the same modeling parameters, and that when spacial grid sizes are given, larger time step means smaller dispersion errors with the standard FDTD (if stable condition is satisfied), while larger time step means larger dispersion errors with ADI-FDTD.

In modeling electromagnetic waves propagation in "open" regions, the field computation domain must be limited in size because no computer can store an unlimited amount of data, and a suitable absorbing boundary condition on the outer perimeter of the domain must be used to simulate its extension to infinity. Some papers have been published recently associate with the perfectly matched layer (PML) suitable for ADI-FDTD. But with the proposed schemes, the reflection errors increase exponentially when a larger time step is used. A new discretization scheme is used to obtain PML of ADI-FDTD to overcome the problem.

Keyword: Finite-difference time-domain method Alternating direction
implicit algorithm Dispersion error perfectly matched layer

第一章 绪论

1.1 FDTD 算法的局限性

时域有限差分法(FDTD)是将 Maxwell 旋度方程直接离散, 得到一个循环时间步推进算法, 即当前时刻的电磁场解由上一时刻的电磁场解计算得到, 如此循环往复, 步步推进[1,2]。FDTD 由于能够精确模拟大量的电磁相互作用问题而被越来越多地用于各种场合的电磁场分析。

就一般而言, FDTD 算法被认为具有方法简便、适用性强等优点。这种方法不仅可以用来计算通常的简单媒质中的电磁场问题, 还可用来计算各向异性媒质、色散媒质、甚至非线性媒质电磁场问题。此外, 作为一种时域方法, FDTD 模拟只要一次运行, 即可以得到一定带宽频率成分的所有信息, 前提是只要选用一个宽带激励, 比如最常用的高斯脉冲激励。

FDTD 算法尽管具有以上优点, 但其应用通常仅限于电小尺寸问题。原因主要在于 FDTD 的计算效率不够高, 如果用来计算一个电大尺寸问题, 为了获得足够精度的解, 则需要比较大的内存和充分长的 CPU 时间。较低的计算效率成为 FDTD 算法进一步应用的瓶颈问题[3]。

有关 FDTD 的理论研究表明, 可观的计算机资源需求, 如内存和 CPU 时间, 主要是由于以下两个方面的与建模过程相关的限制:

- (1) 与所要模拟的电磁波调和分解的最短波长相比, 空间网格尺寸必须充分小(通常每波长 10-20 个网格单元), 以保证色散误差可以忽略;
- (2) 时间步尺寸必须充分小, 以满足如下 Courant-Friedrich-Levy (CFL) 稳定性条件:

$$v_{\max} \Delta t \leq \left[\frac{1}{\Delta x^2} + \frac{1}{\Delta y^2} + \frac{1}{\Delta z^2} \right]^{-1/2} \quad (1-1)$$

其中 v_{\max} 为被模拟媒质中电磁波的最大相速度。如果时间步尺寸大于以上限制, FDTD 差分方案是不稳定的, 随着时间步的推进, 数值计算中的截断误差将无限制地增长。

特别是后者, 当计算域结构复杂时, 往往不得不采用较细的网格或非均匀网格以保证计算精度。但如果在计算域中的部分子区域或某一方向采用相对较小的网格尺寸, 由于上述 CFL 稳定性条件的限制, FDTD 模拟电磁场演变的时间步尺寸必须相应地减小, 因而模拟在一定物理时间内的物理过程所需要的时间步数增加。

这往往造成无法避免的计算负担,如大大地增加了 CPU 时间;另一方面——本文第三章将证明——FDTD 时间步减小本身伴随着色散误差的增加,这与提高计算精度的初衷相背。如果能够得到一种 FDTD 差分方案,该方案不需要考虑 CFL 稳定性条件,即当 (1-1) 不满足时,差分方案仍然是稳定的,这将可能大幅地提高 FDTD 算法的执行效率。

1.2 无条件稳定 FDTD 研究概况

一般而言,大多数显式差分近似是条件稳定的,而大多数隐式差分近似是无条件稳定的[4]。

从这一概念出发,文献[5]得到一种无条件稳定的 FDTD。我们知道在 FDTD 方法中,当前时刻的电场(或磁场)由上一时刻的电场(或磁场)和中间时刻的磁场(或电场)求得。而文献[5]采用的算法只是将一般 FDTD 差分法中间时刻的场值代以前后两个时刻场值的平均值,因而显式算法变为隐式,条件稳定变为无条件稳定。这个方法导致了一个大的线性方程组,求解这个方程组的运算量很大,但这种算法的思路与本文将要讨论的“交替方向隐式算法(Alternating-Direction Implicit Method,简称为 ADI)”[3,8,9]一脉相通,本文第二章还要进一步介绍。

ADI-FDTD 是一种比较成功的无条件稳定算法。最早在 1984 年, R.Holland 第一次将 ADI 应用于 Yee 网格从而得到了一种隐式的 FDTD 差分格式[6],其中,为求解 Maxwell 方程有限差分算子被分解为三个算子,每个算子对应与一个坐标方向,因此每一个时间步的 FDTD 迭代需要分为三个次一级的隐式计算步来完成。这种算法是无条件稳定的,但伴随有严重的介电损耗。在 1990 年,一种二维的 FDTD 算法被提出来[7],这种算法允许使用大于标准 FDTD 的时间步,但由于使用了不同于 Yee 网格的交错网格,网格点和场分量是 Yee FDTD 的两倍,因而需要更大的内存和运行时间。直到 1999 年 Takefumi Namiki 的有关 ADI-FDTD 文章[8]发表后,ADI-FDTD 算法才真正成为了一种具有实用价值的算法。

ADI-FDTD 兼有无条件稳定和相对于其它无条件稳定算法求解运算量较小的优点。这种算法将 FDTD 算法的一个时间步分为前后两个次级时间步。和 FDTD 一样,电场(或磁场)分量的求解与该分量垂直面上对该分量所在点形成围线的四个相邻点的磁场(或电场)分量相关,这四个分量两两成对,位于两条相互垂直的直线上。FDTD 方法式显式的,求解当前时刻的场量只用到前一时刻已知的场量,ADI-FDTD 电场(或磁场)分量的值,与垂直面上一个方向当前时刻的磁场(或电场)分量相关(未知),而与另一个方向上半个时间步的磁场(或电场)分量相关(已知)。在相互耦合的方向上三个未知量必须同时求解,两个次级的时

间步分别在不同的方向交替耦合。该算法导致一个三条带系数矩阵线性方程组，可以使用征对这种方程组的 Thomas 算法求解。这种新方法的优点和缺点已逐步为大家所认识。由于一些计算中间量需要暂时保存，ADI-FDTD 占用较大的内存；每一时间步场量更新的运算量数倍于 FDTD；在相同条件下，ADI-FDTD 的数值误差总要大于 FDTD。但 ADI-FDTD 允许使用任意大时间步，因此在计算域中最小网格尺寸比波长小得多的情况下，ADI-FDTD 总的运算时间比 FDTD 少，因而具有较高的计算效率。

此外，还有一些学者致力于发展其它的一些方案。如文献[10]介绍了一种基于特征线理论的隐式算法(Implicit LU/AF FDTD)，该方法具有二阶精度，同 ADI 一样起源于计算流体力学，是一种将 LU/AF 近似因式分解技术应用于通量守恒式的 Maxwell 方程而得到的迎风格式。值得一提的是，荷兰 Groningen 大学的 S.Kole 等人采用算子方法，得到了一系列显式的无条件稳定的算法，这些算法采用类似 Yee 的空间网格，其精度等级可以采用所提供的系统的方法得以提高，而不影响无条件稳定性。S.Kole 等人已有两篇文章发表(Physics Review 2001, Physics Review 2002)。

1.3 本文主要工作和研究方法

ADI-FDTD 是一种较新的算法，相关的研究主要集中在色散误差、适用 PML、以及应用研究方面。

Takefumi Namiki 在 1999 年提出二维 ADI-FDTD 算法的同时，还给出了一个二维 ADI-FDTD 算法的数值色散公式[8]，在 2000 年又采用数值实验方法研究了二维 ADI-FDTD 算法的计算误差[11]。2001 年 Fengfua Zheng 等导出了三维 ADI-FDTD 算法的数值色散公式[12]。2002 年 A.P.Zhao 则导出了两个二维 ADI-FDTD 算法的数值色散公式[13]，并因此认为有两种二维 ADI-FDTD 算法，三维情况则更为复杂。

由于 ADI-FDTD 算法的数值色散公式具有重要的理论价值和实践指导意义，本文就该问题作了进一步的研究。值得注意的是，上述所有数值色散公式都有待于数值实验的检验。本文首先将文献[8]和文献[13]所得二维色散公式与实验结果相对照，发现这两个公式与实验结果均有较大的偏差。鉴于此本文采用傅里叶分析方法，研究了空域单色模的增长过程，在此基础上得到了一个新的二维 ADI-FDTD 数值色散公式。该公式与实验结果吻合较好。

ADI-FDTD 算法出现以后，相应的吸收边界条件(ABC)被采用[8]。Mur 方案[14]是首选的 ABC，但很多情况下 Mur 方案是不够的。文献[15]将 Berenger 建立在场分裂形式 Maxwell 方程基础上的理想匹配层 (PML) [16-19]推广到 ADI-FDTD 算法中，保持了 ADI-FDTD 算法的无条件稳定性，但边界条件的反射误差随时间步

尺寸的增加而成数量级地增加。考虑到 ADI-FDTD 通常用于时间步尺寸较大的场合, 如此 PML 的实际作用甚至不超过 Mur 方案。文献[20]将单轴各向异性 PML(UPML)推广到 ADI-FDTD, 但存在与文献[15]相同的问题。为了解决这一问题, 本文提出了一种不同的差分方案用于离散修正形式 Maxwell 方程, 从而将 Berenger 的 PML 推广到 ADI-FDTD 算法, 其结果是边界条件的反射误差几乎恒定地保持在-80dB 上下, 达到与 FDTD PML 相同的性能。

本文主要致力于 ADI-FDTD 算法的理论性研究。在第二章中较系统地介绍了 ADI-FDTD 算法的思路以及二维、三维 ADI-FDTD 算法; 第三章首先介绍了数值算法的稳定性概念, 然后给出了二维 ADI-FDTD 算法无条件稳定的理论证明; 第四章将 ADI-FDTD 算法用于二维、三维谐振腔分析, 通过这些例子进一步了解该算法在运行速度和数值误差等方面的特征; 第五章的数值实验发现已有的二维色散公式与实验结果偏差较大, 故而重新推导并利用数值实验证明了新的二维 ADI-FDTD 色散公式, 接着从色散公式出发通过大量图例从各个方面对比研究了 ADI-FDTD 和 FDTD 算法的相同和不同之处; 第六章在对 ADI-FDTD 原理进一步认识的基础, 提出了与原有方法不同的离散方案, 将 Berenger 建立在场分裂形式 Maxwell 方程基础上的 PML 推广到 ADI-FDTD 算法中, 并提供了部分图例以说明新方法的合理性; 第七章为全文总结, 简要陈述了本文工作的意义和主要的结论, 并提出了有待进一步研究的课题。

第二章 ADI-FDTD 算法介绍

ADI-FDTD 算法是在通常的 FDTD 算法的基础上发展而来的, 其电磁场分量在空间网格上交错分布, 与 FDTD 算法完全相同。其不同之处在于, 这种新方法是建立在“交替方向隐式算法(ADI)”的基础上[8]。ADI 算法求解差分方程将导致一个三条带系数矩阵线性方程组, 托马斯(Thomas)算法用于求解这一类型的线性方程组非常有效[4], 这使得 ADI 算法由于较其它隐式算法具有求解方便快捷的优点而被用于多维问题的求解中。和通常的 FDTD 算法相比较, 这种新方法完全摆脱了 CFL 稳定性条件的限制, 具有无条件稳定性[3,8]。本章第一节首先列举了本文所引用 Maxwell 方程的各种分量形式, 并简要介绍一种概念相对简单的基于 Crank-Nicolson 离散格式的隐式 FDTD, 以此说明发展 ADI-FDTD 的必要性及其特点; 第二节介绍二维 ADI-FDTD 算法; 第三节介绍三维 ADI-FDTD 算法。

2.1 Maxwell 方程及无条件稳定 FDTD 初步

2.1.1 Maxwell 旋度方程

宏观电磁场的 Maxwell 旋度方程可表示为:

$$\nabla \times \vec{E} = -\frac{\partial \vec{B}}{\partial t} - \vec{J}_m \quad (2-1)$$

$$\nabla \times \vec{H} = \frac{\partial \vec{D}}{\partial t} + \vec{J}_e \quad (2-2)$$

以上两式中, \vec{E} 为电场强度(V/m); \vec{H} 为磁场强度(A/m); \vec{D} 为电位移矢量(C/m²); \vec{B} 为磁感应强度(T); \vec{J}_e 为电流密度矢量(A/m²); \vec{J}_m 为磁流密度矢量(V/m²)。

对于各向同性媒质而言, 在实际工程问题中经常遇到的场强范围内, 本构关系是简单的线性关系:

$$\vec{D} = \epsilon \vec{E} \quad (2-3)$$

$$\vec{B} = \mu \vec{H} \quad (2-4)$$

式中, ϵ 为介电常数(F/m); μ 为磁导率(H/m)。

在电的和磁的导体中, 对电流密度矢量和磁流密度矢量有下式成立:

$$\vec{J}_e = \sigma \vec{E} \quad (2-5)$$

$$\vec{J}_m = \sigma_m \vec{H} \quad (2-6)$$

式中, σ 为电导率(S/m); σ_m 为等效磁导率(Ω/m)。综合(2-1)至(2-6)式, Maxwell 方程可写为:

$$\nabla \times \vec{E} = -\mu \frac{\partial \vec{H}}{\partial t} - \sigma_m \vec{H} \quad (2-7)$$

$$\nabla \times \vec{H} = \varepsilon \frac{\partial \vec{E}}{\partial t} + \sigma \vec{E} \quad (2-8)$$

在直角坐标系中, 将(2-7)与(2-8)式展开可得:

$$\frac{\partial E_x}{\partial t} = \frac{1}{\varepsilon} \left(\frac{\partial H_z}{\partial y} - \frac{\partial H_y}{\partial z} - \sigma E_x \right) \quad (2-9a)$$

$$\frac{\partial E_y}{\partial t} = \frac{1}{\varepsilon} \left(\frac{\partial H_x}{\partial z} - \frac{\partial H_z}{\partial x} - \sigma E_y \right) \quad (2-9b)$$

$$\frac{\partial E_z}{\partial t} = \frac{1}{\varepsilon} \left(\frac{\partial H_y}{\partial x} - \frac{\partial H_x}{\partial y} - \sigma E_z \right) \quad (2-9c)$$

$$\frac{\partial H_x}{\partial t} = \frac{1}{\mu} \left(\frac{\partial E_y}{\partial z} - \frac{\partial E_z}{\partial y} - \sigma_m H_x \right) \quad (2-9d)$$

$$\frac{\partial H_y}{\partial t} = \frac{1}{\mu} \left(\frac{\partial E_z}{\partial x} - \frac{\partial E_x}{\partial z} - \sigma_m H_y \right) \quad (2-9e)$$

$$\frac{\partial H_z}{\partial t} = \frac{1}{\mu} \left(\frac{\partial E_x}{\partial y} - \frac{\partial E_y}{\partial x} - \sigma_m H_z \right) \quad (2-9f)$$

在二维情况下以上方程组分裂为两组独立的方程。

二维 TE 模:

$$\frac{\partial E_x}{\partial t} = \frac{1}{\varepsilon} \left(\frac{\partial H_z}{\partial y} - \sigma E_x \right) \quad (2-10a)$$

$$\frac{\partial E_y}{\partial t} = \frac{1}{\varepsilon} \left(-\frac{\partial H_z}{\partial x} - \sigma E_y \right) \quad (2-10b)$$

$$\frac{\partial H_z}{\partial t} = \frac{1}{\mu} \left(\frac{\partial E_x}{\partial y} - \frac{\partial E_y}{\partial x} - \sigma_m H_z \right) \quad (2-10c)$$

二维 TM 模:

$$\frac{\partial E_z}{\partial t} = \frac{1}{\varepsilon} \left(\frac{\partial H_y}{\partial x} - \frac{\partial H_x}{\partial y} - \sigma E_z \right) \quad (2-11a)$$

$$\frac{\partial H_x}{\partial t} = \frac{1}{\mu} \left(-\frac{\partial E_z}{\partial y} - \sigma_m H_x \right) \quad (2-11b)$$

$$\frac{\partial H_y}{\partial t} = \frac{1}{\mu} \left(\frac{\partial E_z}{\partial x} - \sigma_m H_y \right) \quad (2-11c)$$

以上公式对于本文所涉及的研究而言具有足够的一般性。但在本文的数值计算编码中采用了归一化的场量，所有代码可用于如下三种场量归一化形式任意之一：

$$1. \quad \vec{H}' = \sqrt{\frac{\mu_0}{\varepsilon_0}} \vec{H}, \quad \vec{E}' = \vec{E} \quad (2-12a)$$

$$2. \quad \vec{H}' = \vec{H}, \quad \vec{E}' = \sqrt{\frac{\varepsilon_0}{\mu_0}} \vec{E} \quad (2-12b)$$

$$3. \quad \vec{H}' = \sqrt{\eta_0} \vec{H}, \quad \vec{E}' = \frac{\vec{E}}{\sqrt{\eta_0}}, \quad \text{其中 } \eta_0 = \sqrt{\frac{\mu_0}{\varepsilon_0}} \quad (2-12c)$$

因为采用三种场量归一化形式任意之一都将得到如下形式的 Maxwell 方程：

$$\nabla \times \vec{E}' = -\frac{\partial \vec{H}'}{c \cdot \partial t} \quad (2-13a)$$

$$\nabla \times \vec{H}' = \frac{\partial \vec{E}'}{c \cdot \partial t} \quad (2-13b)$$

在不引起混淆的前提下，引用场量时仍然采用了原来的符号。其中已假设无耗条件 $\sigma = \sigma_m = 0$ 。

2.1.2 FDTD 差分格式

考虑二维 TE 模，场分量在平面网格上的位置分布如图所示

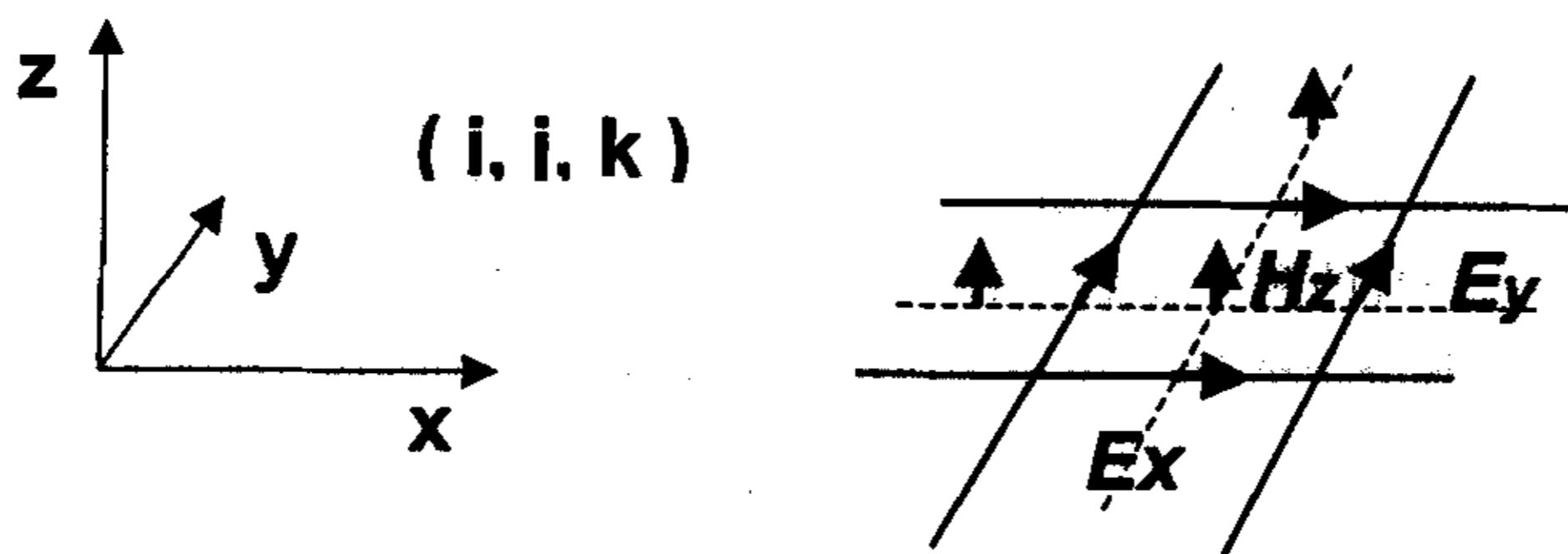


图 2.1 二维 TE 模场分量在 FDTD 网格上的位置分布

场分量 $F_\alpha(t, x, y)$ 在离散空间表示为如下形式:

$$F_\alpha|_{i,j}^n = F_\alpha(n\Delta t, i\Delta x, j\Delta y) \quad (2-14)$$

其中 $\alpha = x, y, z$ 按照习惯 n, i, j 为时间和空间指数, Δt 为时间增量, $\Delta x, \Delta y$ 分别为沿 X, Y 方向的空间网格尺寸。考虑(2-10)式, 令 $\sigma = \sigma_m = 0$, 将所有的导数项代以其中心差分近似即可得相应的 FDTD 差分格式:

$$\frac{1}{\Delta t} \left[E_x|_{i+\frac{1}{2},j}^{n+1} - E_x|_{i+\frac{1}{2},j}^n \right] = \frac{1}{\mu\Delta y} \left[H_z|_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2}}^{n+1/2} - H_z|_{i+\frac{1}{2},j-\frac{1}{2}}^{n+1/2} \right] \quad (2-15a)$$

$$\frac{1}{\Delta t} \left[E_y|_{i,j+\frac{1}{2}}^{n+1} - E_y|_{i,j+\frac{1}{2}}^n \right] = -\frac{1}{\mu\Delta x} \left[H_z|_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2}}^{n+1/2} - H_z|_{i-\frac{1}{2},j+\frac{1}{2}}^{n+1/2} \right] \quad (2-15b)$$

$$\frac{1}{\Delta t} \left[H_z|_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2}}^{n+1/2} - H_z|_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2}}^{n-1/2} \right] = -\frac{1}{\varepsilon\Delta x} \left[E_y|_{i+1,j+\frac{1}{2}}^n - E_y|_{i,j+\frac{1}{2}}^n \right] + \frac{1}{\varepsilon\Delta y} \left[E_x|_{i+\frac{1}{2},j+1}^n - E_x|_{i+\frac{1}{2},j}^n \right] \quad (2-15c)$$

2.1.3 基于 Crank-Nicolson 离散格式的隐式 FDTD

FDTD 差分格式的优点在于它是显式格式, 但(1-1)表明它是条件稳定的。我们发现, 大多数显式差分近似是条件稳定的, 而大多数隐式差分近似是无条件稳定的[4]。根据这一常识, 可以得到一种无条件稳定的 FDTD[5]。如果把方程(2-10)做如此离散:

$$\frac{1}{\Delta t} \left[E_x|_{i+\frac{1}{2},j}^{n+1} - E_x|_{i+\frac{1}{2},j}^n \right] = \frac{1}{2\varepsilon\Delta y} \left[H_z|_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2}}^{n+1} - H_z|_{i+\frac{1}{2},j-\frac{1}{2}}^{n+1} + H_z|_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2}}^n - H_z|_{i+\frac{1}{2},j-\frac{1}{2}}^n \right] \quad (2-16a)$$

$$\frac{1}{\Delta t} \left[E_y|_{i,j+\frac{1}{2}}^{n+1} - E_y|_{i,j+\frac{1}{2}}^n \right] = -\frac{1}{2\varepsilon\Delta x} \left[H_z|_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2}}^{n+1} - H_z|_{i-\frac{1}{2},j+\frac{1}{2}}^{n+1} + H_z|_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2}}^n - H_z|_{i-\frac{1}{2},j+\frac{1}{2}}^n \right] \quad (2-16b)$$

$$\frac{1}{\Delta t} \left[H_z|_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2}}^{n+1} - H_z|_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2}}^n \right] = -\frac{1}{2\mu\Delta x} \left[E_y|_{i+1,j+\frac{1}{2}}^{n+1} - E_y|_{i,j+\frac{1}{2}}^{n+1} + E_y|_{i+1,j+\frac{1}{2}}^n - E_y|_{i,j+\frac{1}{2}}^n \right] \\ -\frac{1}{2\mu\Delta y} \left[E_x|_{i+\frac{1}{2},j+1}^{n+1} - E_x|_{i+\frac{1}{2},j}^{n+1} + E_x|_{i+\frac{1}{2},j+1}^n - E_x|_{i+\frac{1}{2},j}^n \right] \quad (2-16c)$$

场分量在空间网格上交错分布不变, 但所有场分量在时间坐标轴的同一点上取值, 齐步并进。可以证明[5], (2-16)为(2-10)提供了一个二阶精度的无条件稳定的差分逼近。由于所有方程的两边都含有当前时刻的未知的场分量(隐式格式), 这些方程还不能直接用于场分量更新。如果把(2-16a)和(2-16b)代入(2-16c)将得到如下形式的等式

$$-\beta H_z|_{i+\frac{1}{2},j-\frac{1}{2}}^{n+1} - \alpha H_z|_{i-\frac{1}{2},j+\frac{1}{2}}^{n+1} + \gamma H_z|_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2}}^{n+1} - \alpha H_z|_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2}}^{n+1} - \beta H_z|_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2}}^{n+1} = f^n(i+\frac{1}{2}, j+\frac{1}{2}) \quad (2-17)$$

这意味着需要求解一个大的线性方程组，因而是一个希望能够回避的问题。

分析(2-16)、(2-17)可以看出，此隐式格式包含了一个未知量的十字耦合或者说网状耦合，如果能用两个一字耦合代替该十字耦合，即将(2-17)化为两个方程，每一个方程只包含一字排列的相邻的三个未知场分量，比如一个沿 X 方向，一个沿 Y 方向排列，则只需要求解两个三对角线性方程组。由于 Thomas 算法可以有效地求解这类方程，整个问题因而得以简化。

这正是本文将采用的“交替方向隐式算法(ADI)”。FDTD 结合 ADI 形成一种新的差分逼近格式，通常简称为 ADI-FDTD。这种格式是无条件稳定的，由于解算方便，目前已成为无条件稳定 FDTD 的主流。

2.2 二维 ADI-FDTD 算法

2.2.1 二维 TE 模的 ADI-FDTD 数值公式

首先考虑二维 TE 模，场分量在平面网格上的位置分布完全和一般的 FDTD 相同，如图 2.1 所示。假设所研究的二维 TE 模在真空中传播，计算域中的所有网格在同一方向上取相同的尺寸。所不同的是，在这里一个离散时间步的计算被分为两步来执行，第一步基于(2-18a)—(2-18c)，第二步基于(2-18d)—(2-18f)。

第一步：

$$E_x \Big|_{i+\frac{1}{2},j}^{n+\frac{1}{2}} = E_x \Big|_{i+\frac{1}{2},j}^n + \left(\frac{\Delta t}{2\epsilon\Delta y} \right) \cdot \left[H_z \Big|_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2}}^n - H_z \Big|_{i+\frac{1}{2},j-\frac{1}{2}}^n \right] \quad (2-18a)$$

$$E_y \Big|_{i,j+\frac{1}{2}}^{n+\frac{1}{2}} = E_y \Big|_{i,j+\frac{1}{2}}^n - \left(\frac{\Delta t}{2\epsilon\Delta x} \right) \cdot \left[H_z \Big|_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2}}^{n+\frac{1}{2}} - H_z \Big|_{i-\frac{1}{2},j+\frac{1}{2}}^{n+\frac{1}{2}} \right] \quad (2-18b)$$

$$H_z \Big|_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2}}^{n+\frac{1}{2}} = H_z \Big|_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2}}^n - \left(\frac{\Delta t}{2\mu\Delta x} \right) \cdot \left[E_y \Big|_{i+1,j+\frac{1}{2}}^{n+\frac{1}{2}} - E_y \Big|_{i,j+\frac{1}{2}}^{n+\frac{1}{2}} \right] + \left(\frac{\Delta t}{2\mu\Delta y} \right) \cdot \left[E_x \Big|_{i+\frac{1}{2},j+1}^n - E_x \Big|_{i+\frac{1}{2},j}^n \right]$$

第二步：

(2-18c)

$$E_x \Big|_{i+\frac{1}{2},j}^{n+1} = E_x \Big|_{i+\frac{1}{2},j}^{n+\frac{1}{2}} + \left(\frac{\Delta t}{2\epsilon\Delta y} \right) \cdot \left[H_z \Big|_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2}}^{n+1} - H_z \Big|_{i+\frac{1}{2},j-\frac{1}{2}}^{n+1} \right] \quad (2-18d)$$

$$E_y \Big|_{i,j+\frac{1}{2}}^{n+1} = E_y \Big|_{i,j+\frac{1}{2}}^{n+\frac{1}{2}} - \left(\frac{\Delta t}{2\epsilon\Delta x} \right) \cdot \left[H_z \Big|_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2}}^{n+\frac{1}{2}} - H_z \Big|_{i-\frac{1}{2},j+\frac{1}{2}}^{n+\frac{1}{2}} \right] \quad (2-18e)$$

$$H_z \Big|_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2}}^{n+1} = H_z \Big|_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2}}^{n+\frac{1}{2}} - \left(\frac{\Delta t}{2\mu\Delta x} \right) \cdot \left[E_y \Big|_{i+1,j+\frac{1}{2}}^{n+\frac{1}{2}} - E_y \Big|_{i,j+\frac{1}{2}}^{n+\frac{1}{2}} \right] + \left(\frac{\Delta t}{2\mu\Delta y} \right) \cdot \left[E_x \Big|_{i+\frac{1}{2},j+1}^{n+1} - E_x \Big|_{i+\frac{1}{2},j}^{n+1} \right]$$

(2-18f)

在第一步中，(2-18b)左边的 E_y 分量和右边的 H_z 分量是定义在同一时刻的变

量；(2-18c)左边的 H_z 分量和右边的 E_y 分量是定义在同一时刻的变量。(2-18b)不能直接用于场分量更新，为此将(2-18c)代入(2-18b)消掉与 E_y 分量定义在同一时刻的 H_z 分量得到(2-18bb)：

$$\begin{aligned}
 & E_y \Big|_{i-1, j+\frac{1}{2}}^{n+\frac{1}{2}} - \left[\left(\frac{2\sqrt{\mu\epsilon}\Delta x}{\Delta t} \right)^2 + 2 \right] \cdot E_y \Big|_{i, j+\frac{1}{2}}^{n+\frac{1}{2}} + E_y \Big|_{i+1, j+\frac{1}{2}}^{n+\frac{1}{2}} \\
 &= - \left(\frac{2\sqrt{\mu\epsilon}\Delta x}{\Delta t} \right)^2 \cdot E_y \Big|_{i, j+\frac{1}{2}}^n + \left(\frac{2\mu\Delta x}{\Delta t} \right) \cdot \left[H_z \Big|_{i+\frac{1}{2}, j+\frac{1}{2}}^n - H_z \Big|_{i-\frac{1}{2}, j+\frac{1}{2}}^n \right] \\
 &+ \left(\frac{\Delta x}{\Delta y} \right) \cdot \left[E_x \Big|_{i+\frac{1}{2}, j+1}^n - E_x \Big|_{i+\frac{1}{2}, j}^n - E_x \Big|_{i-\frac{1}{2}, j+1}^n + E_x \Big|_{i-\frac{1}{2}, j}^n \right]
 \end{aligned} \tag{2-18bb}$$

这实际上是一个三条带系数矩阵线性方程组，求解该方程组可以更新 E_y 分量。然后引用更新后的 E_y 分量，(2-18c)可以直接用来更新 H_z 分量。

在第二步中，(2-18d)左边的 E_x 分量和右边的 H_z 分量是定义在同一时刻的变量；(2-18f)左边的 H_z 分量和右边的 E_x 分量是定义在同一时刻的变量。(2-18d)不能直接用于场分量更新，为此将(2-18f)代入(2-18d)消掉与 E_x 分量定义在同一时刻的 H_z 分量得到(2-18dd)：

$$\begin{aligned}
 & E_x \Big|_{i+\frac{1}{2}, j-1}^{n+1} - \left[\left(\frac{2\sqrt{\mu\epsilon}\Delta y}{\Delta t} \right)^2 + 2 \right] \cdot E_x \Big|_{i+\frac{1}{2}, j}^{n+1} + E_x \Big|_{i+\frac{1}{2}, j+1}^{n+1} \\
 &= - \left(\frac{2\sqrt{\mu\epsilon}\Delta y}{\Delta t} \right)^2 \cdot E_x \Big|_{i+\frac{1}{2}, j}^{n+\frac{1}{2}} + \left(\frac{2\mu\Delta y}{\Delta t} \right) \cdot \left[H_z \Big|_{i+\frac{1}{2}, j-\frac{1}{2}}^{n+\frac{1}{2}} - H_z \Big|_{i+\frac{1}{2}, j+\frac{1}{2}}^{n+\frac{1}{2}} \right] \\
 &+ \left(\frac{\Delta y}{\Delta x} \right) \cdot \left[E_y \Big|_{i+1, j+\frac{1}{2}}^{n+\frac{1}{2}} - E_y \Big|_{i, j+\frac{1}{2}}^{n+\frac{1}{2}} - E_y \Big|_{i+1, j-\frac{1}{2}}^{n+\frac{1}{2}} + E_y \Big|_{i, j-\frac{1}{2}}^{n+\frac{1}{2}} \right]
 \end{aligned} \tag{2-18dd}$$

