

学校代码: 10357
学 号:

安徽大学

博士学位论文

高阶辛算法的理论和应用研究

Theoretical and Applied Study of
High-Order Symplectic Schemes

姓 名	沙 威
学科专业	电磁场与微波技术
研究方向	电磁散射与目标识别
指导教师	吴先良
完成时间	2008 年 4 月

独创性声明

本人声明所呈交的学位论文是本人在导师指导下进行的研究工作及取得的
研究成果。据我所知，除了文中特别加以标注和致谢的地方外，论文中不包含其
他人已经发表或撰写过的研究成果，也不包含为获得安徽大学或其他教育机构
的学位或证书而使用过的材料。与我一同工作的同志对本研究所做的任何贡献均
已在论文中作了明确的说明并表示谢意。

学位论文作者签名：沙威

签字日期：2008 年 4 月 9 日

学位论文版权使用授权书

本学位论文作者完全了解安徽大学有关保留、使用学位论文的规定，
有权保留并向国家有关部门或机构送交论文的复印件和磁盘，允许论文被查阅和
借阅。本人授权安徽大学可以将学位论文的全部或部分内容编入有关数据库进行
检索，可以采用影印、缩印或扫描等复制手段保存、汇编学位论文。

(保密的学位论文在解密后适用本授权书)

学位论文作者签名：沙威

导师签名：吴志良

签字日期：2008 年 4 月 9 日

签字日期：2008 年 4 月 9 日

学位论文作者毕业去向：

工作单位：

电话：

通讯地址：

邮编：

摘要

计算电磁学是融电磁场理论、数值方法、计算机技术于一体的新兴交叉科学，其学术价值和工程意义已逐步凸现。以建模、仿真、优化、设计为流程的电磁场工程已经渗透到工业领域和军事领域的各个方面，而计算电磁学的诞生和发展对电磁场工程起到了革命性的推动作用。近半个世纪来，计算电磁学算法层出不穷，其杰出代表包括：离散矢量波动方程的有限元法，离散积分方程的矩量法，离散麦克斯韦方程的时域有限差分法。

从 1966 年 Yee 网格提出至今，经典的时域有限差分法以概念清晰、操作简单、通用性强、便于并行等优点，其在宽带分析、瞬态分析、全波分析中有着广泛的应用。然而，时域有限差分法也有两大缺点。其一，由于数值色散性、数值稳定性、各向异性的影响，在长时间仿真和电大目标仿真中，时域有限差分法的数值误差随时间积累，造成了计算结果的失真、歪曲。其二，由于采用阶梯近似和结构网格，在模拟金属曲面和材质不连续性中存在一定的困难。

为了解决上述两大问题，本文对高阶辛时域有限差分法进行了系统研究。时间方向上，采用高阶辛积分，在长期仿真中保持麦克斯韦方程的辛结构；空间方向上，采用 4 阶交错差分，减小数值色散，提高数值精度；网格剖分上，采用高阶子网格模型解决材质不连续性问题，采用高阶共形网格模型解决金属曲面的电磁建模问题。通过上述相互匹配的算法和技术，来建立快速度、低内存、高精度的时域解决方案。

针对“高阶辛算法的理论和应用研究”这一课题，本文的创新工作主要包括以下几个方面的内容：

(1) 探讨了自由空间麦克斯韦方程的辛性质，证明了其时间演化矩阵是辛矩阵，且该矩阵保持了电磁场的能量守恒性，建立了麦克斯韦方程、离散方式、网格、空间拓扑之间的内在联系。

(2) 将对称辛算子引入到辛时域有限差分法中，提出了更高效的 3 阶 3 步辛积分方法。推导了辛算子的阶数条件，并给出了可行的优化方案。

(3) 对比了各种时域高阶算法的数值稳定性和数值色散性，证明了高阶辛算法在长时间仿真、能量守恒、数值精度等方面的优势。提出了新的“平均稳定

度”标准，指出只有高阶时间算法和高阶空间算法相结合才能成为优化的时域解决方案。

(4) 基于张量积的思路，提出了高阶近远场变换技术，并证明了其更适合在粗网格条件下计算目标单、双站雷达散射截面。

(5) 基于广义安培定理和广义法拉弟定理，一方面，提出了高阶子网格模型解决材质不连续性问题，另一方面，提出了高阶共形网格模型解决金属曲面的电磁建模问题。同其它相关的低阶模型和高阶模型相比，我们提出的模型在近场和远场电磁仿真中均有优势，且通过数值分析证明了新的高阶模型能节省大量的计算机资源。

(6) 将高阶辛时域有限差分法应用于波导仿真。采用渐变的介电常数和磁导率设置，修正高阶完全匹配层，使其能够吸收消失波。将微分方法推广到高阶，只需运行程序一次就能提取散射参数或反射系数。通过高阶辛算法和上述方法的结合，对波导谐振器、不连续性和光子带隙结构进行了仿真，获得了令人满意的数值结果。

关键字：麦克斯韦方程；辛积分；高阶差分；网格；电磁散射；波导仿真

Abstract

Computational electromagnetics (CEM) is a new multi-disciplinary science. Integrating electromagnetic field theory, numerical method, and computer technology, CEM has shown its academic and engineering significances. Through modeling, simulation, optimization, and design, electromagnetic field engineering has penetrated many aspects of industrial and military fields. In particular, CEM plays a revolutionary role in advancing electromagnetic field engineering. Over past half century, algorithms of CEM were rapidly developed. Their outstanding representatives involve finite-element method, moment methods, and finite-difference time-domain (FDTD) method, which are respectively used to discretize vector wave functions, integral equations, and Maxwell's equations.

It is in 1966 that Yee grid was proposed. Until now, the traditional FDTD method has been widely applied to broad-band, transient, and full-wave analyses owing to its simplicity, generality, and facility for parallel computing. However, the FDTD method has two drawbacks. One is the undesirable numerical results caused by the significant accumulated errors from numerical instability, dispersion, and anisotropy, especially for long-term simulation and electrically-large objects. Another is the inability to accurately model curved conducting surfaces and material discontinuities by using the staircasing approach with structured grids.

To solve the two problems, the dissertation systematically studies the high-order symplectic FDTD (SFDTD) scheme. For temporal direction, the high-order symplectic integration scheme is used to keep the global symplectic structure of Maxwell's equations for long-term simulation. For spatial direction, the staggered fourth-order difference scheme is used to reduce numerical dispersion and improve numerical precision. For grid generation, the high-order subcell technique and the high-order conformal grid technique are proposed to model material discontinuities and curved conducting surfaces. With the help of these matched schemes and techniques, we can build a fast, low-consumed, and accurate time-domain solver.

Focusing on the “theoretical and applied study of high-order symplectic schemes”, some novel contributions are made as follows

(1) The symplectiness of Maxwell’s equations in free space is discussed. On the one hand, it is verified that the time evolution matrix of Maxwell’s equations is symplectic matrix and conserves the total energy of electromagnetic field. On the other hand, the connections between Maxwell’s equations, discretization method, grid, and topological geometry are established.

(2) The symmetric symplectic integrators are introduced for the SFDTD scheme and the more efficient three-stage three-order symplectic integration scheme is developed. Furthermore, the symplectic integrators are optimized with the order conditions derived.

(3) First, numerical dispersion and stability are compared for a variety of high-order time-domain schemes. In particular, through numerical experiments on long-term simulation, energy conservation, and numerical precision, the advantages of the high-order symplectic schemes are demonstrated. Second, a novel averaged stability criteria is proposed. Third, we draw an important conclusion that combining high-order time schemes with high-order space schemes is required for constructing an optimum time-domain solver.

(4) Based on the concept of tensor product, the high-order near-to-far-field transformation is put forward. The technique is more suitable for computing monostatic and bistatic radar cross sections under coarse grid condition.

(5) Using general Ampere’s law and Faraday’s law, the high-order subcell technique and the high-order conformal grid technique are proposed to model material discontinuities and curved conducting surfaces. Compared with other low-order and high-order strategies, the proposed techniques show their advantages for both near-field and far-field simulations. Numerical results suggest that the new high-order techniques can save considerable computer resources.

(6) The high-order SFDTD scheme is applied to waveguide simulation. On the one hand, by adopting the gradually-changed permittivities and permeabilities, the modified high-order perfectly matched layer is employed to absorb the attenuated

waves. On the other hand, the differential method is extended to its high-order form. As a result, scattering parameters or reflection coefficients can be extracted by only running the program once. Using the high-order symplectic schemes and above mentioned methods, we can obtain the satisfying numerical results when simulating waveguide resonator, discontinuities, and photonic band gap structures.

Keywords: Maxwell's Equations; Symplectic Integration; High-Order Difference; Grid; Electromagnetic Scattering; Waveguide Simulation.

目录

第一章 绪论.....	1
§1.1. 计算电磁学的意义.....	1
§1.2. 计算电磁学中的常用方法.....	1
§1.3. 麦克斯韦方程的时域解决方案.....	4
§1.4. 本论文所做的工作.....	10
参考文献.....	11
第二章 麦克斯韦方程的辛性质.....	15
§2.1. 引言.....	15
§2.2. 预备知识.....	16
§2.2.1. 线性空间、欧氏空间、酉空间.....	16
§2.2.2. 辛内积、辛空间、辛变换、辛矩阵.....	17
§2.2.3. 哈密尔顿系统和辛变换.....	19
§2.3. 麦克斯韦方程、空间网格和辛矩阵.....	21
§2.3.1. 重要的 3 个定理.....	21
§2.3.2. 时间连续空间连续的麦克斯韦方程的辛性质.....	23
§2.3.3. 时间连续空间离散的麦克斯韦方程的辛性质.....	26
§2.3.4. 时间离散空间离散的麦克斯韦方程的辛性质.....	28
§2.4. 小结.....	29
参考文献.....	29
第三章 麦克斯韦方程的离散辛框架.....	32
§3.1. 引言.....	32
§3.2. 高阶辛时域有限差分法的基本形式.....	32
§3.3. 数值稳定性、色散性分析.....	42
§3.3.1. 稳定性分析.....	42
§3.3.2. 色散性分析.....	46
§3.4. 数值稳定性、色散性优化.....	49
§3.5. 小结.....	59
参考文献.....	59
第四章 高阶辛算法中的关键技术.....	61
§4.1. 引言.....	61
§4.2. 高阶总场散射场分离.....	62
§4.3. 高阶完全匹配层.....	67
§4.4. 高阶近远场变换.....	72
§4.5. 数值算例.....	77
§4.6. 小结.....	79
参考文献.....	80
第五章 网格剖分及高阶边界处理.....	82
§5.1. 引言.....	82
§5.2. 阶梯近似模型.....	83
§5.3. 高阶子网格技术.....	86

§5.4. 高阶共形网格技术.....	100
§5.5. 小结.....	111
参考文献.....	111
第六章 高阶辛算法在波导仿真中的应用.....	113
§6.1. 引言.....	113
§6.2. 关键技术.....	114
§6.2.1. 源的加入.....	114
§6.2.2. 金属边界处理.....	116
§6.2.3. 吸收边界条件.....	116
§6.2.4. 参数抽取.....	118
§6.3. 数值算例.....	120
§6.4. 小结.....	128
参考文献.....	128
结束语.....	130
致谢.....	132
作者攻博期间发表的刊物.....	134
作者攻博期间参加的科研项目.....	137
作者攻博期间获得的奖励和荣誉.....	138

第一章 绪论

§1.1. 计算电磁学的意义

计算电磁学是融电磁场理论、数值方法、计算机技术于一体的新兴交叉科学，其学术价值和工程意义已逐步凸现。以建模、仿真、优化、设计为流程的电磁场工程已经渗透到工业领域和军事领域的各个方面，而计算电磁学的诞生和发展对电磁场工程起到了革命性的推动作用。

计算电磁学本质上是一种仿真科学。对科学领域，通过仿真能够预测科学现象，引领新的研究方向，促进实验科学和理论科学的发展。对工程领域，通过仿真可以节省工程试验和改进过程中的人力、物力和财力的耗费。作为仿真科学的一种，计算电磁学已经在材料、医学、电子、通讯、航空航天等领域发挥了重要的作用。如左手材料的电磁波传播问题，医学上电磁成像问题，电子对抗技术中电磁脉冲对人和设备的影响问题，通讯领域中天线的设计、微波集成电路的设计、电磁兼容等问题，航空航天领域中的雷达成像、隐身反隐身等问题。

随着科学技术的进一步发展，计算电磁学需要解决新的课题，也将面临新的机遇和挑战。目前具有挑战性的课题有：射频集成电路和微波集成电路的混合仿真问题，复杂背景下的复杂目标精确计算问题，超电大目标的超宽带快速计算问题，太赫兹波段的电磁仿真问题等等。

§1.2. 计算电磁学中的常用方法

电磁场问题的求解方法一般分两种：解析法和数值法。

解析法首先建立描述电磁场问题的偏微分方程或者积分方程，然后再找到其精确的数学表达。对偏微分方程，解析法主要是分离变量法。对积分方程，解析法主要是变换数学法。解析法可得到精确的计算结果，因此能作为检验近似解和数值解的标准。根据解析解的显式表达式，我们也能了解其中的参数对最终结果的影响。然而，解析法只能求解很少量的问题，它对目标的几何形态、边界条件等都有严格的数学界定。

在实际的复杂问题中，我们不可能获得电磁场问题的精确解。因此，近似解也就显得尤为重要。在计算电磁学中常见的近似解法包括：偏微分方程中的摄动

(微扰)理论, 准静态近似法, 及高频近似法[1-8] (物理光学、物理绕射、几何光学、几何绕射、射线追踪等)。近似解总是对方程、边界、目标等做出了近似处理, 从而简化了电磁场的物理模型。该类方法比纯数值法的计算复杂度要低, 但比解析法的计算复杂度要高。近似法总是在一定条件和范围内才成立。如高频近似法只对电大目标有效, 且只能在后向小角度范围内得到远场近似解。

同解析法相比, 数值法有很多优点: (1) 能够解决复杂问题。这里复杂指的是目标的几何形体复杂, 材质特性复杂 (色散、各向异性)、背景复杂 (非均匀、随机)。(2) 通用性强, 利于软件和硬件的开发。然而, 数值法将消耗大量的计算机资源, 而且在计算精度、存储容量、执行时间等方面离工程的期望值还有相当距离。

计算电磁学中的数值方法可分为微分方法和积分方法两大类。微分方法, 可以用于频域, 也可用于时域。下面我们列出一些主要的微分方法。

(1) 频域有限差分法 (FDFD)。该方法用中心或后向差分近似波动方程中的拉普拉斯算子或者其简化形式, 将连续的偏微分方程转化成稀疏的矩阵方程。该类方法一般采用复坐标完全匹配层吸收辐射波或散射波, 采用纯散射场技术引入平面波源。对于波动方程[9], 该方法计算精度差, 且随着目标电尺寸的增大, 稀疏矩阵的条件数急剧增加, 导致矩阵方程无法收敛。对于抛物线方程 (Parabolic Equation) [10], 该方法只能在近轴小角度范围内获得精确解, 且很难对纯介质体和非均匀涂层目标进行精确的电磁散射特性分析。

(2) 时域有限差分法 (FDTD) [11-16]。该方法直接求解依赖时间的麦克斯韦旋度方程, 利用二阶精度的中心差分近似旋度方程中的时间及空间微分算符, 且自动满足无散条件和场量的切向连续条件。它的优点包括形式简单、便于处理非均匀结构、能得到目标的宽带信息、具有天然的并行特点等等。然而, 受数值色散的影响, 若想获得低于1%的相位误差, 空间分辨率必须大于18个点每波长, 这必然会消耗大量的计算机资源。此外, 由于使用了结构网格和阶梯近似模型, 在模拟非均匀边界时, 该方法的数值精度将会降低。

(3) 时域有限体积法 (FVTD) [17]。该方法将体积分形式的安培定理和法拉第定理, 分别在“主”元胞 (Primary Cell) 和“对偶”元胞 (Dual Cell) 离散。它和时域有限差分法有两点不同。其一, 它不能自动满足电场和磁场的无散条件,

需要采用强加的策略。其二，该方法可采用四面体网格离散目标，克服了阶梯近似的缺陷。然而，时域有限体积法存在后时不稳定 (Late-Time Instability) 问题。虽然可用引入损耗的方式加以解决，但降低了计算的精度。

(4) 频域/时域有限元法 (FEM) [18, 19]。该方法将矢量波动方程的求解问题转化成泛函求极值问题，采用定义在组成全域的子域上的基函数 (边棱元) 逼近待求场值，然后再用定义在组成全域的子域上的基函数构成测试函数，最后生成稀疏矩阵。有限元法一般采用四面体网格，因此精度较时域有限差分法高，且容易推广到高阶。此外，对于时域有限元法而言，其生成的质量矩阵 (Mass Matrix) 和刚度矩阵 (Stiff Matrix) 是对称的。因此，该方法没有后时不稳定现象，但其计算复杂度至少是时域有限差分法的 10 倍。

和微分方法一样，积分方法可用于频域，也可用于时域。下面我们列出一些主要的积分方法。

(1) 矩量法 (MOM) [20]。采用定义在组成全域的子域上的基函数 (RWG 基函数) [21] 逼近待求等效电磁流，然后再用定义在组成全域的子域上的基函数构成测试函数，将积分方程转化为稠密的矩阵方程。在大多数情况下，该方法只对目标的表面进行离散，因此未知数的个数大大减小。但由于生成的阻抗矩阵是稠密的，其计算复杂度和内存耗费随着目标电尺寸的增大而急剧增加。且由于边界条件的不同，须采用不同的积分方程，因此该方法的通用性略差。对于导体，我们一般采用能避免内谐振的混合场积分方程 (CFIE)；对于介质体，我们一般采用 PMCHWT 方程；对于非均匀目标，我们一般采用体积分方程 (VIE)。

(2) 快速多极子 (FMM) [22, 23] 和多层快速多极子方法 (MLFMA) [24]。对于传统矩量法，我们采用共轭梯度法 (CG)、双共轭梯度法 (BICG)、或广义最小余量法 (GMRES) 迭代求解矩阵方程。在此过程中，矩阵向量积的操作占用了大量的计算时间。且阻抗矩阵是稠密矩阵，也将消耗大量内存。针对此瓶颈问题，学者 Rokhlin 提出了快速多极子算法，后经学者 W. C. Chew 领导的研究小组发展成更为高效的多层快速多极子方法。该方法的主要思想就是将源点和场点之间的远场相互作用转化成源点到源点所属长方体中心、源点所属长方体中心到场点所属长方体中心、场点所属长方体中心到场点的相互作用。上述三个步骤被称为：聚集、转移、发散。对于电大目标的求解，采用多层快速多极子算法的执行时间