这实际上是一个三条带系数矩阵线性方程组，求解该方程组可以更新 E_x 分量。然后引用更新后的 E_x 分量，(2-18c)可以直接用来更新 H_z 分量。

有一种十分有效和简单的算法可用来求解三条带系数矩阵线性方程组(2-18bb)和(2-18dd)，这种算法基本上是高斯消去法的变种，通常称为 Thomas 算法[4]，在本文附录 A 中另作介绍。整个求解过程的简单流程图见图 2.2。

需要说明，在流程图 2.2 第一步中，由(2-18a)更新后的 E_x 分量应该作为中间值放在另一个存储单元 e_x 中，因为在用(2-18bb)更新 E_y 分量，用(2-18c)更新 H_z 分量时，还要用导原先的 E_x 分量值；在流程图 2.2 第二步中，由(2-18e)更新后的 E_y 分量应该作为中间值放在另一个存储单元 e_y 中，因为在用(2-18f)更新 H_z 分量时，还要用导原先的 E_y 分量值。如此在执行程序过程中实际引用的变量由三个增加到五个，占用内存增加三分之二。如果在流程图 2.2 第一步中首先由(2-18bb)更新 E_y 分

量,再由(2-18c)更新 H_z 分量,最后由(2-18a)更新 E_x 分量;第二步中,由(2-18dd)更新 E_x 分量后,接着由(2-18f)更新 H_z 分量,最后由(2-18e)更新后的 E_y 分量,则只要一个中间变量 h_z 就够了。如此增加的内存为三分之一。总之要么选择所有电场分量,要么选择所有磁场分量作为中间变量。

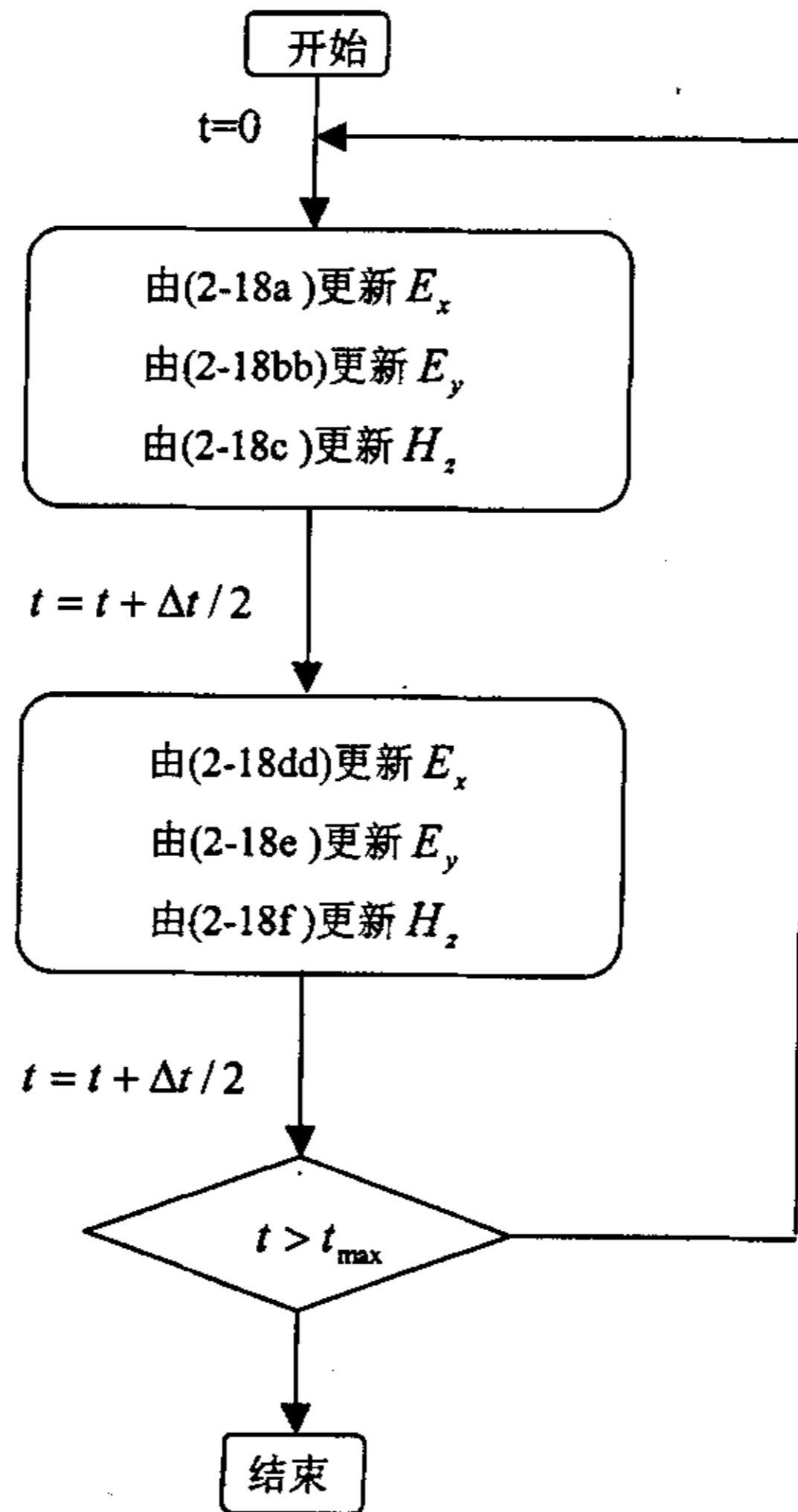


图 2.2 ADI-FDTD 算法流程图(二维 TE 模)

2.2.2 二维 TM 模的 ADI-FDTD 数值公式

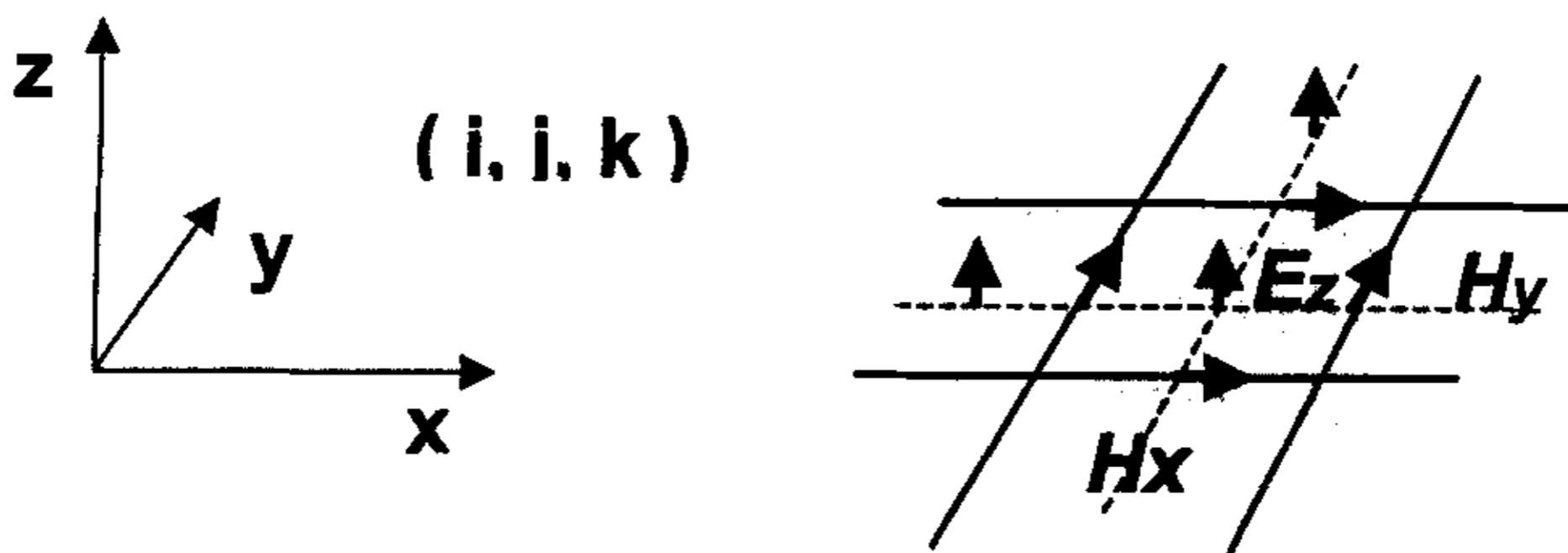


图 2.3 二维 TM 模场分量在 FDTD 网格上的位置分布

二维 TM 模的场分量在平面网格上的分布如图 2.3 所示,这和一般的 FDTD 完全相同。假设所研究的二维 TE 模在真空中传播,计算域中的所有网格在同一方向上取相同的尺寸。

二维 TM 模和二维 TE 模通过对偶变换 $E_x \rightarrow H_x$, $E_y \rightarrow H_y$, $H_z \rightarrow -E_z$, $\varepsilon \rightarrow \mu$, $\mu \rightarrow \varepsilon$ 相联系,由对偶变换可得二维 TM 模 ADI-FDTD 数值计算公式: 第一步:

$$H_x \Big|_{i+\frac{1}{2},j}^{n+\frac{1}{2}} = H_x \Big|_{i+\frac{1}{2},j}^n - \left(\frac{\Delta t}{2\mu\Delta y} \right) \cdot \left[E_z \Big|_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2}}^n - E_z \Big|_{i+\frac{1}{2},j-\frac{1}{2}}^n \right] \quad (2-19a)$$

$$H_y \Big|_{i,j+\frac{1}{2}}^{n+\frac{1}{2}} = H_y \Big|_{i,j+\frac{1}{2}}^n + \left(\frac{\Delta t}{2\mu\Delta x} \right) \cdot \left[E_z \Big|_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2}}^{n+\frac{1}{2}} - E_z \Big|_{i-\frac{1}{2},j+\frac{1}{2}}^{n+\frac{1}{2}} \right] \quad (2-19b)$$

$$E_z \Big|_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2}}^{n+\frac{1}{2}} = E_z \Big|_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2}}^n + \left(\frac{\Delta t}{2\varepsilon\Delta x} \right) \cdot \left[H_y \Big|_{i+1,j+\frac{1}{2}}^{n+\frac{1}{2}} - H_y \Big|_{i,j+\frac{1}{2}}^{n+\frac{1}{2}} \right] - \left(\frac{\Delta t}{2\varepsilon\Delta y} \right) \cdot \left[H_x \Big|_{i+\frac{1}{2},j+1}^n - H_x \Big|_{i+\frac{1}{2},j}^n \right] \quad (2-19c)$$

第二步:

$$H_x \Big|_{i+\frac{1}{2},j}^{n+1} = H_x \Big|_{i+\frac{1}{2},j}^{n+\frac{1}{2}} - \left(\frac{\Delta t}{2\mu\Delta y} \right) \cdot \left[E_z \Big|_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2}}^{n+1} - E_z \Big|_{i+\frac{1}{2},j-\frac{1}{2}}^{n+1} \right] \quad (2-19d)$$

$$H_y \Big|_{i,j+\frac{1}{2}}^{n+1} = H_y \Big|_{i,j+\frac{1}{2}}^{n+\frac{1}{2}} - \left(\frac{\Delta t}{2\mu\Delta x} \right) \cdot \left[E_z \Big|_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2}}^{n+\frac{1}{2}} - E_z \Big|_{i-\frac{1}{2},j+\frac{1}{2}}^{n+\frac{1}{2}} \right] \quad (2-19e)$$

$$E_z \Big|_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2}}^{n+1} = E_z \Big|_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2}}^{n+\frac{1}{2}} + \left(\frac{\Delta t}{2\varepsilon\Delta x} \right) \cdot \left[H_y \Big|_{i+1,j+\frac{1}{2}}^{n+\frac{1}{2}} - H_y \Big|_{i,j+\frac{1}{2}}^{n+\frac{1}{2}} \right] - \left(\frac{\Delta t}{2\varepsilon\Delta y} \right) \cdot \left[H_x \Big|_{i+\frac{1}{2},j+1}^{n+1} - H_x \Big|_{i+\frac{1}{2},j}^{n+1} \right] \quad (2-19f)$$

求解过程形式上同二维 TE 模。

2.3 三维 ADI-FDTD 算法

采用与二维情况相同的场分量表示方法,即将场分量 $F_\alpha(t, x, y, z)$ 在离散空间表示为如下形式:

$$F_\alpha \Big|_{i,j,k}^n = F_\alpha(n\Delta t, i\Delta x, j\Delta y, k\Delta z) \quad (2-20)$$

其中 $\alpha = x, y, z$, 按照习惯 n, i, j, k 为时间和空间指数, Δt 为时间增量, $\Delta x, \Delta y, \Delta z$ 分别为沿 X, Y, Z 方向的空间网格尺寸。场分量在空间网格上的位置分布与通常的三维 FDTD 完全相同,如图 2.4 所示。

在无耗条件下考虑(2-9a),从第 n 到第 $n+1$ 时间步的场量更新分解为两步完成: 第一步从 n 到 $n+1/2$ 时间步, 第二步从 $n+1/2$ 到 $n+1$ 时间步,或者说前半步和后半

步。在前半步(n 至 $n+1/2$), (2-9a)右边的第一项 $\partial H_z / \partial y$ 用它在 $n+1/2$ 时刻的差分表示代替, 而第二项 $\partial H_y / \partial z$ 则用其在 n 时刻的差分表示代替, 即

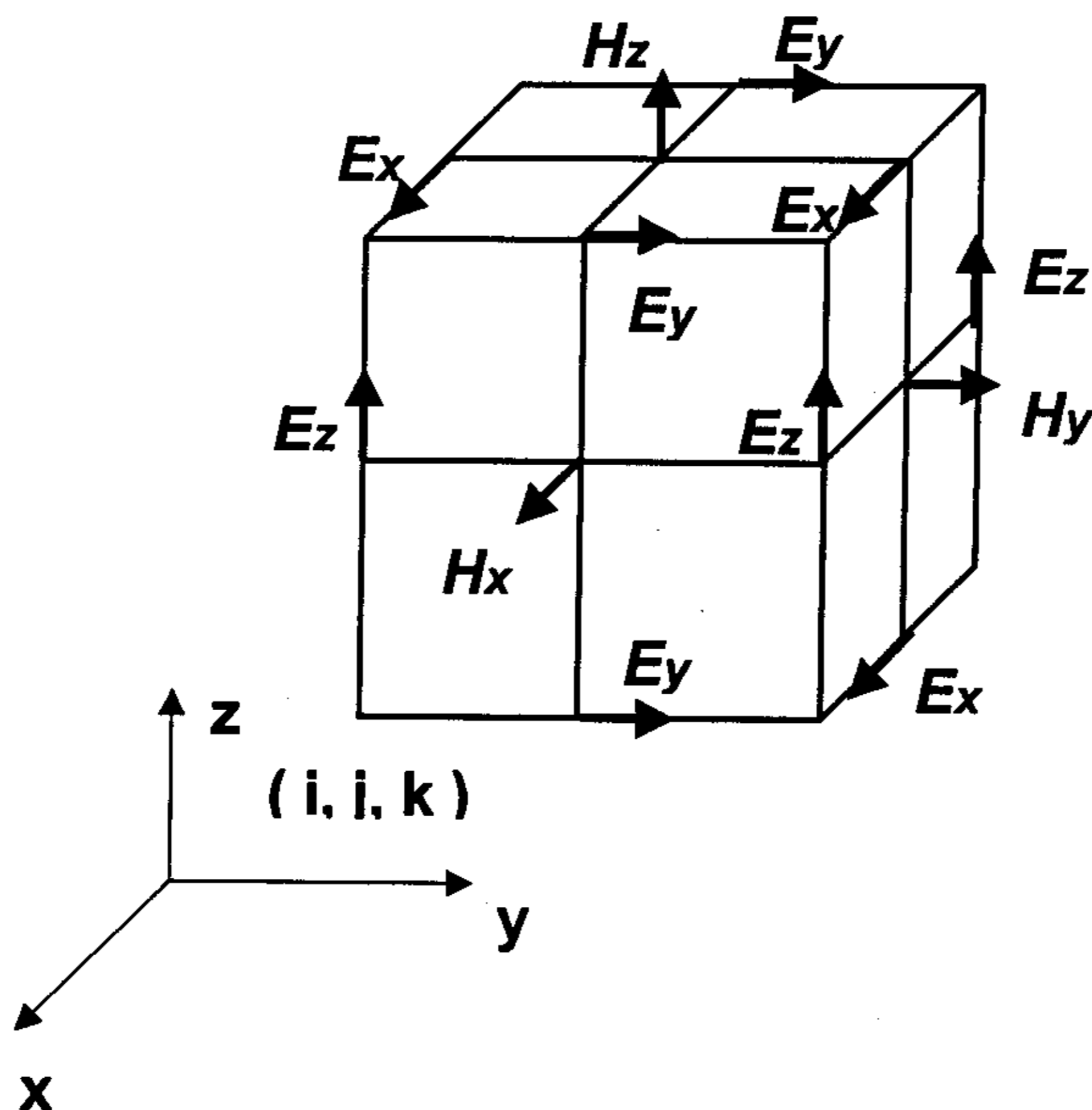


图 2.4 基本空间单元上得场分量分布图

$$\frac{E_x \Big|_{i+\frac{1}{2},j,k}^{n+\frac{1}{2}} - E_x \Big|_{i+\frac{1}{2},j,k}^n}{\Delta t / 2} = \frac{1}{\varepsilon} \left[\frac{H_z \Big|_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2},k}^{n+\frac{1}{2}} - H_z \Big|_{i+\frac{1}{2},j-\frac{1}{2},k}^{n+\frac{1}{2}}}{\Delta y} - \frac{H_y \Big|_{i+\frac{1}{2},j,k+\frac{1}{2}}^n - H_y \Big|_{i+\frac{1}{2},j,k-\frac{1}{2}}^n}{\Delta z} \right] \quad (2-21a)$$

在后半步($n+1/2$ 至 $n+1$), (2-9a)右边的第一项 $\partial H_z / \partial y$ 仍然用它在 $n+1/2$ 时刻的差分表示代替, 而第二项 $\partial H_y / \partial z$ 则用其在 $n+1$ 时刻的差分表示代替, 即

$$\frac{E_x \Big|_{i+\frac{1}{2},j,k}^{n+1} - E_x \Big|_{i+\frac{1}{2},j,k}^{n+\frac{1}{2}}}{\Delta t / 2} = \frac{1}{\varepsilon} \left[\frac{H_z \Big|_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2},k}^{n+\frac{1}{2}} - H_z \Big|_{i+\frac{1}{2},j-\frac{1}{2},k}^{n+\frac{1}{2}}}{\Delta y} - \frac{H_y \Big|_{i+\frac{1}{2},j,k+\frac{1}{2}}^{n+1} - H_y \Big|_{i+\frac{1}{2},j,k-\frac{1}{2}}^{n+1}}{\Delta z} \right] \quad (2-21b)$$

(2-21a)式和(2-21b)是同一个场分量微分方程(2-9a)的差分近似, 在(2-21a)中, 定义在 $n+1/2$ 时刻未知场分量 E_x 、 H_z 在一条沿 Y 方向的直线($x=i+1/2, z=k$)上排列; 而在(2-21b)中, 定义在 $n+1$ 时刻未知场分量 E_x 、 H_y 在一条沿 Z 方向的直线

($x=i+1/2, y=j$)上排列。正是由于采用这种方法每进行一个循环的计算, 需要求解以两个不同方向写出的两个不同的有限差分方程, 所以被称为交替方向法[4]。

采用相同的方法离散(2-9)另外五个场分量微分方程, 我们可以得到全部的三维 ADI-FDTD 差分公式。(2-22)为从 n 时间步到 $n+1/2$ 时间步场分量更新公式:

$$\frac{E_x \Big|_{i+\frac{1}{2}, j, k}^{n+\frac{1}{2}} - E_x \Big|_{i+\frac{1}{2}, j, k}^n}{\Delta t/2} = \frac{1}{\varepsilon} \left[\frac{H_z \Big|_{i+\frac{1}{2}, j+\frac{1}{2}, k}^{n+\frac{1}{2}} - H_z \Big|_{i+\frac{1}{2}, j-\frac{1}{2}, k}^{n+\frac{1}{2}}}{\Delta y} - \frac{H_y \Big|_{i+\frac{1}{2}, j, k+\frac{1}{2}}^n - H_y \Big|_{i+\frac{1}{2}, j, k-\frac{1}{2}}^n}{\Delta z} \right] \quad (2-22a)$$

$$\frac{E_y \Big|_{i, j+\frac{1}{2}, k}^{n+\frac{1}{2}} - E_y \Big|_{i, j+\frac{1}{2}, k}^n}{\Delta t/2} = \frac{1}{\varepsilon} \left[\frac{H_x \Big|_{i, j+\frac{1}{2}, k+\frac{1}{2}}^{n+\frac{1}{2}} - H_x \Big|_{i, j+\frac{1}{2}, k-\frac{1}{2}}^{n+\frac{1}{2}}}{\Delta z} - \frac{H_z \Big|_{i+\frac{1}{2}, j+\frac{1}{2}, k}^n - H_z \Big|_{i-\frac{1}{2}, j+\frac{1}{2}, k}^n}{\Delta x} \right] \quad (2-22b)$$

$$\frac{E_z \Big|_{i, j, k+\frac{1}{2}}^{n+\frac{1}{2}} - E_z \Big|_{i, j, k+\frac{1}{2}}^n}{\Delta t/2} = \frac{1}{\varepsilon} \left[\frac{H_y \Big|_{i+\frac{1}{2}, j, k+\frac{1}{2}}^{n+\frac{1}{2}} - H_y \Big|_{i-\frac{1}{2}, j, k+\frac{1}{2}}^{n+\frac{1}{2}}}{\Delta x} - \frac{H_x \Big|_{i, j+\frac{1}{2}, k+\frac{1}{2}}^n - H_x \Big|_{i, j-\frac{1}{2}, k+\frac{1}{2}}^n}{\Delta y} \right] \quad (2-22c)$$

$$\frac{H_x \Big|_{i, j+\frac{1}{2}, k+\frac{1}{2}}^{n+\frac{1}{2}} - H_x \Big|_{i, j+\frac{1}{2}, k+\frac{1}{2}}^n}{\Delta t/2} = \frac{1}{\mu} \left[\frac{E_y \Big|_{i, j+\frac{1}{2}, k+1}^{n+\frac{1}{2}} - E_y \Big|_{i, j+\frac{1}{2}, k}^{n+\frac{1}{2}}}{\Delta z} - \frac{E_z \Big|_{i, j+1, k+\frac{1}{2}}^n - E_z \Big|_{i, j, k+\frac{1}{2}}^n}{\Delta y} \right] \quad (2-22d)$$

$$\frac{H_y \Big|_{i+\frac{1}{2}, j, k+\frac{1}{2}}^{n+\frac{1}{2}} - H_y \Big|_{i+\frac{1}{2}, j, k+\frac{1}{2}}^n}{\Delta t/2} = \frac{1}{\mu} \left[\frac{E_z \Big|_{i+1, j, k+\frac{1}{2}}^{n+\frac{1}{2}} - E_z \Big|_{i, j, k+\frac{1}{2}}^{n+\frac{1}{2}}}{\Delta x} - \frac{E_x \Big|_{i+\frac{1}{2}, j, k+1}^n - E_x \Big|_{i+\frac{1}{2}, j, k}^n}{\Delta z} \right] \quad (2-22e)$$

$$\frac{H_z \Big|_{i+\frac{1}{2}, j+\frac{1}{2}, k}^{n+\frac{1}{2}} - H_z \Big|_{i+\frac{1}{2}, j+\frac{1}{2}, k}^n}{\Delta t/2} = \frac{1}{\mu} \left[\frac{E_x \Big|_{i+\frac{1}{2}, j+1, k}^{n+\frac{1}{2}} - E_x \Big|_{i+\frac{1}{2}, j, k}^{n+\frac{1}{2}}}{\Delta y} - \frac{E_y \Big|_{i+1, j+\frac{1}{2}, k}^n - E_y \Big|_{i, j+\frac{1}{2}, k}^n}{\Delta x} \right] \quad (2-22f)$$

(2-23)为从 $n+1/2$ 时间步到 $n+1$ 时间步场分量更新公式:

$$\frac{E_x \Big|_{i+\frac{1}{2}, j, k}^{n+1} - E_x \Big|_{i+\frac{1}{2}, j, k}^{n+\frac{1}{2}}}{\Delta t/2} = \frac{1}{\varepsilon} \left[\frac{H_z \Big|_{i+\frac{1}{2}, j+\frac{1}{2}, k}^{n+\frac{1}{2}} - H_z \Big|_{i+\frac{1}{2}, j-\frac{1}{2}, k}^{n+\frac{1}{2}}}{\Delta y} - \frac{H_y \Big|_{i+\frac{1}{2}, j, k+\frac{1}{2}}^{n+1} - H_y \Big|_{i+\frac{1}{2}, j, k-\frac{1}{2}}^{n+1}}{\Delta z} \right] \quad (2-23a)$$

$$\frac{E_y|_{i,j+\frac{1}{2},k}^{n+1} - E_y|_{i,j+\frac{1}{2},k}^{n+\frac{1}{2}}}{\Delta t/2} = \frac{1}{\varepsilon} \left[\frac{H_x|_{i,j+\frac{1}{2},k+\frac{1}{2}}^{n+\frac{1}{2}} - H_x|_{i,j+\frac{1}{2},k-\frac{1}{2}}^{n+\frac{1}{2}}}{\Delta z} - \frac{H_z|_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2},k}^{n+1} - H_z|_{i-\frac{1}{2},j+\frac{1}{2},k}^{n+1}}{\Delta x} \right] \quad (2-23b)$$

$$\frac{E_z|_{i,j,k+\frac{1}{2}}^{n+1} - E_z|_{i,j,k+\frac{1}{2}}^{n+\frac{1}{2}}}{\Delta t/2} = \frac{1}{\varepsilon} \left[\frac{H_y|_{i+\frac{1}{2},j,k+\frac{1}{2}}^{n+\frac{1}{2}} - H_y|_{i-\frac{1}{2},j,k+\frac{1}{2}}^{n+\frac{1}{2}}}{\Delta x} - \frac{H_x|_{i,j+\frac{1}{2},k+\frac{1}{2}}^{n+1} - H_x|_{i,j-\frac{1}{2},k+\frac{1}{2}}^{n+1}}{\Delta y} \right] \quad (2-23c)$$

$$\frac{H_x|_{i,j+\frac{1}{2},k+\frac{1}{2}}^{n+1} - H_x|_{i,j+\frac{1}{2},k+\frac{1}{2}}^{n+\frac{1}{2}}}{\Delta t/2} = \frac{1}{\mu} \left[\frac{E_y|_{i,j+\frac{1}{2},k+1}^{n+\frac{1}{2}} - E_y|_{i,j+\frac{1}{2},k}^{n+\frac{1}{2}}}{\Delta z} - \frac{E_z|_{i,j+1,k+\frac{1}{2}}^{n+1} - E_z|_{i,j,k+\frac{1}{2}}^{n+1}}{\Delta y} \right] \quad (2-23d)$$

$$\frac{H_y|_{i+\frac{1}{2},j,k+\frac{1}{2}}^{n+1} - H_y|_{i+\frac{1}{2},j,k+\frac{1}{2}}^{n+\frac{1}{2}}}{\Delta t/2} = \frac{1}{\mu} \left[\frac{E_z|_{i+1,j,k+\frac{1}{2}}^{n+\frac{1}{2}} - E_z|_{i,j,k+\frac{1}{2}}^{n+\frac{1}{2}}}{\Delta x} - \frac{E_x|_{i+\frac{1}{2},j,k+1}^{n+1} - E_x|_{i+\frac{1}{2},j,k}^{n+1}}{\Delta z} \right] \quad (2-23e)$$

$$\frac{H_z|_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2},k}^{n+1} - H_z|_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2},k}^{n+\frac{1}{2}}}{\Delta t/2} = \frac{1}{\mu} \left[\frac{E_x|_{i+\frac{1}{2},j+1,k}^{n+\frac{1}{2}} - E_x|_{i+\frac{1}{2},j,k}^{n+\frac{1}{2}}}{\Delta y} - \frac{E_y|_{i+1,j+\frac{1}{2},k}^{n+1} - E_y|_{i,j+\frac{1}{2},k}^{n+1}}{\Delta x} \right] \quad (2-23f)$$

同二维情况相类似，这些方程还不能直接用于场分量更新。考虑(2-22a),将(2-22f)代入(2-22a)消去 $\left[H_z|_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2},k}^{n+\frac{1}{2}} - H_z|_{i+\frac{1}{2},j-\frac{1}{2},k}^{n+\frac{1}{2}} \right]$ 可得：

$$\begin{aligned} & -\left(\frac{\Delta t^2}{4\mu\varepsilon\Delta y^2} \right) E_x|_{i+\frac{1}{2},j+1,k}^{n+\frac{1}{2}} + \left(1 + \frac{\Delta t^2}{2\mu\varepsilon\Delta y^2} \right) E_x|_{i+\frac{1}{2},j,k}^{n+\frac{1}{2}} - \left(\frac{\Delta t^2}{4\mu\varepsilon\Delta y^2} \right) E_x|_{i+\frac{1}{2},j-1,k}^{n+\frac{1}{2}} \\ & = E_x|_{i+\frac{1}{2},j,k}^n + \left(\frac{\Delta t}{2\varepsilon\Delta y} \right) \left(H_z|_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2},k}^n - H_z|_{i+\frac{1}{2},j-\frac{1}{2},k}^n \right) - \left(\frac{\Delta t}{2\varepsilon\Delta z} \right) \left(H_y|_{i+\frac{1}{2},j,k+\frac{1}{2}}^n - H_y|_{i+\frac{1}{2},j,k-\frac{1}{2}}^n \right) \\ & - \left(\frac{\Delta t^2}{4\mu\varepsilon\Delta y\Delta x} \right) \left(E_y|_{i+1,j+\frac{1}{2},k}^n - E_y|_{i,j+\frac{1}{2},k}^n - E_y|_{i+1,j-\frac{1}{2},k}^n + E_y|_{i,j-\frac{1}{2},k}^n \right) \end{aligned} \quad (2-24)$$

给定边界条件，(2-24)表示一个三条带系数矩阵线性方程组，Thomas 算法是求解这类方程组的有效方法。 E_x 更新以后，代入(2-22f)以更新 H_z 。(2-22)式中的其它场分量以及(2-23)中的场分量可用相同的方法更新，前半时间步和后半时间步各需要求解三个线性方程组。

和二维情况一样，在场量更新过程中要用到中间变量，或者选择三个电场分量，或者选择三个磁场分量。与通常的 FDTD 相比，占用内存增加二分之一。

另须注意，以上讨论假设初始时刻的场分量值已知，且计算域中不包含任何形式的激励源。但在实际计算时往往要设计一定形式的数值激励源以激励数值电磁波，方法与通常的 FDTD 算法相同，在本文后面针对各个具体问题的具体要求，还要作详细说明。

第三章 二维 ADI-FDTD 算法的稳定性

虽然对于任何一种有限差分近似都有一个理论上的精确解，但由于计算机的舍入误差，每进行一次数值计算，就有一次舍入误差引入。这些误差是增大还是减小，反映出计算格式的稳定性。算法的精度固然重要，但算法的稳定性则更为重要，只有确保算法是稳定的，才有可能进行一次有意义的计算。3.1 节讨论一般的稳定性概念，3.2 节用傅里叶分析方法证明二维 ADI-FDTD 算法的稳定性。在第五章导出色散公式时利用了 3.2 节的结果。

3.1 稳定性概念

一. 差分格式的稳定性、相容性、收敛性

出于方便研究和认识之目的，可以将通常物理问题的求解过程归纳为两次建模：数学建模和数值建模。由物理问题得到定解问题（包括泛定方程和定解条件）的过程称为数学建模；由定解问题到可供编写计算代码的计算方案的过程称为数值建模。

我们所研究的泛定方程正是 Maxwell 方程。定解问题除了必须具有唯一解之外，还必须是适定的。其意义是，当定解条件有微小扰动时，所求得的偏微分方程的解与未受扰动时的解偏离很小。这等价于要求偏微分方程能真实地代表原型物理系统。事实上，来自实际测量的定解条件总带有些偏差，有实际意义的泛定方程必须保证定解条件的偏差在求解过程中不被放大。打个比方，南美洲有一只蝴蝶扇一扇翅膀，如果这一扰动在传播的过程中被逐步放大，就会把纽约的摩天大楼扇倒。“蝴蝶效应”形象地描述了不稳定系统的求解过程。因此非适定的定解问题没有价值，这时必须改变问题的提法，重新构造适定的定解问题。

我们所研究的数值方案即 FDTD 方法。可以想象，不仅定解问题应该是适定的，所采用的有限差分方案也应当是适定的。由于数值计算不仅要考虑到原始的测量误差，还要考虑到计算机本身的截断误差，一种适定的差分近似和偏微分方程相比应在初始数据更大的扰动范围内保持连续；这与有限差分近似的稳定性直接有关，对于一个稳定的计算格式，计算所得解的全部扰动一定有界。当初始数据的扰动取得很小时，由此产生的解的扰动一定也很小（直至任意小），从而得到有限差分近似的收敛性。

可以概括地说，计算上的稳定性表示在所算得的解中全部扰动有界。换句话说，当初始数据的扰动任意小，如 $\Delta t, \Delta x, \Delta y, \Delta z \rightarrow 0$ 时，在所算得的解中产生的