和内存耗费优于常见的时域算法。然而，计算时间上的优势必须当目标的电尺寸超过某个数量级以上时才能显示出来。目前，对快速多极子和多层快速多极子算法的并行效率改进和复杂度常数消减等问题仍在研究中。

(3) 其它快速算法。在矩量法的演进过程中，除快速多极子和多层快速多极子方法外，还有很多著名的算法。如适用于非均匀目标的共轭梯度快速傅里叶变换法 (CG-FFT) [25]，适用于静电场和二维时谐场的小波变换法 (Wavelet Transform) [26, 27]，适用于随机多目标的稀疏矩阵规则网格法 (SMCG) [28]，还有自适应积分法 (AIM) [29] 等等。

(4) 时域积分方程法 (TDIE) [30, 31]。该方法通过离散时域形式的积分方程，在时间方向上采用显式或隐式的递推方式，求解时域等效电磁流。其后时不稳定问题，可以采用引入损耗和有限元技术加以解决。然而，与常见的时域方法相比，该方法的计算复杂度和内存耗费没有太多优势。

为了便于比较，对于三维问题，表 1.1 列出了几种常见数值方法的计算复杂度和内存消耗。

表 1.1 计算电磁学中常见算法的计算复杂度 (Complexity) 和内存 (Memory) 与频率 f 和迭代次数 N_{it} 的关系。

Algorithm	FDTD/FVTD	FEM	MOM	MLFMA	TDIE
Complexity	$O(f^4)$	$O(f^4)$	$O(N_{it}f^4)$	$O(N_{it}f^2 \log f)$	$O(f^5)$
Memory	$O(f^3)$	$O(f^3)$	$O(f^4)$	$O(f^2 \log f)$	$O(f^4)$

无论积分方法还是微分方法，都有各自的优缺点和适用范围。因此，我们可以将某些算法混合起来使用，取长补短，来达到更好的效果。如时域有限差分法和时域有限元法的混合 [32, 33]，既可节省计算时间又能避免阶梯近似；同样频域有限元法和频域矩量法的混合，即有限元-边界积分方程法 (FE-BI) [34, 35]，既可提高精度又能节省计算资源。但两种和多种方法的混合，会带来一些新的问题，例如建模和程序的复杂性，及算法结合部的边界处理等。

§1.3. 麦克斯韦方程的时域解决方案

作为一种经典的时域电磁仿真方法，时域有限差分法直接求解依赖时间的麦

克斯韦旋度方程, 利用二阶精度的中心差分近似旋度方程中的时间及空间微分算符, 且自动满足无散条件和场量的切向连续条件。其优点包括形式简单、便于处理非均匀结构、和具有天然的并行特点等。时域有限差分法在宽带分析、瞬态分析、全波分析中有着广泛的应用。

时域有限差分法主要有两大缺点。首先, 由于数值稳定、数值色散、各向异性的影响, 在长时间仿真和电大目标仿真中, 时域有限差分法的数值误差随时间积累, 造成了计算结果的失真、歪曲。其次, 由于使用了阶梯近似和结构网格模型, 在模拟金属曲面和材质不连续性中存在一定的困难。

为了解决上述两大问题, 国内外学者相继提出了不同的改进方法。对这些方法的回顾、对比和总结, 对今后进一步开展相关的创新工作有着重要的借鉴和启迪意义。

麦克斯韦方程中任一场量的时空描述可定义为

$$F(x, y, z, t) = F^{n+l/m}(i\Delta_x, j\Delta_y, k\Delta_z, (n+\tau_l)\Delta_t) \quad (1.1)$$

这里, Δ_x , Δ_y , 和 Δ_z 分别是 x , y , 和 z 方向的空间步长, Δ_t 是时间步长, i , j , k , n , l , 和 m 是整数, $n+l/m$ 代表在 n 个时间步后的第 l 级计算, m 是在一个时间步内需要的总步进级数, τ_l 是第 l 级对应的具体时刻。

自由空间的麦克斯韦旋度方程可以写成如下矩阵形式

$$\frac{\partial}{\partial t} \begin{pmatrix} \mathbf{H} \\ \hat{\mathbf{E}} \end{pmatrix} = L \begin{pmatrix} \mathbf{H} \\ \hat{\mathbf{E}} \end{pmatrix} \quad (1.2)$$

$$L = \begin{pmatrix} \{0\}_{3 \times 3} & -\frac{1}{\sqrt{\mu_0 \epsilon_0}} \mathfrak{R}_{3 \times 3} \\ \frac{1}{\sqrt{\mu_0 \epsilon_0}} \mathfrak{R}_{3 \times 3} & \{0\}_{3 \times 3} \end{pmatrix} \quad \hat{\mathbf{E}} = \sqrt{\frac{\epsilon_0}{\mu_0}} \mathbf{E} \quad (1.3)$$

$$\mathfrak{R} = \begin{pmatrix} 0 & -\frac{\partial}{\partial z} & \frac{\partial}{\partial y} \\ \frac{\partial}{\partial z} & 0 & -\frac{\partial}{\partial x} \\ -\frac{\partial}{\partial y} & \frac{\partial}{\partial x} & 0 \end{pmatrix} = \nabla \times \quad (1.4)$$

这里, $\mathbf{E} = (E_x, E_y, E_z)^T$ 是电场矢量, $\mathbf{H} = (H_x, H_y, H_z)^T$ 是磁场矢量, T 为转置,

$\{0\}_{3 \times 3}$ 是 3×3 的全零矩阵, $\mathfrak{R}$ 是三维旋度算子, ε_0 和 μ_0 是自由空间的介电常数和磁导率。

(1.2) 式从 $t = 0$ 时刻到 $t = \Delta_t$ 时刻的精确解为

$$\begin{pmatrix} \mathbf{H} \\ \hat{\mathbf{E}} \end{pmatrix}(\Delta_t) = \exp(\Delta_t L) \begin{pmatrix} \mathbf{H} \\ \hat{\mathbf{E}} \end{pmatrix}(0) \quad (1.5)$$

对于时间方向, 为了近似时间演化矩阵 $\exp(\Delta_t L)$, 国内外学者相继提出了如下离散化方案。

(1) 4 阶龙格库塔法 [36, 37]

该算法将时间演化矩阵展开成泰勒级数的形式

$$\exp(\Delta_t L) = I + \Delta_t L + (\Delta_t L)^2 / 2! + (\Delta_t L)^3 / 3! + (\Delta_t L)^4 / 4! + O(\Delta_t^5) \quad (1.6)$$

然后采用巧妙的多级步进, 实现对 (1.6) 式的逼近。其第 n 个时间步到第 $n+1$ 个时间步的操作方法在 (1.7)–(1.9) 式中给出。

$$\mathbf{F}^{n+1} = \mathbf{F}^n + (\Delta_t / 6) \times (\mathbf{F}_1 + 2\mathbf{F}_2 + 2\mathbf{F}_3 + \mathbf{F}_4) \quad (1.7)$$

$$\mathbf{F}_1 = L(t, \mathbf{F}^n) \quad \mathbf{F}_2 = L(t + \Delta_t / 2, \mathbf{F}^n + (\Delta_t / 2) \cdot \mathbf{F}_1) \quad (1.8)$$

$$\mathbf{F}_3 = L(t + \Delta_t / 2, \mathbf{F}^n + (\Delta_t / 2) \cdot \mathbf{F}_2) \quad \mathbf{F}_4 = L(t + \Delta_t, \mathbf{F}^n + \Delta_t \cdot \mathbf{F}_3) \quad (1.9)$$

这里, $\mathbf{F} = (H_x, H_y, H_z, E_x, E_y, E_z)^T$ 。

龙格库塔法在时间上有高阶精度和高稳定度, 但该算法有幅度误差, 且耗费大量的计算机内存。为了进一步节省内存, 学者 E. Turkel 改进了上面的步进公式 [38], 使内存只要原始操作的一半。对于非线性偏微分方程, 改进方法在时间方向上的精度只有 2 阶。但对于麦克斯韦方程, 该改进方法仍保持了 4 阶精度。

(2) 2 阶蛙跳 (交错) 时间步进法 [11]

我们将矩阵 L 分裂成 U 和 V 之和

$$L = U + V \quad (1.10)$$

$$U = \begin{pmatrix} \{0\}_{3 \times 3} & -\frac{1}{\sqrt{\mu_0 \varepsilon_0}} \mathfrak{R}_{3 \times 3} \\ \{0\}_{3 \times 3} & \{0\}_{3 \times 3} \end{pmatrix} \quad V = \begin{pmatrix} \{0\}_{3 \times 3} & \{0\}_{3 \times 3} \\ \frac{1}{\sqrt{\mu_0 \varepsilon_0}} \mathfrak{R}_{3 \times 3} & \{0\}_{3 \times 3} \end{pmatrix} \quad (1.11)$$

这里, U 和 V 满足下面的条件: $U^\gamma = 0, \gamma \geq 2$, $V^\gamma = 0, \gamma \geq 2$, 且 $UV \neq VU$ 。

采用指数矩阵的分解技术，我们可以将 $\exp(\Delta_t(U+V))$ 写成一系列矩阵相乘的形式

$$\exp(\Delta_t(U+V)) \approx \exp\left(\frac{U\Delta_t}{2}\right) \cdot \exp(V\Delta_t) \cdot \exp\left(\frac{U\Delta_t}{2}\right) \quad (1.12)$$

然后对 (1.12) 式中的每一项使用泰勒展开，我们有

$$\exp\left(\frac{U\Delta_t}{2}\right) = I + \frac{U\Delta_t}{2}, \quad \exp(V\Delta_t) = I + V\Delta_t \quad (1.13)$$

这里， I 是单位矩阵。

因此，方程 (1.12) 可以重写为

$$\exp(\Delta_t(U+V)) = \left(I + \frac{U\Delta_t}{2}\right) \cdot (I + V\Delta_t) \cdot \left(I + \frac{U\Delta_t}{2}\right) + O(\Delta t^2) \quad (1.14)$$

将 (1.14) 式的首尾两项合并，并采用交错的时间步进，就得到了我们熟悉的蛙跳格式。该 2 阶蛙跳（交错）时间步进方法操作简单，且在每个时间步内只需要 1 次迭代。然而，该方法只有 2 阶精度。在长时间仿真条件下，有明显的误差积累。

(3) 无条件稳定算法（交替方向隐式时间步进法）[39, 40]

类似于式 (1.12)，我们也可以将 $\exp(\Delta_t(U+V))$ 写成如下的矩阵相乘形式

$$\exp(\Delta_t(U+V)) \approx \exp\left(\frac{V\Delta_t}{2}\right) \cdot \exp\left(\frac{U\Delta_t}{2}\right) \cdot \exp\left(\frac{U\Delta_t}{2}\right) \cdot \exp\left(\frac{V\Delta_t}{2}\right) \quad (1.15)$$

使用帕德（Padé）近似，我们有

$$\exp\left(\frac{V\Delta_t}{2}\right) = \frac{I}{I - (V\Delta_t)/2} \quad \exp\left(\frac{U\Delta_t}{2}\right) = \frac{I}{I - (U\Delta_t)/2} \quad (1.16)$$

结合上面的泰勒展开，因此方程 (1.15) 可以重写为

$$\exp(\Delta_t(U+V)) = \left(\frac{I}{I - (V\Delta_t)/2}\right) \cdot \left(I + \frac{U\Delta_t}{2}\right) \cdot \left(\frac{I}{I - (U\Delta_t)/2}\right) \cdot \left(I + \frac{V\Delta_t}{2}\right) + O(\Delta t^2) \quad (1.17)$$

该交替方向隐式时间步进法，可通过设置较大的时间步长和较小的空间步长，来模拟电小目标的电磁特性。然而，该方法需要矩阵求逆操作，因而在计算复杂度上的优势并不明显。且一旦设置了过大的稳定度常数 (CFL Number)，将会

产生明显的数值色散。

(4) 高阶辛积分方法[41]

使用高阶指数矩阵分解技术，这个精确的时间演化矩阵 $\exp(\Delta_t L)$ 可以被 m -级 p -阶的辛积分方法近似重构。其中，每一级时间步进被称为基本的“辛映射”。

$$\exp(\Delta_t(U+V)) = \prod_{l=1}^m \exp(d_l \Delta_t V) \exp(c_l \Delta_t U) + O(\Delta_t^{p+1}) \quad (1.18)$$

这里， c_l 和 d_l 为辛算子或辛传播子。

该高阶辛积分方法有高阶的数值精度和高稳定度，同龙格库塔法相比可节省内存，且没有幅度误差。但高精度和高稳定度的获得是以多级步进为代价的。

国内外学者在改进时间方向离散格式的同时，也在想方设法提出不同方案来逼近空间的一阶导数。

(1) 2 阶蛙跳（交错）差分[11]

$$\frac{\partial F}{\partial \delta} \Big|_{\delta=h\Delta_\delta} = \frac{F(h+1/2) - F(h-1/2)}{\Delta_\delta} + (\Delta_\delta^2) \quad \delta = x, y, z \quad h = i, j, k \quad (1.19)$$

这里， $F(h+1/2)$ 代表 F 在 $\delta = (h+1/2)\Delta_\delta$ 点处的场值， $\frac{\partial F}{\partial \delta} \Big|_{\delta=h\Delta_\delta}$ 代表 F 在 $\delta = h\Delta_\delta$ 点处的一阶导数值。

该 2 阶蛙跳（交错）差分方法，计算量低，操作简单，具有天然的并行特点。同时，其易和局部亚网格（Subgridding）技术[42]或局部共形网格（Conformal Grid）技术[43]相结合，能有效地解决金属曲面和非均匀材质的电磁建模问题。然而，在电大目标或长时间电磁仿真中，该方法会产生严重的数值色散现象。因此，为了能够精确模拟目标的电磁特性，必须采用精细的空间网格，这必将耗费大量的计算机资源。

(2) 4 阶交错差分方法[44-46]

$$\frac{\partial F}{\partial \delta} \Big|_{\delta=h\Delta_\delta} = \frac{9}{8} \times \frac{F(h+1/2) - F(h-1/2)}{\Delta_\delta} - \frac{1}{24} \times \frac{F(h+3/2) - F(h-3/2)}{\Delta_\delta} + (\Delta_\delta^4) \quad (1.20)$$

该 4 阶交错差分方法，具有低的数值色散性，在电大目标仿真中有潜在的优势。其主要的缺点有二：一方面，它的稳定度低，因此空间的高阶收敛率必须在

小的时间步长条件下才能维持；另一方面，高阶差分难于处理非均匀边界，有时甚至不及传统 2 阶差分的精度。

(3) 4 阶隐式紧差分方法[36, 37]

$$\frac{\frac{\partial F}{\partial \delta}|_{\delta=(h+1)\Delta_\delta} - \frac{\partial F}{\partial \delta}|_{\delta=(h-1)\Delta_\delta}}{24} + \frac{11}{12} \frac{\partial F}{\partial \delta}|_{\delta=h\Delta_\delta} = \frac{F(h+1/2) - F(h-1/2)}{\Delta_\delta} + (\Delta_\delta^4) \quad (1.21)$$

该 4 阶隐式紧差分方法，其数值精度高于 4 阶交错差分，而且在边界处理上保持了 2 阶差分的优势。不幸的是，该隐式方法在每个时间步需要求解三对角稀疏矩阵方程，也就降低了计算效率。

(4) 多分辨率扩展方法[47]

$$\left(\frac{\partial F}{\partial \delta}\right)_h \approx \frac{1}{\Delta_\delta} \int \psi_h(\delta) \frac{\partial \psi_{h'+1/2}(\delta)}{\partial \delta} F_{h'+1/2} d\delta \quad (1.22)$$

这里， $\left(\frac{\partial F}{\partial \delta}\right)_h$ 代表 F 沿 δ 方向的导数值序列， ψ 是尺度函数， $F_{h'+1/2}$ 代表 F 在交错网格上的采样序列。

该多分辨率扩展方法，进一步降低了每波长的采样点数，可节省大量的内存和 CPU 时间。但该算法的稳定度很低，且必需采用多镜像技术[48]来处理金属曲面边界、不同介质分界面、和完全匹配层吸收边界，空间精度很难保证。

(5) 伪谱近似方法[49]

$$\left(\frac{\partial F}{\partial \delta}\right)_h \approx \frac{2\pi}{N_\delta \Delta_\delta} \text{fft}_\delta^{-1}[j_0 h \cdot \text{fft}_\delta(F_h)] \quad (1.23)$$

这里， fft 和 fft^{-1} 分别表示快速傅里叶正变换和快速傅里叶反变换， F_h 代表 F 在同位 (Collocated) 网格上的采样序列， N 是采样点数， j_0 是虚部单位。

该伪谱近似方法，使用低的空间采样率来降低计算复杂度，且数值色散随采样点数的增加以指数速率衰减。但该方法受吉布斯 (Gibbs) 效应的影响，和几乎所有高阶方法一样，很难有效解决非均匀边界的电磁建模问题。

依作者所见，一个针对麦克斯韦方程的稳定、精确、快速、低耗的时域解决方案，可从以下几个方面予以考虑：

第一，提出新的方法来逼近时间演化矩阵或空间一阶导数。例如，高阶辛积分算法，采用了高阶指数矩阵分解技术和泰勒展开相结合的方法来逼近时间演化

矩阵。而交替方向隐式算法,则采用了低阶指数矩阵分解技术,且交替使用了泰勒展开和帕德展开。又例如,多分辨率扩展方法和伪谱方法,则分别采用了小波变换和傅里叶变换的思路来逼近空间一阶导数。

第二,采用新的技术来改进上述方法。例如,一系列边界处理方法的提出,包括一侧导数(One-Sided Difference)法[44]、混合亚网格(Hybrid Subgridding)法[50]、空间滤波(Spatial Filtering)法[37],部分解决了4阶交错差分中非均匀边界的建模问题。又例如,多镜像原理的提出,也部分解决了多分辨率扩展算法的边界处理问题。

第三,将上面提及的空间方案和时间方案有效结合。例如,4阶龙格库塔法和多分辨率扩展法的结合,或许就有良好的数值结果。又例如,高阶辛积分法和4阶交错差分法的结合,也是值得我们研究的对象。

第四,混合(Hybrid)时域技术是新的机会和挑战[51]。例如,时域有限差分法和时域有限体积法或时域有限元法的混合[32-33, 35]是一个具有挑战性的课题。又例如,时域离散迦略金(Discontinuous Galerkin)方法[52]和时域有限差分法的混合或许是将来的一个研究方向。

本文围绕上述第二点和第三点开展工作,建立高效的时域解决方案,以此达到快速度、低内存、高精度的电磁仿真目标。

§1.4. 本论文所做的工作

本论文的研究和创新工作主要包括以下几个方面的内容:

(1) 回顾了麦克斯韦方程的时域解决方案,分析了各种方案的思路和特点,提出了今后的改进方向和发展趋势。

(2) 探讨了自由空间麦克斯韦方程的辛性质,证明了其时间演化矩阵是辛矩阵,且该矩阵保持了电磁场的能量守恒性,建立了麦克斯韦方程、离散方式、网格、空间拓扑之间的内在联系。

(3) 采用空间4阶交错差分和时间高阶辛积分,离散化麦克斯韦方程,给出了高阶辛时域有限差分法的基本迭代公式,分析了高阶辛算法的数值稳定性和色散性。引入了时间可逆辛算子和对称辛算子,推导了辛算子的阶数条件,提出了可行的优化方案。

(4) 对比了各种时域高阶算法的数值稳定性和数值色散性,证明了高阶辛

算法在长时间仿真、能量守恒、数值精度等方面的优势。提出了新的“平均稳定度”标准,指出只有高阶时间算法和高阶空间算法相结合才能成为优化的时域解决方案。

(5) 研究了高阶辛时域有限差分法中的三大关键技术:高阶总场散射场分离、高阶完全匹配层、高阶近远场变换。为了显示高阶技术较传统低阶技术的优势,测试了具有代表性的数值算例。此外,采用上述三大高阶技术,分析了单体、多体、及包层体的电磁散射问题。

(6) 基于广义安培定理和广义法拉第定理,一方面,提出了高阶子网格模型解决材质不连续性问题,另一方面,提出了高阶共形网格模型解决金属曲面的电磁建模问题。同其它相关的低阶模型和高阶模型相比,我们提出的模型在近场和远场电磁仿真中均有优势,且通过数值分析证明了新的高阶模型能节省大量的计算机资源。

(7) 将高阶辛时域有限差分法应用于波导仿真。为了充分激励高次模,采用了电磁流混合激励的方法;为了吸收消失波,将渐变的介电常数和磁导率引入高阶完全匹配层;为了节省散射参数的抽取时间,将微分方法推广到高阶。通过高阶辛算法和这些方法的结合,对波导谐振器、不连续性、光子带隙结构进行了仿真,获得了令人满意的数值结果。

参考文献

- [1] W. T. Welford. Geometrical Optics[M]. Holland: North-Holland Publishing Company, 1962.
- [2] M. Kline and I. W. Kay. Electromagnetic Theory and Geometrical Optics[M]. New York: Interscience Publishers, 1965.
- [3] M. S. Narasimhan, P. Ramanujam, and K. Raghavan. GTD analysis of near-field and far-field patterns of a parabolic subreflector illuminated by a plane wave[J]. IEEE Transactions on Antennas and Propagation, 1981, AP-29(4):654-660.
- [4] 阮颖铮. 复射线理论及其应用[M]. 北京: 电子工业出版社, 1991.
- [5] M. Martinez-Burdalo, A. Martin, and R. Villar. Uniform PO and PTD solution for calculating plane wave backscattering from a finite cylindrical shell of arbitrary cross section[J]. IEEE Transactions on Antennas and Propagation, 1993, 41(9):1336-1339.
- [6] 汪茂光. 几何绕射理论[M]. 西安: 西安电子科技大学出版社, 1994.
- [7] 阮颖铮. 雷达散射截面与隐身技术[M]. 北京: 国防工业出版社, 1998.
- [8] F. Weinmann. Ray tracing with PO/PTD for RCS modeling of large complex objects[J]. IEEE Transactions on Antennas and Propagation, 2006, 54(6):1797-1806.
- [9] W. C. Chew and J. M. Jin. Fast and Efficient Algorithms in Computational Electromagnetics [M]. Boston: Artech House, 2001.
- [10] M. F. Levy. Parabolic Equation Methods for Electromagnetic Wave Propagation[M]. London:

- IEE Press, 2000.
- [11] K. S. Yee. Numerical solution of initial boundary value problems involving Maxwell's equations in isotropic media[J]. IEEE Transactions on Antennas and Propagation, 1966, 14(3):302-307.
- [12] 王长清, 祝西里. 电磁场计算中的时域有限差分方法[M]. 北京: 北京大学出版社, 1994.
- [13] A. Taflov. Computational Electrodynamics: the Finite-Difference Time-Domain Method[M]. Norwood, MA: Artech House, 1995.
- [14] D. M. Sullivan. Electromagnetic Simulation Using the FDTD Method[M]. New York: IEEE Press, 2000.
- [15] 王秉中. 计算电磁学[M]. 北京: 科学出版社, 2002.
- [16] 葛德彪, 闫玉波. 电磁波时域有限差分方法[M]. 西安: 西安电子科技大学, 2005.
- [17] V. Shankar, A. H. Mohammadian, and W. F. Hall. A time-domain, finite-volume treatment for the Maxwell equations[J]. Electromagnetics, 1990, 10(1-2):127-145.
- [18] J. M. Jin. The Finite Element Method in Electromagnetics[M]. New York: Wiley-IEEE Press, 1993.
- [19] J. F. Lee, R. Lee, and A. Cangellaris. Time-domain finite-element methods[J]. IEEE Transactions on Antennas and Propagation, 1997, 45(3):430-442.
- [20] R. F. Harrington. Field Computation by Moment Methods[M]. New York: Macmillan, 1968.
- [21] S. M. Rao, D. R. Wilton, and A. W. Glisson. Electromagnetic scattering by surface of arbitrary shape[J]. IEEE Transactions on Antennas and Propagation, 1982, AP-30(3):409-418.
- [22] V. Rokhlin. Rapid solution of integral-equations of scattering-theory in 2 dimensions[J]. Journal of Computational Physics, 1990, 86(2):414-439.
- [23] N. Engheta, W. D. Murphy, V. Rokhlin, and M. S. Vassiliou. The fast multipole method (FMM) for electromagnetic scattering problems[J]. IEEE Transactions on Antennas and Propagation, 1992, 40(6):634-641.
- [24] J. M. Song and W. C. Chew. Multilevel fast-multipole algorithm for solving combined field integral equations of electromagnetic scattering[J]. Microwave and Optical Technology Letters, 1995, 10(1):14-19.
- [25] T. K. Sarkar, E. Arvas, and S. M. Rao. Application of FFT and the conjugate gradient method for the solution of electromagnetic radiation from electrically large and small conducting bodies[J]. IEEE Transactions on Antennas and Propagation, 1986, AP-34(5):635-640.
- [26] Z. B. Steinberg and Y. Leviatan. On the use of wavelet expansions in the method of moments[J]. IEEE Transactions on Antennas and Propagation, 1993, 41(5):610-619.
- [27] R. L. Wagner and W. C. Chew. Study of wavelets for the solution of electromagnetic integral equations[J]. IEEE Transactions on Antennas and Propagation, 1995, 43(8):802-810.
- [28] C. H. Chan and L. Tsang. A sparse-matrix canonical-grid method for scattering by many scatterers[J]. Microwave and Optical Technology Letters, 1995, 8(2):114-118.
- [29] E. Bleszynski, M. Bleszynski, and T. Jaroszewicz. AIM: adaptive integral method for solving large-scale electromagnetic scattering and radiation problems[J]. Radio Science, 1996, 31(5):1225-1251.
- [30] S. M. Rao and T. K. Sarkar. An alternative version of the time-domain electric-field integral-equation for arbitrarily-shaped conductors[J]. IEEE Transactions on Antennas and Propagation, 1993, 41(6):831-834.
- [31] S. M. Rao. Time Domain Electromagnetics[M]. New York: Academic Press, 1999.

- [32] F. Edelvik and G. Ledfelt. A comparison of time-domain hybrid solvers for complex scattering problems[J]. *International Journal of Numerical Modelling-Electronic Networks Devices and Fields*, 2002, 15(5-6):475-487.
- [33] T. Rylander and A. Bondeson. Stable FEM-FDTD hybrid method for Maxwell's equations[J]. *Computer Physics Communications*, 2000, 125(1-3):75-82.
- [34] 盛新庆. 计算电磁学要论[M]. 北京: 中国科学出版社, 2004.
- [35] A. Monorchio, A. R. Bretones, R. Mittra, G. Manara, and R. G. Martin. A hybrid time-domain technique that combines the finite element, finite difference and method of moment techniques to solve complex electromagnetic problems[J]. *IEEE Transactions on Antennas and Propagation*, 2004, 52(10):2666-2674.
- [36] J. L. Young, D. Gaitonde, and J. S. Shang. Toward the construction of a fourth-order difference scheme for transient EM wave simulation: staggered grid approach[J]. *IEEE Transactions on Antennas and Propagation*, 1997, 45(11):1573-1580.
- [37] J. S. Shang. High-order compact-difference schemes for time-dependent Maxwell equations[J]. *Journal of Computational Physics*, 1999, 153(2):312-333.
- [38] A. Taflove, etc. *Advances in Computational Electrodynamics: The Finite-Difference Time-Domain Method*[M]. Norwood, MA: Artech House, 1998.
- [39] T. Namiki. New FDTD algorithm based on alternating-direction implicit method[J]. *IEEE Transactions on Microwave Theory and Techniques*, 1999, 47(10):2003-2007.
- [40] F. H. Zhen, Z. Z. Chen, and J. Z. Zhang. Toward the development of a three-dimensional unconditionally stable finite-difference time-domain method[J]. *IEEE Transactions on Microwave Theory and Techniques*, 2000, 48:1550-1558.
- [41] T. Hirono, W. Lui, S. Seki, and Y. Yoshikuni. A three-dimensional fourth-order finite-difference time-domain scheme using a symplectic integrator propagator[J]. *IEEE Transactions on Microwave Theory and Techniques*, 2001, 49(9):1640-1648.
- [42] M. Okoniewski, E. Okoniewska, and M. A. Stuchly. Three-dimensional subgridding algorithm for FDTD[J]. *IEEE Transactions on Antennas and Propagation*, 1997, 45(3):422-429.
- [43] S. Dey and R. Mittra. A locally conformal finite-difference time-domain algorithm for modeling three-dimensional perfectly conducting objects[J]. *IEEE Microwave and Guided Wave Letters*, 1997, 7(9):273-275.
- [44] A. Yefet and P. G. Petropoulos. A staggered fourth-order accurate explicit finite difference scheme for the time-domain Maxwell's equations[J]. *Journal of Computational Physics*, 2001, 168(2):286-315.
- [45] S. V. Georgakopoulos, C. R. Birtcher, C. A. Balanis, and R. A. Renaut. Higher-order finite-difference schemes for electromagnetic radiation, scattering, and penetration, Part I: Theory[J]. *IEEE Antennas and Propagation Magazine*, 2002, 44(1):134-142.
- [46] S. V. Georgakopoulos, C. R. Birtcher, C. A. Balanis, and R. A. Renaut. Higher-order finite-difference schemes for electromagnetic radiation, scattering, and penetration, Part 2: Applications[J]. *IEEE Antennas and Propagation Magazine*, 2002, 44(2):92-101.
- [47] M. Krumpholz and L. P. B. Katehi. MRTD: new time-domain schemes based on multiresolution analysis[J]. *IEEE Transactions on Microwave Theory and Techniques*, 1996, 44(4):555-571.
- [48] Q. S. Cao, Y. C. Chen, and R. Mittra. Multiple image technique (MIT) and anisotropic perfectly matched layer (APML) in implementation of MRTD scheme for boundary truncations of

- microwave structures[J]. IEEE Transactions on Microwave Theory and Techniques, 2002, 50(6):1578-1589.
- [49] Q. H. Liu. PSTD algorithm: A time-domain method requiring only two cells per wavelength[J]. Microwave and Optical Technology Letters, 1997, 15(3):158-165.
- [50] S. V. Georgakopoulos, C. R. Birtcher, C. A. Balanis, and R. A. Renaut. HIRF penetration and PED coupling analysis for scaled fuselage models using a hybrid subgrid FDTD(2,2)/FDTD(2,4) method[J]. IEEE Transactions on Electromagnetic Compatibility, 2003, 45(2):293-305.
- [51] 刘波, 高本庆. 电磁场时域数值技术新进展[J]. 北京理工大学学报, 2002, 22(4):401-406.
- [52] T. Lu, W. Cai, and P. W. Zhang. Discontinuous Galerkin time-domain method for GPR simulation in dispersive media[J]. IEEE Transactions on Geoscience and Remote Sensing, 2005, 43(1):72-80.

第二章 麦克斯韦方程的辛性质

§2.1. 引言

在经典物理、化学、机械、几何光学中一切非耗散的现象均可表示成哈密尔顿微分方程的形式。怎样能找出优秀的数值算法，精确地刻画其解的行为成为数学家、物理学家和工程学家共同关注的问题。冯康教授指出：哈密尔顿微分方程的时间步进本质上是辛变换，其流保持了系统的辛结构[1, 2]。因此精确描述该系统的数值方法也必然是辛算法。同其它的一些非辛方法相比（如龙格库塔法）[3]，辛算法更好地保持了哈密尔顿系统的辛变换性质，其在全局性、结构性、长时间仿真中有明显的优势。对哈密尔顿系统生成函数的研究、对辛几何理论的研究、对辛算法的研究已经持续了长达半个世纪之久，其间的论文和著作对科学和工程领域已经产生了巨大的影响[2, 4, 5]。

对哈密尔顿函数的研究，已经从可分的系统拓展到不可分的系统[6-8]，从有限维的系统拓展到无限维的系统[9-11]，从普通的常微分方程拓展到偏微分方程[11, 12]；对辛几何理论的研究从实数域被推广到复数域[13]，其相关的微分流形、群论、李代数等分支也得到了飞速发展；对辛算法的研究主要有辛龙格库塔法[14]、辛分块龙格库塔法[15]、显式多级辛算法[16-19]、及最近的多辛算法[20, 21]等等。

麦克斯韦方程可以写成相空间无限维的哈密尔顿系统。因此，对其离散化的方法应该在辛框架内产生。国内外学者先后对高阶辛时域有限差分法[22]、辛有限元方法[23]、辛紧差分方法[24]、辛伪谱方法[25]、辛波动方程法[26]进行了探索式的研究。从电磁传播、透射、散射的数值结果看，辛算法在时域电磁仿真中显示了初步的优势。然而，对麦克斯韦方程辛性质的理论研究和严格的数学证明，却未见太多报道。

本章首先回顾了实空间和复空间内的辛内积、辛空间、辛变换和辛矩阵的理论背景；其次介绍了哈密尔顿系统的基本知识，指出了其与辛变换和辛结构的联系；最后证明了麦克斯韦微分方程的时间演化矩阵是辛矩阵，并探讨了在时空离散后该演化矩阵的性态变化。

§2.2. 预备知识

§2.2.1. 线性空间、欧氏空间、酉空间

定义1 线性空间[27]。设 Ω 是一个非空集合， D 是一个数域，在集合 Ω 的元素之间定义了加法运算。即对于 Ω 中任意两个元素 a 与 b ，在 Ω 中有唯一的元素 c 与它们对应，称之为 a 与 b 的和，记为 $c = a + b$ 。且加法运算，满足下面四条法则

$$(1) \text{ 交换律 } a + b = b + a$$

$$(2) \text{ 结合律 } a + (b + c) = (a + b) + c$$

(3) 零元素 在 Ω 中有一元素 0 （称为零元素），对于 Ω 中任意元素 a 都有 $a + 0 = a$

(4) 负元素 对于 Ω 中每一个元素 a ，都有 Ω 的元素 b ，使得 $a + b = 0$

在集合 Ω 的元素与数域 D 的数之间还定义了一种运算，叫数乘。即对于 Ω 中任一元素 a 与数域 D 中任一数 g ，在 Ω 中有唯一的一个元素 e 与它们对应，称为 a 与 g 的数乘积，记为 $e = ga$ ，并且数乘运算满足下面四条法则

$$(1) 1 \cdot a = a$$

$$(2) g(oa) = (go)a$$

$$(3) (g + o)a = ga + oa$$

$$(4) g(a + b) = ga + gb$$

其中 g, o 表示数域 D 中的任意数， a, b 表示 Ω 中的任意元素。称这样的 Ω 为数域 D 上的线性空间。

定义2 欧氏空间[27]。设 Ω 是实数域 R 上的 n 维线性空间，对 Ω 中的任意两个向量 a, b 依照一确定法则对应一个实数，这个实数称为内积，记作 (a, b) 。且要求内积运算满足下列四个条件

$$(1) (a, b) = (b, a)$$

$$(2) (ga, b) = g(a, b), \quad g \text{ 为任意实数}$$

$$(3) (a+b, c) = (a, c) + (b, c)$$

$$(4) (a, a) \geq 0, \text{ 当且仅当 } a = 0 \text{ 时, } (a, a) = 0$$

这里, a, b, c 是 Ω 中任意向量。称定义有这样内积的 n 维线性空间 Ω 为 n 维欧氏空间。

定义3 酉空间[27]。设 Ω 是复数域 C 上的 n 维线性空间, 对 Ω 中的任意两个向量 x^0, y^0 依照一确定法则对应一个复数, 这个复数称为内积, 记作 (x^0, y^0) 。

且要求内积运算满足下列四个条件

$$(1) (x^0, y^0) = \overline{(y^0, x^0)}, \quad \overline{(y^0, x^0)} \text{ 是 } (x^0, y^0) \text{ 的共轭复数}$$

$$(2) (g^0 x^0, y^0) = g^0 (x^0, y^0), \quad g^0 \text{ 为任意复数}$$

$$(3) (x^0 + y^0, z^0) = (x^0, z^0) + (y^0, z^0)$$

$$(4) (x^0, x^0) \text{ 为非负实数, 当且仅当 } x^0 = 0 \text{ 时, } (x^0, x^0) = 0。$$

这里, x^0, y^0, z^0 是 Ω 中任意向量。称定义有这样内积的 n 维线性空间 Ω 为 n 维酉空间。

§2.2.2. 辛内积、辛空间、辛变换、辛矩阵

定义1 实辛内积[2, 5, 28]。对于 n 维酉空间中任意向量 $x^0 = (x_1, x_2, \dots, x_n)$ 和 $y^0 = (y_1, y_2, \dots, y_n)$, 因为 $x_k \in C, y_k \in C$, 所以我们有 $x_k = a_k + j_0 b_k$, $y_k = c_k + j_0 d_k$ 。采用酉空间标准的Hermite内积

$$(x^0, y^0) = \sum_{k=1}^n x_k \bar{y}_k = \sum_{k=1}^n (a_k + j_0 b_k)(c_k - j_0 d_k) = \sum_{k=1}^n (a_k c_k + b_k d_k) - j_0 \sum_{k=1}^n (a_k d_k - b_k c_k)$$

可以看出 (x^0, y^0) 的实部就是 R_{2n} 中向量 $p_{2n}^0 = (a_1, a_2, \dots, a_n, b_1, b_2, \dots, b_n)$ 和 $q_{2n}^0 = (c_1, c_2, \dots, c_n, d_1, d_2, \dots, d_n)$ 的欧氏内积。而 (x^0, y^0) 的虚部可以看成是一种新的内积, 我们称这种内积为 R_{2n} 中的标准实辛内积。其定义为

$$\varpi(p^0, q^0) = \sum_{k=1}^n (a_k d_k - b_k c_k) = p^0 J (q^0)^T \quad (2.1)$$

这里, $J = \begin{bmatrix} \{0\}_{n \times n} & I_{n \times n} \\ -I_{n \times n} & \{0\}_{n \times n} \end{bmatrix}_{2n \times 2n}$, 满足反对称关系和正交关系 $J = -J^T$,

$$J^{-1} = J^T = -J.$$

R_{2n} 中的实辛内积有下列性质

- (1) 双线性 $\varpi(p^0 + q^0, r^0 + s^0) = \varpi(p^0, r^0) + \varpi(p^0, s^0) + \varpi(q^0, r^0) + \varpi(q^0, s^0)$,
 $\varpi(\lambda p^0, \eta q^0) = \lambda \eta \varpi(p^0, q^0)$, $r^0, s^0 \in R_{2n}$, $\lambda, \eta \in R$;
- (2) 反对称 $\varpi(p^0, q^0) = -\varpi(q^0, p^0)$;
- (3) 非退化 $\forall q^0 \neq 0, \exists p^0, \varpi(p^0, q^0) = 0 \Rightarrow p^0 = 0$.