扰动一定趋于零而不是越来越大。此时，满足相容性的有限差分近似方程的解就收敛到定解问题的解。正如 Lax 所指出的那样[4]，差分格式的稳定性和相容性就意味着收敛性。用另一种方法来说，要使某一种有限差分近似的数值解收敛，必须使适定的偏微分方程所对应的有限差分近似格式相容和稳定。以上这些概念对于判断任何一种有限差分近似格式是否可行具有头等重要意义。

相容性与下述保证有关：当有限差分网格变小时（即，当 $\Delta t, \Delta x, \Delta y, \Delta z \rightarrow 0$ ），截断误差必须趋于零。换句话说，有限差分模型逼近所期望的偏微分方程而不是逼近其它的偏微分方程。例如，求解一维标量波动方程

$$\frac{\partial^2 u}{\partial t^2} = c^2 \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \quad (3-1)$$

的差分迭代格式为

$$u_i^{n+1} = \left(\frac{c\Delta t}{\Delta x} \right)^2 (u_{i+1}^n - 2u_i^n + u_{i-1}^n) + 2u_i^n - u_i^{n-1} \quad (3-2a)$$

其等价形式为

$$\frac{u_i^{n+1} - 2u_i^n + u_i^{n-1}}{(c\Delta t)^2} - \frac{u_{i+1}^n - 2u_i^n + u_{i-1}^n}{\Delta x^2} = 0 \quad (3-2b)$$

将 $u_i^{n+1}, u_i^{n-1}, u_{i+1}^n, u_{i-1}^n$ 在 $(i\Delta x, n\Delta t)$ 点的 Taylor 展开代入(1-3b)可得

$$\frac{u_i^{n+1} - 2u_i^n + u_i^{n-1}}{(c\Delta t)^2} - \frac{u_{i+1}^n - 2u_i^n + u_{i-1}^n}{\Delta x^2} = \frac{\partial^2 u}{c^2 \partial t^2} - \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + O(\Delta x^2) + O(\Delta t^2) \quad (3-3)$$

$$\frac{\partial^2 u}{c^2 \partial t^2} - \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + O(\Delta x^2) + O(\Delta t^2) = 0 \quad (3-4)$$

(3-4)称为差分格式(3-2a)的修正方程。由此可见通过差分格式(3-2a)求得的是修正方程(3-4)的解，而不是微分方程(3-1)本身的解。但是当 $\Delta t, \Delta x \rightarrow 0$ 时截断误差 $O(\Delta x^2) + O(\Delta t^2) \rightarrow 0$ ，因此差分格式(3-2a)与偏微分方程(3-1)是相容的。

如果当 $\Delta t, \Delta x \rightarrow 0$ 时

$$\|\bar{u}_i^n - u_i^n\| \rightarrow 0 \quad (3-5)$$

则称有限差分近似收敛。这里 $\|\cdot\|$ 是在指定点 $(i\Delta x, n\Delta t)$ 上 u 的准确解 $\bar{u}(i\Delta x, n\Delta t)$ 与计算值 u_i^n 之差的模。原则上，通过加密网格可以使有限差分近似与准确解任意接近。

数值分析中的稳定性概念基本上与偏微分方程无关，它所关心的是在求解有限差分近似时由于进行算术运算而产生误差的不稳定增长和稳定衰减问题。虽然对于任何一种有限差分近似都有一个理论上的精确解，但由于计算机的舍入误差，每进行一次数值计算，就有一次舍入误差引入。这些误差是增大还是减小，反映

出计算格式的稳定性。如果一种近似格式是稳定的,则在原则上可使计算误差达到任意小。

在涉及某一种有限差分近似的稳定性时,需要使用“条件”和“无条件”这两个术语。一种“条件”稳定的差分格式意味着对网格宽度 $\Delta t, \Delta x, \dots$ 等存在着约束界限,在此界限之下数值解稳定,在此界限之上数值解不稳定。一个“无条件”稳定的算法不存在这种界限。

在任何一种算法中稳定性多半是最关紧要的问题,因为对精度来说稳定性不是充分条件但却是必要条件。在为求得数值解而作的任何尝试中,它通常是首先会遇到的问题。只有当我们确信可以成功地进行一次有意义的计算后,才能进一步考虑精度和计算效率。此外,经验表明一种不稳定的格式是不会收敛的。以下 Lax 等价定理陈述了稳定性和收敛性之间的关系:

对于一个适定的偏微分方程的初值或边值问题,如果其有限差分逼近满足相容性条件,那么差分格式稳定是差分格式收敛的充分必要条件。

二. 稳定性判别

在判定一种有限差分近似稳定性的各种方法中,或许以 Von Neumann 方法(有时候也称为 Fourier 方法)使用得最广泛。它在实质上是用一个有限 Fourier 级数代表初始时刻的误差,然后考察当时间 t 增加时这些误差的增大或减小情形。在理论上,这种方法只能用于具有周期性初始数据的纯初值问题,即它完全忽略了边界条件的影响。此外,它仅适用于线性常系数有限差分近似(FDTD 正是这种近似)。由于线性性质,故可个别地处理每一个 Fourier 分量并与其它分量叠加。具有实际意义的是 Von Neumann 方法总能导出稳定性的必要条件,而在很多情况下这也是充分的。

为了便于讨论,考虑 u_i^n 为标量的任一有限差分近似。我们在一个给定的时刻 t 对各网格点的误差进行调和分解

$$E(x) = \sum_s w_s e^{j\beta_s x} \quad (3-6)$$

式中 S 表示 x 轴上的格点数, $|\beta_s|$ 是误差的频率, j 是虚数单位 $\sqrt{-1}$ 。由于线性性质,我们只需考虑这些 S 项中的一项,即只考虑 $e^{j\beta x}$ (式中 β 是实数)。也就是说每一个调和分量的增长和衰减是独立的。

现在用分离形式写出有限差分近似的解

$$E(t, x) = e^{\gamma t} e^{j\beta x} \quad (3-7)$$

式中 $\gamma = \gamma(\beta)$ 一般说来是复数。注意, $t=0$ 时刻的解等于 $t=0$ 时刻引入的误差。但从(3-7)可以看出,为了保证 t 增加时原始误差不相应地增加,对所有的 γ 应有

$$|e^{\gamma t}| \leq 1 \quad (3-8)$$

这一稳定性条件也可写为

$$|e^{r\Delta t}| \leq 1 \quad [\text{Von Neumann 条件}] \quad (3-9)$$

一般说来, 如果我们定义 $\xi = e^{r\Delta t}$ = 放大系数, 则稳定性约束条件(1-8b)变成

$$|\xi| \leq 1 \quad (3-10)$$

以上我们对 Von Neumann 稳定性条件的讨论中, 假定 u_i^n 为标量。但是在我们的电磁场问题求解中则涉及到多个因变量, 3.2 节对二维 ADI-FDTD 差分格式的稳定性分析正是以上讨论的推广。

3.2 二维 ADI-FDTD 的数值稳定性

证明三维 ADI-FDTD 算法的稳定性, 涉及到非常复杂的代数运算, 文献[3]采用了公式推理软件 Maple 来完成这一过程。相对而言, 二维情况要简单的多, 这里选择二维 TE 模的 ADI-FDTD 迭代过程来研究。

通常, 对于一个如下形式的迭代过程

$$X^{n+1} = \Lambda \cdot X^n \quad (3-11)$$

其数值稳定性可以通过所谓傅立叶方法确定: 首先, 把某一瞬间的空间场分布作傅立叶变换, 在空间谱域得到一个空间正弦模的谱; 然后, 考虑一空间谱域单色波的迭代过程, 求其增长矩阵 Λ 的本征值, Λ 的本征值决定迭代过程的稳定性。如果所有本征值的模小于或等于 1, 迭代过程是稳定的; 如果其中之一大于 1, 则迭代过程可能是不稳定的。

对于二维 TE 模, 设沿 X, Y 方向的空间频率为 k_x, k_y , 则场分量的空域单色模可表示为

$$E_x \Big|_{i+\frac{1}{2}, j}^n = E_x^n \exp\{-j[k_x(i+\frac{1}{2})\Delta x + k_y(j)\Delta y]\} \quad (3-12a)$$

$$E_y \Big|_{i, j+\frac{1}{2}}^n = E_y^n \exp\{-j[k_x(i)\Delta x + k_y(j+\frac{1}{2})\Delta y]\} \quad (3-12b)$$

$$H_z \Big|_{i+\frac{1}{2}, j+\frac{1}{2}}^n = H_z^n \exp\{-j[k_x(i+\frac{1}{2})\Delta x + k_y(j+\frac{1}{2})\Delta y]\} \quad (3-12c)$$

代入二维 TE 模 ADI-FDTD 数值公式(2-18)有:

第一步:

$$E_x^{n+\frac{1}{2}} = E_x^n - j \frac{\Delta t}{\epsilon \Delta y} \sin\left(\frac{k_y \Delta y}{2}\right) \cdot H_z^n \quad (3-13a)$$

$$E_y^{n+\frac{1}{2}} = E_y^n + j \frac{\Delta t}{\epsilon \Delta x} \sin\left(\frac{k_x \Delta x}{2}\right) \cdot H_z^{n+\frac{1}{2}} \quad (3-13b)$$

$$H_z^{n+\frac{1}{2}} = H_z^n - j \frac{\Delta t}{\mu \Delta y} \sin\left(\frac{k_y \Delta y}{2}\right) \cdot E_x^n + j \frac{\Delta t}{\epsilon \Delta x} \sin\left(\frac{k_x \Delta x}{2}\right) \cdot E_y^{n+\frac{1}{2}} \quad (3-13c)$$

第二步:

$$E_x^{n+1} = E_x^{n+\frac{1}{2}} - j \frac{\Delta t}{\varepsilon \Delta y} \sin\left(\frac{k_y \Delta y}{2}\right) \cdot H_z^{n+1} \quad (3-13d)$$

$$E_y^{n+1} = E_y^{n+\frac{1}{2}} + j \frac{\Delta t}{\varepsilon \Delta x} \sin\left(\frac{k_x \Delta x}{2}\right) \cdot H_z^{n+\frac{1}{2}} \quad (3-13e)$$

$$H_z^{n+1} = H_z^{n+\frac{1}{2}} - j \frac{\Delta t}{\mu \Delta y} \sin\left(\frac{k_y \Delta y}{2}\right) \cdot E_x^{n+1} + j \frac{\Delta t}{\varepsilon \Delta x} \sin\left(\frac{k_x \Delta x}{2}\right) \cdot E_y^{n+\frac{1}{2}} \quad (3-13f)$$

引用符号

$$U^n = \begin{bmatrix} E_x^n \\ E_y^n \\ H_z^n \end{bmatrix} \quad (3-14)$$

上述过程可以写成如下矩阵形式:

$$U^{n+\frac{1}{2}} = \Lambda_1 \cdot U^n \quad (3-15a)$$

$$U^{n+1} = \Lambda_2 \cdot U^{n+\frac{1}{2}} \quad (3-15b)$$

$$U^{n+1} = \Lambda \cdot U^n = \Lambda_1 \cdot \Lambda_2 \cdot U^n \quad (3-15c)$$

其中,

$$\Lambda_1 = \begin{bmatrix} 1 & 0 & -Y \\ -XY' & 1 & X \\ \frac{1-XX'}{1-XX'} & \frac{1-XX'}{1-XX'} & \frac{1-XX'}{1-XX'} \\ -Y' & X' & 1 \\ \frac{1-XX'}{1-XX'} & \frac{1-XX'}{1-XX'} & \frac{1-XX'}{1-XX'} \end{bmatrix} \quad (3-16a)$$

$$\Lambda_2 = \begin{bmatrix} 1 & -X'Y & -Y \\ \frac{1-YY'}{1-YY'} & \frac{1-YY'}{1-YY'} & \frac{1-YY'}{1-YY'} \\ 0 & 1 & X \\ -Y' & X' & 1 \\ \frac{1-YY'}{1-YY'} & \frac{1-YY'}{1-YY'} & \frac{1-YY'}{1-YY'} \end{bmatrix} \quad (3-16b)$$

$$\Lambda = \frac{1}{(1-XX')(1-YY')} \begin{bmatrix} (1-XX')+(1+XX') \cdot YY' & -2X'Y & -2Y \\ -2XY' \cdot (1-YY') & (1+XX') \cdot (1-YY') & 2X \cdot (1-YY') \\ -2Y' & 2X' & YY' \cdot (1-XX')+(1+XX') \end{bmatrix} \quad (3-16c)$$

其中引入了简化书写记号:

$$X = j \cdot \frac{\Delta t}{\varepsilon \Delta x} \cdot \sin\left(\frac{k_x \Delta x}{2}\right) \quad (3-17a)$$

$$Y = j \cdot \frac{\Delta t}{\varepsilon \Delta y} \cdot \sin\left(\frac{k_y \Delta y}{2}\right) \quad (3-17b)$$

$$X' = j \cdot \frac{\Delta t}{\mu \Delta x} \cdot \sin\left(\frac{k_x \Delta x}{2}\right) \quad (3-17c)$$

$$Y' = j \cdot \frac{\Delta t}{\mu \Delta y} \cdot \sin\left(\frac{k_y \Delta y}{2}\right) \quad (3-17d)$$

将特征方程 $\det(\lambda \cdot I - \Lambda) = 0$ 展开可得如下三元三次方程:

$$\begin{aligned} \lambda^3 - \frac{3 + XX' + YY' - XX' \cdot YY'}{(1 - XX')(1 - YY')} \cdot \lambda^2 + \frac{3 - 2 \cdot XX' - 2 \cdot YY' - (XX')^2 - (YY')^2}{(1 - XX')^2 \cdot (1 - YY')^2} \\ + \frac{2 \cdot (XX')^2 \cdot YY' + 2 \cdot XX' \cdot (YY')^2 - (XX')^2 \cdot (YY')^2}{(1 - XX')^2 \cdot (1 - YY')^2} \cdot \lambda - 1 = 0 \end{aligned} \quad (3-18)$$

求解这样一个方程的方法之一是套用已有的公式, 但涉及大量的代数运算。相对而言采用尝试法要简单的多。将尝试解 $\lambda_1 = 1$, $\lambda_{2,3} = a \pm j \cdot b$ 代入如下方程

$$(\lambda - \lambda_1) \cdot (\lambda - \lambda_2) \cdot (\lambda - \lambda_3) = 0 \quad (3-19a)$$

可得

$$\lambda^3 - (2a + 1) \cdot \lambda^2 + (a^2 + 2a + b^2) \cdot \lambda - (a^2 + b^2) = 0 \quad (3-19b)$$

对照方程(3-18)、(3-19b)可得

$$a = \frac{\sqrt{R^2 - S^2}}{R} \quad (3-20a)$$

$$b = \frac{S}{R} \quad (3-20b)$$

$$\lambda_{2,3} = \frac{\sqrt{R^2 - S^2} \pm j \cdot S}{R} \quad (3-20c)$$

其中

$$R = (1 - XX') \cdot (1 - YY') \quad (3-21a)$$

$$S = 2 \cdot \sqrt{-XX' - YY' + XX' \cdot YY'} \quad (3-21b)$$

显然有

$$|\lambda_i| = 1 \quad (i=1,2,3) \quad (3-22)$$

设增长矩阵

$$\Lambda = V^{-1} \cdot [\lambda_1, \lambda_2, \lambda_3] \cdot V = V^{-1} \cdot D \cdot V \quad (3-23)$$

则

$$U^1 = \Lambda \cdot U^0 = V^{-1} \cdot D \cdot V \cdot U^0 \quad (3-24a)$$

$$U^2 = \Lambda \cdot U^1 = V^{-1} \cdot D \cdot V \cdot V^{-1} \cdot D \cdot V \cdot U^0 = V^{-1} \cdot D^2 \cdot V \cdot U^0 \quad (3-24b)$$

.....

$$U^n = V^{-1} \cdot D^n \cdot V \cdot U^0 = V^{-1} \cdot [\lambda_1^n, \lambda_2^n, \lambda_3^n] \cdot V \cdot U^0 \quad (3-24c)$$

考虑到 $|\lambda_i^n| = 1$, ($i=1,2,3$), 这样的迭代过程必然是稳定的。

类似的证明过程适用于二维 TM 模 ADI-FDTD 迭代过程。

如果采用文献[8]的方法来证明二维 ADI-FDTD 算法的稳定性, 推导过程更加简单明了, 但所得到的结果不足以导出准确的数值色散公式。本文第五章将引用这儿的結果用以导出二维 ADI-FDTD 数值色散公式。

第四章 ADI-FDTD 用于谐振腔分析

在以上两章中，我们介绍了 ADI-FDTD 算法的概念和方法，并从理论上证明了二维 ADI-FDTD 算法的稳定性。本章把这种方法用于二维和三维谐振腔的分析。通过具体的数值计算以证明 ADI-FDTD 算法具有实践意义上的无条件稳定性，并认识该算法在运行时间和数值误差等方面的特征。

4.1 二维金属谐振腔分析

由矩形波导中的 TE_{mn} 导模[21]，令传播常数 $\beta=0$ ，可得二维金属谐振腔中的 TE_{mn} 模的场分量分布为：

$$E_x = \frac{j\omega\mu}{k^2} \cdot \frac{n\pi}{b} \cdot H_{mn} \cos\left(\frac{m\pi x}{a}\right) \sin\left(\frac{n\pi y}{b}\right) e^{j\omega t} \quad (4-1a)$$

$$E_y = -\frac{j\omega\mu}{k^2} \cdot \frac{m\pi}{a} \cdot H_{mn} \sin\left(\frac{m\pi x}{a}\right) \cos\left(\frac{n\pi y}{b}\right) e^{j\omega t} \quad (4-1b)$$

$$H_z = H_{mn} \cos\left(\frac{m\pi x}{a}\right) \cos\left(\frac{n\pi y}{b}\right) e^{j\omega t} \quad (4-1c)$$

其中

$$k = \sqrt{\left(\frac{m\pi}{a}\right)^2 + \left(\frac{n\pi}{b}\right)^2} \quad (4-2)$$

$$\omega = \frac{k}{\sqrt{\mu\epsilon}} \quad (4-3)$$

这里设， $a=b=1(\text{m})$ ， $\mu=\mu_0$ ， $\epsilon=\epsilon_0$ ，则对于 TE_{11} 模， $k=\sqrt{2}\pi$ ， $\omega=\sqrt{2}\pi c$ ， $\lambda_{11}=\sqrt{2}$ ，采用(2-12)的三种场量归一化形式之一可得：

$$E_x = \frac{\sqrt{2}}{2} \cdot \cos(\pi x) \sin(\pi y) \cos\left(\omega t + \frac{\pi}{2}\right) \quad (4-4a)$$

$$E_y = \frac{\sqrt{2}}{2} \cdot \sin(\pi x) \cos(\pi y) \cos\left(\omega t - \frac{\pi}{2}\right) \quad (4-4b)$$

$$H_z = \cos(\pi x) \cos(\pi y) \cos(\omega t) \quad (4-4c)$$

在 $1\text{m} \times 1\text{m}$ 的二维空间划分 20×20 个网格，这样对于 TE_{11} 模，网格分辨率为

$$R = \frac{\lambda_{11}}{\Delta} = \frac{\sqrt{2}}{0.05} \approx 28.3, \text{ 这样的分辨率}$$

对于通常的 FDTD 而言是适当的。在边界处的电场分量为零(PEC 边界条件)。

由(2-31)知, 初始时刻($t=0$)

$$E_x = 0 \quad (4-5a)$$

$$E_y = 0 \quad (4-5b)$$

$$H_z = \cos(\pi x) \cos(\pi y) \quad (4-5c)$$

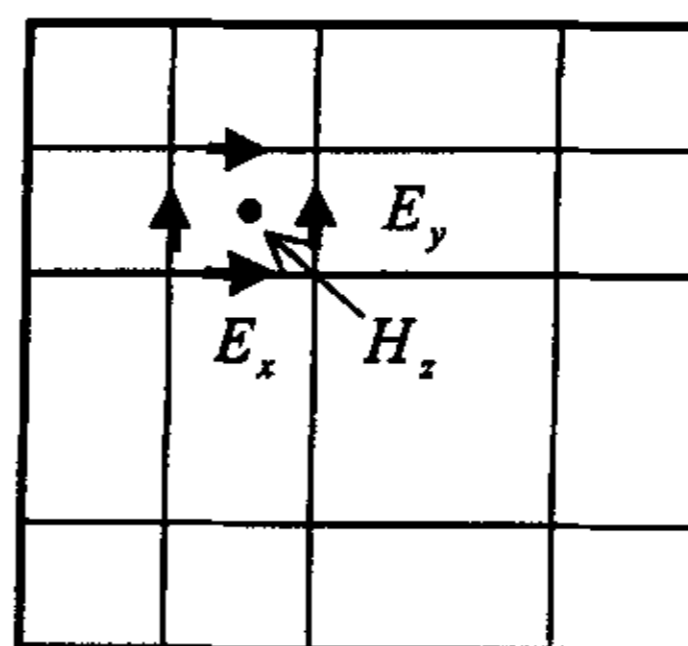


图 4.1 场分量位置

现在分别采用解析方法、标准 FDTD 和 ADI-FDTD 三种方法求解任意时刻腔中的电磁场分布, 并对所求得的结果加以比较。

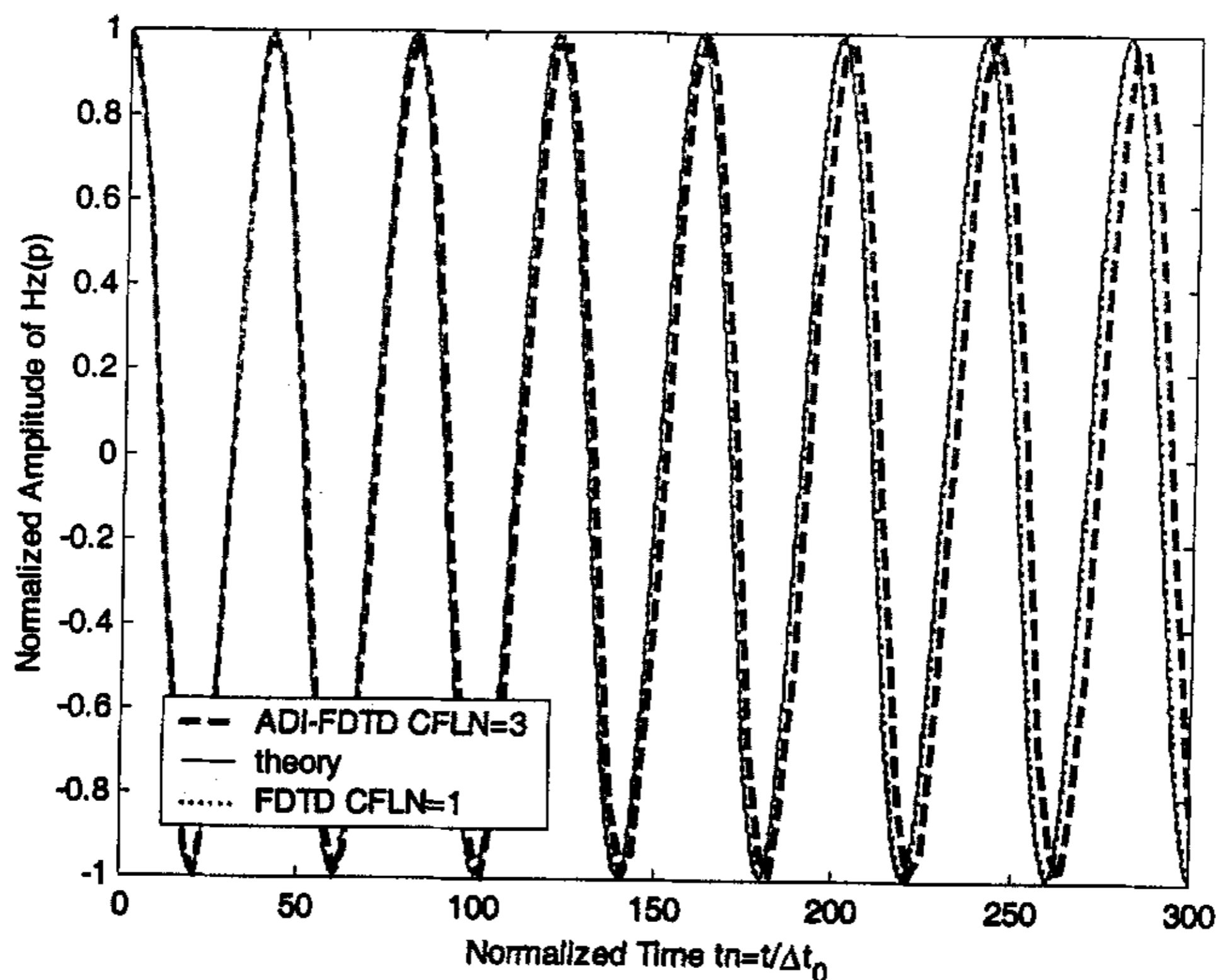


图 4.2 ADI-FDTD 数值解和理论解对照图

这儿空间网格尺寸 $\Delta x = \Delta y = \Delta = 1/20 = 0.05(m)$ 。采用 FDTD 算法, CFL 稳定性条件要求的时间步最大值为 $\Delta t_0 = \Delta / \sqrt{2}c$, 模拟从 $t_0 = 0$ 到 $t_1 = 300 \cdot \Delta t_0$ 一段时间内的物理过程需要 300 步; 然而 ADI-FDTD 算法是无条件稳定的, 时间步即使不满足 CFL 稳定性条件也不会发散, 不妨取 CFL 数

$$CFLN = \Delta t / \Delta t_0 = 3 \quad (2-35)$$

模拟相同时间内的电磁物理过程, 只需要 100 步; 采用分析方法, 这一物理时间内腔内任一点的任意场分量都可以精确地计算。不失一般性考虑点 $p(0.05, 0.05)$, 将

$H_z(p)$ 的分析解和数值解对照如图 4.2。由图可见：

- (1) 采用 ADI-FDTD 算法，当 CFL 稳定性条件不满足时，计算结果丝毫没有发散的迹象；
- (2) 数值解两峰值之间的间隔大于分析解（以 ADI-FDTD 较为明显），即数值解的谐振周期大于分析解，角频率小于分析解。由(2-30)可知，对于确定尺寸任意均匀介质填充的二维金属腔，确定模式（比如的 TE_{11} 模）的波数是确定的；考虑到(2-31)，数值解的角频率小于分析解可以理解为数值电磁波在一种不同的介质中传播，其介电常数大于真空中的介电常数，即所谓数值以太。数值电磁波在数值以太中的传播速度 $v_p = 1/\sqrt{\mu\epsilon}$ 小于真空中的光速；
- (3) ADI-FDTD 相位误差明显大于 FDTD；随着时间的推移，数值解的相位越来越落后于分析解，因而场分量误差越来越大。

对 E_x 和 E_y 分量的记录结果也作了对比分析，除了幅值差异外，所表现的规律完全和 H_z 分量相同。为了进一步观察 ADI-FDTD 相速度与时间步大小的关系，取 CFLN=1,2,3,4 分别迭代 10000 次，将所得结果作频谱分析结果列于表 4.1，更为形象的振荡曲线放大图见图 4.3。这些结果说明，ADI-FDTD 的数值计算误差随着时间步尺寸的增加呈非线性增长态势。

表 4.1 不同 CFLN 模拟结果对比

	理论值	FDTD	ADI-FDTD			
CFLN		1	1	2	3	4
频率 ($\times 10^8 H_z$)	2.1213	2.1209	2.1165	2.1084	2.0951	2.0770
相对误差 (%)		0.02	0.23	0.61	1.24	2.09

如果我们模拟从 $t_0 = 0$ 到 $t_1 = 40000 \cdot \Delta t_0$ 一段时间内的物理过程，采用 FDTD，取 CFLN=1，需要迭代 40000 次，耗时 23 秒；采用 ADI-FDTD，取 CFLN=4，只需要迭代 10000 次，耗时 22 秒。这说明 ADI-FDTD 具有通过增加步长减少步数以提高计算效率的潜在优势。以下通过改变网格尺寸研究网格分辨率对 ADI-FDTD 数值误差的影响。

表 4.2 ADI-FDTD 不同网格尺寸模拟结果对比

网格尺寸 Δ (m)	1.0/20	1.0/40	1.0/60	1.0/80	1.0/100
频率 ($\times 10^8 H_z$)	2.0951	2.1147	2.1184	2.1195	2.1202
相对误差 (%)	1.24	0.31	0.14	0.08	0.05
运行时间 (s)	2	9	26	77	122

表 4.2 为 CFLN=3，迭代 10000 次所得计算结果。由表 4.2 可见，当网格较密时，ADI-FDTD 计算误差很小。因此在网格尺寸不得不取得很小（和波长相比）的情况下，如果用 FDTD 模拟，相应的的时间步也必须取得很小，迭代次数增加，因而

总的运行时间将很长；而如果用 ADI-FDTD 模拟, 则可以根据误差要求, 选取适当长时间步以提高计算效率, 而不必顾及 CFL 稳定性条件。

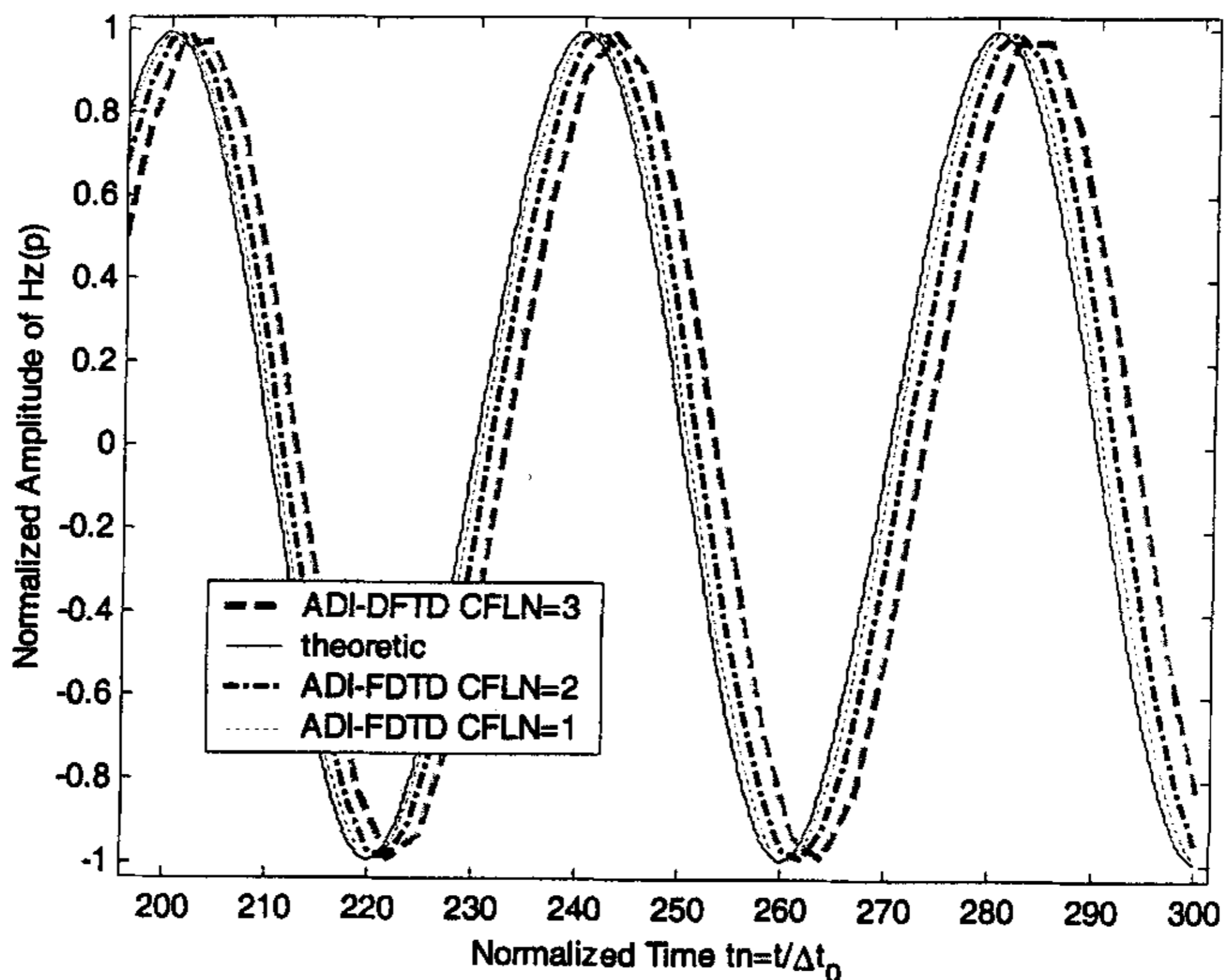


图 4.3 不同 CFLN 模拟振荡曲线对比

4.2 三维金属谐振腔分析

考虑一个 $1m \times 2m \times 1.5m$ 三维金属空腔(如图 4.4), 不妨取 $\Delta x = \Delta y = \Delta z = 0.1m$ 。