定义2 实辛空间和实辛结构[2, 5, 28]。设 Ω 是 $2n$ 维实向量空间中的子空间, 映射 $\varpi: \Omega \times \Omega \rightarrow R$ 满足上述实辛内积的性质, 我们称 (Ω, ϖ) 为实辛空间, 称 ϖ 为实辛结构。

定义3 实辛变换[2, 5, 28]。如果实空间 Ω 中的线性变换 $T_l: \Omega \rightarrow \Omega$ 满足: 对 $\forall p^0, q^0 \in \Omega$, 均有 $\varpi(T_l p^0, T_l q^0) = \varpi(p^0, q^0)$, 则称 T_l 为实辛变换, 即实辛变换保持两向量的实辛内积不变。实空间上的线性变换 T_l 是实辛变换的充要条件为:
 $T_l^T J T_l = J$ 。

定义4 实辛矩阵[2, 5, 28]。如果 $2n$ 阶实矩阵 B 满足 $B^T J B = J$, 则称 B 为实辛矩阵。实辛矩阵的全体构成一个群, 称为实辛群, 记为 $Sp(2n, R)$ 。如果一个矩阵 B 是实辛矩阵, 即 $B \in Sp(2n, R)$, 则它的行列式 $\det B = 1$ [29]。

定义5 无穷小实辛矩阵[2, 5, 28]。如果 $2n$ 阶实矩阵 B 满足 $B^T J + J B = 0$, 则称 B 为无穷小实辛矩阵。无穷小实辛矩阵可以构成由泊松括号 (Poisson Bracket) 定义的李代数, 即 $[A, B] = AB - BA$ 。无穷小实辛矩阵的指数变换 $\exp(B)$ 是实辛矩阵。

上述所有的定义和结论可以推广到复空间[13, 30]。

定义6 复辛内积。对 C_{2n} 中向量 p_{2n}^0, q_{2n}^0 , 标准复辛内积的定义

$$\varpi(p^0, q^0) = p^0 J(q^0)^H \quad (2.2)$$

这里, H 代表复共轭转置或伴随 (Adjoint)。

复辛内积有如下性质

(1) 共轭双线性

$$\varpi(p^0 + q^0, r^0 + s^0) = \varpi(p^0, r^0) + \varpi(p^0, s^0) + \varpi(q^0, r^0) + \varpi(q^0, s^0),$$

$$\varpi(\lambda p^0, \eta q^0) = \lambda \bar{\eta} \varpi(p^0, q^0), \quad r^0, s^0 \in C_{2n}, \quad \lambda, \eta \in C;$$

(2) 反厄密 (Skew-Hermitian) $\varpi(p^0, q^0) = -\overline{\varpi(q^0, p^0)}$;

(3) 非退化 $\forall q^0 \neq 0, \exists p^0, \varpi(p^0, q^0) = 0 \Rightarrow p^0 = 0$ 。

定义 7 复辛空间和复辛结构。设 Ω 是 $2n$ 维复向量空间中的子空间, 映射 $\varpi: \Omega \times \Omega \rightarrow C$ 满足上述复辛内积的性质, 我们称 (Ω, ϖ) 为复辛空间, 称 ϖ 为复辛结构。

定义 8 复辛变换。如果复空间 Ω 中的线性变换 $T_l: \Omega \rightarrow \Omega$ 满足: 对 $\forall p^0, q^0 \in \Omega$, 均有 $\varpi(T_l p^0, T_l q^0) = \varpi(p^0, q^0)$, 则称 T_l 为复辛变换, 即复辛变换保持两向量的复辛内积不变。复空间上的线性变换 T_l 是复辛变换的充要条件为:

$$T_l^H J T_l = J.$$

定义 9 复辛矩阵。如果 $2n$ 阶复矩阵 B 满足 $B^H J B = J$, 则称 B 为复辛矩阵。复辛矩阵的全体构成一个群, 称为复辛群, 记为 $Sp(2n, C)$ 。如果一个矩阵 B 是复辛矩阵, 即 $B \in Sp(2n, C)$, 则它的行列式 $\det B = 1$ [29]。

定义 10 无穷小复辛矩阵。如果 $2n$ 阶复矩阵 B 满足 $B^H J + J B = 0$, 则称 B 为无穷小复辛矩阵。无穷小复辛矩阵可以构成由泊松括号定义的李代数, 即 $[A, B] = AB - BA$ 。无穷小复辛矩阵的指数变换 $\exp(B)$ 是复辛矩阵。

§2.2.3. 哈密尔顿系统和辛变换

对于 $\Omega \subseteq R_{2n}$ 中的点 $(p^0, q^0) = (p_1, p_2, \dots, p_n, q_1, q_2, \dots, q_n)$, 实轴开区间 I 内的时间变量 t_0 , 其哈密尔顿函数 $\Xi(p^0, q^0, t_0)$ 的正则方程 [2, 4] 为:

$$\frac{dp_i}{dt_0} = -\frac{\partial \Xi}{\partial q_i}, \quad \frac{dq_i}{dt_0} = +\frac{\partial \Xi}{\partial p_i}, \quad i = 1, 2, \dots, n \quad (2.3)$$

这里, n 称为自由度, Ω 为相空间, $\Omega \times I$ 为增广相空间 (Extended Phase Space)。

令 $Z = (p^0, q^0)$, 则上式可写成

$$\frac{dZ}{dt} = J^{-1} \nabla \Xi \quad (2.4)$$

这里, $\nabla = (\partial/\partial p_1, \partial/\partial p_2, \dots, \partial/\partial p_n, \partial/\partial q_1, \partial/\partial q_2, \dots, \partial/\partial q_n)$, 为梯度算子。

设初始时刻 t_0 的相空间 (p^0, q^0) , 任意 t_* 时刻的相空间 (p^*, q^*) 。为了使 (p^*, q^*) 仍满足哈密顿函数 (2.3) 的形式, 其充分必要条件是雅可比矩阵

$$\Theta = \frac{\partial(p^*, q^*)}{\partial(p^0, q^0)} = \begin{pmatrix} \partial p^*/\partial p^0 & \partial p^*/\partial q^0 \\ \partial q^*/\partial p^0 & \partial q^*/\partial q^0 \end{pmatrix} \text{ 是辛变换或辛矩阵, 即}$$

$$\Theta^T J \Theta = J \quad (2.5)$$

将 (2.5) 展开, 我们有 $\frac{\partial p^*}{\partial p^0} \frac{\partial q^*}{\partial q^0} - \frac{\partial p^*}{\partial q^0} \frac{\partial q^*}{\partial p^0} = 1$, 即 $\left| \frac{\partial(p^*, q^*)}{\partial(p^0, q^0)} \right| = 1$ 。这就是哈密

顿系统相流的面积或体积守恒性。在物理实质上, 也就是能量守恒性。

定义式 (2.3) 的解算子为 $\Psi(t_*, t_0)$, 即

$$(p^*, q^*) = \Psi(t_*, t_0)(p^0, q^0) \quad (2.6)$$

这里, $\Psi(t_*, t_0)$ 称为哈密顿流或辛流, 满足半群关系

$$\Psi(t_2, t_0) = \Psi(t_2, t_1) \Psi(t_1, t_0)。$$

若定义 $TM^0 = (\frac{\partial}{\partial p^0}, \frac{\partial}{\partial q^0})$ 为 t_0 时刻的切空间, $TM^* = (\frac{\partial}{\partial p^*}, \frac{\partial}{\partial q^*})$ 为 t_* 时刻的

切空间, 则哈密顿函数 $\Xi(p^0, q^0, t_0)$ 和 $\Xi(p^*, q^*, t_*)$ 可看作两个切空间 TM^0 和

TM^* 所定义微分流形。因此, 称 $\Psi(t_*, t_0)$ 是 $TM^0 \rightarrow TM^*$ 的辛映射。我们知道,

TM^0 和 TM^* 的共轭 (对偶) 空间分别为二阶外微分形式 $\varpi^0 = dp^0 \wedge dq^0$ 和

$\varpi^* = dp^* \wedge dq^*$ 。因此, 从共轭空间的角度看, 辛流 $\Psi(t_*, t_0)$ 保持了哈密顿系统的

辛结构 [2, 4], 即

$$\Psi(t_*, t_0)^* \varpi^* = \varpi^0 \quad (2.7)$$

换句话说, $\Psi(t_*, t_0)$ 的共轭算子 $\Psi(t_*, t_0)^*$ 是 $\omega^* \rightarrow \omega^0$ 的保辛映射。

§2.3. 麦克斯韦方程、空间网格和辛矩阵

§2.3.1. 重要的 3 个定理

$$\text{定理1} \quad \text{矩阵 } L = \begin{bmatrix} \{0\}_{n \times n} & A_{n \times n} \\ -A_{n \times n} & \{0\}_{n \times n} \end{bmatrix}_{2n \times 2n}, \text{ 则 } \exp(L) = \begin{bmatrix} \cos(A) & \sin(A) \\ -\sin(A) & \cos(A) \end{bmatrix}.$$

证明:

使用矩阵幂级数展开技术[27]

$$\exp(L) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{L^n}{n!} \quad (2.8)$$

当 $n = 2N, N = 0, 1, 2, 3, \dots$ 时, 我们有

$$L^{2N} = \begin{pmatrix} (-1)^N A^{2N} & 0 \\ 0 & (-1)^N A^{2N} \end{pmatrix} \quad (2.9)$$

当 $n = 2N + 1, N = 0, 1, 2, 3, \dots$ 时, 我们有

$$L^{2N+1} = \begin{pmatrix} 0 & (-1)^N A^{2N+1} \\ -(-1)^N A^{2N+1} & 0 \end{pmatrix} \quad (2.10)$$

综合上面两种情况, 我们可以得到

$$\exp(L) = \begin{pmatrix} \sum_{N=0}^{\infty} \frac{(-1)^N A^{2N}}{(2N)!} & \sum_{N=0}^{\infty} \frac{(-1)^N A^{2N+1}}{(2N+1)!} \\ -\sum_{N=0}^{\infty} \frac{(-1)^N A^{2N+1}}{(2N+1)!} & \sum_{N=0}^{\infty} \frac{(-1)^N A^{2N}}{(2N)!} \end{pmatrix} \quad (2.11)$$

我们注意到

$$\cos(A) = \sum_{N=0}^{\infty} \frac{(-1)^N A^{2N}}{(2N)!} \quad (2.12)$$

$$\sin(A) = \sum_{N=0}^{\infty} \frac{(-1)^N A^{2N+1}}{(2N+1)!} \quad (2.13)$$

因此, $\exp(L)$ 可以重写为

$$\exp(L) = \begin{pmatrix} \cos(A) & \sin(A) \\ -\sin(A) & \cos(A) \end{pmatrix} \quad (2.14)$$

定理2 对矩阵 $L = \begin{bmatrix} \{0\}_{n \times n} & A_{n \times n} \\ -A_{n \times n} & \{0\}_{n \times n} \end{bmatrix}_{2n \times 2n}$, 若 $A = A^T$, 则我们有: (1) L 是对称矩阵, 即 $L = -L^T$; (2) $\exp(L)$ 即为实辛矩阵, 又为正交矩阵, 称为辛正交矩阵。

(1) 很容易证明, 接下来我们证明 (2)。

利用 $A^T = A$, 结合 (2.12-2.13), 我们有

$$(\cos(A))^T = \cos(A), \quad (\sin(A))^T = \sin(A) \quad (2.15)$$

又利用矩阵恒等式[27]

$$\cos^2(A) + \sin^2(A) = I \quad (2.16)$$

可证明 $\exp(L)$ 满足下面的正交条件和辛条件

$$\begin{aligned} & \exp(L) \exp(L)^T \\ &= \begin{pmatrix} \cos(A) & \sin(A) \\ -\sin(A) & \cos(A) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} (\cos(A))^T & -(\sin(A))^T \\ (\sin(A))^T & (\cos(A))^T \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} \cos(A) & \sin(A) \\ -\sin(A) & \cos(A) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \cos(A) & -\sin(A) \\ \sin(A) & \cos(A) \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} I_{n \times n} & \{0\}_{n \times n} \\ \{0\}_{n \times n} & I_{n \times n} \end{pmatrix} = I_{2n \times 2n} \end{aligned} \quad (2.17)$$

$$\begin{aligned} & (\exp(L))^T \begin{pmatrix} \{0\}_{n \times n} & I_{n \times n} \\ -I_{n \times n} & \{0\}_{n \times n} \end{pmatrix} \exp(L) \\ &= \begin{pmatrix} (\cos(A))^T & -(\sin(A))^T \\ (\sin(A))^T & (\cos(A))^T \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & I \\ -I & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \cos(A) & \sin(A) \\ -\sin(A) & \cos(A) \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} \cos(A) & -\sin(A) \\ \sin(A) & \cos(A) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & I \\ -I & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \cos(A) & \sin(A) \\ -\sin(A) & \cos(A) \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} \sin(A) & \cos(A) \\ -\cos(A) & \sin(A) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \cos(A) & \sin(A) \\ -\sin(A) & \cos(A) \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} \{0\}_{n \times n} & I_{n \times n} \\ -I_{n \times n} & \{0\}_{n \times n} \end{pmatrix} = J_{2n \times 2n} \end{aligned} \quad (2.18)$$

此外, 正交性的证明也可采用如下方法:

$$(\exp(L))^{-1} = \exp(-L) = \exp(L^T) = (\exp(L))^T \quad (2.19)$$

定理3 对矩阵 $L = \begin{bmatrix} \{0\}_{n \times n} & A_{n \times n} \\ -A_{n \times n} & \{0\}_{n \times n} \end{bmatrix}_{2n \times 2n}$, 若 $A = A^H$, 则我们有: (1) L 是厄密阵, 即 $L = -L^H$; (2) $\exp(L)$ 即为复辛矩阵, 又为酉矩阵, 称为辛酉矩阵。

证明: 根据 $A = A^H$, 采用定理2的方法, 将 (2.15, 2.17-2.19) 中的转置 T 改为 H 即可。

根据上述3个定理, 我们来研究自由空间的麦克斯韦方程的辛性质。

§2.3.2. 时间连续空间连续的麦克斯韦方程的辛性质

自由空间麦克斯韦方程的生成函数为 [31]

$$\Xi(\mathbf{H}, \mathbf{E}) = \frac{1}{2} \left(\frac{1}{\varepsilon_0} \mathbf{H} \cdot \nabla \times \mathbf{H} + \frac{1}{\mu_0} \mathbf{E} \cdot \nabla \times \mathbf{E} \right) \quad (2.20)$$

式 (2.20) 对应的哈密顿函数的微分形式为

$$\frac{\partial \mathbf{H}}{\partial t} = -\frac{\partial \Xi}{\partial \mathbf{E}}, \quad \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t} = +\frac{\partial \Xi}{\partial \mathbf{H}} \quad (2.21)$$

采用变分法, 由 (2.21) 可以推导出麦克斯韦旋度方程

$$\frac{\partial}{\partial t} \begin{pmatrix} \mathbf{H} \\ \hat{\mathbf{E}} \end{pmatrix} = L \begin{pmatrix} \mathbf{H} \\ \hat{\mathbf{E}} \end{pmatrix} \quad (2.22)$$

$$L = \begin{pmatrix} \{0\}_{3 \times 3} & -\frac{1}{\sqrt{\mu_0 \varepsilon_0}} \Re_{3 \times 3} \\ \frac{1}{\sqrt{\mu_0 \varepsilon_0}} \Re_{3 \times 3} & \{0\}_{3 \times 3} \end{pmatrix} \quad \hat{\mathbf{E}} = \sqrt{\frac{\varepsilon_0}{\mu_0}} \mathbf{E} \quad (2.23)$$

$$\Re = \begin{pmatrix} 0 & -\frac{\partial}{\partial z} & \frac{\partial}{\partial y} \\ \frac{\partial}{\partial z} & 0 & -\frac{\partial}{\partial x} \\ -\frac{\partial}{\partial y} & \frac{\partial}{\partial x} & 0 \end{pmatrix} = \nabla \times \quad (2.24)$$

式 (2.22) 从 $t = 0$ 到 $t = \Delta_t$ 的时间演化为

$$\begin{pmatrix} \mathbf{H} \\ \hat{\mathbf{E}} \end{pmatrix}(\Delta_t) = \exp(\Delta_t L) \begin{pmatrix} \mathbf{H} \\ \hat{\mathbf{E}} \end{pmatrix}(0) \quad (2.25)$$

这里, 我们称 $\exp(\Delta_t L)$ 为麦克斯韦方程的时间演化矩阵。实际上, 该时间演化矩

阵也就是麦克斯韦方程的辛流。

对于实空间中，定义内积

$$\langle F(t, \mathbf{r}), G(t, \mathbf{r}) \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} F(t, \mathbf{r}) \cdot G(t, \mathbf{r}) d\mathbf{r} \quad (2.26)$$

这里， $\mathbf{r} = x\mathbf{e}_x + y\mathbf{e}_y + z\mathbf{e}_z$ 为空间位置矢量。式(2.26)本质上是体积分，采用矢量的写法是为了简便。

在希尔伯特空间和定义分布的广义函数空间内，我们均有

$$\langle \frac{\partial}{\partial \delta} F, G \rangle = - \langle F, \frac{\partial}{\partial \delta} G \rangle, \quad \delta = x, y, z \quad (2.27)$$

上式说明 $\frac{\partial}{\partial \delta}$ 是一个反对称算子。因此，三维旋度算子 $\mathfrak{R}$ 是对称矩阵，即 $\mathfrak{R} = \mathfrak{R}^T$ 。

根据定理2，在实空间，麦克斯韦方程的时间演化矩阵是辛正交矩阵。

对于复空间中，定义内积

$$\langle F(t, \mathbf{r}), G(t, \mathbf{r}) \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} F(t, \mathbf{r}) \cdot \overline{G(t, \mathbf{r})} d\mathbf{r} \quad (2.28)$$

引入任意电磁场量 F 的傅里叶正变换和傅里叶逆变换

$$\tilde{F}(t, \mathbf{k}_0) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} F(t, \mathbf{r}) \exp(j_0 \mathbf{k}_0 \cdot \mathbf{r}) d\mathbf{r} \quad (2.29)$$

$$F(t, \mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \tilde{F}(t, \mathbf{k}_0) \exp(-j_0 \mathbf{k}_0 \cdot \mathbf{r}) d\mathbf{k}_0 \quad (2.30)$$

这里， $\mathbf{k}_0 = k_x \mathbf{e}_x + k_y \mathbf{e}_y + k_z \mathbf{e}_z$ 为空间波矢量。采用简化的算子定义，式(2.29-2.30)

可重写为

$$\tilde{F} = \phi F, \quad F = \phi^{-1} \tilde{F} \quad (2.31)$$

这里， ϕ 表示傅里叶正算子， ϕ^{-1} 表示傅里叶逆算子。

首先，根据帕斯维尔(Parseval)能量守恒定理

$$\langle \phi F(t, \mathbf{r}), \tilde{G}(t, \mathbf{k}_0) \rangle = \langle F(t, \mathbf{r}), \phi^{-1} \tilde{G}(t, \mathbf{k}_0) \rangle \quad (2.32)$$

结合伴随算子的定义，我们得到 $\phi^{-1} = \phi^H$ ，即傅里叶算子是酉算子。

其次，根据傅里叶变换的微分性质 $\frac{\partial F}{\partial \delta} \leftrightarrow -j_0 k_\delta \tilde{F}, \delta = x, y, z$ ，自由空间麦克斯韦旋度方程的谱域形式为

$$\frac{\partial}{\partial t} \begin{pmatrix} \tilde{\mathbf{H}} \\ \tilde{\mathbf{E}} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \{0\}_{3 \times 3} & -\frac{1}{\sqrt{\mu_0 \varepsilon_0}} \tilde{\mathfrak{R}}_{3 \times 3} \\ \frac{1}{\sqrt{\mu_0 \varepsilon_0}} \tilde{\mathfrak{R}}_{3 \times 3} & \{0\}_{3 \times 3} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \tilde{\mathbf{H}} \\ \tilde{\mathbf{E}} \end{pmatrix} \quad (2.33)$$

$$\tilde{\mathfrak{R}}_{3 \times 3} = \begin{pmatrix} 0 & j_0 k_z & -j_0 k_y \\ -j_0 k_z & 0 & j_0 k_x \\ j_0 k_y & -j_0 k_x & 0 \end{pmatrix} \quad (2.34)$$

容易验证 $\tilde{\mathfrak{R}}_{3 \times 3}$ 是厄密矩阵, 满足共轭对称性 $\tilde{\mathfrak{R}}_{3 \times 3}^H = \tilde{\mathfrak{R}}_{3 \times 3}$

最后, 我们再将 (2.33) 式重新写成空间域形式

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \begin{pmatrix} \mathbf{H} \\ \hat{\mathbf{E}} \end{pmatrix} &= \begin{pmatrix} \Phi_{3 \times 3}^{-1} & \{0\}_{3 \times 3} \\ \{0\}_{3 \times 3} & \Phi_{3 \times 3}^{-1} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \{0\}_{3 \times 3} & -\frac{1}{\sqrt{\mu_0 \varepsilon_0}} \tilde{\mathfrak{R}}_{3 \times 3} \\ \frac{1}{\sqrt{\mu_0 \varepsilon_0}} \tilde{\mathfrak{R}}_{3 \times 3} & \{0\}_{3 \times 3} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \Phi_{3 \times 3} & \{0\}_{3 \times 3} \\ \{0\}_{3 \times 3} & \Phi_{3 \times 3} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{H} \\ \hat{\mathbf{E}} \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} \Phi_{3 \times 3}^H & \{0\}_{3 \times 3} \\ \{0\}_{3 \times 3} & \Phi_{3 \times 3}^H \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \{0\}_{3 \times 3} & -\frac{1}{\sqrt{\mu_0 \varepsilon_0}} \tilde{\mathfrak{R}}_{3 \times 3} \\ \frac{1}{\sqrt{\mu_0 \varepsilon_0}} \tilde{\mathfrak{R}}_{3 \times 3} & \{0\}_{3 \times 3} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \Phi_{3 \times 3} & \{0\}_{3 \times 3} \\ \{0\}_{3 \times 3} & \Phi_{3 \times 3} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{H} \\ \hat{\mathbf{E}} \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} \{0\}_{3 \times 3} & -\frac{1}{\sqrt{\mu_0 \varepsilon_0}} \Phi_{3 \times 3}^H \tilde{\mathfrak{R}}_{3 \times 3} \Phi_{3 \times 3} \\ \frac{1}{\sqrt{\mu_0 \varepsilon_0}} \Phi_{3 \times 3}^H \tilde{\mathfrak{R}}_{3 \times 3} \Phi_{3 \times 3} & \{0\}_{3 \times 3} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{H} \\ \hat{\mathbf{E}} \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (2.35)$$

这里, $\Phi_{3 \times 3} = \text{diag}(\phi, \phi, \phi)$, $\Phi_{3 \times 3}^H = \text{diag}(\phi^H, \phi^H, \phi^H)$, $\Phi_{3 \times 3}^{-1} = \text{diag}(\phi^{-1}, \phi^{-1}, \phi^{-1})$, diag 表示对角矩阵。满足关系 $\Phi_{3 \times 3}^{-1} = \text{diag}(\phi^{-1}, \phi^{-1}, \phi^{-1}) = \text{diag}(\phi^H, \phi^H, \phi^H) = \Phi_{3 \times 3}^H$ 。

比较 (2.35) 和 (2.22-2.23), 我们有 $\mathfrak{R} = \Phi_{3 \times 3}^H \tilde{\mathfrak{R}}_{3 \times 3} \Phi_{3 \times 3}$, 且 $\mathfrak{R} = \mathfrak{R}^H$ 。根据定理 3, 在复空间, 麦克斯韦方程的时间演化矩阵是辛酉矩阵。

无论是在实空间或是在复空间, 自由空间电磁场的总能量, 可以由下式表征

$$\Sigma^V = \frac{1}{2} \mu_0 (\langle \mathbf{H}, \mathbf{H} \rangle + \langle \hat{\mathbf{E}}, \hat{\mathbf{E}} \rangle) = \iiint_V \left(\frac{1}{2} \mu_0 |\mathbf{H}|^2 + \frac{1}{2} \varepsilon_0 |\mathbf{E}|^2 \right) dV \quad (2.36)$$

根据时间演化矩阵的正交性或者酉性, 我们有 $\|\exp(\Delta_t L)\| = 1$ 。因此, 该时间演化矩阵保证了电磁场总能量的守恒性。结合定理 1, 时间演化矩阵 $\exp(\Delta_t L)$, 只是“旋转”了电磁场的初始状态, 而保持其模值或长度不变。从数值角度上讲, 如果一个算法的时间演进可以看作是一系列旋转矩阵的乘积, 且所有的旋转矩阵

又精确地保持了电磁场能量的守恒性（即旋转矩阵具有正交性或酉性），则该算法必然是无条件稳定的。

§2.3.3. 时间连续空间离散的麦克斯韦方程的辛性质

接下来，我们将空间无限维的麦克斯韦方程离散成空间有限维的麦克斯韦方程。

若用伪谱方法进行空间离散，则采用同位网格，即 $\mathbf{E} \rightarrow \mathbf{E}^d(i, j, k)$ ， $\mathbf{H} \rightarrow \mathbf{H}^d(i, j, k)$ 。

引入三维离散傅里叶正变换和逆变换

$$\tilde{F}^d = \phi_d F^d, \quad F^d = \phi_d^{-1} \tilde{F}^d \quad (2.37)$$

ϕ_d 是离散傅里叶正变换， ϕ_d^{-1} 是离散傅里叶逆变换。和连续傅里叶变换类似， ϕ_d 是 $n \times n$ 的酉矩阵。

式 (2.35) 经空间离散后可写为

$$\frac{\partial}{\partial t} \begin{pmatrix} \mathbf{H}^d \\ \hat{\mathbf{E}}^d \end{pmatrix}_{6n \times 1} = L_d \begin{pmatrix} \mathbf{H}^d \\ \hat{\mathbf{E}}^d \end{pmatrix}_{6n \times 1} \quad (2.38)$$

$$L_d = \begin{pmatrix} \{0\}_{3n \times 3n} & -\frac{1}{\sqrt{\mu_0 \epsilon_0}} \Phi_d^H \tilde{\mathfrak{R}}_d \Phi_d \\ \frac{1}{\sqrt{\mu_0 \epsilon_0}} \Phi_d^H \tilde{\mathfrak{R}}_d \Phi_d & \{0\}_{3n \times 3n} \end{pmatrix} \quad (2.39)$$

$$\Phi_d = \text{diag}(\phi_d, \phi_d, \phi_d)_{3n \times 3n}, \quad \Phi_d^H = \text{diag}(\phi_d^H, \phi_d^H, \phi_d^H)_{3n \times 3n} \quad (2.40)$$

这里， $\tilde{\mathfrak{R}}_d$ 为 $3n \times 3n$ 离散化的 $\tilde{\mathfrak{R}}$ 矩阵，仍满足关系 $\tilde{\mathfrak{R}}_d^H = \tilde{\mathfrak{R}}_d$ 。所以， $\mathfrak{R}_d = \Phi_d^H \tilde{\mathfrak{R}}_d \Phi_d$ 为厄密矩阵，即 $\mathfrak{R}_d^H = \mathfrak{R}_d$ 。根据定理 3，该时间演化矩阵是酉矩阵，且 $\exp(\Delta_t L_d) \in Sp(2n, \mathbb{C})$ 。这里，需要说明的是，该伪谱离散采用的是三维离散傅里叶变换，而不同于柳清伙教授提出的一维离散傅里叶变换的方案[32]。

若用有限差分方法进行空间离散，则采用交错网格（Yee网格[33]），电磁场的空域离散形式如下

$$\begin{aligned} E_x &\rightarrow E_x^d(i + \frac{1}{2}, j, k), \quad E_y \rightarrow E_y^d(i, j + \frac{1}{2}, k), \quad E_z \rightarrow E_z^d(i, j, k + \frac{1}{2}) \\ H_x &\rightarrow H_x^d(i, j + \frac{1}{2}, k + \frac{1}{2}), \quad H_y \rightarrow H_y^d(i + \frac{1}{2}, j, k + \frac{1}{2}), \quad H_z \rightarrow H_z^d(i + \frac{1}{2}, j + \frac{1}{2}, k) \end{aligned}$$

式(2.22-2.23)经空间离散后可写为

$$\frac{\partial}{\partial t} \begin{pmatrix} \mathbf{H}^d \\ \hat{\mathbf{E}}^d \end{pmatrix}_{6n \times 1} = \begin{pmatrix} \{0\}_{3n \times 3n} & -\frac{1}{\sqrt{\mu_0 \varepsilon_0}} \mathfrak{R}_{d,E} \\ \frac{1}{\sqrt{\mu_0 \varepsilon_0}} \mathfrak{R}_{d,H} & \{0\}_{3n \times 3n} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{H}^d \\ \hat{\mathbf{E}}^d \end{pmatrix}_{6n \times 1} \quad (2.41)$$

这里，根据交错网格的拓扑关系[34-36]，我们只能得到 $\mathfrak{R}_{d,E}^T = \mathfrak{R}_{d,H}$ 和 $L_d^T = -L_d$ 。虽然很容易证明 $\exp(\Delta_t L_d)$ 是正交阵，然而我们似乎并不能导出 $\exp(\Delta_t L_d)$ 是实辛矩阵这一结论。

为了进一步理解这种拓扑关系，我们以1维麦克斯韦方程为例。其时空均连续的旋度方程为

$$\frac{\partial}{\partial t} \begin{pmatrix} H_y \\ \hat{E}_x \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & -\frac{1}{\sqrt{\mu_0 \varepsilon_0}} \frac{\partial}{\partial z} \\ -\frac{1}{\sqrt{\mu_0 \varepsilon_0}} \frac{\partial}{\partial z} & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} H_y \\ \hat{E}_x \end{pmatrix} \quad (2.42)$$



图 2.1 1 维交错网格 (Yee 网格) 离散后电磁场量的空间分布图。(从左至右为 z 轴正方向，圆点代表磁场分量，方点代表电场分量。)

采用Yee网格进行空间离散后，其电磁场量的空间分布如图2.1所示。使用2阶中心差分来离散1阶连续微分算符，且为了模拟无限维的自由空间，所有边界采用周期延拓处理。(2.42)经空间离散后为

$$\frac{\partial}{\partial t} \begin{pmatrix} H_1 \\ H_2 \\ H_3 \\ H_4 \\ H_5 \\ \hat{E}_1 \\ \hat{E}_2 \\ \hat{E}_3 \\ \hat{E}_4 \\ \hat{E}_5 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -\nu & 0 & 0 & 0 & \nu \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \nu & -\nu & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \nu & -\nu & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \nu & -\nu & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \nu & -\nu \\ \nu & -\nu & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \nu & -\nu & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \nu & -\nu & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \nu & -\nu & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -\nu & 0 & 0 & 0 & \nu & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} H_1 \\ H_2 \\ H_3 \\ H_4 \\ H_5 \\ \hat{E}_1 \\ \hat{E}_2 \\ \hat{E}_3 \\ \hat{E}_4 \\ \hat{E}_5 \end{pmatrix} \quad (2.43)$$

这里, $\nu = \frac{1}{\sqrt{\mu_0 \varepsilon_0}} \frac{1}{\Delta_z}$ 。容易验证, $\mathfrak{R}_{d,E}^T = \mathfrak{R}_{d,H}$ 和 $L_d^T = -L_d$ 。

幸运的是, $\mathfrak{R}_{d,E}$ 和 $\mathfrak{R}_{d,H}$ 为非对称的托布里兹 (Toeplitz) 矩阵, 我们可以重新排列电场, 使 $\mathfrak{R}_{d,E}$ 和 $\mathfrak{R}_{d,H}$ 变成对称的汉开尔 (Hankel) 矩阵。

$$\frac{\partial}{\partial t} \begin{pmatrix} H_1 \\ H_2 \\ H_3 \\ H_4 \\ H_5 \\ \hat{E}_2 \\ \hat{E}_1 \\ \hat{E}_5 \\ \hat{E}_4 \\ \hat{E}_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -\nu & \nu & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -\nu & \nu & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \nu & 0 & 0 & 0 & -\nu \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -\nu & \nu \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -\nu & \nu & 0 \\ 0 & \nu & -\nu & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \nu & -\nu & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -\nu & 0 & 0 & 0 & \nu & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \nu & -\nu & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \nu & -\nu & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} H_1 \\ H_2 \\ H_3 \\ H_4 \\ H_5 \\ \hat{E}_2 \\ \hat{E}_1 \\ \hat{E}_5 \\ \hat{E}_4 \\ \hat{E}_3 \end{pmatrix} \quad (2.44)$$

由式 (2.44) 可得, $\mathfrak{R}_{d,E} = \mathfrak{R}_{d,H} = \mathfrak{R}_d$ 和 $\mathfrak{R}_d^T = \mathfrak{R}_d$ 。根据定理 2, 时间演化矩阵的辛正交性可以保持。

§2.3.4. 时间离散空间离散的麦克斯韦方程的辛性质

无论在实空间还是在复空间, 离散的矩阵 L_d 总可以分解成 U_d 和 V_d 之和, 即

$$L_d = U_d + V_d \quad (2.45)$$

$$U_d = \begin{pmatrix} \{0\}_{3nx3n} & -\frac{1}{\sqrt{\mu_0 \epsilon_0}} \mathfrak{R}_d \\ \{0\}_{3nx3n} & \{0\}_{3nx3n} \end{pmatrix}, \quad V_d = \begin{pmatrix} \{0\}_{3nx3n} & \{0\}_{3nx3n} \\ \frac{1}{\sqrt{\mu_0 \epsilon_0}} \mathfrak{R}_d & \{0\}_{3nx3n} \end{pmatrix} \quad (2.46)$$

采用m级p阶辛积分方法，离散化的时间演化矩阵可近似为

$$\exp(\Delta_t(U_d + V_d)) = \prod_{l=1}^m \exp(d_l \Delta_t V_d) \exp(c_l \Delta_t U_d) + O(\Delta_t^{p+1}) \quad (2.47)$$

这里， c_l 和 d_l 是辛算子或辛传播子。

对于实空间， $\mathfrak{R}_d = \mathfrak{R}_d^T$ ，可验证 U_d 和 V_d 是无穷小实辛矩阵。同样，对于复空间， $\mathfrak{R}_d = \mathfrak{R}_d^H$ ，可验证 U_d 和 V_d 是无穷小复辛矩阵。因此，我们有：(1) U_d 和 V_d 可以构成李代数，即 $[U_d, V_d] = U_d V_d - V_d U_d$ ；(2) $\exp(d_l \Delta_t V_d)$ 和 $\exp(c_l \Delta_t U_d)$ 是辛矩阵，它们的行列式值都为1[29]。

根据上述结论，在时空离散后，时间演化矩阵可以保持辛性质，但无法保持严格的正交性或酉性。由于 $\exp(d_l \Delta_t V_d)$ 和 $\exp(c_l \Delta_t U_d)$ 的行列式值均为1，所以近似后的时间演化矩阵的行列式值也为1。根据上面的分析，我们可知该辛积分方法是条件稳定的且没有幅度误差。

§2.4. 小结

首先，分析时空均连续的麦克斯韦微分方程。在实空间内，其时间演化矩阵是辛正交矩阵；在复空间内，其时间演化矩阵是辛酉矩阵。无论在哪个空间内，该时间演化矩阵保持了自由空间电磁场能量的守恒性。