为了在腔中激励起感兴趣的谐振模式, 可以在腔中心附近一点或多点加上如下形式的激励源:

$$F_{\alpha}(C) = F_{\alpha}(C) - \exp\left[-\frac{(t-t_0)^2}{T^2}\right]$$

F 表示 E 或 H, α 表示 x, y 或 z。

取 $t_0 = 4T$, $t = n \cdot \Delta t = n \cdot (t_n \Delta t_0)$,

$T = 10 \cdot \Delta t = 10 \cdot (t_n \Delta t_0)$, 这儿 n

为时间步, $t_n = \text{CFLN}$ 为 CFL 数,

$\Delta t_0 = \Delta / \sqrt{3}c$ 。作为对比, 我们

同时采用三维 ADI-FDTD 和

FDTD 分别进行模拟。

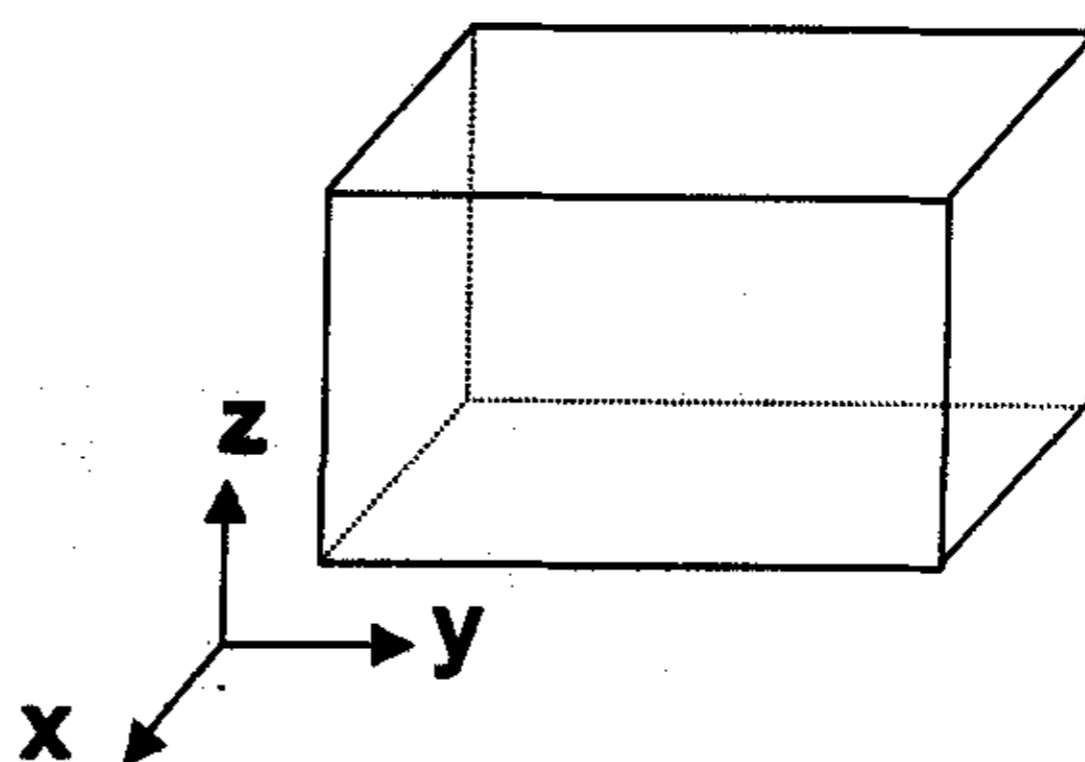


图 4.4 三维金属腔

首先取 CFLN=1.1, 用 FDTD 模拟, 任取腔内一点的 E_z 纪录(如图 4.5), 由图可见, FDTD 很快发散, 这是我们预期的结果; 但是如果采用 ADI-FDTD 模拟, CFLN 无论取多大都不会上述情况, 比如我们取 CFLN=1000, 由图(4.6)可见, 所得到的结果并没有发散。

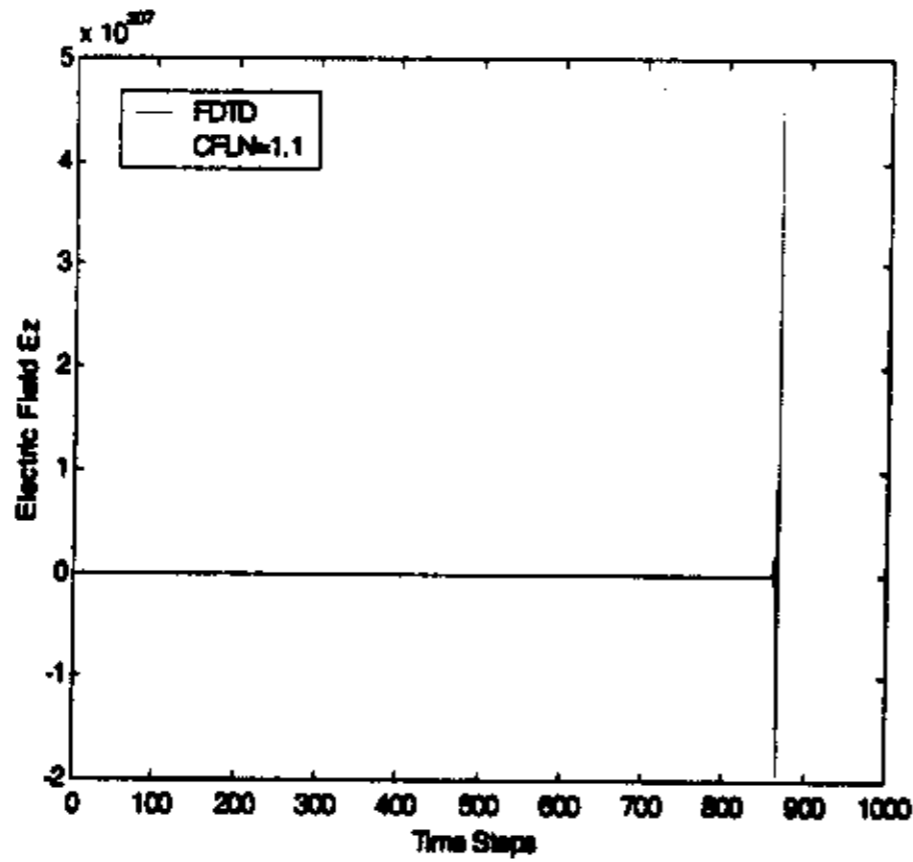


图 4.5 E_z 随时间步变化图 (FDTD)

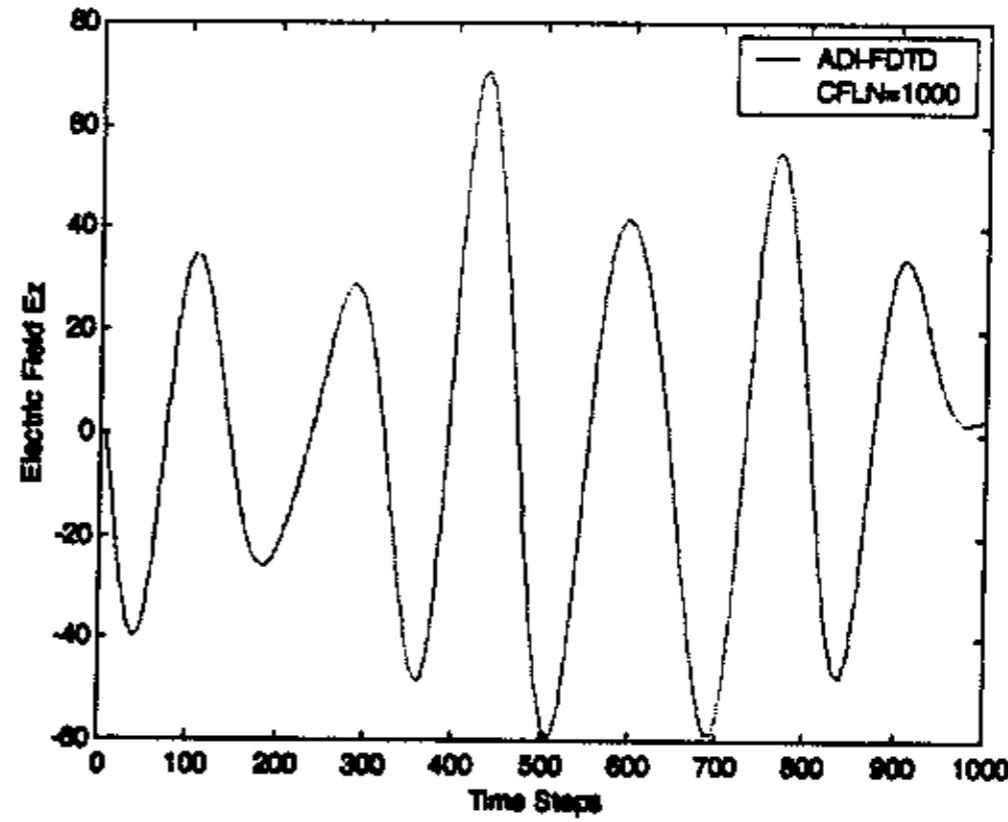


图 4.6 E_z 随时间步变化图 (ADI-FDTD)

接下来我们取不同的时间步, 分别用两种方法模拟腔中电磁场的演化。迭代 10000 次, 对所纪录的场值作傅里叶分析以求得主模的频率, 结果列于表 4.3。

表 4.3 不同时间步主模频率的计算值

CFLN		0.15	0.25	0.50	0.75	1.00	2.00	3.00
FDTD	主模频率(MHz)	1.2480	1.2480	1.2484	1.2488	1.2492		
	相对误差(%)	0.16	0.16	0.13	0.10	0.06		
ADI-FDTD	主模频率(MHz)	1.2480	1.2480	1.2476	1.2472	1.2466	1.2419	1.2344
	相对误差(%)	0.16	0.16	0.19	0.22	0.27	0.65	1.25

利用以上数据绘制曲线图 4.7 如下。由此图可以清楚看到, 当时间步减小时, FDTD 的误差越来越大, 而 ADI-FDTD 的误差越来越小; 图中两条曲线趋于一致, 但不是趋于零。

表 4.4 不同时间步主模频率的计算值 ($\Delta x = \Delta y = \Delta z = 0.05m$)

理论值				频率值(MHz)	1.2500	1.6671	1.8028	1.9526
FDTD	CFLN	迭代次数	耗时(S)	频率值(MHz)	1.2499	1.6761	1.8022	1.9520
	1	20000	752	相对误差(%)	0.008	0.54	0.033	0.031
	ADI-FDTD	CFLN	迭代次数	耗时(S)	频率值(MHz)	1.2434	1.6583	1.7824
	4	5000	608	相对误差(%)	0.53	0.53	1.13	1.15

为了进一步精细地权衡两种算法在计算误差和运行时间方面的得失, 将网格

尺寸减小一倍, 取 $\Delta x = \Delta y = \Delta z = 0.05\text{m}$, 采用两种方法分别模拟从 $t_0 = 0$ 到 $t_1 = 20000 \cdot \Delta t_0$ 一段时间内腔内的电磁物理过程。对于 FDTD, CFL 数的最大值为 1, 因而最少的迭代步数为 20000; 而对于 ADI-FDTD, 我们不妨取 CFLN=4, 相应的迭代步数为 5000。该谐振腔的前四个模频率间隔较大, 便于将计算值和理论值比较, 所得数值结果列于表 4.4。从四个模频率的计算结果看, ADI-FDTD 的计算误差整体上大于 FDTD。但 ADI-FDTD 可以取更大的时间步, 迭代步数因而总的运行时间得以减少。

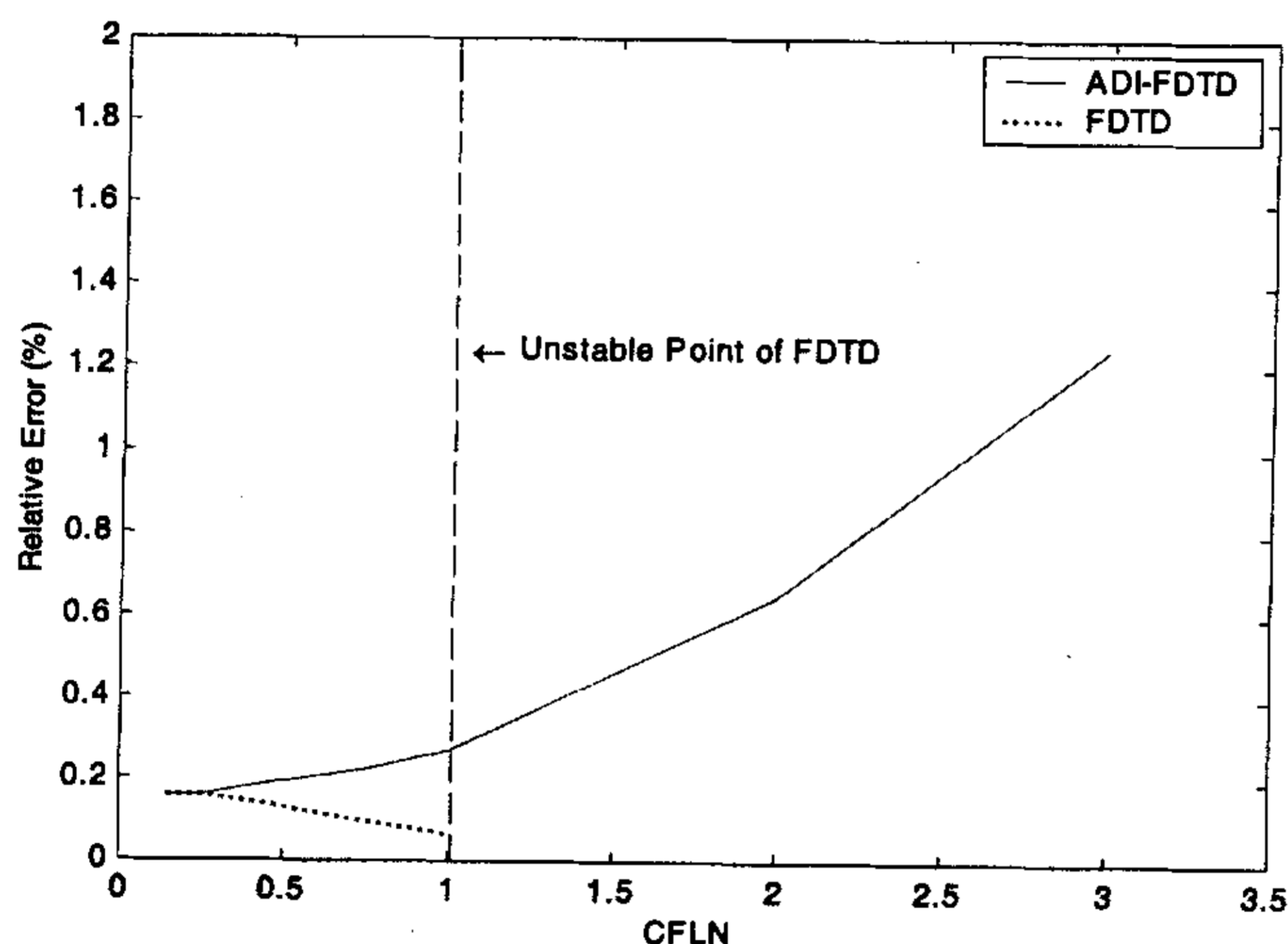


图 4.7 两种方法计算三维腔主模相对误差对照

4.3 小结

以上两节将两种算法分别用于二、三维谐振腔分析, 所得结论可以概括为如下五个方面: (1) 时间步不满足 CFL 条件时, ADI-FDTD 算法仍然是稳定的; (2) 从二维单模情况的分析看, 两种算法的误差均表现为相位误差, 或色散误差; (3) 相同条件下, ADI-FDTD 每迭代一次的时间为 FDTD 的数倍 (就上述例子而言, 大约为 4 倍, 但一般而言还与计算域的复杂程度有关), 且误差较大; (4) ADI-FDTD 的计算误差随时步减小而减小, FDTD 的计算误差则正好相反, 从图中看, 两种算法的误差在时间步较小时趋于一致; (5) 在网格尺寸不得不取得很小 (和波长相比) 的情况下, ADI-FDTD 可以根据误差要求, 选取适当长时间步以提高计算效率。

第五章 ADI-FDTD 的数值色散

通过上一章的分析计算我们已经对 ADI-FDTD 算法的数值误差有所了解, 本章将就这一问题作专门深入的研究。ADI-FDTD 算法一经提出, 其色散误差的研究就一直是一个重要的课题。文献[8]中所提出的二维 ADI-FDTD 色散误差公式是在一种极强的特殊条件下导出的; 文献[11]采用数值实验方法研究了二维 ADI-FDTD 算法的数值误差, 包括色散误差和幅值误差; 文献[12]导出了三维 ADI-FDTD 数值色散公式; 文献[13]则得到了两个二维 ADI-FDTD 色散公式, 因而认为相应地有两种二维 ADI-FDTD 算法。文献[8,12,13]中所得到的数值色散公式彼此互不相容, 而且都没有相应的数值实验支持。为此 5.1 节首先将文献[8,13]所得二维色散公式与实验结果对照, 发现二者均与实验曲线偏差较大; 接着 5.2 节采用傅里叶分析方法, 导出一个与文献[12]三维公式相容的二维 ADI-FDTD 数值色散公式; 5.3 节提供了相应的数值实验证明; 5.4 节从色散公式出发对比研究了 ADI-FDTD 和 FDTD 算法色散误差的相同和不同表现; 为了准确完整起见, 5.5 节在重新推导核实之后, 提供了三维 ADI-FDTD 色散公式。

5.1 核实已有的二维 ADI-FDTD 数值色散公式

文献[8]分别计算了二维 ADI-FDTD 前半步和后半步空域单色模的增长因子, 结果表明, 一般情况下这两个因子都不等于 1, 但二者的积等于 1, 从而证明二维 ADI-FDTD 算法是稳定的。为了进一步(但也许是粗略地)认识 ADI-FDTD 算法的特征, 在假设以上两个因子相等的条件下, 得到了下面的色散公式:

$$\frac{1}{\Delta x^2} \sin^2\left(\frac{k_x \Delta x}{2}\right) + \frac{1}{\Delta y^2} \sin^2\left(\frac{k_y \Delta y}{2}\right) = \frac{4}{(c\Delta t)^2} \sin^2\left(\frac{\omega \Delta t}{4}\right) \cos^{-1}\left(\frac{\omega \Delta t}{2}\right) \quad (5-1)$$

当然这个公式是初步的或近似的。

文献[13]用如下形式表示二维空间某一点某时刻的场量:

$$F_a^n(I, J) = F_{a0} \exp[j(\omega n \Delta t - k_x I \Delta x - k_y J \Delta y)] \quad (5-2)$$

需要注意的是, 在该文献中以上表示式中的时间指标 n 可以为整数, 也可以为半整数。当 n 为整数时表示间隔为 Δt 的不同时刻的场值, 当 n 为半整数时表示前后两个半时间步中间时刻的场值。这等于假设了前后两半时间步的增长因子的模都等于 1, 因而与文献[8]的结论相冲突。

在引入(5-2)表示法以后, 文献[13]由(2-18)导出如下形式的色散公式:

$$\frac{1}{\Delta x^2} \sin^2\left(\frac{k_x \Delta x}{2}\right) + \cos^2\left(\frac{\omega \Delta t}{2}\right) \frac{1}{\Delta y^2} \sin^2\left(\frac{k_y \Delta y}{2}\right) = \frac{1}{(c \Delta t)^2} \sin^2\left(\frac{\omega \Delta t}{2}\right) \quad (5-3)$$

显然这个公式在 X 和 Y 轴之间不对称,文献[13]认为这是由于 ADI-FDTD 公式(2-18)选择了前半步在 X 方向耦合、后半步在 Y 方向耦合的次序。把这个公式和下文(5-22)标准 FDTD 公式对照可见,除了 Y 相关项前多了一个 $\cos^2(\omega \Delta t / 2)$ 外,二者完全一样。通过把(2-18)的耦合次序变为先 Y、后 X 方向,文献[13]得到了另外一个公式:

$$\cos^2\left(\frac{\omega \Delta t}{2}\right) \frac{1}{\Delta x^2} \sin^2\left(\frac{k_x \Delta x}{2}\right) + \frac{1}{\Delta y^2} \sin^2\left(\frac{k_y \Delta y}{2}\right) = \frac{1}{(c \Delta t)^2} \sin^2\left(\frac{\omega \Delta t}{2}\right) \quad (5-4)$$

并把(5-3)叫做 X 方向 ADI-FDTD 色散公式,把(5-4)叫做 Y 方向 ADI-FDTD 色散公式。

为了检验所得到的数值色散公式,设计一个这样的数值实验:考虑 $M \times M$ 个矩形单元构成的 x-y 平面网格(设 M 为奇数),将激励源加于点 $S(M/2-d, M/2-d)$,另外设置数据采集点 $A(M/2-d, M/2)$, $B(M/2-d, M/2+d)$ 沿 y 轴方向, $C(M/2, M/2)$, $D(M/2+d, M/2+d)$ 沿方向角 $\theta = 45^\circ$ 的方向,为了讨论方便,设 Δ 为一长度单位, $\Delta x = x_n \cdot \Delta$, $\Delta y = y_n \cdot \Delta$, 如果 $\Delta x = \Delta y = \Delta$ (即 $x_n = y_n = 1$), 通常的 FDTD 算法稳定性条件要求时间步大小 $\Delta t \leq \Delta t_0 = \Delta / (\sqrt{2}c)$, 但 ADI-FDTD 算法的时间步大小完全没有这一限制,设 $\Delta t = t_n \cdot \Delta t_0$, 当时 $\Delta x = \Delta y = \Delta$, t_n 即 FDTD 算法的 CFL 数。

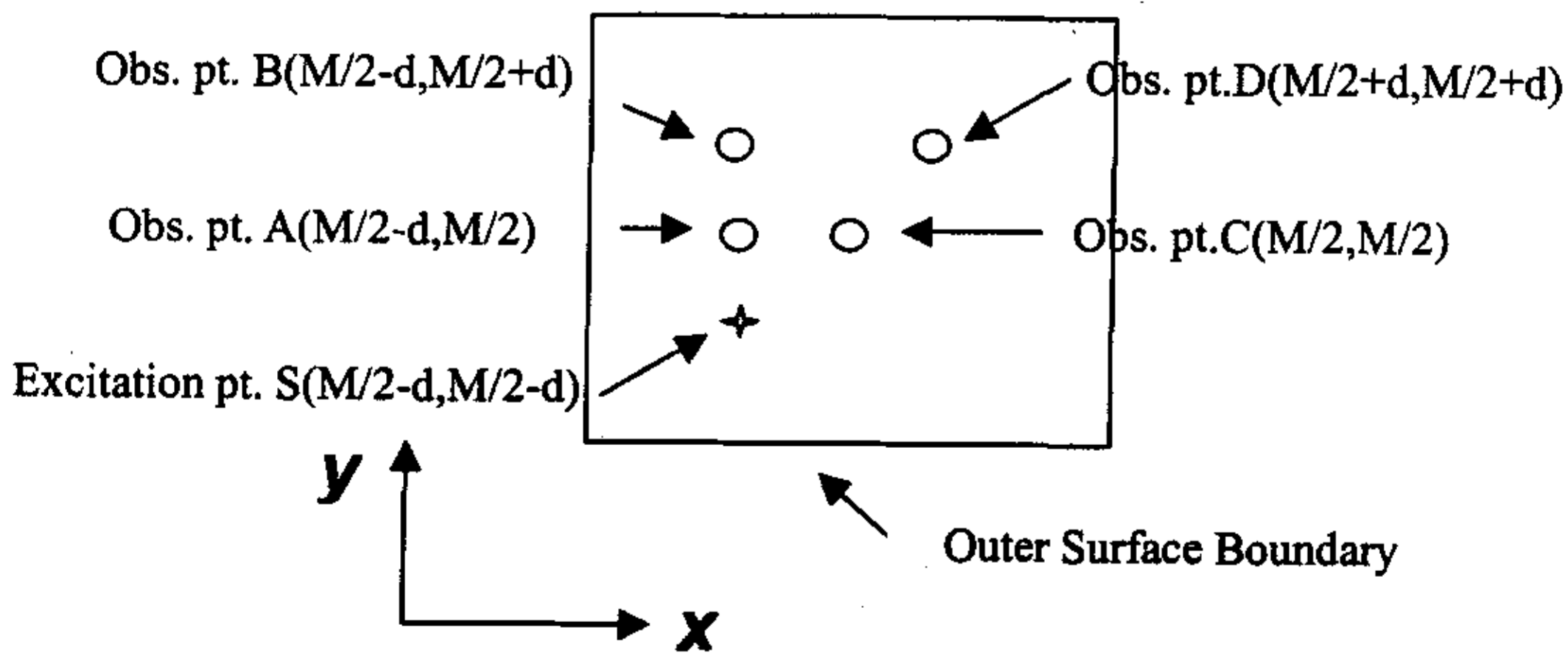


图 5.1 数值实验方案示意图

数值计算表明,如果 M 取充分大的值,从边界处反射回计算域的电磁波可以被充分地隔离,因而边界条件的精度并不重要;但是在该数值实验中,由于所研究的数值波是高度色散的,为使采样点的数值波衰减到充分小,采样时间需要充分长,因而为了隔离反射波, M 往往需要取得很大,数值模拟所需要的时间会很长。因而这里使用了 PML 边界条件(详见本文第六章)。

在该数值实验中,激励源被加在磁场分量 $H_z(M/2-d, M/2-d)$ 上,使用了如下通常形式的高斯源

$$H_z(M/2-d, M/2-d) = H_z(M/2-d, M/2-d) + \exp\left[-\frac{(t-t_0)^2}{T^2}\right] \quad (5-5)$$

取 $t_0 = 4 \cdot T$, $T = 2 \cdot \Delta t = 2 \cdot (t_n \Delta t_0)$, $t = n \cdot \Delta t = n \cdot (t_n \Delta t_0)$, n 为整数, 表示时间步, 即激励源每时间步馈入一次。这儿 T 的取值是可变的, 其原因说明如下。由后面的图 5.4、5.5 可知, 当 Δt 减小时, 相应的数值以太中可以正常传播的电磁波的最高频率变得越来越大, 因而需要研究的频谱范围也越来越大, 但高斯源所提供的频带宽度有限, 最大频率 $f_m \cong 1/T$ [22]。为了得到充分宽的频带信息, T 应该取得充分小, 数值实验的结果表明, 选取 $T = 2 \cdot \Delta t$, 让 T 随 Δt 以系数为 2 的比例减小是恰当的。

在二维点源激励情况, 如果实验中的数值以太可以近似地看作为一种各向同性的色散媒质 (严格地讲, FDTD 和 ADI-FDTD 数值以太是各向异性的, 如图 5.8-5.13 所示), 则有[22]:

$$H_z(t, r) = \frac{1}{\sqrt{r}} \cdot f(r - vt) \quad (5-6)$$

其中 r 为观察点离开源点的距离。于是

$$H_z(t, r_1) = \frac{1}{\sqrt{r_1}} \cdot f(r_1 - vt), \quad (5-7a)$$

$$H_z(t, r_2) = \frac{1}{\sqrt{r_2}} \cdot f(r_2 - vt) = \frac{1}{\sqrt{r_2}} \cdot f(r_1 + L - vt) = \frac{1}{\sqrt{r_2}} \cdot f\left[r_1 - v\left(t - \frac{L}{v}\right)\right] \quad (5-7b)$$

其中 $L = r_2 - r_1$ 。用 F 表示傅立叶变换, 即

$$F[g(t)] = \int_{-\infty}^{\infty} g(t) \cdot e^{-j\omega t} dt \quad (5-8)$$

利用傅里叶变换公式

$$F[g(t+t_0)] = e^{j\omega t_0} \cdot F[g(t)] \quad (5-9)$$

有

$$\begin{aligned} H(\omega, r_2) &= F[H(t, r_2)] = \frac{1}{\sqrt{r_2}} \cdot e^{j\omega\left(-\frac{L}{v}\right)} \cdot F[f(r_1 - vt)] \\ &= \frac{\sqrt{r_1}}{\sqrt{r_2}} \cdot e^{j\omega\left(-\frac{L}{v}\right)} \cdot F[H(t, r_1)] = \frac{\sqrt{r_1}}{\sqrt{r_2}} e^{-j\frac{\omega}{v}L} H(\omega, r_1) \end{aligned} \quad (5-10)$$

因而

$$\frac{\sqrt{r_1}}{\sqrt{r_2}} e^{-j\frac{\omega}{v}L} = \frac{H(\omega, r_2)}{H(\omega, r_1)} \quad (5-11)$$

由上式所得到的 v 即相速度 $v_p(\omega)$

再来交待一下如何利用数值色散公式计算数值相速的理论值。如上文所述，为了讨论方便，引入代数量 Δ （为一长度单位），设 $\Delta x = x_n \cdot \Delta$ ， $\Delta y = y_n \cdot \Delta$ ， $\Delta t = t_n \cdot \Delta t_0$ （其中 $\Delta t_0 = \Delta / (\sqrt{2}c)$ ），频率 $f = f_n \cdot c / (100\Delta)$ ，相速度 $v_p = v_n \cdot c$ ， $k_x = k \cdot \cos(\theta)$ ， $k_y = k \cdot \sin(\theta)$ ，（注意：所有带下标 n 的量都是无量纲量， n 表示 normalized），则(5-1)数值色散公式将表示为如下形式：

$$f(x_n, y_n, t_n, \theta, f_n, v_n) = 4 \sin^2 \left(\frac{\sqrt{2}\pi}{400} \cdot f_n \cdot t_n \right) \cos^{-1} \left(\frac{\sqrt{2}\pi}{200} \cdot f_n \cdot t_n \right) - \frac{t_n^2}{2x_n^2} \sin^2 \left(\frac{\pi}{100} \cdot f_n \cdot \frac{x_n \cos(\theta)}{v_n} \right) - \frac{t_n^2}{2y_n^2} \sin^2 \left(\frac{\pi}{100} \cdot f_n \cdot \frac{y_n \sin(\theta)}{v_n} \right) = 0 \quad (5-12)$$

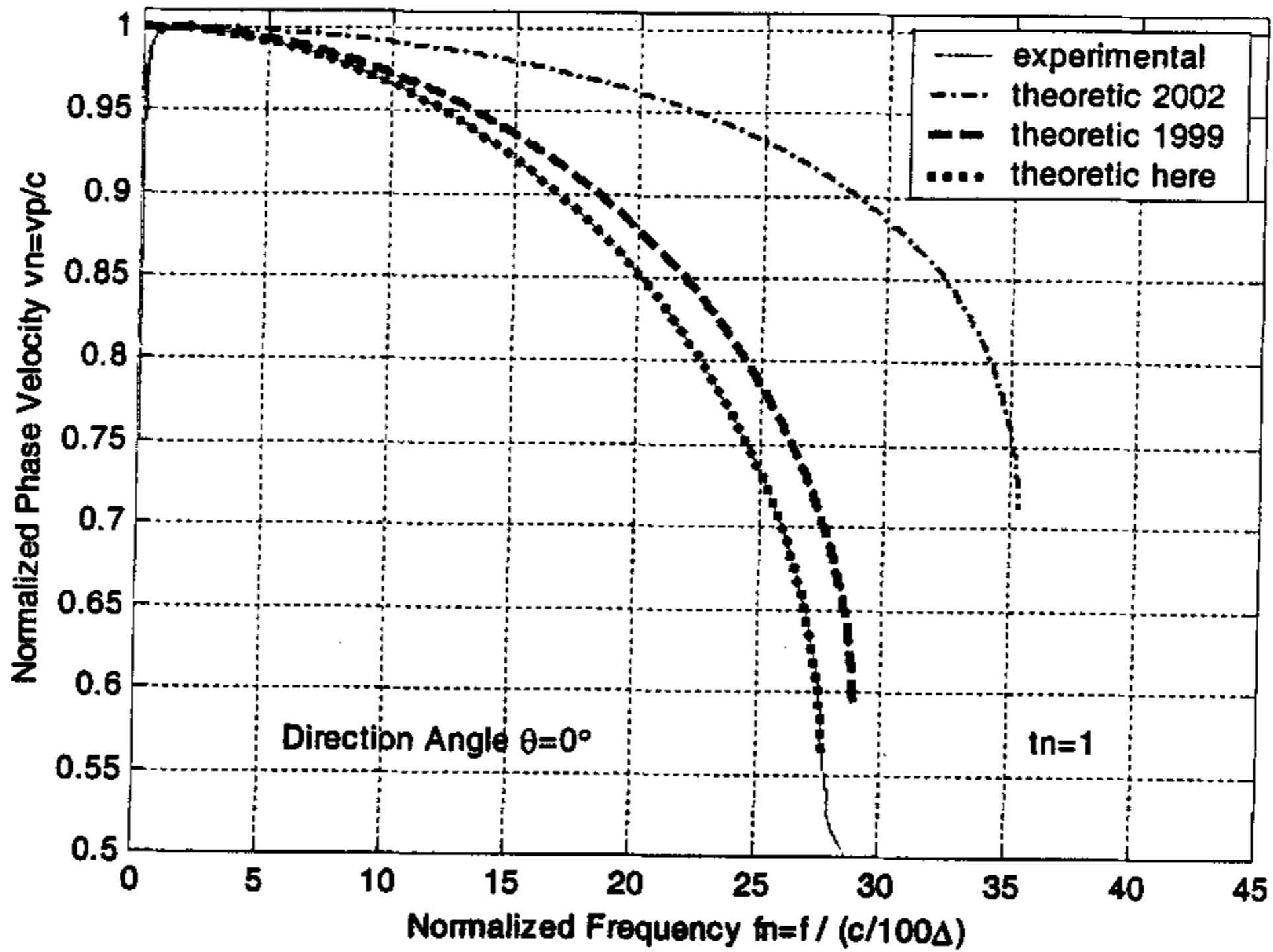


图 5.2 理论曲线和实验曲线对照图 $\theta = 0^\circ$

对于文献[13]中的两个色散公式，我们选择(5-3)所谓 X 方向 ADI-FDTD 色散公式来研究。引用上述符号色散公式(5-3)可表示为如下形式：

$$f(x_n, y_n, t_n, \theta, f_n, v_n) = \sin^2 \left(\frac{\sqrt{2}\pi}{200} \cdot f_n \cdot t_n \right) - \frac{t_n^2}{2x_n^2} \sin^2 \left(\frac{\pi}{100} \cdot f_n \cdot \frac{x_n \cos(\theta)}{v_n} \right) - \frac{t_n^2}{2y_n^2} \sin^2 \left(\frac{\pi}{100} \cdot f_n \cdot \frac{y_n \sin(\theta)}{v_n} \right) \cos^2 \left(\frac{\sqrt{2}\pi}{200} \cdot f_n \cdot t_n \right) = 0 \quad (5-13)$$