其次，分析时间连续空间离散的麦克斯韦方程。空间上采用伪谱方法和同位网格离散后，该时间演化矩阵保持辛酉性；空间上采用有限差分方法和交错网格离散后，该时间演化矩阵保持辛正交性。

最后，分析时间空间均离散的麦克斯韦方程。即在空间上采用伪谱方法或者有限差分法，在时间上采用辛积分方法。结果，近似的时间演化矩阵保持了辛性质，丢失了酉性或正交性。又因为近似的时间演化矩阵的行列式值为1，所以辛时域有限差分法或者辛伪谱方法是条件稳定的且没有幅度误差。

参考文献

- [1] K. Feng. Difference-schemes for Hamiltonian-formalism and symplectic-geometry[J]. Journal

- of Computational Mathematics, 1986, 4(3):279-289.
- [2] 冯康, 秦孟兆. 哈密尔顿系统的辛几何算法[M]. 杭州: 浙江科学技术出版社, 2003.
- [3] J. M. Sanzserna. Runge-Kutta schemes for Hamiltonian-systems[J]. Bit Foundation, 1988, 28(4):877-883.
- [4] J. M. Sanz-Serna and M. P. Calvo. Numerical Hamiltonian Problems[M]. London, U.K.: Chapman & Hall, 1994.
- [5] 李世雄. 波动方程的高频近似与辛几何[M]. 北京: 科学出版社, 2001.
- [6] I. Marshall and S. Wojciechowski. When is a Hamiltonian system separable[J]. Journal of Mathematical Physics, 1988, 29(6):1338-1346.
- [7] J. Candy and W. Rozmus. A symplectic integration algorithm for separable Hamiltonian functions[J]. Journal of Computational Physics, 1991, 92(1):230-256.
- [8] X. H. Liao. Symplectic integrator for general near-integrable Hamiltonian system[J]. Celestial Mechanics & Dynamical Astronomy, 1997, 66(3):243-253.
- [9] M. Antonowicz and S. Rauchwojciechowski. How to construct finite-dimensional Bi-Hamiltonian systems from Soliton-Equations-Jacobi integrable potentials[J]. Journal of Mathematical Physics, 1992, 33(6):2115-2125.
- [10] F. Magri, C. Morosi, and O. Ragnisco. Reduction techniques for infinite-dimensional Hamiltonian-systems—some ideas and applications[J]. Communications in Mathematical Physics, 1985, 99(1):115-140.
- [11] S. B. Kuksin. Infinite-dimensional symplectic capacities and a squeezing theorem for Hamiltonian PDEs[J]. Communications in Mathematical Physics, 1995, 167(3):531-552.
- [12] B. Leimkuhler and S. Reich. Symplectic integration of constrained Hamiltonian-systems[J]. Mathematics of Computation, 1994, 63(208):589-605.
- [13] W. N. Everitt and L. Markus. Complex symplectic geometry with applications to ordinary differential operators[J]. Transactions of the American Mathematical Society, 1999, 351(12):4905-4945.
- [14] G. Sun. Construction of high-order symplectic Runge-Kutta methods[J]. Journal of Computational Mathematics, 1993, 11(3):250-260.
- [15] L. Jay. Symplectic partitioned Runge-Kutta methods for constrained Hamiltonian systems[J]. SIAM Journal on Numerical Analysis, 1996, 33(1):368.
- [16] H. Yoshida. Construction of higher order symplectic integrators[J]. Physica D: Nonlinear Phenomena, 1990, 46(3):262-268.
- [17] M. Suzuki. General theory of higher-order decomposition of exponential operators and symplectic integrators[J]. Physics Letters A, 1992, 165(5-6):387-395.
- [18] M. P. Calvo and J. M. Sanzserna. The development of variable-step symplectic integrators with application to the 2-body problem[J]. SIAM Journal on Scientific Computing, 1993, 14(4):936-952.
- [19] S. A. Chin. Symplectic integrators from composite operator factorizations[J]. Physics Letters A, 1997, 226(6):344-348.
- [20] S. Reich. Multi-symplectic Runge-Kutta collocation methods for Hamiltonian wave equations[J]. Journal of Computational Physics, 2000, 157(2):473-499.
- [21] T. J. Bridges and S. Reich. Multi-symplectic integrators: numerical schemes for Hamiltonian PDEs that conserve symplecticity[J]. Physics Letters A, 2001, 284(4-5):184-193.
- [22] T. Hirono, W. Lui, S. Seki, and Y. Yoshikuni. A three-dimensional fourth-order

- finite-difference time-domain scheme using a symplectic integrator propagator[J]. IEEE Transactions on Microwave Theory and Techniques, 2001, 49(9):1640-1648.
- [23] R. Rieben, D. White, and G. Rodrigue. High-order symplectic integration methods for finite element solutions to time dependent Maxwell equations[J]. IEEE Transactions on Antennas and propagation, 2004, 52(8):2190-2195.
- [24] 傅平. 辛紧致格式 FDTD 方法的研究[D]. 苏州: 苏州大学, 2005.
- [25] Y. Shi and C. H. Liang. Multidomain pseudospectral time domain algorithm using a symplectic integrator[J]. IEEE Transactions on Antennas and Propagation, 2007, 55(2):433-439.
- [26] S. Wang, Z. H. Shao, and G. J. Wen. A modified high order FDTD method based on wave equation[J]. IEEE Microwave and Wireless Components Letters, 2007, 17(5):316-318.
- [27] 史荣昌. 矩阵分析[M]. 北京: 北京理工大学出版社, 1996.
- [28] L. H. Kong, R. X. Liu, and X. H. Zheng. A survey on symplectic and multi-symplectic algorithms[J]. Applied Mathematics and Computation, 2007, 186(1):670-684.
- [29] F. M. Dopico and C. R. Johnson. Complementary bases in symplectic matrices and a proof that their determinant is one[J]. Linear Algebra and Its Applications, 2006, 419(2-3):772-778.
- [30] 刘风华, 苟长义. 复辛群与复线性 Hamilton 系统基本解的关系[J]. 天津理工学院学报, 1999, 15:9-11.
- [31] N. Anderson and A. M. Arthurs. Helicity and variational principles for Maxwell's equations[J]. International Journal of Electronics, 1983, 54(6):861-864.
- [32] Q. H. Liu. Large-scale simulations of electromagnetic and acoustic measurements using the pseudospectral time-domain (PSTD) algorithm[J]. IEEE Transactions on Geoscience and Remote Sensing, 1999, 37(2):917-926.
- [33] K. S. Yee. Numerical solution of initial boundary value problems involving Maxwell's equations in isotropic media[J]. IEEE Transactions on Antennas and Propagation, 1966, 14(3):302-307.
- [34] J. S. Kole, M. T. Figge, and H. De Raedt. Higher-order unconditionally stable algorithms to solve the time-dependent Maxwell equations[J]. Physical Review E, 2002, 65(6):066705.
- [35] H. De Raedt, J. S. Kole, K. F. L. Michielsen, and M. T. Figge. Unified framework for numerical methods to solve the time-dependent Maxwell equations[J]. Computer Physics Communications, 2003, 156(1):43-61.
- [36] I. Farago, R. Horvath, and W. H. A. Schilders. Investigation of numerical time-integrations of Maxwell's equations using the staggered grid spatial discretization[J]. International Journal of Numerical Modelling-Electronic Networks Devices and Fields, 2005, 18(2):149-169.

第三章 麦克斯韦方程的离散辛框架

§3.1. 引言

上一章, 我们研究了自由空间中麦克斯韦方程的辛性质, 分析了其时间演化矩阵在时空离散后的性态变化。本章我们将辛算法推广到更一般的无耗和有耗介质中, 并对它的数值稳定性和色散性进行分析和优化。

首先, 建立了高阶辛时域有限差分法的通用离散框架, 给出了它在无耗和有耗介质中的具体操作; 其次, 结合电磁场中的物理概念, 利用矩阵分析和张量分析理论, 推导了高阶辛算法的数值稳定性和色散性公式; 再次, 根据新的平均稳定度标准, 客观分析了高阶辛积分方法的优缺点, 提出了可靠的优化方案; 最后, 将高阶辛算法同低阶辛算法和其它时域高阶方法相比较, 证明了它的优势。此外, 我们还提出了“高阶时间算法必须和高阶空间算法相匹配才能成为高效的时域电磁仿真方案”这一论断。

§3.2. 高阶辛时域有限差分法的基本形式

对于空间方向, 我们在Yee网格下建立矩形差分网格, 网格节点与相应的整数标号对应

$$(i, j, k) = (i\Delta_x, j\Delta_y, k\Delta_z) \quad (3.1)$$

任一场量函数 $F(x, y, z, t)$ 在第 n 个时间步第 l 级步进的离散表达式

$$F^{n+l/m}(i, j, k) = F(i\Delta_x, j\Delta_y, k\Delta_z, (n + \tau_l)\Delta_t) \quad (3.2)$$

这里, 每个时间步需要 m 级时间步进, 且第 l 级步进对应的时间增量为 $\tau_l\Delta_t$ 。对于传统的 2 阶蛙跳时间步进方法, 每个时间步只需要 1 级步进。而对于其它多级方法, 则需要多级步进才能获得时间上的高精度和高稳定性。

我们用 q 阶中心 (交错) 差分离散空间 1 阶导数

$$\left(\frac{\partial F^{n+l/m}}{\partial \delta}\right)_{\delta=h\Delta_\delta} = \sum_{r=1}^{q/2} W_r \frac{F^{n+l/m}(h+r-1/2) - F^{n+l/m}(h-r+1/2)}{\Delta_\delta} + O(\Delta_\delta^q) \quad (3.3)$$

这里, $\delta = x, y, z$, $h = i, j, k$, W_r 是空间差分系数。我们定义 W_s 如下:

$$W_s = 2 \times \sum_{r=1}^{q/2} |W_r| \quad (3.4)$$

表 3.1 给出了 W_r 和 W_s 的值。可以看出， W_s 随差分阶数的增加而增大。

表 3.1 q 阶中心差分系数 (Yee 网格)。

Order (q)	W_1	W_2	W_3	W_4	W_s
2	1				2
4	9/8	-1/24			7/3
6	75/64	-25/384	3/640		149/60
8	1225/1024	-245/3072	49/5120	-5/7168	2161/840

本论文我们主要研究4阶中心差分。其空间的电磁场排布如图3.1所示：即每1个磁场分量被8个电场分量环绕，每1个电场分量被8个磁场分量环绕。这种空间取样方式，比传统的2阶中心差分要复杂。一方面它仍然符合广义的法拉弟感应定理和安培环路定理，只不过采用了双环路的形式；另一方面，该取样方式不易处理材质的不连续性，也不易模拟金属曲面。但4阶差分能更精确地描述邻近电磁场之间的相互作用，因此可获得更优良的数值色散特性和数值精度。此外，由于采用了Yee网格[1]，也就自动满足了电场的无散特性，没有非物理的电荷积累。

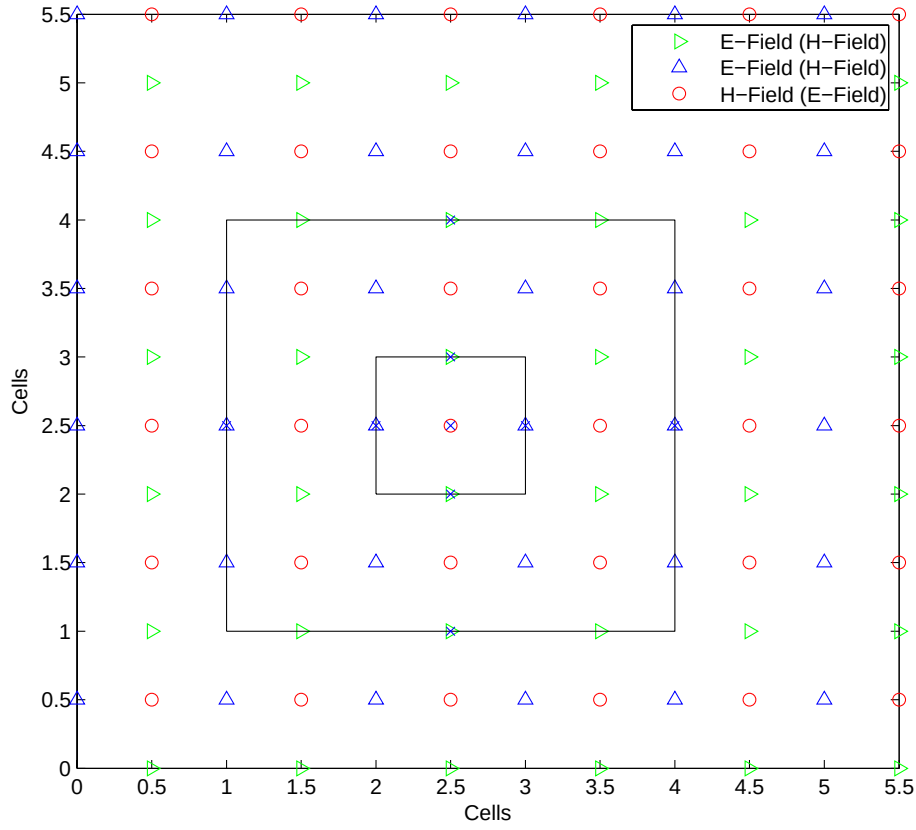


图 3.1 4 阶交错差分对应的电磁场空间分布图。其中红色圆圈代表磁场(电场), 绿色和蓝色三角代表电场(磁场)。图中, 红色圆圈表示的磁场分量(电场分量) 被绿色叉号三角和蓝色叉号三角表示的 8 个电场分量(磁场分量) 环绕。距离磁场分量(电场分量) 半个网格的电场分量(磁场分量) 构成内环路; 距离磁场分量(电场分量) 1 个半网格的电场分量(磁场分量) 构成外环路。

在时间方向上, 无源、均匀、无耗媒质中的麦克斯韦旋度方程的哈密尔顿函数 (Helicity Hamiltonian) 可定义如下[2]

$$\Xi(\mathbf{H}, \mathbf{E}) = \frac{1}{2} \left(\frac{1}{\varepsilon} \mathbf{H} \cdot \nabla \times \mathbf{H} + \frac{1}{\mu} \mathbf{E} \cdot \nabla \times \mathbf{E} \right) \quad (3.5)$$

式 (3.5) 对应的欧拉-哈密尔顿方程 (Euler-Hamilton Equation) 如 (3.6) 所示

$$\frac{\partial \mathbf{H}}{\partial t} = -\frac{\partial \Xi}{\partial \mathbf{E}}, \quad \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t} = \frac{\partial \Xi}{\partial \mathbf{H}} \quad (3.6)$$

通过变分法, (3.6) 可以写成

$$\frac{\partial}{\partial t} \begin{pmatrix} \mathbf{H} \\ \mathbf{E} \end{pmatrix} = (U + V) \begin{pmatrix} \mathbf{H} \\ \mathbf{E} \end{pmatrix} \quad (3.7)$$

$$U = \begin{pmatrix} \{0\}_{3 \times 3} & -\mu^{-1} \mathfrak{R}_{3 \times 3} \\ \{0\}_{3 \times 3} & \{0\}_{3 \times 3} \end{pmatrix}_{6 \times 6}, \quad V = \begin{pmatrix} \{0\}_{3 \times 3} & \{0\}_{3 \times 3} \\ \varepsilon^{-1} \mathfrak{R}_{3 \times 3} & \{0\}_{3 \times 3} \end{pmatrix}_{6 \times 6} \quad (3.8)$$

$$\mathfrak{R} = \begin{pmatrix} 0 & -\frac{\partial}{\partial z} & \frac{\partial}{\partial y} \\ \frac{\partial}{\partial z} & 0 & -\frac{\partial}{\partial x} \\ -\frac{\partial}{\partial y} & \frac{\partial}{\partial x} & 0 \end{pmatrix} \quad (3.9)$$

这里, ε 和 μ 是媒质的介电常数和磁导率。

我们采用无耗散的 m 级 p 阶显式辛积分[3-6]来近似麦克斯韦旋度方程的时间演化矩阵 $\exp(\Delta_t(U+V))$, 即

$$\exp(\Delta_t(U+V)) = \prod_{l=1}^m \exp(d_l \Delta_t V) \exp(c_l \Delta_t U) + O(\Delta_t^{p+1}) \quad (3.10)$$

这里, c_l 和 d_l 是辛算子或者辛传播子, 其具体求解见本章第 4 节。根据第 2 章的结论, 每级时间步进 $\exp(c_l \Delta_t U)$ 和 $\exp(d_l \Delta_t V)$, 都是一个基本的辛变换 (Elementary Symplectic Mapping), 它完成从电场到磁场, 再从磁场到电场的显式递推。以 5 级 4 阶辛积分方法为例, 其时间步进如图 3.2 所示。

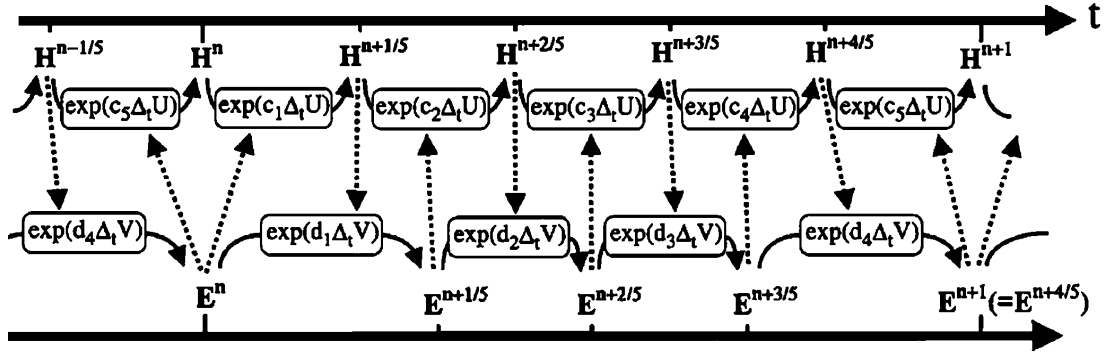


图3.2 5级4阶辛积分方法的电磁场时间步进图。

无论对于连续的微分矩阵或者离散的差分矩阵, 我们总可以证明 $U^\gamma = 0, \gamma \geq 2$, $V^\gamma = 0, \gamma \geq 2$ 。使用泰勒展开技术, (3.10) 式可以写成

$$\exp(\Delta_t(U+V)) = \prod_{l=1}^m (I + d_l \Delta_t V)(I + c_l \Delta_t U) + O(\Delta_t^{p+1}) \quad (3.11)$$

从(3.11)可以看出,该辛积分方法具有显式逐级递推的特点。因而,同龙格库塔和其它一些隐式算法相比,也就大大节约了内存,提高了计算效率。

经过空间 q 阶中心差分、时间 p 阶辛积分离散后,我们就建立了麦克斯韦方程的离散辛框架,即SFDTD(p, q)算法。

为了减小截断误差,我们对电场分量进行尺度变换,使其与磁场分量的数量级相当。

$$\hat{\mathbf{E}} = \sqrt{\frac{\varepsilon_0}{\mu_0}} \mathbf{E} \quad (3.12)$$

尺度变化后的电场 x, y, z 分量的迭代公式如下

$$\begin{aligned} \hat{E}_x^{n+l/m}(i+\frac{1}{2}, j, k) &= \hat{E}_x^{n+(l-1)/m}(i+\frac{1}{2}, j, k) + \frac{1}{\varepsilon_r(i+\frac{1}{2}, j, k)} \\ &\times \{ \alpha_{y1} \times [H_z^{n+l/m}(i+\frac{1}{2}, j+\frac{1}{2}, k) - H_z^{n+l/m}(i+\frac{1}{2}, j-\frac{1}{2}, k)] \\ &- \alpha_{z1} \times [H_y^{n+l/m}(i+\frac{1}{2}, j, k+\frac{1}{2}) - H_y^{n+l/m}(i+\frac{1}{2}, j, k-\frac{1}{2})] \\ &+ \alpha_{y2} \times [H_z^{n+l/m}(i+\frac{1}{2}, j+\frac{3}{2}, k) - H_z^{n+l/m}(i+\frac{1}{2}, j-\frac{3}{2}, k)] \\ &- \alpha_{z2} \times [H_y^{n+l/m}(i+\frac{1}{2}, j, k+\frac{3}{2}) - H_y^{n+l/m}(i+\frac{1}{2}, j, k-\frac{3}{2})] \} \end{aligned} \quad (3.13)$$

$$\begin{aligned} \hat{E}_y^{n+l/m}(i, j+\frac{1}{2}, k) &= \hat{E}_y^{n+(l-1)/m}(i, j+\frac{1}{2}, k) + \frac{1}{\varepsilon_r(i, j+\frac{1}{2}, k)} \\ &\times \{ \alpha_{z1} \times [H_x^{n+l/m}(i, j+\frac{1}{2}, k+\frac{1}{2}) - H_x^{n+l/m}(i, j+\frac{1}{2}, k-\frac{1}{2})] \\ &- \alpha_{x1} \times [H_z^{n+l/m}(i+\frac{1}{2}, j+\frac{1}{2}, k) - H_z^{n+l/m}(i-\frac{1}{2}, j+\frac{1}{2}, k)] \\ &+ \alpha_{z2} \times [H_x^{n+l/m}(i, j+\frac{1}{2}, k+\frac{3}{2}) - H_x^{n+l/m}(i, j+\frac{1}{2}, k-\frac{3}{2})] \\ &- \alpha_{x2} \times [H_z^{n+l/m}(i+\frac{3}{2}, j+\frac{1}{2}, k) - H_z^{n+l/m}(i-\frac{3}{2}, j+\frac{1}{2}, k)] \} \end{aligned} \quad (3.14)$$

$$\begin{aligned}
 \hat{E}_z^{n+l/m}(i, j, k + \frac{1}{2}) &= \hat{E}_z^{n+(l-1)/m}(i, j, k + \frac{1}{2}) + \frac{1}{\varepsilon_r(i, j, k + \frac{1}{2})} \\
 &\times \{ \alpha_{x1} \times [H_y^{n+l/m}(i + \frac{1}{2}, j, k + \frac{1}{2}) - H_y^{n+l/m}(i - \frac{1}{2}, j, k + \frac{1}{2})] \\
 &- \alpha_{y1} \times [H_x^{n+l/m}(i, j + \frac{1}{2}, k + \frac{1}{2}) - H_x^{n+l/m}(i, j - \frac{1}{2}, k + \frac{1}{2})] \\
 &+ \alpha_{x2} \times [H_y^{n+l/m}(i + \frac{3}{2}, j, k + \frac{1}{2}) - H_y^{n+l/m}(i - \frac{3}{2}, j, k + \frac{1}{2})] \\
 &- \alpha_{y2} \times [H_x^{n+l/m}(i, j + \frac{3}{2}, k + \frac{1}{2}) - H_x^{n+l/m}(i, j - \frac{3}{2}, k + \frac{1}{2})] \}
 \end{aligned} \tag{3.15}$$

$$\alpha_{x1} = \frac{9}{8} d_l \times CFL_x \quad \alpha_{y1} = \frac{9}{8} d_l \times CFL_y \quad \alpha_{z1} = \frac{9}{8} d_l \times CFL_z \tag{3.16}$$

$$\alpha_{x2} = \frac{-1}{24} d_l \times CFL_x \quad \alpha_{y2} = \frac{-1}{24} d_l \times CFL_y \quad \alpha_{z2} = \frac{-1}{24} d_l \times CFL_z \tag{3.17}$$

$$CFL_x = \frac{1}{\sqrt{\mu_0 \varepsilon_0}} \frac{\Delta_t}{\Delta_x} \quad CFL_y = \frac{1}{\sqrt{\mu_0 \varepsilon_0}} \frac{\Delta_t}{\Delta_y} \quad CFL_z = \frac{1}{\sqrt{\mu_0 \varepsilon_0}} \frac{\Delta_t}{\Delta_z} \tag{3.18}$$

这里, ε_r 是相对介电常数。在立方网格 (Cubic Grid) 条件下, $\Delta_x = \Delta_y = \Delta_z = \Delta_\delta$,

则 $CFL_x = CFL_y = CFL_z = CFL_\delta$, $\alpha_{x1} = \alpha_{y1} = \alpha_{z1} = \alpha_{\delta 1}$, $\alpha_{x2} = \alpha_{y2} = \alpha_{z2} = \alpha_{\delta 2}$ 。

磁场 x, y, z 分量的迭代公式如 (3.19-3.21) 所示

$$\begin{aligned}
 H_x^{n+l/m}(i, j + \frac{1}{2}, k + \frac{1}{2}) &= H_x^{n+(l-1)/m}(i, j + \frac{1}{2}, k + \frac{1}{2}) + \frac{1}{\mu_r(i, j + \frac{1}{2}, k + \frac{1}{2})} \\
 &\times \{ \beta_{z1} \times [\hat{E}_y^{n+(l-1)/m}(i, j + \frac{1}{2}, k + 1) - \hat{E}_y^{n+(l-1)/m}(i, j + \frac{1}{2}, k)] \\
 &- \beta_{y1} \times [\hat{E}_z^{n+(l-1)/m}(i, j + 1, k + \frac{1}{2}) - \hat{E}_z^{n+(l-1)/m}(i, j, k + \frac{1}{2})] \\
 &+ \beta_{z2} \times [\hat{E}_y^{n+(l-1)/m}(i, j + \frac{1}{2}, k + 2) - \hat{E}_y^{n+(l-1)/m}(i, j + \frac{1}{2}, k - 1)] \\
 &- \beta_{y2} \times [\hat{E}_z^{n+(l-1)/m}(i, j + 2, k + \frac{1}{2}) - \hat{E}_z^{n+(l-1)/m}(i, j - 1, k + \frac{1}{2})] \}
 \end{aligned} \tag{3.19}$$

$$\begin{aligned}
 H_y^{n+l/m}(i+\frac{1}{2}, j, k+\frac{1}{2}) &= H_y^{n+(l-1)/m}(i+\frac{1}{2}, j, k+\frac{1}{2}) + \frac{1}{\mu_r(i+\frac{1}{2}, j, k+\frac{1}{2})} \\
 &\times \{\beta_{x1} \times [\hat{E}_z^{n+(l-1)/m}(i+1, j, k+\frac{1}{2}) - \hat{E}_z^{n+(l-1)/m}(i, j, k+\frac{1}{2})] \\
 &- \beta_{z1} \times [\hat{E}_x^{n+(l-1)/m}(i+\frac{1}{2}, j, k+1) - \hat{E}_x^{n+(l-1)/m}(i+\frac{1}{2}, j, k)] \\
 &+ \beta_{x2} \times [\hat{E}_z^{n+(l-1)/m}(i+2, j, k+\frac{1}{2}) - \hat{E}_z^{n+(l-1)/m}(i-1, j, k+\frac{1}{2})] \\
 &- \beta_{z2} \times [\hat{E}_x^{n+(l-1)/m}(i+\frac{1}{2}, j, k+2) - \hat{E}_x^{n+(l-1)/m}(i+\frac{1}{2}, j, k-1)]\}
 \end{aligned} \tag{3.20}$$

$$\begin{aligned}
 H_z^{n+l/m}(i+\frac{1}{2}, j+\frac{1}{2}, k) &= H_z^{n+(l-1)/m}(i+\frac{1}{2}, j+\frac{1}{2}, k) + \frac{1}{\mu_r(i+\frac{1}{2}, j+\frac{1}{2}, k)} \\
 &\times \{\beta_{y1} \times [\hat{E}_x^{n+(l-1)/m}(i+\frac{1}{2}, j+1, k) - \hat{E}_x^{n+(l-1)/m}(i+\frac{1}{2}, j, k)] \\
 &- \beta_{x1} \times [\hat{E}_y^{n+(l-1)/m}(i+1, j+\frac{1}{2}, k) - \hat{E}_y^{n+(l-1)/m}(i, j+\frac{1}{2}, k)] \\
 &+ \beta_{y2} \times [\hat{E}_x^{n+(l-1)/m}(i+\frac{1}{2}, j+2, k) - \hat{E}_x^{n+(l-1)/m}(i+\frac{1}{2}, j-1, k)] \\
 &- \beta_{x2} \times [\hat{E}_y^{n+(l-1)/m}(i+2, j+\frac{1}{2}, k) - \hat{E}_y^{n+(l-1)/m}(i-1, j+\frac{1}{2}, k)]\}
 \end{aligned} \tag{3.21}$$

$$\beta_{x1} = \frac{9}{8}c_l \times CFL_x \quad \beta_{y1} = \frac{9}{8}c_l \times CFL_y \quad \beta_{z1} = \frac{9}{8}c_l \times CFL_z \tag{3.22}$$

$$\beta_{x2} = \frac{-1}{24}c_l \times CFL_x \quad \beta_{y2} = \frac{-1}{24}c_l \times CFL_y \quad \beta_{z2} = \frac{-1}{24}c_l \times CFL_z \tag{3.23}$$

这里, μ_r 是相对磁导率。

对于有耗媒质, 电导率 σ 或者磁阻率 σ^* 至少有一个不为零, 其对应的哈密顿系统不可分。但是, 我们仍可以将上述的显式辛积分方法作为有效的高阶多级方法加以使用。有耗媒质的麦克斯韦方程组仍可写成

$$\frac{\partial}{\partial t} \begin{pmatrix} \mathbf{H} \\ \mathbf{E} \end{pmatrix} = (U + V) \begin{pmatrix} \mathbf{H} \\ \mathbf{E} \end{pmatrix} \tag{3.24}$$

但与 (3.8) 不同的是, U, V 的表达式变为

$$U = \begin{pmatrix} -\mu^{-1}\sigma^* I_{3 \times 3} & -\mu^{-1}\mathfrak{R}_{3 \times 3} \\ \{0\}_{3 \times 3} & \{0\}_{3 \times 3} \end{pmatrix}_{6 \times 6} \quad V = \begin{pmatrix} \{0\}_{3 \times 3} & \{0\}_{3 \times 3} \\ \varepsilon^{-1}\mathfrak{R}_{3 \times 3} & -\varepsilon^{-1}\sigma I_{3 \times 3} \end{pmatrix}_{6 \times 6} \tag{3.25}$$

采用多级显式辛算法, (3.24) 式的解仍可近似成

$$\exp(\Delta_t(U+V)) = \prod_{l=1}^m \exp(d_l \Delta_t V) \exp(c_l \Delta_t U) + O(\Delta_t^{p+1}) \quad (3.26)$$

由于 $U^\gamma \neq 0$, $V^\gamma \neq 0$, 原先的泰勒展开失效。采用指数差分, 我们得到

$$\exp(c_l \Delta_t U) = \begin{pmatrix} & 1 - \exp(-\frac{c_l \Delta_t \sigma^*}{\mu}) \\ \exp(-\frac{c_l \Delta_t \sigma^*}{\mu}) I_{3 \times 3} & -\frac{\mu}{\sigma^*} \Re_{3 \times 3} \\ \{0\}_{3 \times 3} & I_{3 \times 3} \end{pmatrix} \quad (3.27)$$

$$\exp(d_l \Delta_t V) = \begin{pmatrix} I_{3 \times 3} & \{0\}_{3 \times 3} \\ 1 - \exp(-\frac{d_l \Delta_t \sigma}{\varepsilon}) & \\ -\frac{\varepsilon}{\sigma} \Re_{3 \times 3} & \exp(-\frac{d_l \Delta_t \sigma}{\varepsilon}) I_{3 \times 3} \end{pmatrix} \quad (3.28)$$

仍采用式 (3.12) 对电场进行尺度变换, 变换后电场 x 分量在有耗媒质中的迭代公式为

$$\begin{aligned} \hat{E}_x^{n+l/m}(i + \frac{1}{2}, j, k) &= \exp(-\xi) \times \hat{E}_x^{n+(l-1)/m}(i + \frac{1}{2}, j, k) + \frac{1 - \exp(-\xi)}{\xi} \times \\ &\frac{1}{\varepsilon_r(i + \frac{1}{2}, j, k)} \times \{ \alpha_{y1} \times [H_z^{n+l/m}(i + \frac{1}{2}, j + \frac{1}{2}, k) - H_z^{n+l/m}(i + \frac{1}{2}, j - \frac{1}{2}, k)] \\ &- \alpha_{z1} \times [H_y^{n+l/m}(i + \frac{1}{2}, j, k + \frac{1}{2}) - H_y^{n+l/m}(i + \frac{1}{2}, j, k - \frac{1}{2})] \\ &+ \alpha_{y2} \times [H_z^{n+l/m}(i + \frac{1}{2}, j + \frac{3}{2}, k) - H_z^{n+l/m}(i + \frac{1}{2}, j - \frac{3}{2}, k)] \\ &- \alpha_{z2} \times [H_y^{n+l/m}(i + \frac{1}{2}, j, k + \frac{3}{2}) - H_y^{n+l/m}(i + \frac{1}{2}, j, k - \frac{3}{2})] \} \end{aligned} \quad (3.29)$$

这里, $\xi = \frac{d_l \Delta_t \sigma(i + \frac{1}{2}, j, k)}{\varepsilon(i + \frac{1}{2}, j, k)}$ 。对于指数函数的计算我们可以采用帕德 (Padé) 近似,

即

$$\exp(-\xi) = \frac{1 - \frac{\xi}{2} + \frac{\xi^2}{12}}{1 + \frac{\xi}{2} + \frac{\xi^2}{12}} + O(\xi^5), \quad \frac{1 - \exp(-\xi)}{\xi} = \frac{1 - \frac{\xi}{2} + \frac{\xi^2}{60}}{1 + \frac{2\xi}{5} + \frac{\xi^2}{20}} + O(\xi^5) \quad (3.30)$$

同理, 以有耗媒质的磁场 x 分量为例, 其迭代公式

$$\begin{aligned}
 H_x^{n+l/m}(i, j + \frac{1}{2}, k + \frac{1}{2}) &= \exp(-\chi) \times H_x^{n+(l-1)/m}(i, j + \frac{1}{2}, k + \frac{1}{2}) + \frac{1 - \exp(-\chi)}{\chi} \times \\
 &\frac{1}{\mu_r(i, j + \frac{1}{2}, k + \frac{1}{2})} \times \{ \beta_{z1} \times [\hat{E}_y^{n+(l-1)/m}(i, j + \frac{1}{2}, k + 1) - \hat{E}_y^{n+(l-1)/m}(i, j + \frac{1}{2}, k)] \\
 &- \beta_{y1} \times [\hat{E}_z^{n+(l-1)/m}(i, j + 1, k + \frac{1}{2}) - \hat{E}_z^{n+(l-1)/m}(i, j, k + \frac{1}{2})] \\
 &+ \beta_{z2} \times [\hat{E}_y^{n+(l-1)/m}(i, j + \frac{1}{2}, k + 2) - \hat{E}_y^{n+(l-1)/m}(i, j + \frac{1}{2}, k - 1)] \\
 &- \beta_{y2} \times [\hat{E}_z^{n+(l-1)/m}(i, j + 2, k + \frac{1}{2}) - \hat{E}_z^{n+(l-1)/m}(i, j - 1, k + \frac{1}{2})] \}
 \end{aligned} \tag{3.31}$$

这里, $\chi = \frac{c_l \Delta_t \sigma^*(i, j + \frac{1}{2}, k + \frac{1}{2})}{\mu(i, j + \frac{1}{2}, k + \frac{1}{2})}$ 。上述指数差分技术在完全匹配层的使用, 实质上也是类似的。

接下来, 为了证明高阶辛算法的优势, 我们初步进行下面两个数值试验。

算例1, 一维高斯脉冲远距离 (长时间) 传播。 E_x 场为高斯脉冲的形式

$\exp[-4\pi(\frac{t-T_0}{W})^2]$, 参数 $T_0 = 10^{-8} s$, $W = 1.33 \times 10^{-8} s$ 。空间步长 $\Delta_z = 0.1m$, 稳

定度常数 $CFL=0.5$ 。该脉冲经过远距离 (10000个网格) 传播后的波形如图3.3所示。算法使用传统FDTD(2, 2)方法, 高阶FDTD(2, 4)方法[7, 8], 和高阶SFDTD(4, 4)方法。从图3.3中可以看出, 与传统的FDTD(2, 2)方法和高阶FDTD(2, 4)方法相比, 高阶辛算法 (SFDTD(4, 4)) 在经过长距离传播或者长时间迭代后仍保持了良好的数值精度。