给定 x_n, y_n, t_n, f_n 和 θ 的值， v_n 的值可用牛顿迭代法求得

$$v_n(i+1) = v_n(i) - \frac{f(v_n)}{f'(v_n)} \quad (5-14)$$

将两种色散公式的理论相速曲线和由实验结果的到的相速曲线对照作图，其中图 5.2 为 $\theta = 0^\circ$ 即 X 方向的色散曲线，图 5.3 为 $\theta = 45^\circ$ 方向的色散曲线。这里我们取 $x_n = y_n = 1, t_n = 1$ ，图中横坐标表示被模拟电磁波的归一化频率，纵轴表示数值电磁波的归一化相速。图标中 theoretic 2002 表示文献[13]2002 年提出的色散公式；theoretic 1999 表示文献[8]1999 年提出的色散公式，theoretic here 表示本文下节将导出的色散公式，作为对比也画在了一起。由图可见，文献[8]和文献[13]中的色散公式和实验结果偏差较大。

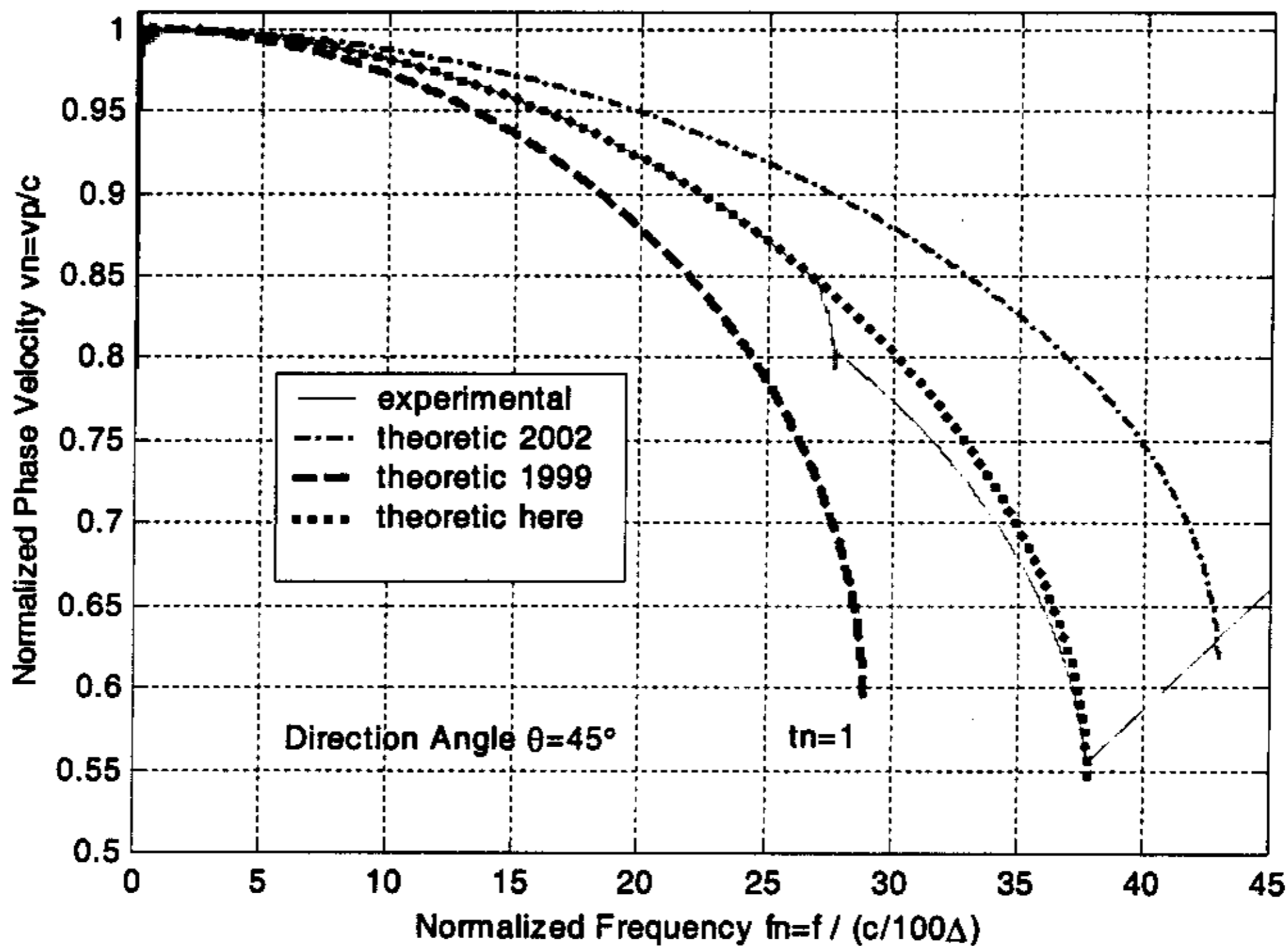


图 5.3 理论曲线和实验曲线对照图 $\theta = 45^\circ$

5.2 导出新的二维 ADI-FDTD 数值色散公式

在 3.2 节稳定性证明结果的基础上通过简单的推导可以得到一个新的二维 ADI-FDTD 算法的色散公式。

由特征方程(3-19a)得

$$\text{Direction Angle } (\theta = 45^\circ) \cdot (\lambda - \lambda_2) \cdot (\lambda - \lambda_3) = 0 \quad (5-15)$$

将 $\lambda_{2,3} = a \pm j \cdot b$ 代入上式可得

$$\lambda^2 - 2a \cdot \lambda + 1 = 0 \quad (5-16a)$$

$$\lambda + \lambda^{-1} = 2a \quad (5-16b)$$

将增长因子

$$\lambda = e^{j\omega\Delta t}, \quad (|\lambda|=1) \quad (5-17)$$

代入上式可得:

$$\cos(\omega\Delta t) = a = \frac{\sqrt{R^2 - S^2}}{R} \quad (5-18)$$

$$\cos^2(\omega\Delta t) = \frac{R^2 - S^2}{R^2} = 1 - \frac{S^2}{R^2} \quad (5-19)$$

$$\sin^2(\omega\Delta t) = \frac{S^2}{R^2} \quad (5-20)$$

将 S,R 等记号还原即得所求色散公式

$$\begin{aligned} \sin^2(\omega\Delta t) = & \\ & 4 \cdot \frac{\left[\frac{\Delta t^2}{\mu\epsilon\Delta x^2} \sin^2\left(\frac{k_x\Delta x}{2}\right) + \frac{\Delta t^2}{\mu\epsilon\Delta y^2} \sin^2\left(\frac{k_y\Delta y}{2}\right) + \frac{\Delta t^4}{(\mu\epsilon)^2\Delta x^2\Delta y^2} \sin^2\left(\frac{k_x\Delta x}{2}\right) \sin^2\left(\frac{k_y\Delta y}{2}\right) \right]}{\left[1 + \frac{\Delta t^2}{\mu\epsilon\Delta x^2} \sin^2\left(\frac{k_x\Delta x}{2}\right) \right]^2 \cdot \left[1 + \frac{\Delta t^2}{\mu\epsilon\Delta y^2} \sin^2\left(\frac{k_y\Delta y}{2}\right) \right]^2} \end{aligned} \quad (5-21)$$

对于二维 TM 模可以得到同样的数值色散公式。以下在讨论 ADI-FDTD 数值色散误差时不再区分 TM 模和 TE 模。

和通常的二维 FDTD 色散公式

$$\sin^2\left(\frac{\omega\Delta t}{2}\right) = \frac{\Delta t^2}{\mu\epsilon\Delta x^2} \sin^2\left(\frac{k_x\Delta x}{2}\right) + \frac{\Delta t^2}{\mu\epsilon\Delta y^2} \sin^2\left(\frac{k_y\Delta y}{2}\right) \quad (5-22)$$

相比较, 二维 ADI-FDTD 色散公式显得要复杂一些, 但是当 $\Delta t \rightarrow 0$ 时两个公式有共同的极限形式

$$\left(\frac{\omega}{2}\right)^2 = \frac{1}{\mu\epsilon\Delta x^2} \sin^2\left(\frac{k_x\Delta x}{2}\right) + \frac{1}{\mu\epsilon\Delta y^2} \sin^2\left(\frac{k_y\Delta y}{2}\right) \quad (5-23)$$

此外, Δt 不变, 当 $\Delta x, \Delta y$ 适当地增加时, ADI-FDTD 色散公式中使其区别于 FDTD 色散公式的项相对减小, 因而也导致了使二者一致化的倾向。

当 $\Delta x, \Delta y, \Delta t \rightarrow 0$ 时, 二维 ADI-FDTD 色散公式以及二维 FDTD 色散公式的共同的极限形式为

$$\left(\frac{\omega}{c}\right)^2 = k_x^2 + k_y^2 \quad (5-24)$$

5.3 用数值实验检验新的色散公式

引入和 5.1 节相同的符号, 新的二维 ADI-FDTD 数值色散公式可表示为如下形式

$$\begin{aligned}
 & f(x_n, y_n, t_n, \theta, f_n, v_n) = \\
 & \sin^2\left(\frac{\sqrt{2}\pi}{100} \cdot f_n \cdot t_n\right) \cdot \left[1 + \frac{t_n^2}{2x_n^2} \sin^2\left(\frac{\pi}{100} \cdot f_n \cdot \frac{x_n \cos(\theta)}{v_n}\right)\right]^2 \cdot \left[1 + \frac{t_n^2}{2y_n^2} \sin^2\left(\frac{\pi}{100} \cdot f_n \cdot \frac{y_n \sin(\theta)}{v_n}\right)\right]^2 \\
 & - 4 \cdot \left[\frac{t_n^2}{2x_n^2} \sin^2\left(\frac{\pi}{100} \cdot f_n \cdot \frac{x_n \cos(\theta)}{v_n}\right) + \frac{t_n^2}{2y_n^2} \sin^2\left(\frac{\pi}{100} \cdot f_n \cdot \frac{y_n \sin(\theta)}{v_n}\right) \right] \\
 & \left[+ \frac{t_n^4}{4x_n^2 y_n^2} \sin^2\left(\frac{\pi}{100} \cdot f_n \cdot \frac{x_n \cos(\theta)}{v_n}\right) \cdot \sin^2\left(\frac{\pi}{100} \cdot f_n \cdot \frac{y_n \sin(\theta)}{v_n}\right) \right] = 0
 \end{aligned} \tag{5-35}$$

给定 x_n, y_n, t_n, f_n 的值, 当 $\theta = 0^\circ$ 或 $\theta = 90^\circ$ 时, v_n 的值可用解析法求得; 在一般的传播方向上, v_n 的值可用牛顿迭代法求得

$$v_n(i+1) = v_n(i) - \frac{f(v_n)}{f'(v_n)} \tag{5-36}$$

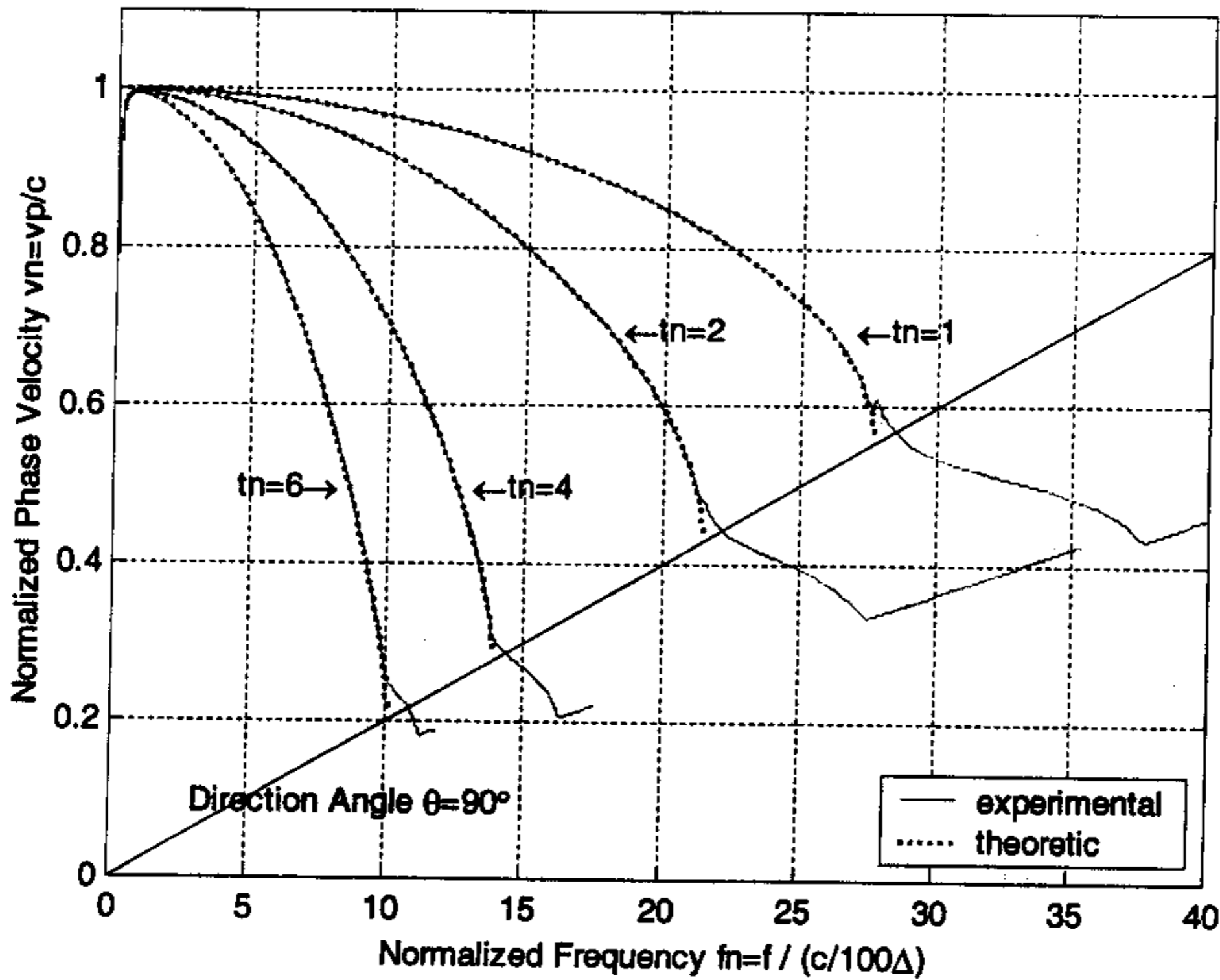


图 5.4 理论曲线和实验曲线对照图($\theta = 90^\circ$)

但是牛顿迭代法的求解过程和结果对初值的依赖性较强, 如果简单地取 v_n 的初值

为 $v_n=1$, 则可能出现解甚至进入死循环。因此在求解 $f_n \sim v_n$ 曲线时, 假设 v_n 是 f_n 的连续函数, 则当 f_n 连续变化时, v_n 的值也连续变化。如果 $v_n(i) = v_n[f_n(i)]$ (当序号 i 增加时 f_n 的值增加), 可设 $v_n(i+1) = v_n[f_n(i+1)]$ 的初值为 $v_n(i+1) = v_n(i) - s \cdot [v_n(i-1) - v_n(i)]$, 其中 s 是一个可调参数, 例如当 $\theta = 90^\circ$, $t_n=6, 4, 2$ 时, $s=0$; $t_n=1$ 时, $s=0.5$ 。

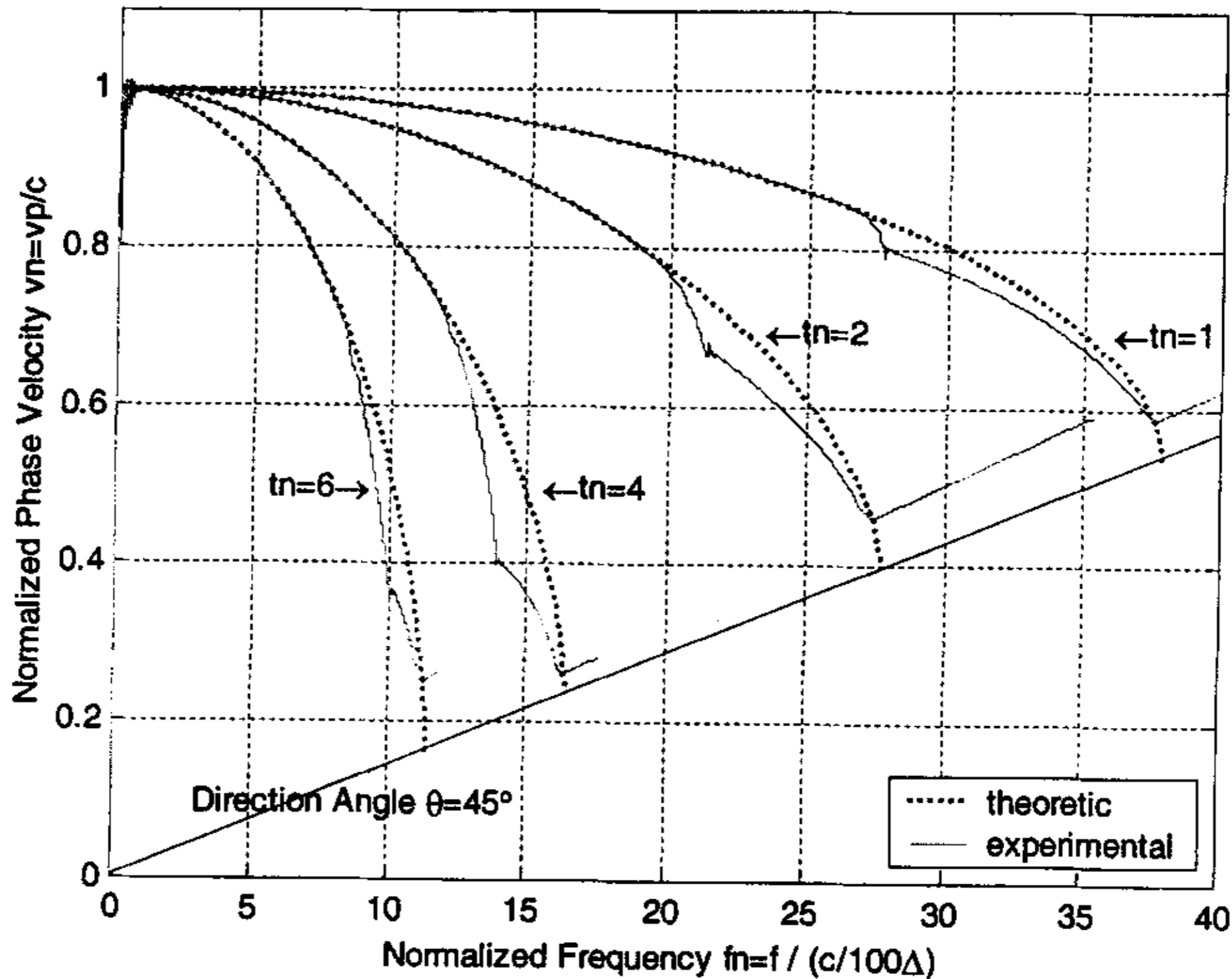


图 5.5 理论曲线和实验曲线对照图($\theta = 45^\circ$)

取 $x_n = y_n = 1$, 时间步尺寸 $t_n=6, 4, 2, 1$ 分别做了相应的理论相速计算和数值实验模拟。图 5.4 表示在 $\theta = 90^\circ$ 方向, 电磁波的归一化数值相速随归一化频率变化曲线, 图 5.5 表示在 $\theta = 45^\circ$ 方向, 电磁波的归一化数值相速随归一化频率变化曲线。

由图可见, 实验结果和理论曲线吻合较好。但在低频端, 当 $f_n < 1$ 时, 实验曲线明显地偏离了理论结果; 在高频段, 尤其是在 $\theta = 45^\circ$ 方向, 实验曲线也偏离了理论结果。

就一般而言, 理论和实验总会有些差别, 其原因有时可能是由于理论的局限性, 有时也可能是由于我们无法完全控制的实验条件, 或者其他与方法相关的系统误差。上述问题则可能部分地与相速计算方法有关。我们所采用的计算方法是以数值以太的各相同性为前提的, 而事实上 FDTD 和 ADI-FDTD 数值以太却是各向异性的, 而且由 5.4 节图 5.8-5.13 可见, 各向异性特征随时间步尺寸增加或网格

分辨率减小（等价于被模拟电磁波频率增加）而越来越突出。

5.4 ADI-FDTD 算法和 FDTD 算法对比

无条件稳定的 ADI-FDTD 算法完全摆脱了稳定性条件的限制，时间步尺寸即使取很大的值，也不会导致发散。但是一般来说有限差分法的精度与自变量差分值的大小相关，如果时间步尺寸或空间网格在某一或某些方向上尺寸的取值增加，将导致更大的求解误差。ADI-FDTD 算法和 FDTD 算法的求解误差表现为色散误差，两种算法的色散关系式不同，因而色散误差有着不同的表现。以下从四个方面对比研究两种算法其色散误差的相同和不同之处：1. 在特定的传播方向，同一次模拟过程中不同频率的数值波以不同的相速传播——色散数值以太；2. 特定频率的数值波在不同方向以不同的相速传播——各向异性数值以太；3. 相同空间网格尺寸和时间步大小的数值模拟，ADI-FDTD 算法和 FDTD 算法的色散程度不同；4. 空间网格尺寸变化对数值波相速度的影响。

二维 FDTD 算法数值色散关系为：

$$\sin^2\left(\frac{\omega\Delta t}{2}\right) = \frac{\Delta t^2}{\mu\epsilon\Delta x^2} \sin^2\left(\frac{k_x\Delta x}{2}\right) + \frac{\Delta t^2}{\mu\epsilon\Delta y^2} \sin^2\left(\frac{k_y\Delta y}{2}\right) \quad (5-22)$$

如果引用如前所述的归一化变量，二维 FDTD 算法的数值色散关系可以表示为：

$$f(x_n, y_n, t_n, \theta, f_n, v_n) = \sin^2\left(\frac{\sqrt{2}\pi}{200} \cdot f_n \cdot t_n\right) - \frac{t_n^2}{2x_n^2} \sin^2\left(\frac{\pi}{100} \cdot f_n \cdot \frac{x_n \cos(\theta)}{v_n}\right) - \frac{t_n^2}{2y_n^2} \sin^2\left(\frac{\pi}{100} \cdot f_n \cdot \frac{y_n \sin(\theta)}{v_n}\right) = 0 \quad (5-40)$$

对于给定的 $x_n, y_n, t_n, \theta, f_n$ ， v_n 的值可用如前所述的牛顿迭代法求得。

1. 在特定的传播方向，同一次模拟过程中不同频率的数值波以不同的相速传播——色散数值以太。

图 5.6 表示在 $\theta = 90^\circ$ 方向，ADI-FDTD 算法和 FDTD 算法归一化数值相速随归一化频率变化曲线对照，图 5.7 表示在 $\theta = 45^\circ$ 方向，ADI-FDTD 算法和 FDTD 算法归一化数值相速随归一化频率变化曲线对照，其中对不同的时间步尺寸 $t_n = 0.25, 0.5, 0.75, 1.00, 1.25$ 分别画出相应的理论相速曲线，其中 $x_n = y_n = 1$ 。尽管当 $t_n > 1$ 时，通常的 FDTD 算法是发散的，即截断误差在计算过程中被逐步放大，因而实际的计算没有意义，但是将这些曲线放在一起比较，却有一定的认识价值。由图可见：

(1) 同一次模拟中（即给定空间网格尺寸和时间步大小），无论在 $\theta = 90^\circ$ 还

是 $\theta = 45^\circ$ 传播方向上, 不同的频率成分相速度不同, 高频成分的色散误差总大于低频成分, 无论是采用 ADI-FDTD 算法还是 FDTD 算法。这说明两种算法所模拟的数值电磁波并不是传播于真实的非色散媒质中, 而是一种色散数值以太;

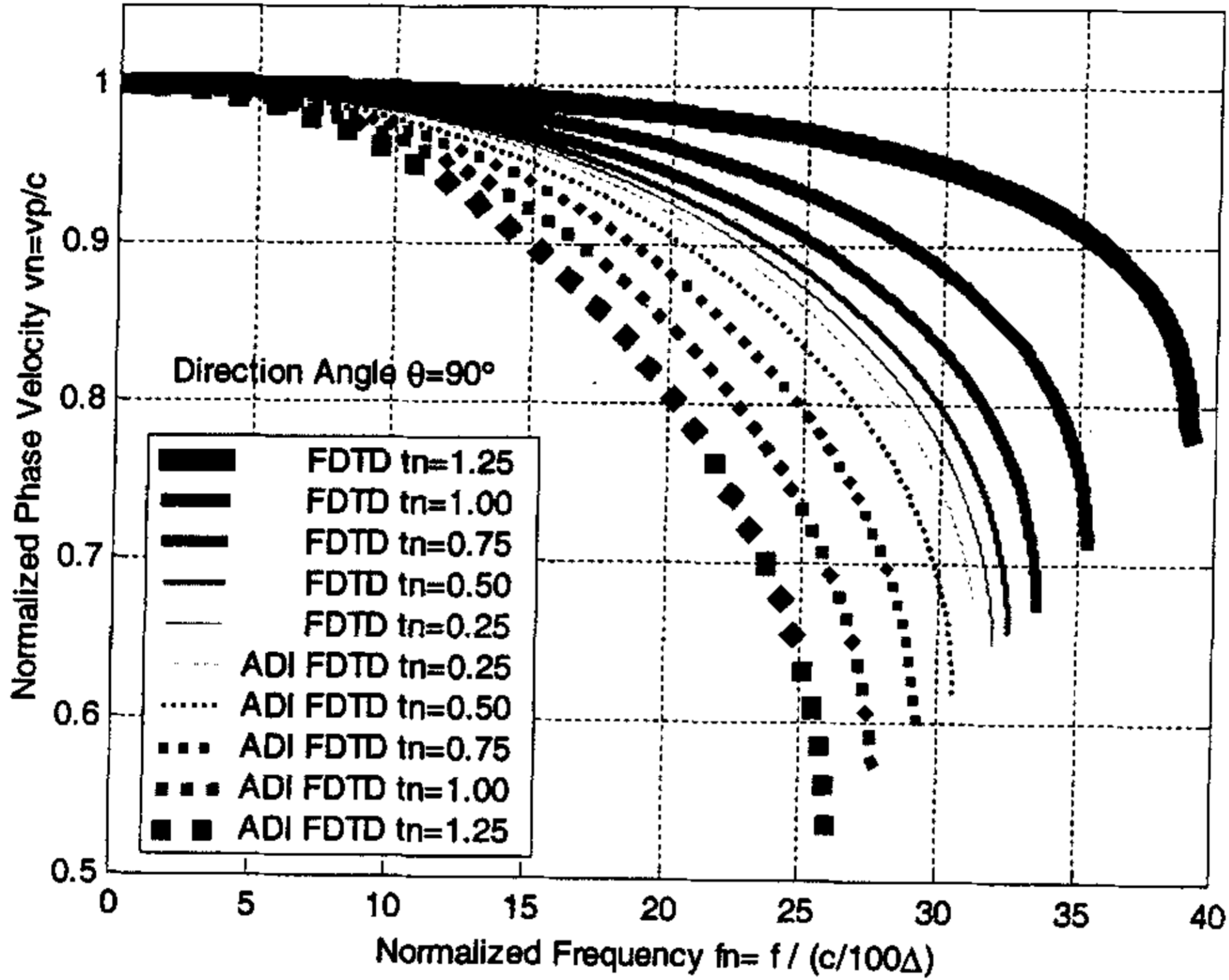


图 5.6 两种算法 $f_n \sim v_n$ 曲线对照 ($\theta = 90^\circ$)

- (2) 空间网格尺寸 $x_n = y_n = 1$ 保持不变, 当时间步尺寸 t_n 较小时, 两种算法的 $f_n \sim v_n$ 曲线趋于一致; 当时间步尺寸 t_n 增加时, ADI-FDTD 算法的 $f_n \sim v_n$ 曲线逐步下沉, 而 FDTD 算法的 $f_n \sim v_n$ 曲线逐步上扬。因此如果空间网格取相同的尺寸, 采用 ADI-FDTD 算法, 电磁场数值波所有频率成分的色散误差总大于采用 FDTD 算法, 且当时间步尺寸增加时, ADI-FDTD 算法的色散误差越来越大, 而 FDTD 算法的色散误差却越来越小 (在时间步尺寸满足稳定性条件 $t_n < 1$ 的范围内);
- (3) 由 $f = f_n \cdot c / (100\Delta)$ 得

$$f_n \cdot \frac{c}{f \cdot \Delta} = f_n \cdot \frac{\lambda}{\Delta} = f_n \cdot R = 100 \quad (5-41)$$

其中 $R = \lambda / \Delta$ 表示空间网格分辨率。由图 5.8 ($\Delta x = \Delta y$) 可见, 数值电磁波的色散误差在方向角 $\theta = 90^\circ$ 传播方向总大于在方向角 $\theta = 45^\circ$ 传播方向, 无论是采用 ADI-FDTD 算法还是 FDTD 算法。对

比图 5.6 和图 5.7 可知, 数值色散曲线终止点的 f_n 在 $\theta = 90^\circ$ 的传播方向上较小, 利用所得公式对图 5.6 中的 $f_n \sim v_n$ 曲线终止点的网格分辨率 R 进行换算, 考虑到 FDTD 算法要求 $t_n < 1$, 而 ADI-FDTD 算法通常采用 $t_n > 1$ 的值, 可以得出如下结论: FDTD 要求的最低网格分辨率为 $R > 3$, ADI-FDTD 要求的最低网格分辨率为 $R > 4$ 或者更大;

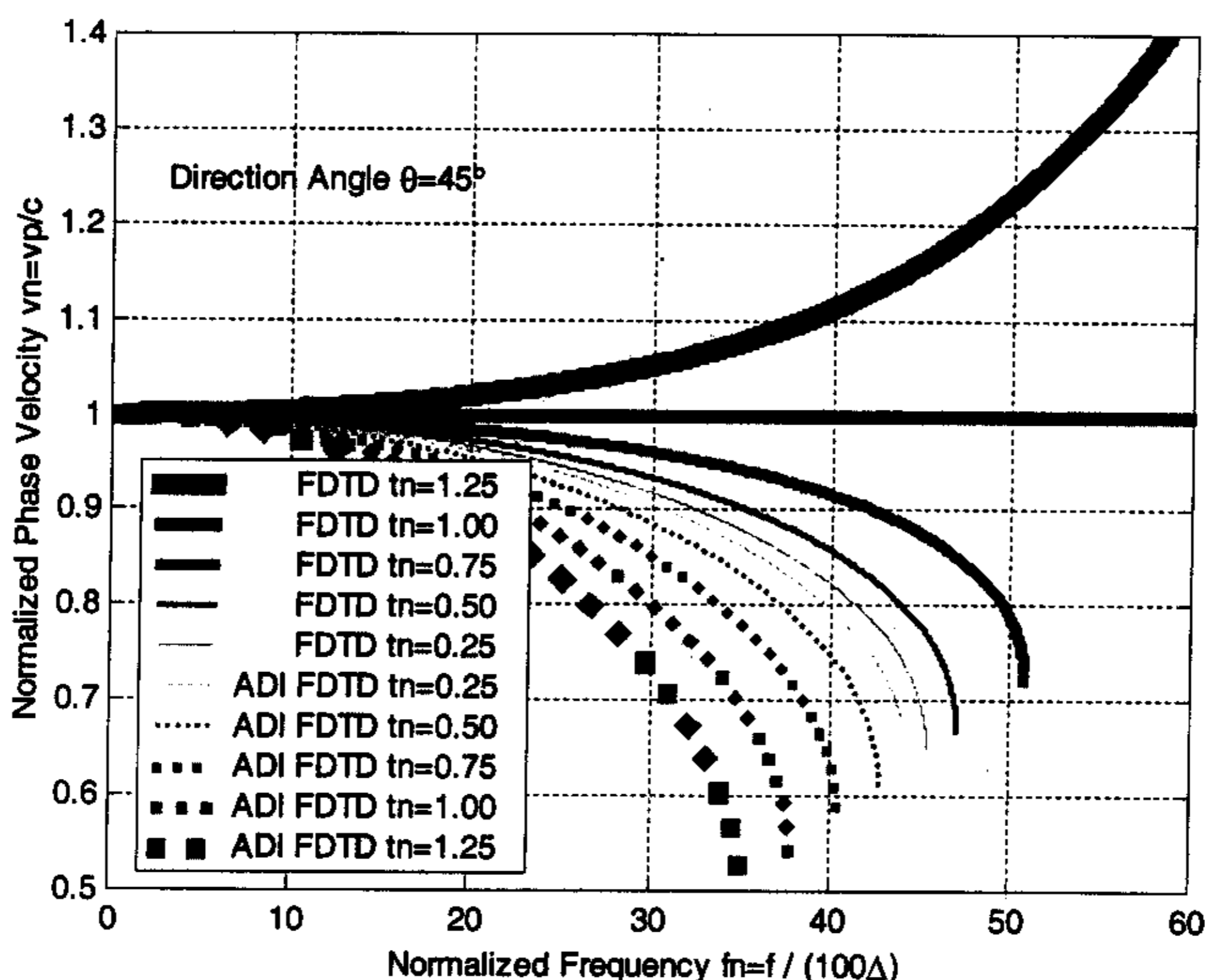


图 5.7 两种算法 $f_n \sim v_n$ 曲线对照 ($\theta = 45^\circ$)

- (4) 当 $\theta = 90^\circ$ 时, 两种算法的所有 $f_n \sim v_n$ 曲线的终止点在一条过原点的直线上 (另见图 5.4), 原来在曲线终止点

$$\sin\left(\frac{k_y \Delta y}{2}\right) = \sin\left(\frac{\pi}{100} \cdot \frac{f_n}{v_n}\right) = 1 \quad (5-42)$$

直线方程为 $f_n = 50v_n$; 当 $\theta = 45^\circ$ 时两种算法的所有 $f_n \sim v_n$ 曲线的终止点也在一条过原点的直线上 (另见图 5.5), 在曲线终止点

$$\sin\left(\frac{k_y \Delta y}{2}\right) = \sin\left(\frac{k_x \Delta x}{2}\right) = \sin\left(\frac{\pi}{100} \cdot \frac{1}{\sqrt{2}} \cdot \frac{f_n}{v_n}\right) = 1 \quad (5-43)$$

直线方程为 $f_n = 50\sqrt{2}v_n$;

- (5) 对于 ADI-FDTD 算法, 在 $f_n \sim v_n$ 曲线的终止点, 如果 f_n 继续增加色散关系式是否仍然有解? 当 $\theta = 90^\circ$, $x_n = y_n = 1$, $t_n = 6$ 时, 用解析法

可以证明：色散关系式有解，但不是 $v_n = 0$ ，而是一个复数。

2. 特定频率的数值波在不同方向以不同的相速传播——各向异性数值以太

在图 5.8 中，取 $x_n = y_n = 1$ ，在图 5.9 中，取 $x_n = 1, y_n = 2$ ，若归一化频率都取为 $f_n = 5$ ，图 5.8 和图 5.9 将对应不同的网格分辨率，图 5.8 中，在 X-轴

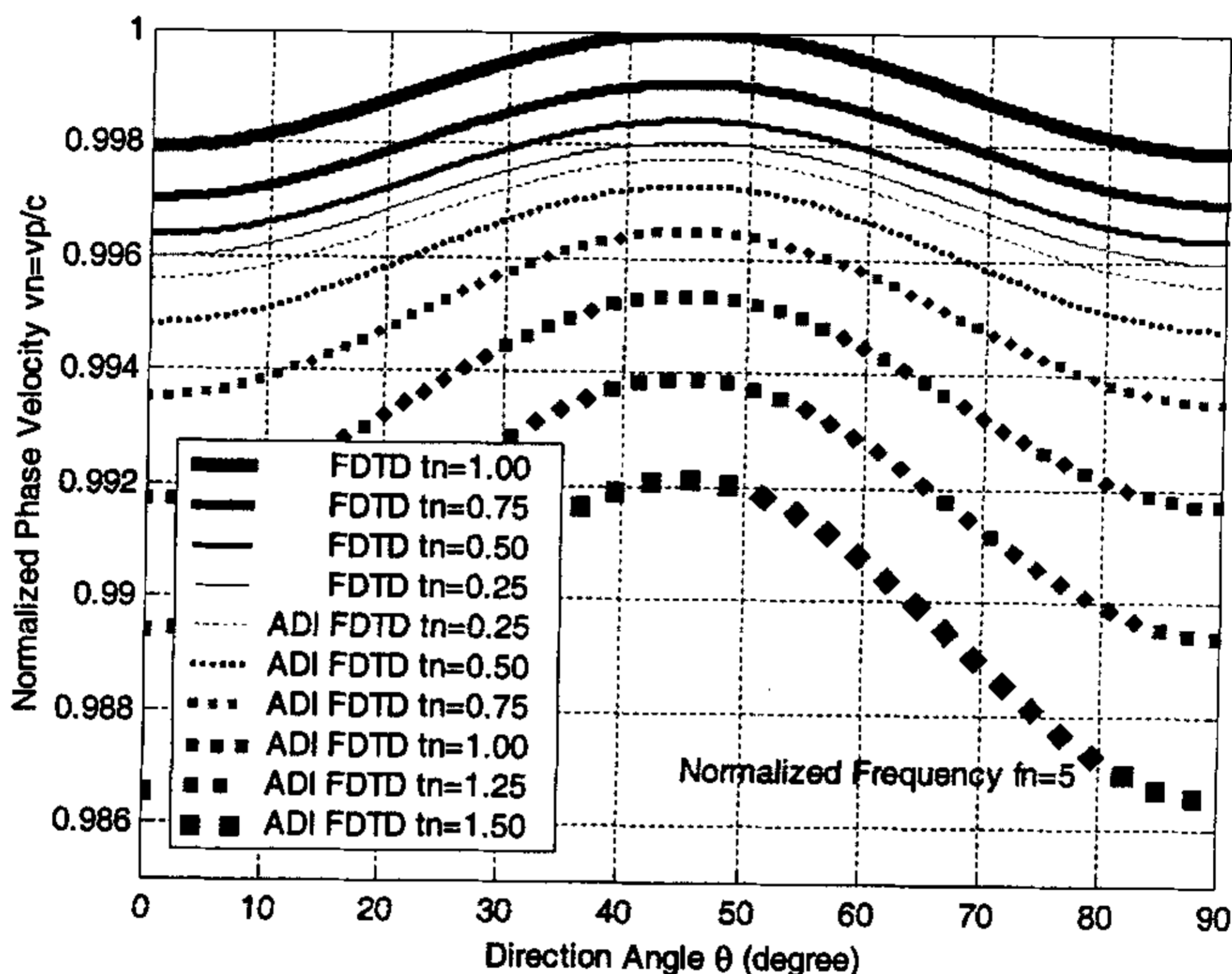


图 5.8 两种算法 $\theta \sim v_n$ 曲线对照 ($\Delta x = \Delta y$, t_n 取不同值)

方向和 Y-轴方向网格分辨率相同 $R_x = R_y = 20$ ，而在图 5.9 中，在 X-轴方向和 Y-轴方向网格分辨率不同 $R_x = 20, R_y = 10$ 。 t_n 取不同的值，画出若干条 $\theta \sim v_n$ 曲线。由图可见：

- (1) 无论是采用 ADI-FDTD 还是通常的 FDTD，所模拟的数值电磁波在不同的方向上相速度不同，即数值电磁波在一种各向异性媒质中传播；
- (2) 空间网格尺寸保持不变，当时间步尺寸 t_n 较小时，两种算法的 $\theta \sim v_n$ 曲线趋于一致；当时间步尺寸 t_n 增加时，ADI-FDTD 算法的 $\theta \sim v_n$ 曲线逐步下沉，而 FDTD 算法的 $\theta \sim v_n$ 曲线逐步上移。因此如果空间网格取相同的尺寸，采用 ADI-FDTD 算法，电磁场数值波的色散误差在所有方向上都大于 FDTD 算法，不论在 X、Y 轴方向网格分辨率是否相同，且当时间步尺寸增加时，ADI-FDTD 算法的色散误差越来越大，而 FDTD 算法的色散误差却越来越小（在时间步尺寸满足稳定性条件 $t_n < 1$ 的范围内）；

- (3) 同一次模拟中（即给定空间网格尺寸和时间步大小），对于某一给定的频率成分，若 $x_n = y_n = 1$ ，在 X-轴方向和 Y-轴方向的色散误差最大，若 $x_n = 1, y_n = 2$ ，在 Y-轴方向的色散误差最大，无论是采用 ADI-FDTD 算法还是 FDTD 算法。

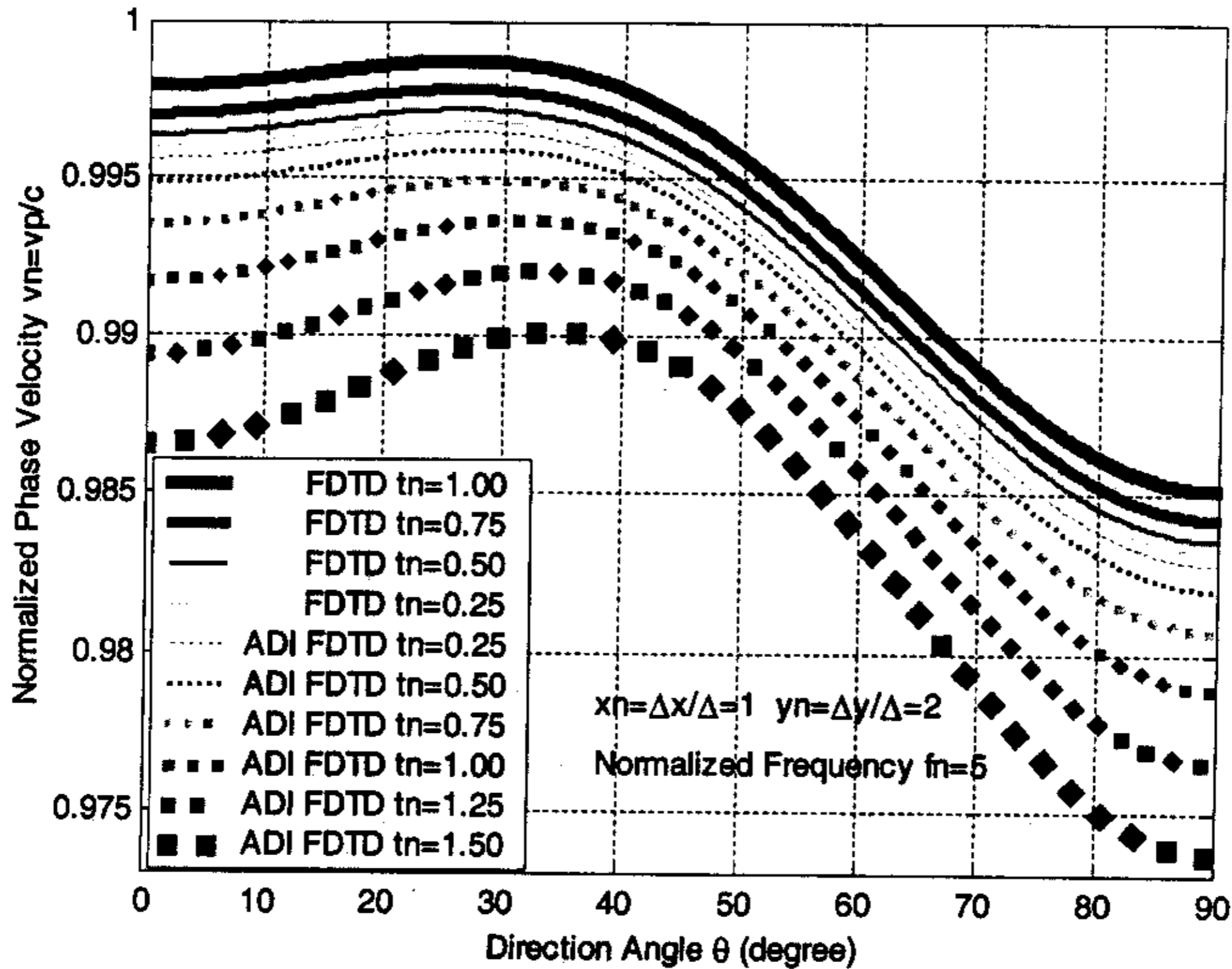


图 5.9 两种算法 $\theta \sim v_n$ 曲线对照 ($\Delta x \neq \Delta y$, t_n 取不同值)

3. 对于给定的空间网格尺寸和时间步大小，ADI-FDTD 算法和 FDTD 算法的色散程度不同(图 5.10、图 5.11)

- (1) 同一次模拟中（即给定空间网格尺寸和时间步大小，如取 $t_n = 1$ ），高频成分的色散误差总大于低频成分，无论是采用 ADI-FDTD 算法还是 FDTD 算法，无论在什么传播方向上，无论在 X、Y 轴方向网格分辨率是否相同；
- (2) 同一次模拟中（即给定空间网格尺寸和时间步大小，如取 $t_n = 1$ ），不同的频率成分（ f_n 取不同的值），采用 ADI-FDTD 算法， $\theta \sim v_n$ 曲线的间距比采用 FDTD 算法稀疏。这反映了 ADI-FDTD 算法所模拟的数值以太具有更加明显的色散效应；值得一提的是，如果取 $\Delta x = \Delta y$ ， $t_n = 1$ ，采用 FDTD 算法，在 $\theta = 45^\circ$ 传播方向相速度严格地等于 1，即没有色散误差；ADI-FDTD 算法则没有对应的现象；

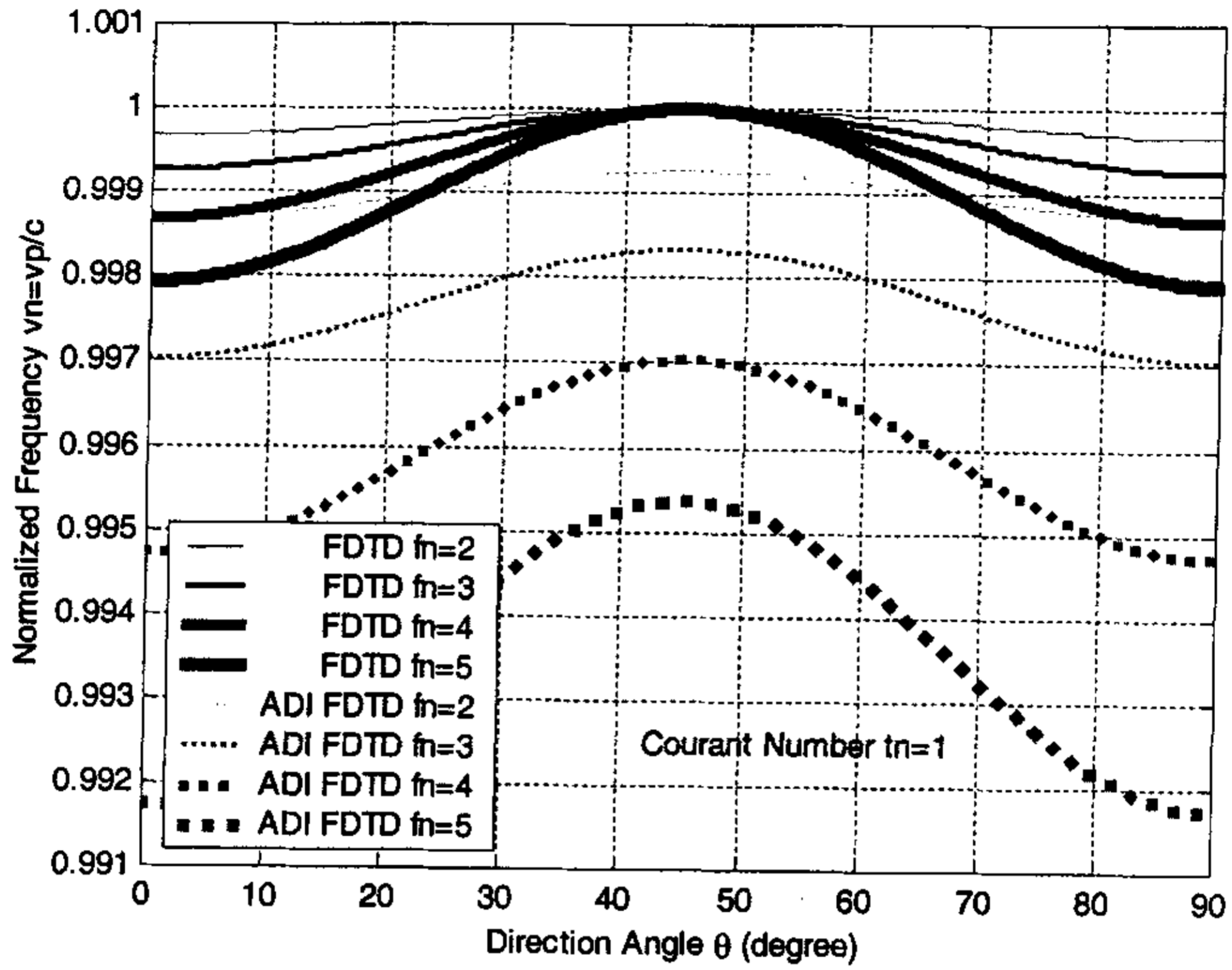


图 5.10 两种算法 $\theta \sim v_n$ 曲线对照 ($\Delta x = \Delta y$, f_n 取不同的值)

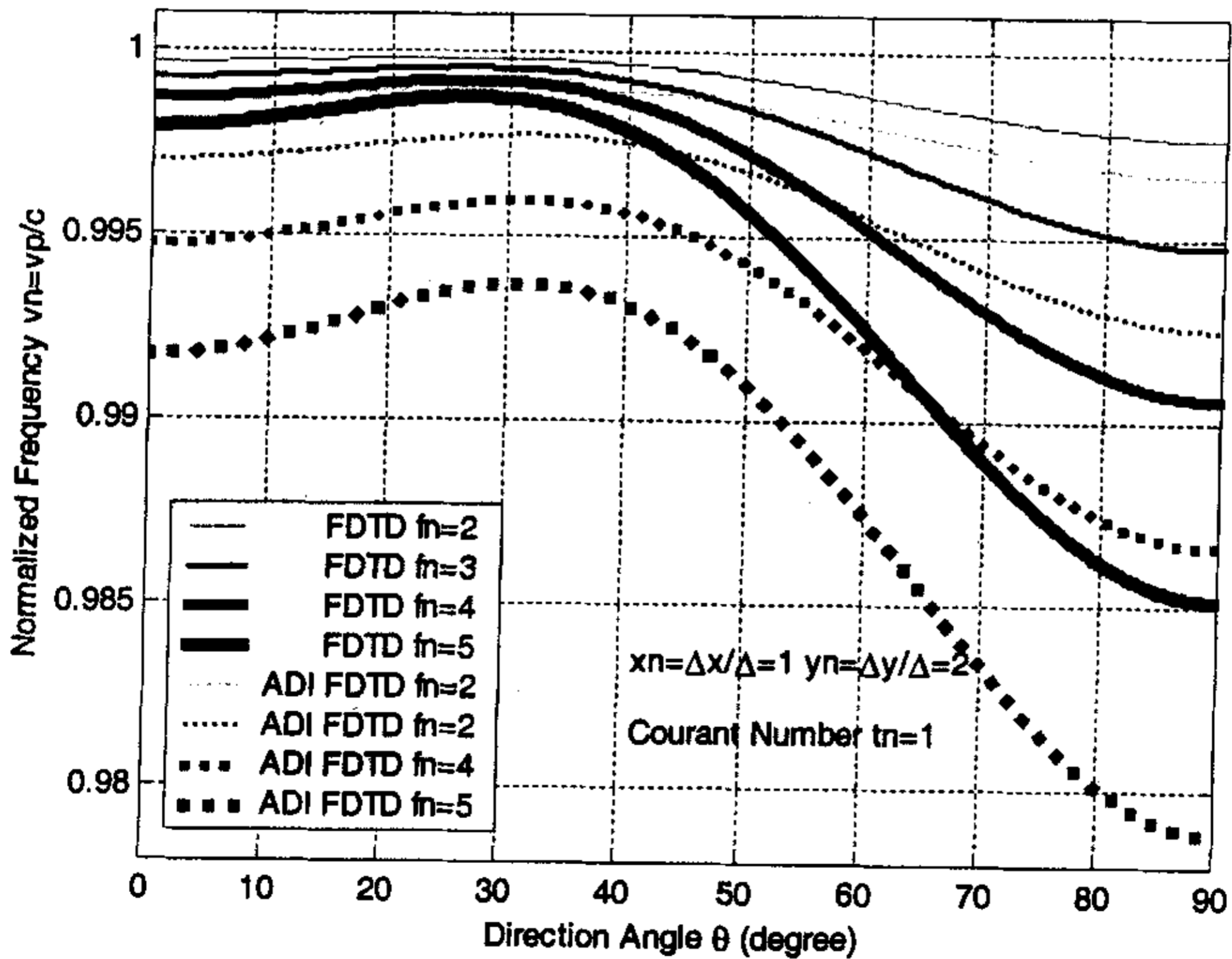


图 5.11 两种算法 $\theta \sim v_n$ 曲线对照 ($\Delta x \neq \Delta y$, f_n 取不同的值)

(3) f_n 取不同的值, 根据(5-41)还可以理解为对确定频率成分, 使用不

同的网格分辨率。由图 5.10、图 5.11 可见，除了 (2) 所述特殊情况外，ADI-FDTD 可以通过采用较小的网格尺寸得到相对较小的色散误差（另见图 5.6、图 5.7）。

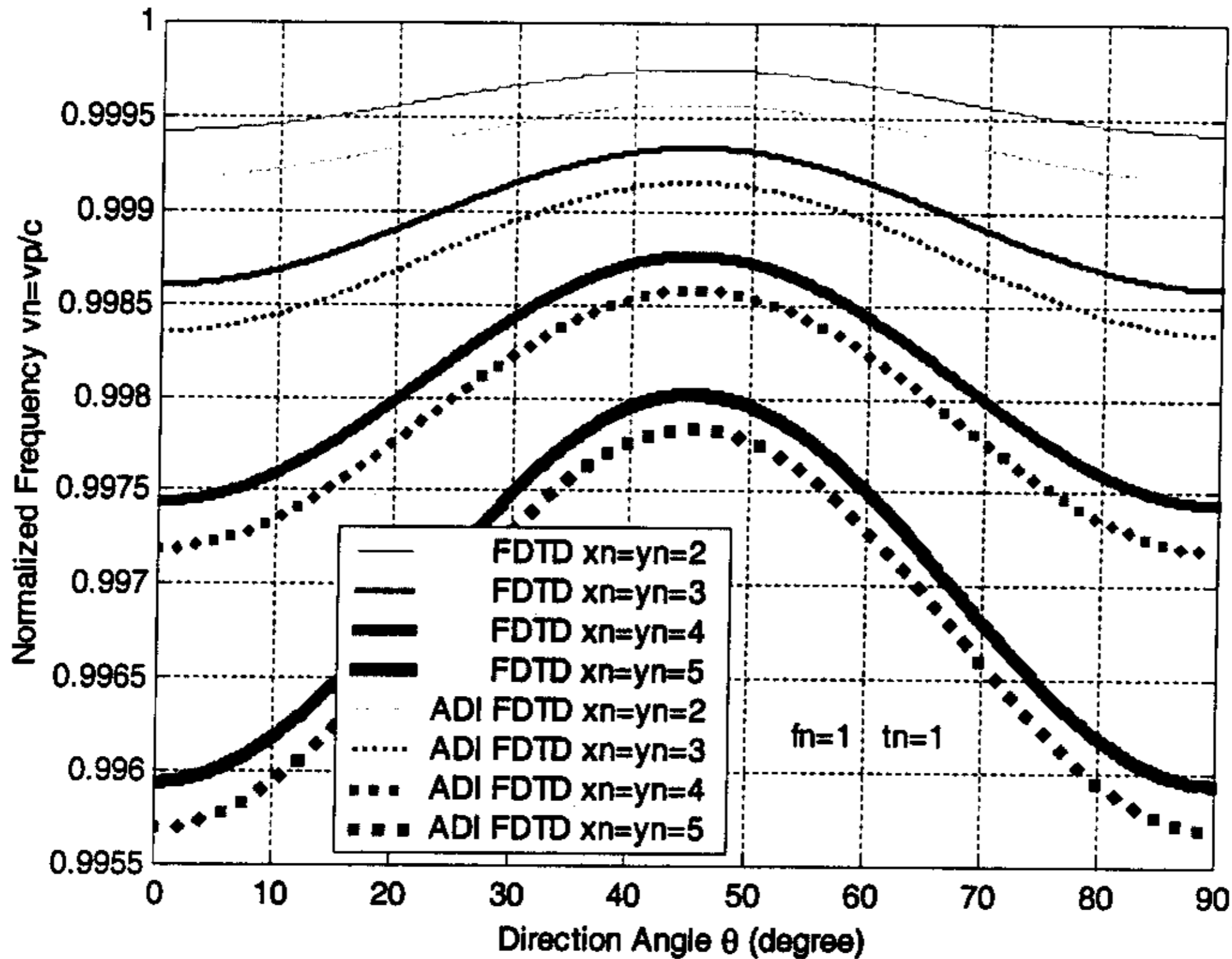


图 5.12 两种算法 $\theta \sim v_n$ 曲线对照 ($\Delta x = \Delta y$, 网格分辨率变化)

4. 空间网格尺寸变化对数值波相速度的影响

- (1) 考虑某一频率成分（如 $f_n=1$ ），如果使用确定的时间步尺寸（ $t_n=1$ ），不同的空间网格分辨率分别进行模拟，ADI-FDTD 和 FDTD 算法对空间网格尺寸的变化有相同的反应。 $x_n=2$ ，对应于网格分辨率 $R_n=50$ ； $x_n=5$ ，对应于网格分辨率 $R_n=20$ ；如此等等。当网格分辨率减小时，两种算法的色散误差在所有的方向上一致地增加，且 $\theta \sim v_n$ 曲线有趋于重合的倾向，这可以从色散公式得到说明，在 5.2 节已经述及；
- (2) 由图 5.12、图 5.13 可知，如果使用非均匀网格进行 ADI-FDTD 或 FDTD 数值模拟，考虑某一频率成分（如 $f_n=1$ ），粗网格中的色散误差大于细网格中的色散误差。

5. 时间步尺寸的最大值

ADI-FDTD 允许 $CFL_N > 1$ ，但时间步尺寸越大，色散误差也越大。此外当 CFL_N 大于确定的值时，数值相速出现复数值，这表明数值电磁波已无法在所模拟的数

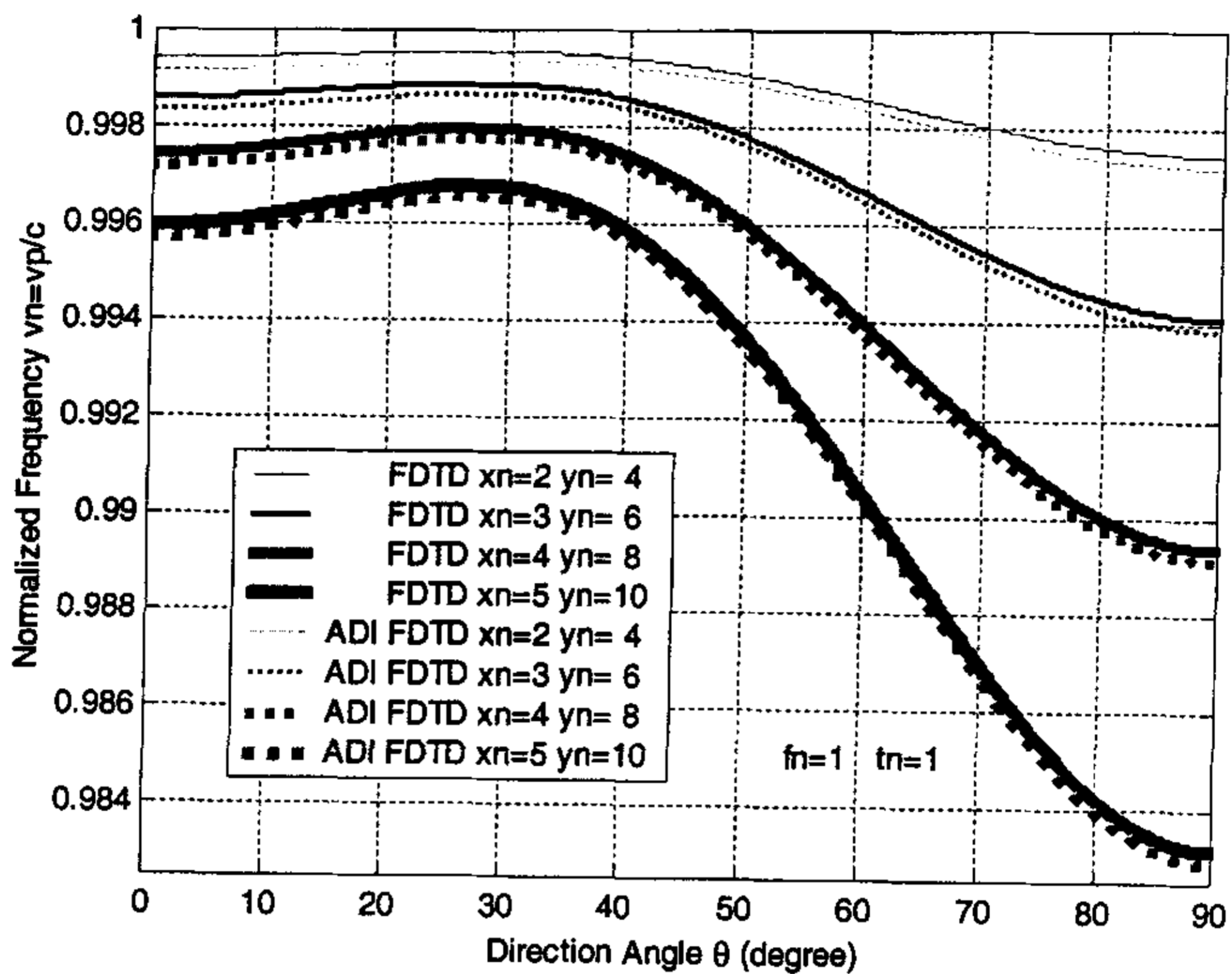


图 5.13 两种算法 $\theta \sim v_n$ 曲线对照 ($\Delta x \neq \Delta y$, 网格分辨率变化)

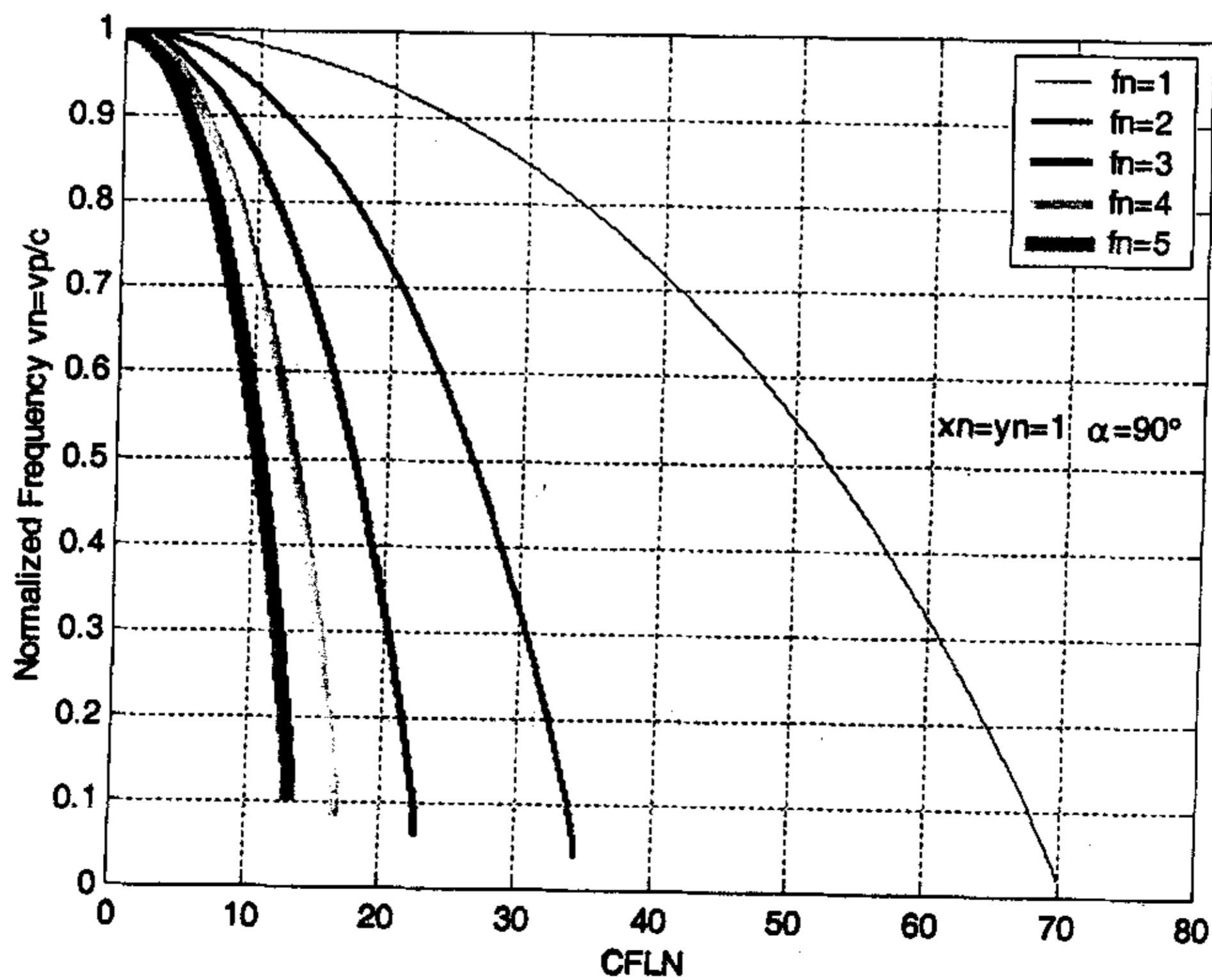


图 5.14 ADI-FDTD $t_n \sim v_n$ 曲线

值以太中正常传播。图(5.14)说明了这一情况。根据式(5-41)图中的五条曲线对应的分辨率分别为 $R=100$ 、50、33、25、20，可见网格分辨率越低，CFLN 的最大允许值越小。由高斯脉冲激励的数值电磁波通常包含一个较宽的谱带，其中高频成分的网格分辨率较低，对于给定的 CFLN 值，这些成分可能无法正常传播。

以上从各个不同的侧面详细地剖析对比了 ADI-FDTD 算法和 FDTD 算法的相同和不同之处，在此基础上可以简单明了地概括如下：(1) 两种算法的色散误差对空间网格分辨率的变化有相同的反应，而对时间步尺寸变化反应不同；(2) ADI-FDTD 算法的色散误差大于 FDTD 算法；(3) 局部地或全局地提高网格分辨率，两种算法的色散误差都不会增加。由于 ADI-FDTD 时间步尺寸的选择不受到 CFL 条件的约束，如果计算域中的最小网格尺寸比所模拟的电磁场波长小得多，可以根据所要求的计算精度，充分自由地选择时间步尺寸，从而获得比 FDTD 算法更高的计算效率。

5.5 三维 ADI-FDTD 数值色散公式

在此之前，文献[3]采用由加拿大 Waterloo University 开发的公式推理软件 Maple V5.2 证明了三维 ADI-FDTD 算法的无条件稳定性，文献[12]采用 Maple V5.0 导出了三维 ADI-FDTD 算法的数值色散公式。鉴于文献[3,12]中出现的量纲不一致错误和印刷错误，为引用参照准确方便起见，本文作者重新推导了三维 ADI-FDTD 算法的数值色散公式，所幸需要的推理并不复杂，可以不使用任何公式推理软件。推理过程基本同二维情况，这里只列出经核实所得色散公式（纠正了文献[12]所给公式中的一处印刷错误）：

$$\sin^2(\omega\Delta t) = \frac{4 \cdot \left[\begin{aligned} & \frac{\Delta t^2}{\mu\epsilon\Delta x^2} \sin^2\left(\frac{k_x\Delta x}{2}\right) + \frac{\Delta t^2}{\mu\epsilon\Delta y^2} \sin^2\left(\frac{k_y\Delta y}{2}\right) + \frac{\Delta t^2}{\mu\epsilon\Delta z^2} \sin^2\left(\frac{k_z\Delta z}{2}\right) \\ & + \frac{\Delta t^4}{(\mu\epsilon)^2\Delta x^2\Delta y^2} \sin^2\left(\frac{k_x\Delta x}{2}\right) \sin^2\left(\frac{k_y\Delta y}{2}\right) \\ & + \frac{\Delta t^4}{(\mu\epsilon)^2\Delta y^2\Delta z^2} \sin^2\left(\frac{k_y\Delta y}{2}\right) \sin^2\left(\frac{k_z\Delta z}{2}\right) \\ & + \frac{\Delta t^4}{(\mu\epsilon)^2\Delta z^2\Delta x^2} \sin^2\left(\frac{k_z\Delta z}{2}\right) \sin^2\left(\frac{k_x\Delta x}{2}\right) \end{aligned} \right]}{\left[1 + \frac{\Delta t^6}{(\mu\epsilon)^3\Delta x^2\Delta y^2\Delta z^2} \sin^2\left(\frac{k_x\Delta x}{2}\right) \sin^2\left(\frac{k_y\Delta y}{2}\right) \sin^2\left(\frac{k_z\Delta z}{2}\right) \right]} \\ \cdot \left[1 + \frac{\Delta t^2}{\mu\epsilon\Delta x^2} \sin^2\left(\frac{k_x\Delta x}{2}\right) \right]^2 \cdot \left[1 + \frac{\Delta t^2}{\mu\epsilon\Delta y^2} \sin^2\left(\frac{k_y\Delta y}{2}\right) \right]^2 \cdot \left[1 + \frac{\Delta t^2}{\mu\epsilon\Delta z^2} \sin^2\left(\frac{k_z\Delta z}{2}\right) \right]^2$$

(5-43)

令 $\Delta z \rightarrow \infty$ ，可由三维 ADI-FDTD 算法的数值色散公式直接得到二维公式 (5-21)。这两个公式是相容的。

第六章 用于 ADI-FDTD 算法的 PML

在第四章中我们将 ADI-FDTD 算法用于谐振腔分析。为了将 ADI-FDTD 算法用于分析开区域问题，还必须发展相应的吸收边界条件。本章第一节介绍相关的研究动态，第二节介绍 Berenger 所提出的建立在场分裂基础上的理想匹配层 (PML) 吸收边界条件[16-19]，第三节提出一种新的实现方法，将 Berenger 的 PML 由通常的 FDTD 推广到 ADI-FDTD 算法中。和采用原有的方法比较，采用所提出的新方法，吸收边界的反射误差成数量级地减小，解决了文献[15,20]中提出的问题，实现了 PML 和 ADI-FDTD 算法有实用价值的结合。在本文第三章的工作中采用了这一方法。

6.1 PML 研究背景

当利用 FDTD 模拟开区域的电磁场问题时，由于计算机内存有限，必须对计算区域截断，使计算区域有限。在截断边界上必须满足吸收边界条件(ABC)，以模拟电磁波无反射地通过截断边界，向无限远处传播。理想的 ABC 是难以实现的，通常只能采用近似的 ABC。

对于近似 ABC，要求

- (1) 能够模拟向外传播的波；
- (2) 引入的反射应足够小，对计算结果的影响可忽略；
- (3) 保证算法稳定。

采用 Mur ABC 差分方案是比较方便的。但通常希望 FDTD 算法能够模拟的动态范围与无反射暗室动态范围相比拟，以便理论值可以与测量结果相比较。一般暗室可以获得低于-70dB 的有效无反射区。注意，低于-70dB 的动态范围相当于能够把近似 ABC 所导致的“反射波”的振幅抑制到不大于入射波振幅的 10^{-4} 。

在通常的 FDTD 算法中，理想匹配层 (PML) 吸收边界条件[1,2]理论上可以实现反射误差任意小。Berenger 起初所提出的 PML 是一种建立在场分裂基础上的媒质吸收边界条件[16]，这种 ABC 第一次成功模拟了可以与无反射暗室相比拟的动态范围。这种方法的特征在于对 Maxwell 方程所做的场分裂修正。场分裂即场分量一分为二，场分裂导致场方程分裂，在一分为二的场方程中分别定义不同的电导率。可以证明，平面电磁波也是修正形式 Maxwell 方程组的本征解。这一数学过程可以理解为电磁波从一种物理媒质通过媒质交界面进入另一种“物理媒质”(PML)，在后一种媒质中电磁波满足场分裂修正形式 Maxwell 方程，在其中基于

所引入的电导率, 电磁波由于损耗而沿传播方向衰减, 而且任何频率、任何极化、任何方向的入射电磁波都可以无发射的通过两种媒质的平面界面。

Berenger 所取得的成功大大地激励了 PML 的进一步研究, UPML(单轴各向异性 PML)就是这一时期的产物[19]。和 Berenger 的 PML 相比, UPML 不是通过修改 Maxwell 方程, 而是通过各向异性媒质属性来描述吸收层。在 UPML 描述的吸收媒质中, 电磁场仍然满足通常形式的 Maxwell 方程, 和 Berenger 通过场分裂修正形式 Maxwell 方程描述的 PML 相比, UPML 更容易被看作为一种物理媒质, 只不过其各向异性属性有些特别而已。

应该指出, 这两种 PML 并不等价[2], 但在理论上两种方法都可以实现电磁场在媒质交界面无反射入射。

无条件稳定的 ADI-FDTD 算法出现以后, 如何实现 ADI-FDTD 和 PML 的结合是一个需要解决的问题。文献[15]将 Berenger 的 PML 引入了 ADI-FDTD 算法, 当时间步加大时, ADI-FDTD 算法仍然保持无条件稳定, 但 PML 的性能却随时间步尺寸的增加而迅速蜕化; 文献[20]将 UPML 引入了 ADI-FDTD 算法, 同样的问题再次出现。考虑到 ADI-FDTD 算法通常会使用较大的时间步尺寸, 如此 PML 的价值将大打折扣。

为了解决这一问题, 本文发展了一种新途径以实现 ADI-FDTD 与 Berenger 的 PML 的结合。采用所提出的新方法, 当时间步尺寸增加时, PML 的反射误差几乎保持不变, 与通常的 FDTD PML 相比, 表现出完全相同的优越性能。应该说这是 PML 本来具有的。

6.2 Berenger 的 PML 介绍

● Maxwell 方程的场分裂修正[16]

我们只考虑二维 TE 情况, 对于二维 TM 和三维情况, 可采用类似方法进行分析。有耗媒质中二维 TE 情况的场量 E_x , E_y , H_z 满足的 Maxwell 方程为

$$\varepsilon_0 \frac{\partial E_x}{\partial t} + \sigma E_x = \frac{\partial H_z}{\partial y} \quad (6-1a)$$

$$\varepsilon_0 \frac{\partial E_y}{\partial t} + \sigma E_y = -\frac{\partial H_z}{\partial x} \quad (6-1b)$$

$$\mu_0 \frac{\partial H_z}{\partial t} + \sigma^* H_z = \frac{\partial E_x}{\partial y} - \frac{\partial E_y}{\partial x} \quad (6-1c)$$

式中, σ 和 σ^* 分别表示自由空间中的电导率和磁损耗。

如果将满足(6-1)式的有耗媒质层加在 FDTD 网格边界的外层, 设平面波沿 x

方向传播, 则

$$E_x = 0, \quad \frac{\partial E_x}{\partial y} = 0 \quad (6-2a)$$

(6-1)变为

$$\begin{cases} \varepsilon_0 \frac{\partial E_y}{\partial t} + \sigma E_y = -\frac{H_z}{\partial x} \\ \mu_0 \frac{\partial H_z}{\partial t} + \sigma^* H_z = -\frac{\partial E_y}{\partial x} \end{cases} \quad (6-2b)$$

如果

$$\frac{\sigma^*}{\mu_0} = \frac{\sigma}{\varepsilon_0} \quad (6-2c)$$

则

$$\begin{cases} \frac{\partial E_y}{\partial t} + \frac{\sigma}{\varepsilon_0} E_y = -c \frac{(\eta H_z)}{\partial x} \\ \frac{\partial(\eta H_z)}{\partial t} + \frac{\sigma}{\varepsilon_0} (\eta H_z) = -c \frac{\partial E_y}{\partial x} \end{cases} \quad (6-2d)$$

式中, $c = \frac{1}{\sqrt{\varepsilon_0 \mu_0}}$, $\eta = \sqrt{\frac{\mu_0}{\varepsilon_0}}$ 分别为自由空间中的光速和波阻抗。于是, $E_y = \eta H_z$,

可见, 有耗自由空间媒质的波阻抗就等于无耗自由空间的波阻抗, 所以当平面波垂直穿过真空和有耗自由空间媒质的界面时将不会发生反射。但是, 当斜入射时, 反射将增加。所以, 这样构造的 ABC 其复合的吸收特性最好也不过与局域 ABC 的量级相同。

Berenger 为了引入规定损耗和阻抗匹配的新自由度, 将 H_z 分裂为两个分量 H_x 和 H_y , 即

$$H_z = H_x + H_y \quad (6-3)$$

同时引入了新的电导率 σ_x, σ_y 和磁损耗 σ_x^*, σ_y^* , 并规定 TE 情形的四个场分量 (而不是通常的 3 个) 由下列方程耦合在一起:

$$\varepsilon_0 \frac{\partial E_x}{\partial t} + \sigma_y E_x = \frac{\partial(H_x + H_y)}{\partial y} \quad (6-4a)$$

$$\varepsilon_0 \frac{\partial E_y}{\partial t} + \sigma_x E_y = -\frac{\partial(H_x + H_y)}{\partial x} \quad (6-4b)$$

$$\mu_0 \frac{\partial H_x}{\partial t} + \sigma_x^* H_x = -\frac{\partial E_y}{\partial x} \quad (6-5a)$$

$$\mu_0 \frac{\partial H_y}{\partial t} + \sigma_y^* H_y = \frac{\partial E_x}{\partial y} \quad (6-5b)$$

换句话说, Berenger 构造了一般新的非物理媒质(称为 PML 媒质), 在该媒质中场满足的方程为(6-4)和(6-5) (并不一定是 Maxwell 方程)。而这些场分量中电场分量与 FDTD 网格的自由空间中的电场分量一致, 磁场分量用(6-3)相联系。

可以看出, (6-4)和(6-5) (称为 PML 公式) 代表了通常模拟的物理媒质的推广。

● TE 波在 PML 媒质中的传播

考虑平面波在 PML 媒质中传播。令电场与 y 轴交角为 ϕ , 则

$$E_x = -E_0 \sin \phi e^{j\omega(t-\alpha-\beta)} \quad E_y = E_0 \cos \phi e^{j\omega(t-\alpha-\beta)} \quad (6-6)$$

$$H_{xz} = H_{xz0} e^{j\omega(t-\alpha-\beta)} \quad H_{yz} = H_{yz0} e^{j\omega(t-\alpha-\beta)} \quad (6-7)$$

设 E_0 已知 (与激励大小有关), 则(6-6)和(6-7)中包含四个特定量 $\alpha, \beta, H_{xz0}, H_{yz0}$ 。将(6-6)和(6-7)代入(6-4)和(6-5), 则

$$\epsilon_0 E_0 \sin \phi - j \frac{\sigma_y}{\omega} E_0 \sin \phi = \beta (H_{xz0} + H_{yz0}) \quad (6-8a)$$

$$\epsilon_0 E_0 \cos \phi - j \frac{\sigma_x}{\omega} E_0 \cos \phi = \alpha (H_{xz0} + H_{yz0}) \quad (6-8b)$$

$$\mu_0 H_{xz0} - j \frac{\sigma_x}{\omega} E_0 \cos \phi = \alpha E_0 \cos \phi \quad (6-9a)$$

$$\mu_0 H_{yz0} - j \frac{\sigma_y}{\omega} E_0 \sin \phi = \beta E_0 \sin \phi \quad (6-9b)$$

从(6-9a)和(6-9b)中提取 H_{xz0} 和 H_{yz0} , 然后分别代入(6-8a)和(6-8b)中, 得

$$\mu_0 \epsilon_0 \left(1 - j \frac{\sigma_y}{\omega \epsilon_0} \right) \sin \phi = \beta \left(\frac{\alpha \cos \phi}{1 - j \sigma_x / \omega \mu_0} + \frac{\beta \sin \phi}{1 - j \sigma_y / \omega \mu_0} \right) \quad (6-10a)$$

$$\mu_0 \epsilon_0 \left(1 - j \frac{\sigma_x}{\omega \epsilon_0} \right) \cos \phi = \alpha \left(\frac{\alpha \cos \phi}{1 - j \sigma_x / \omega \mu_0} + \frac{\beta \sin \phi}{1 - j \sigma_y / \omega \mu_0} \right) \quad (6-10b)$$

两式相除, 得

$$\frac{\beta}{\alpha} = \frac{\sin \phi (1 - j \sigma_y / \omega \epsilon_0)}{\cos \phi (1 - j \sigma_x / \omega \epsilon_0)} \quad (6-11)$$

然后从(6-11)和(6-10b)可得 α^2 , (6-11)和(6-10a)可得 β^2 。于是得到两组符号相反的 (α, β) , 对应于沿相反方向传播, 选取正号:

$$\alpha = \frac{\sqrt{\mu_0 \epsilon_0}}{G} \left(1 - j \frac{\sigma_x}{\omega \epsilon} \right) \cos \phi \quad \beta = \frac{\sqrt{\mu_0 \epsilon_0}}{G} \left(1 - j \frac{\sigma_y}{\omega \epsilon} \right) \sin \phi \quad (6-12)$$

式中,

$$G = \sqrt{W_x \cos^2 \phi + W_y \sin^2 \phi} \quad (6-13a)$$

$$W_x = \frac{1 - j\sigma_x/\omega\epsilon_0}{1 - j\sigma_x^*/\omega\mu_0}, \quad W_y = \frac{1 - \sigma_y/\omega\epsilon_0}{1 - j\sigma_y^*/\omega\mu_0} \quad (6-13b)$$

用 Ψ 表示任何一个场分量, Ψ_0 为其振幅, c 为光速, 则由(6-6)和(6-7), 得

$$\Psi = \Psi_0 e^{j\omega\left(t - \frac{x\cos\phi + y\sin\phi}{cG}\right)} e^{\frac{\sigma_x \cos\phi}{\epsilon_0 c G} x} e^{\frac{\sigma_y \sin\phi}{\epsilon_0 c G} y} \quad (6-14)$$

将 α 和 β 代入(6-9)得

$$H_{x0} = E_0 \sqrt{\frac{\epsilon_0}{\mu_0}} \cdot \frac{1}{G} W_x \cos^2 \phi \quad (6-15a)$$

$$H_{y0} = E_0 \sqrt{\frac{\epsilon_0}{\mu_0}} \cdot \frac{1}{G} W_y \sin^2 \phi \quad (6-15b)$$

于是

$$H_0 = H_{x0} + H_{y0} = E_0 \sqrt{\frac{\epsilon_0}{\mu_0}} \cdot G \quad (6-16)$$

$$Z = \frac{E_0}{H_0} = \sqrt{\frac{\mu_0}{\epsilon_0}} \cdot G \quad (6-17)$$

● 无反射匹配条件

如果 (σ_x, σ_x^*) 和 (σ_y, σ_y^*) 满足

$$\frac{\sigma_x}{\epsilon_0} = \frac{\sigma_x^*}{\mu_0} \quad \frac{\sigma_y}{\epsilon_0} = \frac{\sigma_y^*}{\mu_0} \quad (6-18)$$

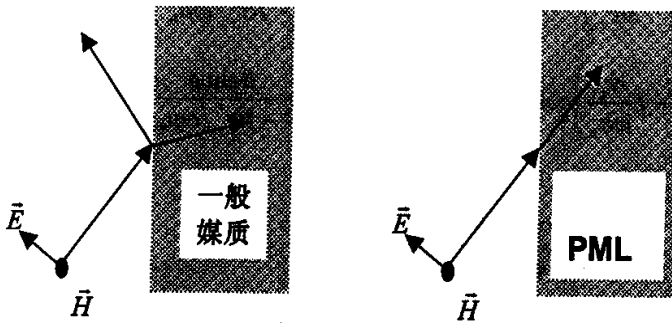


图 6.1 波进入一般媒质和 PML 媒质的传播

则在任何频率和入射角 $W_x = W_y = G = 1$, 于是(6-14)和(6-17)变为

$$\psi = \psi_0 e^{j\omega \left(t - \frac{x \cos \phi + y \sin \phi}{c} \right)} \cdot e^{-\frac{\sigma_x \cos \phi}{\epsilon_0 c} x} e^{-\frac{\sigma_y \sin \phi}{\epsilon_0 c} y} \quad (6-19)$$

$$Z = \sqrt{\frac{\mu_0}{\epsilon_0}} \quad (6-20)$$

(6-19)第一个指数项表明在 PML 媒质中波以光速沿与电场垂直的方向传播, 剩余的两个指数项表明波沿 x 和 y 方向指数衰减。(6-20)表明 PML 媒质中的波阻抗与真空中波阻抗相同, 且与入射角无关, 这意味着电磁波以任意角度从真空中入射到 PML 媒质交界面时将无反射地进入 PML 媒质中, 并在 PML 媒质中衰减地传播。

● PML 的理论性能[2]

以上简单介绍了用于 FDTD 空间网格截断的理想匹配层 (PML) 理论基础, 但没有涉及 PML 的厚度。当用于截断 FDTD 网格, PML 的厚度必然是有限的, 即被一个边界所截断, 比如是一个 PEC 壁 (如图 6.2), 到达 PEC 的剩余能量将被反射回 FDTD 网格区域。此外, σ 和 σ^* 在两种媒质分界面上的不连续变化也会导致较大的离散误差, 成为一种虚假的反射误差。

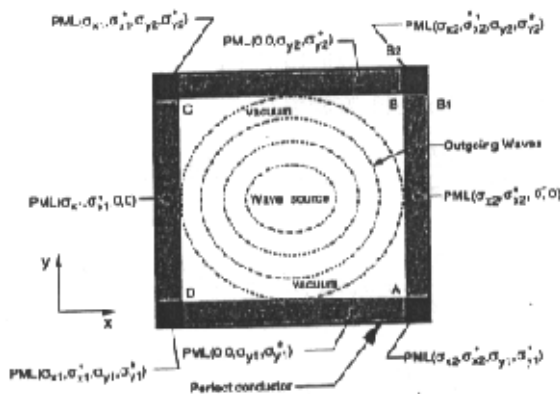


图 6.2 二维 FDTD 网格的 PML 吸收边界结构

对于二维 TE FDTD 网络, Berenger 提出了图 6.2 所示的吸收边界结构。Berenger 建议 PML 中的损耗应当随 PML 媒质层深度 ρ 适度地增加, 如

$$\sigma(\rho) = \sigma_{\max} (\rho/\delta)^m \quad (6-21)$$

其中 δ 为 PML 厚度。这样产生的反射为[2]

$$R(\theta) = e^{-2\sigma_{\max} \delta \cos \theta / (m+1)\epsilon_0 c} \quad (6-22)$$

当垂直入射时 $R(0) = e^{-2\sigma_{\max} \delta / (m+1)\epsilon_0 c}$, 当相切入射时 $R(90^\circ) \approx 1$ 。在实际模拟时这不会成为问题, 因为 $x = x_0$ 处 PML 的反射波与 $y = y_0$ 处 PML 边界几乎垂直而被吸收。

一个有效的 PML 必须在 PEC 壁的反射与离散误差之间取的平衡: 为了减小反射误差, σ 和 σ^* 应该取尽可能大的值; 不幸的是, 如果 σ 和 σ^* 的值取得太大, 由于 FDTD 差分近似所导致的离散误差上升为主要矛盾, 成数量级地大于 PEC 壁的反射误差。大量的数值实验表明, 如果采用(6-21)的变换, m 的最佳值介于 3 和 4 之间; 对于厚度为 10 个网格单元的 PML, 反射误差的最佳选择为 $R(0) = e^{-16}$; 对于厚度为 5 格网格单元的 PML, 反射误差的最佳选择为 $R(0) = e^{-8}$; 由此决定的 σ_{\max} 的最佳值为

$$\sigma_{opt} = \frac{m+1}{150\pi\sqrt{\epsilon_r}\Delta x} \quad (6-23)$$

当 σ 和 σ^* 的值给定值后, 将(6-4)和(6-5)做 FDTD 离散即可得相应的 PML 差分格式, 如将(6-4a)离散如下

$$\frac{\epsilon_0}{\Delta t} \left(E_x \Big|_{i+\frac{1}{2},j}^{n+1} - E_x \Big|_{i+\frac{1}{2},j}^n \right) + \frac{\sigma_y}{2} \left(E_x \Big|_{i+\frac{1}{2},j}^{n+1} + E_x \Big|_{i+\frac{1}{2},j}^n \right) = \frac{1}{\Delta y} \left(H_z \Big|_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2}}^{n+\frac{1}{2}} - H_z \Big|_{i+\frac{1}{2},j-\frac{1}{2}}^{n+\frac{1}{2}} \right) \quad (6-24)$$

6.3 ADI-FDTD 和 PML 的结合

仍然以二维 TE 模为例, 在较一般的情况下, 考虑无反射匹配条件(6-18)以后, Berenger 的场分裂形式的 Maxwell 方程为

$$\epsilon_0\epsilon_r \frac{\partial E_x}{\partial t} + \sigma_y\epsilon_0\epsilon_r E_x = \frac{\partial(H_{zx} + H_{zy})}{\partial y} \quad (6-34a)$$

$$\epsilon_0\epsilon_r \frac{\partial E_y}{\partial t} + \sigma_x\epsilon_0\epsilon_r E_y = -\frac{\partial(H_{zx} + H_{zy})}{\partial x} \quad (6-34b)$$

$$\mu_0\mu_r \frac{\partial H_{zx}}{\partial t} + \sigma_x\mu_0\mu_r H_{zx} = -\frac{\partial E_y}{\partial x} \quad (6-35a)$$

$$\mu_0\mu_r \frac{\partial H_{zy}}{\partial t} + \sigma_y\mu_0\mu_r H_{zy} = \frac{\partial E_x}{\partial y} \quad (6-35b)$$

将以上方程做 ADI-FDTD 离散即可得 ADI-FDTD PML 离散公式, 问题在于如何离散。以(6-34a)为例, 文献[15]的方法是前半个时间步,

$$\frac{2\epsilon_0\epsilon_r}{\Delta t} \left(E_x \Big|_{i+\frac{1}{2},j}^{n+\frac{1}{2}} - E_x \Big|_{i+\frac{1}{2},j}^n \right) + \frac{\sigma_y\epsilon_0\epsilon_r}{2} \left(E_x \Big|_{i+\frac{1}{2},j}^{n+\frac{1}{2}} + E_x \Big|_{i+\frac{1}{2},j}^n \right) = \frac{1}{\Delta y} \left(H_z \Big|_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2}}^{n+\frac{1}{2}} - H_z \Big|_{i+\frac{1}{2},j-\frac{1}{2}}^{n+\frac{1}{2}} \right) \quad (6-36a)$$

后半段时间步,

$$\frac{2\varepsilon_0\varepsilon_r}{\Delta t}\left(E_x\Big|_{i+\frac{1}{2},j}^{n+1}-E_x\Big|_{i+\frac{1}{2},j}^{n+\frac{1}{2}}\right)+\frac{\sigma_y\varepsilon_0\varepsilon_r}{2}\left(E_x\Big|_{i+\frac{1}{2},j}^{n+1}+E_x\Big|_{i+\frac{1}{2},j}^{n+\frac{1}{2}}\right)=\frac{1}{\Delta y}\left(H_z\Big|_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2}}^{n+1}-H_z\Big|_{i+\frac{1}{2},j-\frac{1}{2}}^{n+1}\right) \quad (6-36b)$$

ADI-FDTD 如此结合 PML 以后, 仍然是无条件稳定的, 且当时间步 Δt 较小时, 比如 CFLN=0.5 时, 实际的最大反射误差与通常的 FDTD 相当; 但是当 Δt 较大时, 比如 CFLN=7 时, 实际的最大反射误差达到 1% 以上(如图 6.3 所示), 这样的 PML 已没有什么优越性。注意, 这里没有采用 Berenger 建议的指数时间步进, 代以时间导数的中心差分近似, 文献[24]对这种形式的有效性和优越性做过研究。

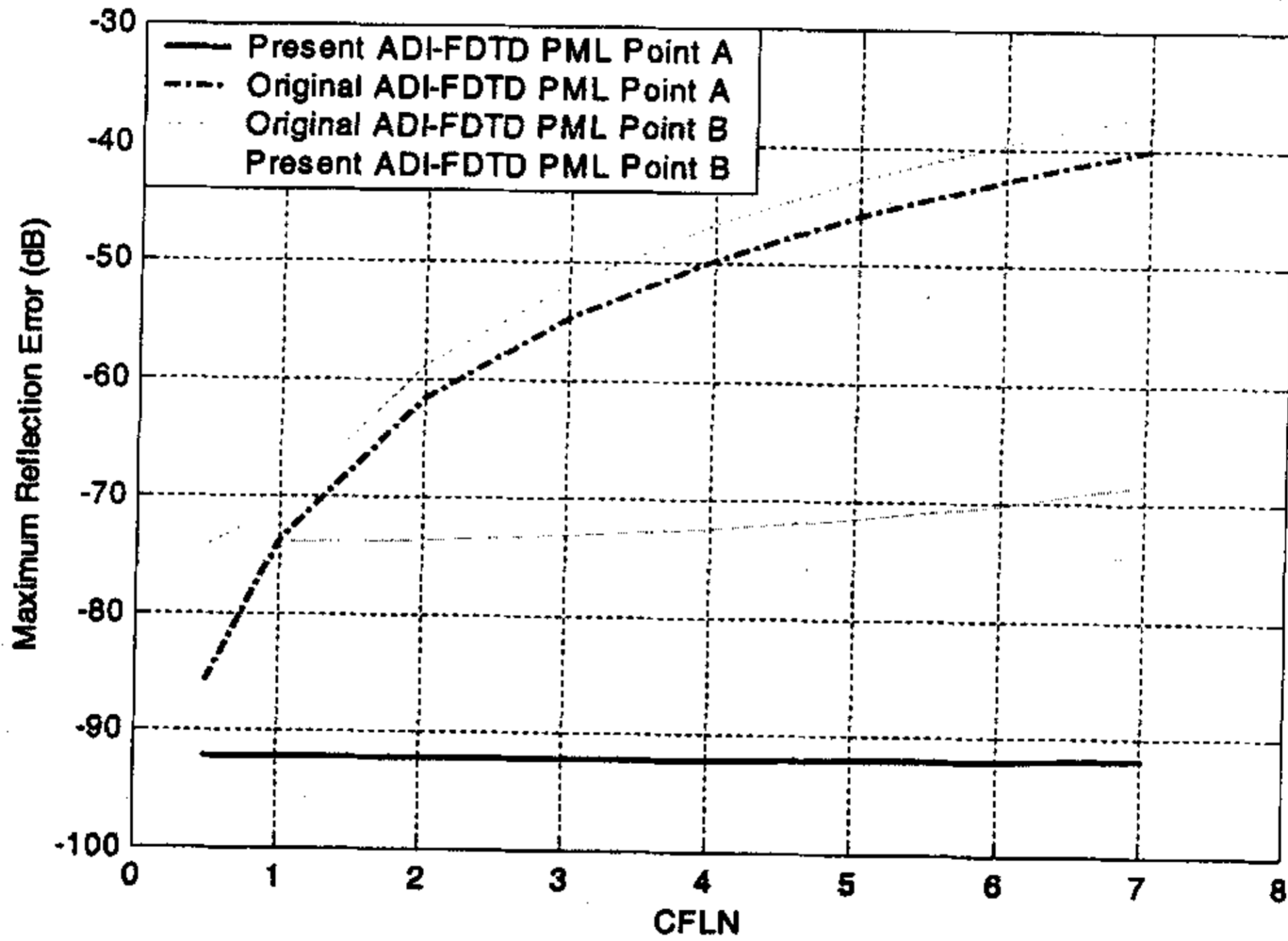


图 6.3 两种方法最大反射误差对照

为了理解其中原因, 回过头来考虑微分方程 (2-10a)。可以认为 (2-18a) 是 (2-10a) 在空间某一点 $(i+1/2, j)$, 某一时刻 n 的差分近似, 注意 E_x 的时间导数项代以其向前时间差商; (2-18d) 是 (2-10a) 在空间同一点 $(i+1/2, j)$, 后一时刻 $n+1$ 的差分近似, 注意 E_x 的时间导数项代以其向后时间差商。正是基于这一概念我们将 (6-34a) 重新做如下离散

前半段时间步,

$$\frac{2\varepsilon_0\varepsilon_r}{\Delta t}\left(E_x\Big|_{i+\frac{1}{2},j}^{n+\frac{1}{2}}-E_x\Big|_{i+\frac{1}{2},j}^n\right)+\sigma_y\varepsilon_0\varepsilon_r E_x\Big|_{i+\frac{1}{2},j}^n=\frac{1}{\Delta y}\left(H_z\Big|_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2}}^n-H_z\Big|_{i+\frac{1}{2},j-\frac{1}{2}}^n\right) \quad (6-37a)$$

后半段时间步,

$$\frac{2\varepsilon_0\varepsilon_r}{\Delta t}\left(E_x\Big|_{i+\frac{1}{2},j}^{n+1}-E_x\Big|_{i+\frac{1}{2},j}^{n+\frac{1}{2}}\right)+\sigma_y\varepsilon_0\varepsilon_r E_x\Big|_{i+\frac{1}{2},j}^{n+1}=\frac{1}{\Delta y}\left(H_z\Big|_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2}}^{n+1}-H_z\Big|_{i+\frac{1}{2},j-\frac{1}{2}}^{n+1}\right) \quad (6-37b)$$

以下数值实验结果说明,这一概念很有价值。

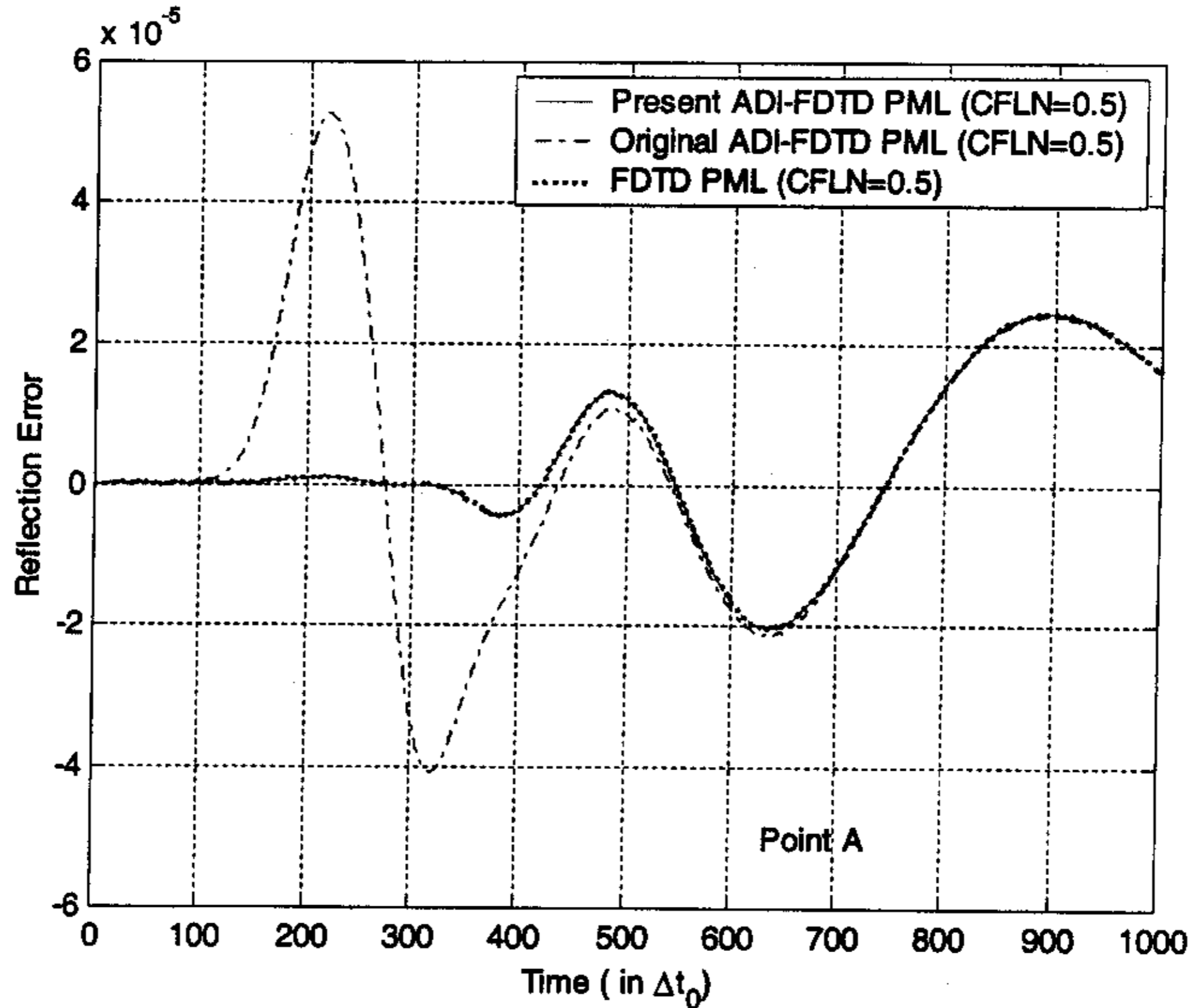


图 6.4 当 CFLN=0.5 时 A 点的反射误差对照图

为了对比 ADI-FDTD 与 PML 的不同结合方式所产生的不同结果,我们来研究一个二维 TE 波模拟问题。将整个计算域划分为 60×60 个均匀网格(含 PML), PML 吸收层加在正方形计算域的四条边带上(如图 6.2 所示),厚度为 10 个网格。在 PML 吸收层中电导率按照(6-21)和(6-23)定义,注意这里取 $\varepsilon_r = 1, m=4$ 。在计算域中部一点 C 加高斯脉冲激励

$$H_z(C) = H_z[30][30] \quad (6-38a)$$

$$H_z[30][30] = H_z[30][30] + \exp\left[-\left(\frac{n \cdot t_n - 186}{50}\right)^2\right] \quad (6-38b)$$

这儿 $t_n = \text{CFLN}$ 表示时间步的大小, $\Delta t = t_n \Delta t_0$, $\Delta t_0 = \Delta / (\sqrt{2}c)$, $\Delta = \Delta x = \Delta y$ 。在邻近两种媒质界面处取两点 A(在邻近该点的界面处电磁场垂直入射 PML)和 B(在邻近该点的界面处电磁场 45° 斜入射 PML),取 A、B 两点的场 $H_z(A) = H_z[30][49]$, $H_z(B) = H_z[49][49]$ 作为研究对象。为了将 PML 的实际反射误差从数值解中分离出来,还需要一个作为参考的数值解,这可以通过加大计

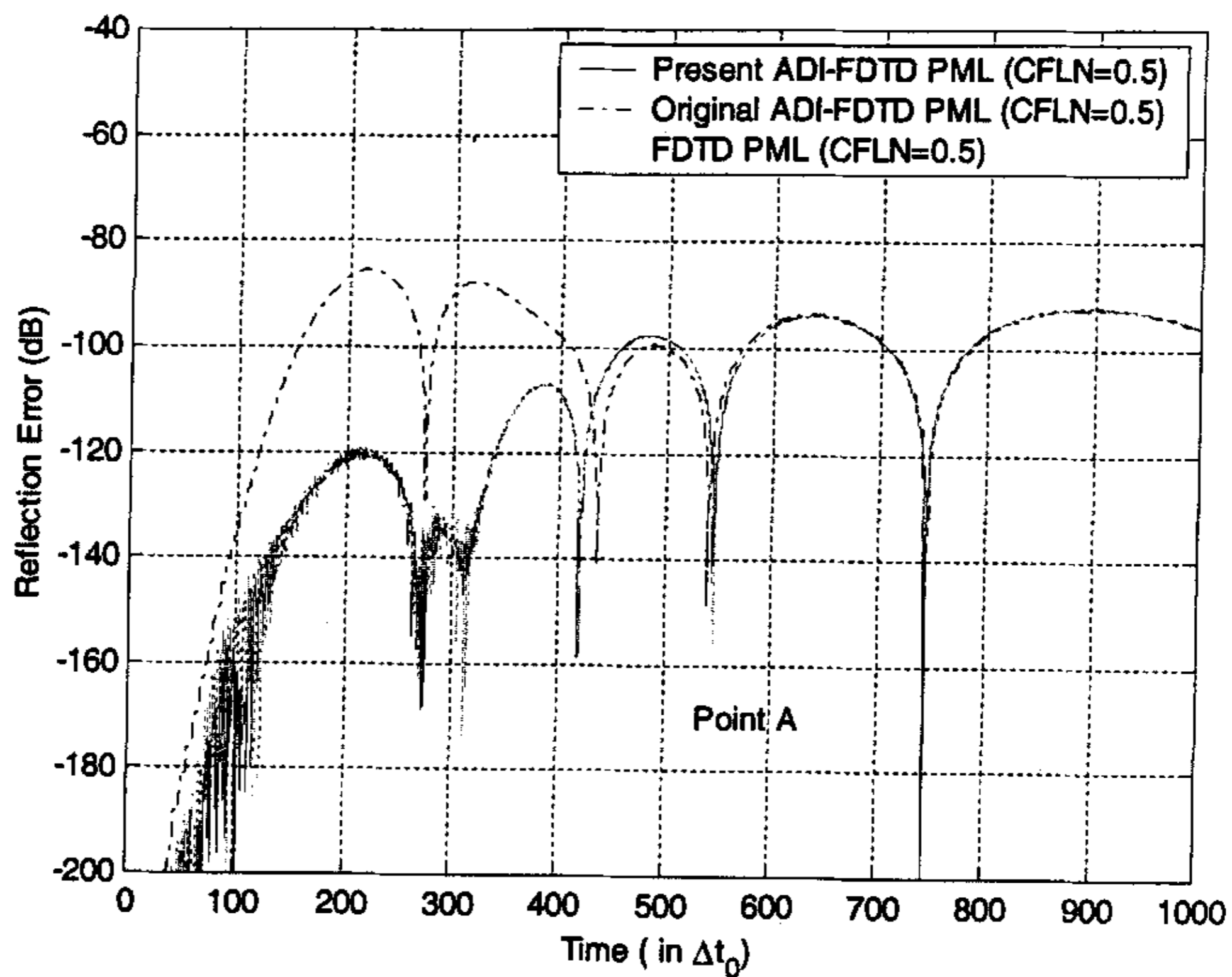


图 6.5 当 CFLN=0.5 时 A 点的反射误差 (dB) 对照图

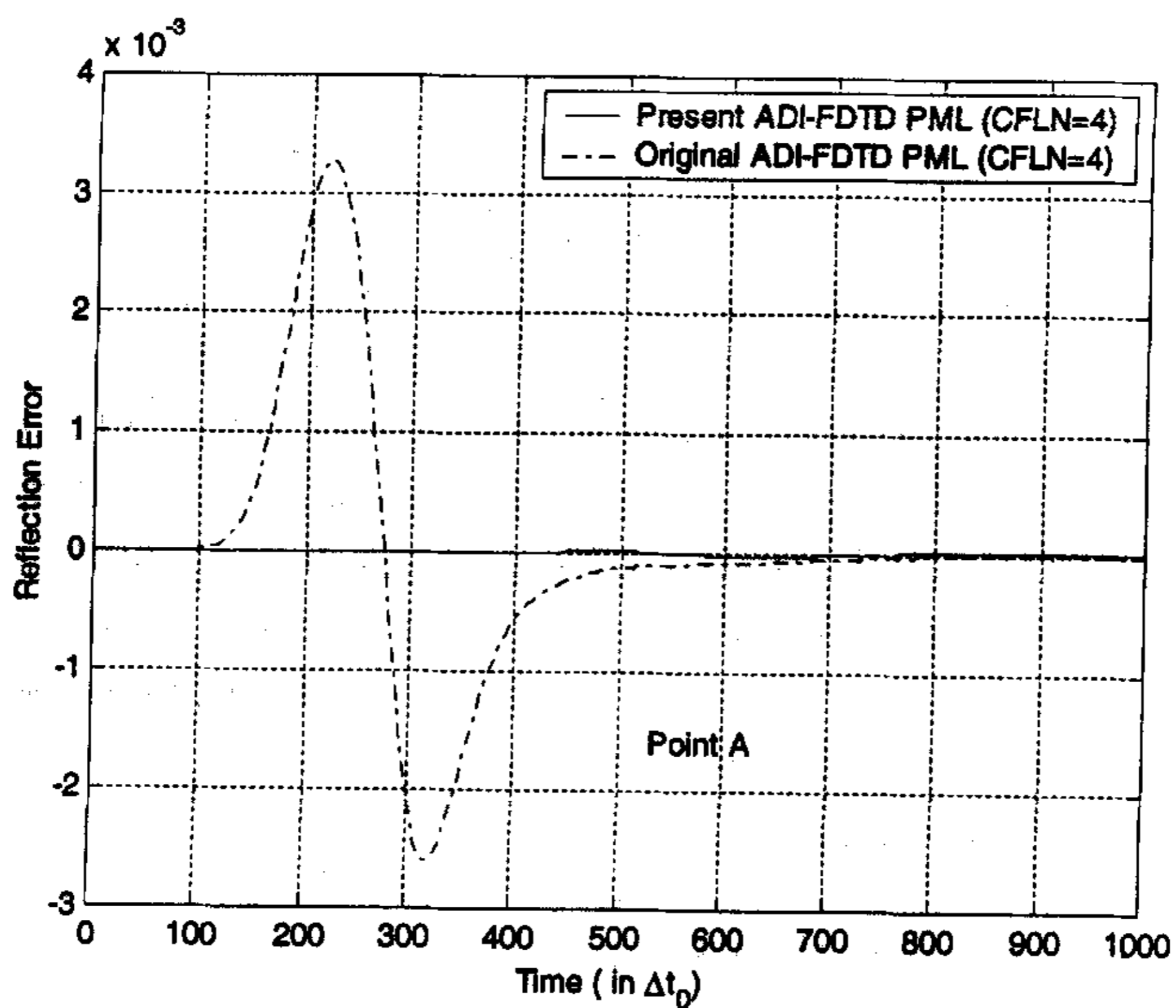


图 6.6 当 CFLN=4 时 A 点的反射误差对照图

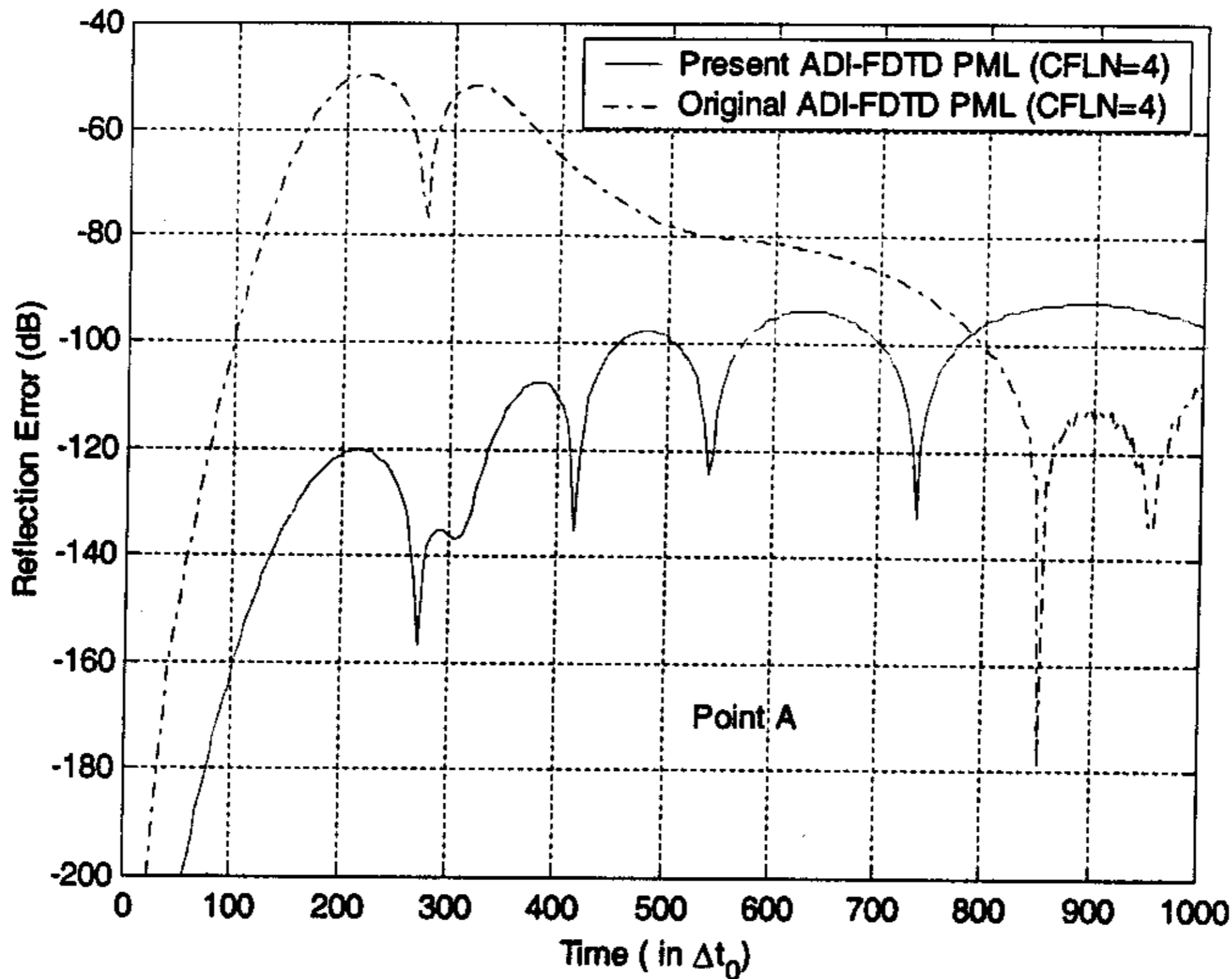


图 6.7 当 CFLN=4 时 A 点的反射误差 (dB) 对照图

算域以隔离反射误差来求得。我们所考虑的是如下定义的相对反射误差

$$H_{relative}(t) = [H_{PML}(t) - H_{ref}(t)] / \max\{abs[H_{ref}(t)]\} \quad (6-39)$$

当 CFLN=0.5 和 CFLN=1 时, Berenger 的 PML 还被用于 FDTD 数值模拟以对比其反射误差。图 6.3 表示最大反射误差和时间步尺寸的关系。图 6.4、6.5、6.6、6.7 表示 A 点附近 PML 的反射误差随照射时间变化规律 (B 点的情况类似), 其中图 6.4、6.5 中, 包括了标准 FDTD PML 的反射误差曲线作为对比, CFL 数等于 0.5; 图 6.6、6.7 中, CFL 数等于 4。以上所有图中, 除图 6.4、6.6 中的反射误差为线性表示外, 其它三幅图中的反射误差均以分贝为单位表示。由图可见:

1. 在 ADI-FDTD 数值模拟中, 采用原有的方法离散修正形式 Maxwell 方程, PML 的最大反射误差随时间步尺寸的增加而迅速增加, 而如果采用本文所提出的离散方法, PML 的最大反射误差则很稳定;
2. 恰好在电磁场脉冲通过 PML 交界面的一段时间内, 即使当 CFLN 较小的时候, 采用原有方法的反射误差也要比采用新方法大过数倍数十倍;
3. 采用本文所提出的方法离散修正形式 Maxwell 方程, ADI-FDTD PML 的反射误差与 FDTD PML 的反射误差基本一致。

限于篇幅, 这里只给出几个典型图例。更多的数据充分表明, 采用原有的方

法离散修正形式 Maxwell 方程式是不恰当的；而只要采用概念统一的、新的离散方法，不论是在 FDTD 还是在 ADI-FDTD 数值模拟中，Berenger PML 的作用相同。

第七章 结束语

ADI-FDTD 是一种较新的算法, 该算法区别于通常 FDTD 的根本特征是无条件稳定性, 采用这种新算法时间步大小的选择不再受到 CFL 稳定性条件的限制, 因而具有通过选择恰当时间步以提高计算效率的潜在优势。

本文第二章对这一算法作了较为完整的介绍; 第三章在简要说明算法稳定性概念的基础上, 提供了一种二维 ADI-FDTD 算法的无条件稳定性证明; 第四章则把这一算法用于二、三维谐振腔分析。这三章的主要结论有: (1) ADI-FDTD 算法具有无条件稳定性; (2) 该算法的计算误差表现为数值波的相速误差或色散误差; (3) 二维 ADI-FDTD 占用内存比 FDTD 增加 $1/3$ 或 $2/3$, 三维 ADI-FDTD 增加 $1/2$; (4) ADI-FDTD 每迭代一次比 FDTD 需要更长的时间, 就本文例子而言大约为 4 倍。

本文第五章通过数值实验说明文献[8]和文献[13]提出的数值色散公式与实验结果有较大偏差, 并利用第四章稳定性证明所得到的增长因子方程导出一个与实验结果吻合较好的二维 ADI-FDTD 数值色散公式。该公式与文献[12]所得三维公式相容。本章中的大量图例说明: (1) 相同空间网格尺寸, 相同时间步大小, ADI-FDTD 较 FDTD 具有更大的色散误差; (2) 随着时间步尺寸的增加, ADI-FDTD 的色散误差增加, 而 FDTD 的色散误差却减小(在保证不发散的前提下); (3) 当空间网格尺寸增加时, 两种算法的色散误差都因此而增加, 而且相速曲线有趋于一致的倾向; (4) ADI-FDTD 和 FDTD 数值以太均为各向异性媒质; (5) 如同过大的网格尺寸将导致数值电磁波无法在 FDTD 数值以太中传播, 过大的网格尺寸和时间步大小都将导致数值电磁波无法在 ADI-FDTD 数值以太中传播; (6) 频率越高, 色散误差越大, 对于确定的数值模型, 高于确定值的频率成分将无法传播。

本文第六章介绍了 PML 研究的主要成就, 分析了文献[15]将 PML 用于 ADI-FDTD 算法时, PML 的性能随时间步尺寸增加迅速蜕化的原因, 并提出了不同的方法用于离散 Berenger 的场分裂形式 Maxwell 方程。采用本文提出来的方法, ADI-FDTD PML 不仅在 CFL 数小于 1 时与 FDTD PML 作用相同, 而且当时间步尺寸增加时, 最大反射误差仍然稳定在 -80dB 上下, 解决了文献[15, 20]中所提出方法存在的 PML 性能蜕化问题。

ADI-FDTD 作为对 FDTD 算法的补充, 在计算域的结构比较复杂, 因而网格尺寸相对于波长小得多的情况下, 使用 ADI-FDTD 算法可以根据精度要求, 通过选择充分长时间步取的较高的计算效率。

与本文工作相关需要进一步研究的题目有: (1) 对于给定的精度要求, 如何选取恰当的建模参数, 如空间网格尺寸和时间步大小, 最好能给出一个公式; (2)

将单轴各向异性理想匹配层 (UPML) 推广到 ADI-FDTD; (3) 相关的应用研究。

致 谢

在做硕士论文的过程中，我遇到了各种困难。能够最终完成我的硕士论文，要感谢老师、同学和亲友的关心和帮助。

首先，我要衷心感谢我的导师褚庆昕教授在我读研期间对我的教育和培养。本论文的研究和写作工作自始至终在导师悉心指导下进行，他广博的专业学识、严谨的治学态度、精益求精的敬业精神、活跃的思维方式、充满朝气的精神状态一直都在影响和激励着我。他在学习和工作上严格要求我们，使我对专业知识有了更深层次的理解和掌握，并结累了一定的实践经验。特别在平时的课题组学术讨论和交流中他以自己的亲身体会给我们在做学问和为人处世方面以教导，使我不仅得到了专业方面的熏陶，更重要的是培养了独立的研究能力，端正了做学问的态度，工作和做人的态度，在困难和挫折面前要积极进取，变被动为主动。这一点我深有体会，这将会极大地影响我今后的工作和生活，成为我终身的财富。

感谢我的同学冯英、张世芳、郑阳明给予我的极大帮助，在我做论文期间，经常和他们讨论问题，他们在我遇到难题时耐心地指出我的疏漏之处，给我提出很好的建议，使我能够顺利解决难题。

感谢我的舍友郑毅平、姚军、宋红波，三年来他们在学习和生活上给了我很大的帮助和关心，尤其是在做论文的最后一段时间，处处照顾我，和他们在一起的日子给我留下了难忘的美好记忆。

感谢我工作单位的领导和同事，是他们为我创造了宽松的环境和各种便利，并给与鼓励和支持，使我得以完成学业。

最难忘的爱来自我年迈的双亲，他们虽然住在遥远的小山村里，但每当我遇到什么挫折，就会想到他们艰难曲折的一生，和他们相比我有什么大不了的困难？如果我在工作上取得了一点点成绩，我总是像小时候一样满怀喜悦的告诉他们，让他们分享我的快乐。最直接的关心和支持来自我的妻儿，他们的叮嘱，他们的期盼，他们为我所做的一切，伴随着我走过了这三年的求学生涯。我衷心地谢谢他们。

最后感谢所有关心和支持我的老师、同学和朋友。

参考文献

- [1] A. Taflove, *Computational Electrodynamics: The Finite-Difference Time-Domain Method*, Norwood, MA: Artech House, 1995, pp. 181-194.
- [2] A. Taflove, *Advances in Computational Electrodynamics: The Finite-Difference Time-Domain Method*, Norwood, MA: Artech House, 1998, pp. 263-343.
- [3] F. Zheng, Z. Chen, and J. Zhang, "Toward the development of a three-dimensional unconditionally stable finite-difference time-domain method," *IEEE Trans. Theory Tech.*, Sept. 2000, vol. 48, pp. 1550-1558.
- [4] [美] L. Lapidus 和 G. F. Pinder 著, 孙钠正 陆祥璇 李竞生 译, *科学和工程中的偏微分方程数值解法*, 第1版, 北京: 煤炭工业出版社, 1989.
- [5] Y. Liu and C. Y. Shen, "A domain decomposition finite-difference method for parallel numerical implementation of time-dependent Maxwell's equations," *IEEE Trans. Antennas and Propagation*, Mar. 1997, vol. 45, pp. 556-562.
- [6] R. Holland, "Implicit three-dimensional finite differencing of Maxwell's equations," *IEEE Trans. Nucl. Sci.*, vol. NS-31, 1984, pp. 1322-1326.
- [7] P.M. Goorjian, "Finite difference time domain algorithm development for Maxwell equations for computational electromagnetism," in *Proc. IEEE Antennas and Propagation Society Int. Symp.*, vol. 1, 1990, pp. 878-881.
- [8] T. Namiki, "A new FDTD algorithm based on alternating-direction implicit method," *IEEE Trans. Microwave Theory Tech.*, Oct. 1999, vol. 47, pp. 2003-2007.
- [9] T. Namiki, "3-D ADI-FDTD method: unconditionally stable time domain algorithm for solving full vector Maxwell's equations," *IEEE Trans. Microwave Theory Tech.*, Oct. 2000, vol. 48, pp. 1743-1748.
- [10] J.H. Beggs and W.R. Briley, "An implicit characteristic based method for computational electromagnetics," *Tech. Rep. MSSU-EIRS-ERC-98-11*, Miss. State Univ., August 1998.
- [11] T. Namiki and K. Ito, "Investigation of numerical errors of the two-dimensional ADI-FDTD method," *IEEE Trans. Microwave Theory Tech.*, Nov. 2000, vol. 48, pp. 1950-1956.
- [12] F. Zheng and Z. Chen, "Numerical dispersion analysis of the unconditionally stable 3-D ADI-FDTD method," *IEEE Trans. Microwave Theory Tech.*, May 2001, vol.

- 49, pp. 1006-1009.
- [13] A. P. Zhao, "Analysis of the numerical dispersion of the 2-D alternating- direction implicit FDTD method," *IEEE Trans. Microwave Theory Tech.*, Apr. 2002, vol. 50, pp. 1156-1164.
- [14] G. Mur, "Absorbing boundary conditions for the finite-difference approximation of the time domain electromagnetic equations," *IEEE Trans. Electromagnetic Compatibility*, vol. 23, 1981, pp. 373-382.
- [15] G. Liu and S. D. Gedney, "Perfectly matched layer media for an unconditionally stable three-dimensional ADI-FDTD method," *IEEE Microwave Guided Wave Lett.*, July 2000, vol. 10, pp. 261-263.
- [16] J.P. Berenger, "A perfectly matched layer for the absorption of electromagnetic waves," *J. Corp. Phys.*, Oct. 1994, vol. 114.no.2, pp. 185-200.
- [17] R. Mittra, and U. Pekel, "A new look at the perfectly matched layer (PML) concept for the reflectionless absorption of electromagnetic waves," *IEEE Microwave Guided Wave Lett.*, March 1995, vol. 5.no.3, pp. 84-86.
- [18] D.M. Sullivan, "A simplified PML for the use with the FDTD method," *IEEE Microwave Guided Wave Lett.*, Feb. 1996, vol. 6.no.2, pp. 97-99.
- [19] Z. S. Sacks, D. M. Kingsland, and R. Lee, "A perfectly matched anisotropic absorber for use as absorbing boundary condition," *IEEE Trans. Antennas and Propagation*, Dec. 1995, vol. 43, pp. 1460-1463.
- [20] G. Luzzy, "Unconditionally stable D-H FDTD formulation with anisotropic PML boundary condition," *IEEE Microwave and Wireless Components Letters*, Apr. 2001, vol. 11, pp. 149-151.
- [21] 廖承恩 编著, 微波技术与基础, 西安: 西安电子科技大学出版社, 1994.
- [22] 高本庆 编著, 时域有限差分法 FDTD Method, 北京: 国防工业出版社, 1995.
- [23] X. Zhang, J. Fang, K.K. Mei, "Calculations of the dispersive characteristics of microstrips by the time-domain finite difference method," *IEEE Trans. Microwave Theory Tech.*, Feb. 1988, vol. 36, pp. 263-267.
- [24] J. C. Veihl, R. Mittra, "A efficient implementation of Berenger's perfectly matched layer (PML) for finite-difference time-domain mesh truncation," *IEEE Microwave Guided Wave Lett.*, Feb. 1996, vol. 6.no.2, pp. 94-96.

在读期间研究成果

- [1] 王林年,白心爱,“Yee 算法的散度特性,” 吕梁高等专科学校学报, 2002 年 1 月, 第 18 卷, 第 5-7 页.
- [2] 白心爱,王林年,“黑体模型的意义,” 吕梁高等专科学校学报, 2002 年 1 月, 第 18 卷, 第 34-35 页.

$$A = \begin{bmatrix} b_1 & c_1 & & & \\ a_2 & b_2 & c_2 & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & \ddots & \ddots & c_{n-1} \\ & & & a_n & b_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \alpha_1 & & & & \\ \gamma_2 & \alpha_2 & & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & \ddots & \ddots & \\ & & & \gamma_n & \alpha_n \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & \beta_1 & & & \\ & 1 & \beta_2 & & \\ & & \ddots & \ddots & \\ & & & \ddots & \beta_{n-1} \\ & & & & 1 \end{bmatrix}, \quad (\text{A-3})$$

其中 $\alpha_i, \beta_i, \gamma_i$ 为待定系数。比较 (2) 式两边即得

$$\left. \begin{aligned} b_1 &= \alpha_1, c_1 = \alpha_1 \beta_1, \\ a_i &= \gamma_i, b_i = \gamma_i \beta_{i-1} + \alpha_i \quad (i=2, \dots, n), \\ c_i &= \alpha_i \beta_i \quad (i=2, \dots, n-1), \end{aligned} \right\} \quad (\text{A-4})$$

由于 $\alpha_1 = b_1 \neq 0$, 故有 $\beta_1 = c_1 / b_1$; 又 $|b_i| > |c_i| > 0$, 从而 $0 < |\beta_i| < 1$. 下面我们由归纳法证明

$$|\alpha_i| > |c_i| \neq 0 \quad (i=1, 2, \dots, n-1) \quad (\text{A-5})$$

从而由 (4) 式可求出 $\beta_i = c_i / \alpha_i$, 且 $0 < |\beta_i| < 1$ ($i=2, \dots, n-1$).

(4) 式对 $i=1$ 时成立的。现设 (4) 式对 $i-1$ 成立, 求证对 i 亦成立。由归纳法假设 $0 < |\beta_{i-1}| < 1$, 又由 (3) 式及 A 的假设条件有

$$|\alpha_i| = |b_i - \gamma_i \beta_{i-1}| = |b_i - a_i \beta_{i-1}| > |b_i| - |a_i \beta_{i-1}| > |b_i| - |a_i| \geq c_i \neq 0,$$

从而

$$\beta_i = c_i / \alpha_i, \text{ 且 } 0 < |\beta_i| < 1 \quad (i=2, \dots, n-1). \quad (\text{A-6})$$

概括起来, 有

$$\begin{cases} \alpha_1 = b_1 \\ \gamma_i = a_i \quad \alpha_i = b_i - a_i \beta_{i-1} \end{cases} \quad (i=2, \dots, n) \quad (\text{A-7})$$

$$\begin{cases} \beta_1 = c_1 / b_1 \\ \beta_i = c_i / (b_i - a_i \beta_{i-1}) \end{cases} \quad (i=2, \dots, n-1) \quad (\text{A-8})$$

这就是说, 由 A 的假设条件, 我们完全确定了 $\{\alpha_i\}, \{\beta_i\}, \{\gamma_i\}$, 实现了 A 的 LU 分解。

求解 $Ax=f$ 等价于解两个三角形方程组

(1) $Ly=f$, 求 y ;

(2) $Ux=y$, 求 x .

从而得到求解三对角方程组的 Thomas 公式:

(1) 计算 β_i 的递推公式

$$\begin{cases} \beta_1 = c_1 / b_1 \\ \beta_i = c_i / (b_i - a_i \beta_{i-1}) \end{cases} \quad (i=2, \dots, n-1) \quad (\text{A-9})$$

(2) 解 $Ly=f$

$$\begin{cases} y_1 = f_1 / b_1 \\ y_i = (f_i - a_i y_{i-1}) / (b_i - a_i \beta_{i-1}) \end{cases} \quad (i=2, \dots, n) \quad (\text{A-10})$$

(3) 解 $Ux=y$

$$\begin{cases} x_n = y_n \\ x_i = y_i - \beta_i x_{i+1} \end{cases} \quad (i = n-1, n-2, \dots, 2, 1) \quad (\text{A-11})$$

注意到上述 Thomas 公式的求解过程是一个顺序过程, 因此这一方法有时又被形象地称为追赶法 [A2], 将计算系数 $\beta_1 \rightarrow \beta_2 \rightarrow \dots \rightarrow \beta_{n-1}$, 以及 $y_1 \rightarrow y_2 \rightarrow \dots \rightarrow y_n$ 的过程称为向前追的过程, 将计算方程组的解 $x_n \rightarrow x_{n-1} \rightarrow \dots \rightarrow x_1$ 的过程称为往回赶的过程。

Thomas 公式实际上就是把高斯消去法用到求解三条带系数矩阵线性方程组上去的结果。这时由于 A 特别简单, 因此使得求解公式也特别简单, 计算量仅为 $5n-4$ 次乘除法, 特别是在 ADI-FDTD 电磁场数值模拟过程中, 实际上是在反复求解形如 $Ax = f_l$ 的线性方程组, 由于系数矩阵 A 不变, 在进入求解线性方程组 $Ax = f_l$ 的循环 ($l = 1, 2, \dots, l_{\max}$) 之前, 系数矩阵 A 的 LU 分解即已一次性完成, 所以每求解一次方程组 $Ax = f_l$ 仅需增加 $3n-2$ 次乘除运算 (假设 f_l 是已知的)。如果用标准的高斯消去法求解, 则大约需要作 n^3 次乘除运算, 而迭代法也大约需要做 n^2 次乘除运算。因此我们说 Thomas 算法求解三条带系数矩阵线性方程组特别有效。

参考文献

- [A1] [美] L. Lapidus 和 G. F. Pinder 著, 孙钠正 陆祥璇 李竞生 译, 科学和工程中的偏微分方程数值解法, 第 1 版, 北京: 煤炭工业出版社, 1989.
- [A2] 李庆扬 王能超 易大义, 数值分析, 武昌喻家山: 华中理工大学出版社, 第 3 版, 1986, 267-269 页.