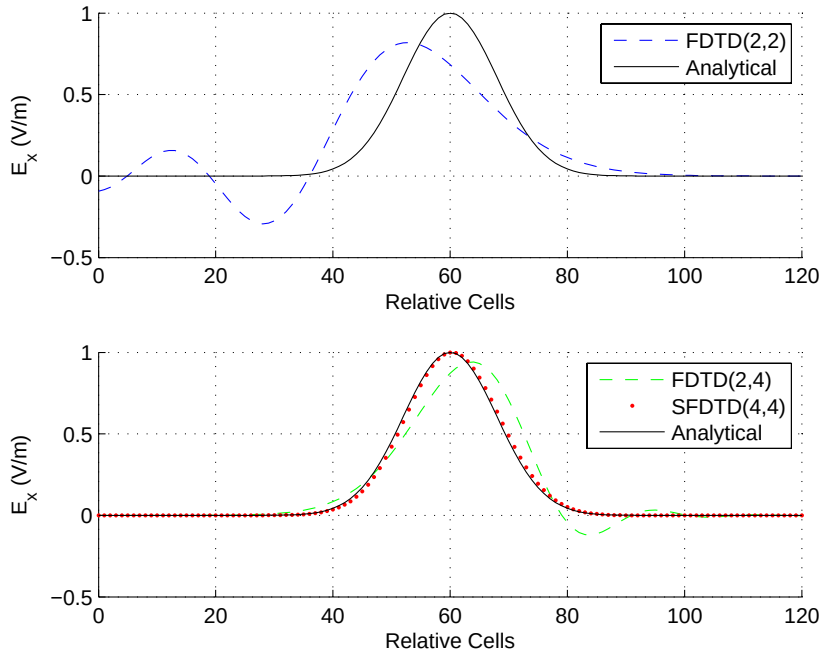


图 3.3 一维高斯脉冲传播 10000 个网格后的时域波形。算法采用 FDTD(2, 2) 方法, 高阶 FDTD(2, 4) 方法, 和 SFDTD(4, 4) 方法。

算例 2, 计算二维波导谐振腔的电磁场总能量。二维波导尺寸 $2.286\text{cm} \times 1.016\text{cm}$, 工作在 TE_{21} 模式, 谐振频率 $f = 19.753\text{GHz}$ 。空间步长 $\Delta_\delta = 1.27\text{mm}$, 稳定度常数 $\text{CFL} = 0.797$, 仿真时间步数 $n_{\max} = 5100$ 。为了获得高阶精度, 所有金属边界条件采用解析的方式处理。算法采用 SFDTD(4, 4) 和 R-K(4, 4) [9-11] 方法。其中, R-K 代表龙格库塔方法, 其时间方向上为 4 阶精度, 空间方向上采用同样的 4 阶中心差分。图 3.4 给出了谐振腔每 3 个周期的平均电磁场总能量。且为了方便比较, 该电磁场总能量经过了归一化处理。与高阶辛算法 (SFDTD(4, 4)) 相比, 龙格库塔方法 (R-K(4, 4)) 有明显的幅度误差。此外, 在同样的数值精度条件下, 其需要的内存是高阶辛算法的 4 倍。

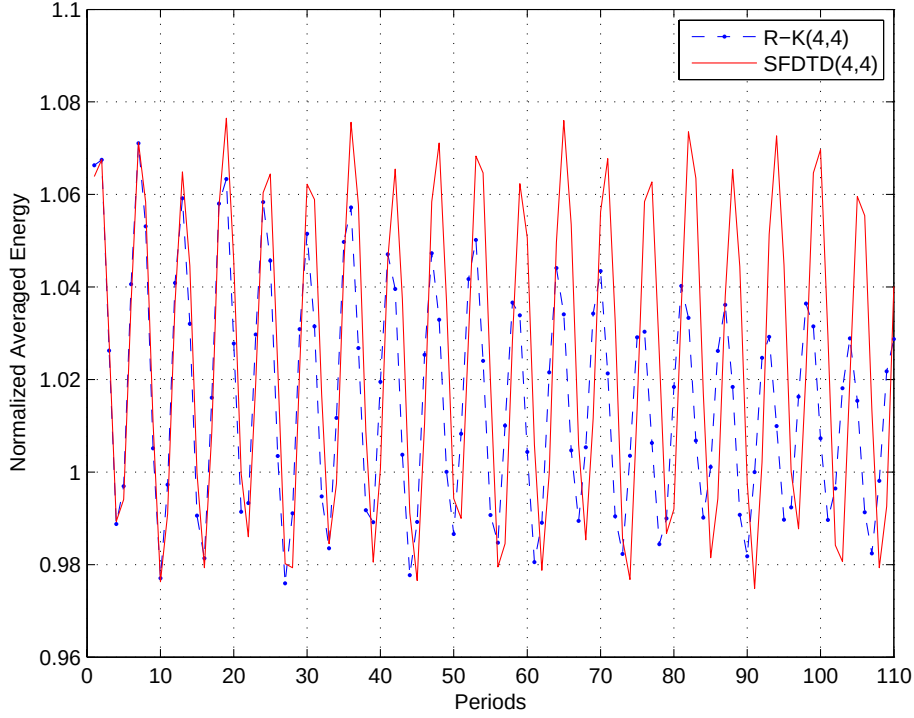


图 3.4 二维波导谐振腔的电磁场总能量随时间变化的曲线。该总能量为每 3 个周期时间内的平均能量，且经过了归一化处理。方法采用 R-K(4, 4) 方法和 SFDTD(4, 4) 方法。

§3.3. 数值稳定性、色散性分析

§3.3.1. 稳定性分析

对于高阶辛算法的数值稳定性分析，我们首先推导 1 维的情况再推广到 3 维。

已知任意 n 时刻场量 $\mathbf{F}^n = (H_y^n, E_x^n)$ ，则任意 $n+1$ 时刻场量 $\mathbf{F}^{n+1} = (H_y^{n+1}, E_x^{n+1})$

可表示为

$$\mathbf{F}^{n+1} = S\mathbf{F}^n \quad (3.32)$$

若算法稳定，其充要条件为稳定度矩阵 S 的所有特征值的模小于等于 1。

采用平面波本征模分析

$$F(x, y, z, t) = f_0 \exp(-j_0(i\Delta_x k_x + j\Delta_y k_y + k\Delta_z k_z)) \quad (3.33)$$

$$k_x = k_0 \sin \theta \cos \varphi, \quad k_y = k_0 \sin \theta \sin \varphi, \quad k_z = k_0 \cos \theta \quad (3.34)$$

这里， k_0 是数值波数， θ ， φ 为球面角。

采用 q 阶交错差分近似空间1阶导数，即

$$\begin{aligned}\frac{\partial F}{\partial z} &\approx \sum_{r=1}^{q/2} W_r \frac{F(i, j, k+r-1/2) - F(i, j, k-r+1/2)}{\Delta_z} \\ &= \sum_{r=1}^{q/2} W_r \frac{\exp[-j_0(r-1/2)k_z \Delta_z] - \exp[j_0(r-1/2)k_z \Delta_z]}{\Delta_z} F \\ &= \eta_z F\end{aligned}\quad (3.35)$$

$$\text{这里, } \eta_z = \sum_{r=1}^{q/2} W_r \frac{\exp[-j_0(r-1/2)k_z \Delta_z] - \exp[j_0(r-1/2)k_z \Delta_z]}{\Delta_z}.$$

则下面时空均连续的麦克斯韦方程

$$\frac{\partial}{\partial t} \begin{pmatrix} H_y \\ E_x \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & -\frac{1}{\mu} \frac{\partial}{\partial z} \\ -\frac{1}{\varepsilon} \frac{\partial}{\partial z} & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} H_y \\ E_x \end{pmatrix} \quad (3.36)$$

其空间离散形式

$$\frac{\partial}{\partial t} \begin{pmatrix} H_y \\ E_x \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & -\frac{1}{\mu} \eta_z \\ -\frac{1}{\varepsilon} \eta_z & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} H_y \\ E_x \end{pmatrix} \quad (3.37)$$

令 $U = \begin{pmatrix} 0 & -\frac{1}{\mu} \eta_z \\ 0 & 0 \end{pmatrix}$, $V = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ -\frac{1}{\varepsilon} \eta_z & 0 \end{pmatrix}$, 时间上采用高阶辛积分方法逼近麦克斯韦

方程的时间演化矩阵，则稳定度矩阵 S 可写成

$$S = \prod_{l=1}^m \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ -\frac{1}{\varepsilon} \eta_z d_l \Delta_t & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & -\frac{1}{\mu} \eta_z c_l \Delta_t \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (3.38)$$

因为每一级步进都是辛变换，所以 $\det[\exp(c_l \Delta_t U)] = 1$ 和 $\det[\exp(d_l \Delta_t V)] = 1$ [12]。

这个结论从式 (3.38) 中很容易检验。所以 $\det S = 1$ 。

我们不妨假设

$$S = \begin{bmatrix} S_{11} & S_{12} \\ S_{21} & S_{22} \end{bmatrix} \quad (3.39)$$

则该矩阵的特征值 λ 满足下面的特征方程

$$\lambda^2 - (S_{11} + S_{22})\lambda + (S_{11}S_{22} - S_{12}S_{21}) = 0 \quad (3.40)$$

注意到 $S_{11} + S_{22}$ 实际上为矩阵 S 的迹，即 $tr(S) = S_{11} + S_{22}$ 。而 $(S_{11}S_{22} - S_{12}S_{21}) = \det S = 1$ 。

因此，上述特征值方程可以改写为

$$\lambda^2 - tr(S)\lambda + 1 = 0 \quad (3.41)$$

其稳定解 $\lambda_{1,2} = \frac{tr(S) \pm j_0 \sqrt{4 - tr(S)^2}}{2}$ 。稳定性条件要求 $|\lambda_{1,2}| = 1$ ，所以只要 $|tr(S)| \leq 2$ 即可。

将 (3.38) 依次相乘，我们求出

$$tr(S) = 2 + \sum_{l=1}^m g_l (v_0^2 \Delta_l^2 \eta_z^2)^l \quad (3.42)$$

$$g_l = \sum_{1 \leq i_1 \leq j_1 < i_2 \leq j_2 < \dots < i_l \leq j_l \leq m} c_{i_1} d_{j_1} c_{i_2} d_{j_2} \dots c_{i_l} d_{j_l} + \sum_{1 \leq i_1 < j_1 \leq i_2 < j_2 \leq \dots \leq i_l < j_l \leq m} d_{i_1} c_{j_1} d_{i_2} c_{j_2} \dots d_{i_l} c_{j_l} \quad (3.43)$$

这里， $v_0 = \frac{1}{\sqrt{\mu\epsilon}}$ ，为介质中的波速。

推广到三维问题，采用矢量分析方法。空间离散后的麦克斯韦方程，可写成

$$\frac{\partial}{\partial t} \begin{pmatrix} \mathbf{H} \\ \mathbf{E} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & \frac{-1}{\mu} (\eta_x \mathbf{e}_x + \eta_y \mathbf{e}_y + \eta_z \mathbf{e}_z) \times \\ \frac{1}{\epsilon} (\eta_x \mathbf{e}_x + \eta_y \mathbf{e}_y + \eta_z \mathbf{e}_z) \times & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{H} \\ \mathbf{E} \end{pmatrix} \quad (3.44)$$

$$\eta_x = \sum_{r=1}^{q/2} W_r \frac{\exp[-j_0(r-1/2)k_x \Delta_x] - \exp[j_0(r-1/2)k_x \Delta_x]}{\Delta_x} \quad (3.45)$$

$$\eta_y = \sum_{r=1}^{q/2} W_r \frac{\exp[-j_0(r-1/2)k_y \Delta_y] - \exp[j_0(r-1/2)k_y \Delta_y]}{\Delta_y} \quad (3.46)$$

注意到 $(\eta_x^2 + \eta_y^2 + \eta_z^2) < 0$ ，式 (3.44) 也可以写成如下张量形式

$$\frac{\partial}{\partial t} \begin{pmatrix} \mathbf{H} \\ \mathbf{E} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & \frac{-\sqrt{-(\eta_x^2 + \eta_y^2 + \eta_z^2)}}{\mu} \bar{\mathbf{K}} \cdot \\ \frac{\sqrt{-(\eta_x^2 + \eta_y^2 + \eta_z^2)}}{\epsilon} \bar{\mathbf{K}} \cdot & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{H} \\ \mathbf{E} \end{pmatrix} \quad (3.47)$$

这里， $\bar{\mathbf{K}}$ 是由球面角定义的张量矩阵 [13]。虽然形式上 (3.47) 是 6×6 的矩阵，

但它只有两个独立的本征值（对应横磁波和横电波）。因此，(3.47)和(3.37)本质上是同构的。采用类似于1维的分析方法，可求出

$$\text{tr}(S) = 2 + \sum_{l=1}^m g_l \{v_0^2 \Delta_l^2 (\eta_x^2 + \eta_y^2 + \eta_z^2)\}^l \quad (3.48)$$

一般而言，时域算法的最大稳定度 $CFL_{\max}$ 可以写成如下时空分离的形式 [14]

$$CFL_{\max} = \frac{\lambda_T}{\lambda_S} \quad (3.49)$$

这里， λ_S 为空间稳定度因子，可以表示为

$$\lambda_S = \sqrt{d} W_s \quad (3.50)$$

$d=1,2,3$ ，为空间维数， W_s 的定义已经在(3.4)中给出，为所有空间差分系数之和。 λ_T 为时间稳定度因子，可以通过空间稳定度因子和 $|\text{tr}(S)| \leq 2$ 的约束求出。

这种时空分离的形式，对分析任意SFDTD(p, q)算法的稳定度是很方便的，尤其适用于时间方向或空间方向其中一个离散方式固定而改变另外一种的情况。

下表列出了传统的FDTD(2, 2)方法，高阶FDTD(2, 4)方法，J-Fang(4, 4)方法 [15]，龙格库塔(4, 4)方法和高阶辛FDTD(4, 4)方法的最大稳定度。这里，所有的空间差分都是2阶或者4阶的显式交错差分。其中，SFDTD(4, 4)方法使用如下辛算子：

$$c_1 = c_5 = 0.17399689, \quad c_2 = c_4 = -0.12038504, \quad c_3 = 0.89277630,$$

$$d_1 = d_4 = 0.62337932, \quad d_2 = d_3 = -0.12337932, \quad d_5 = 0.$$

表 3.2 各种算法的最大稳定度比较。

Algorithm	Stability
FDTD(2,2)	0.577
FDTD(2,4)	0.495
J-Fang(4,4)	0.577
R-K(4,4)	0.700
SFDTD(4,4)	0.743

§3.3.2. 色散性分析

由于 $|\lambda_{1,2}|=1$ ，该算法是无耗散的。根据反余弦求出特征值的相角，则色散方程可写成

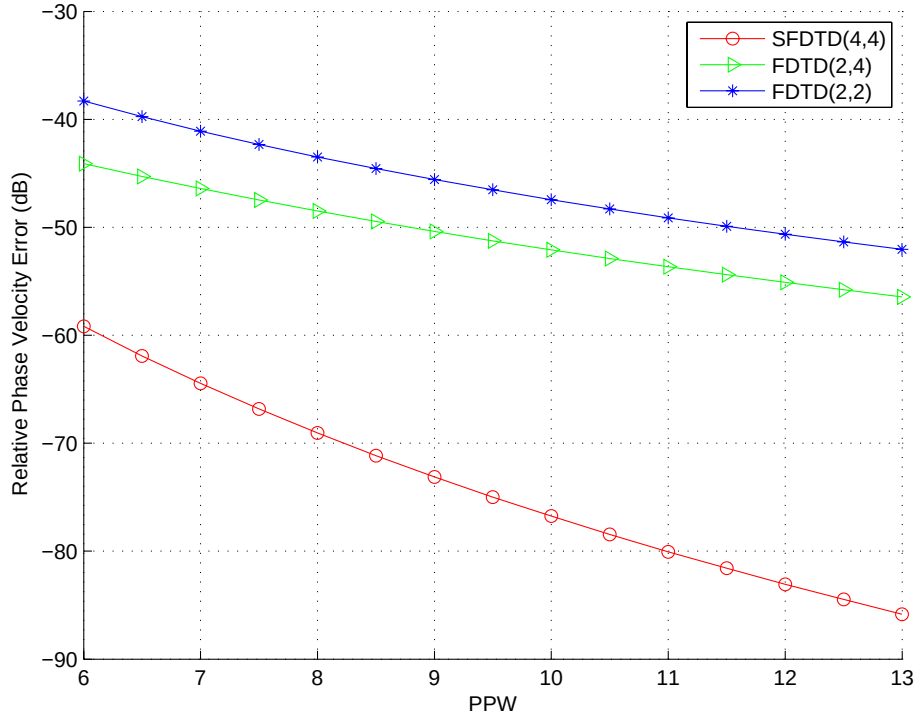
$$\omega\Delta t = \arccos[\text{tr}(S)/2] \quad (3.51)$$

我们定义相对相速度误差

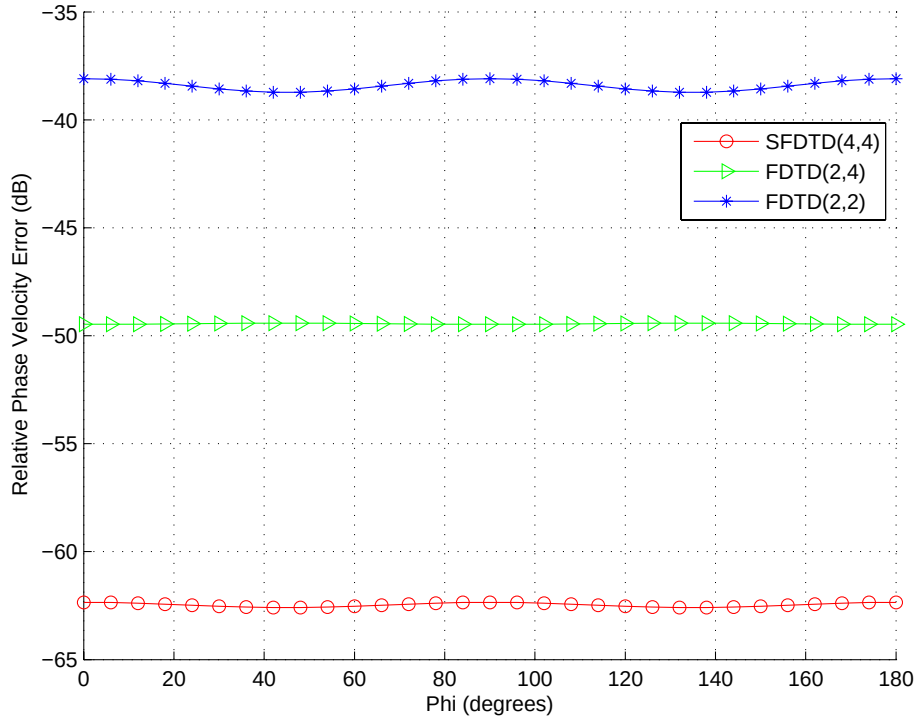
$$Err = 20\log_{10} \left| \frac{v_p - v_0}{v_0} \right| \quad (3.52)$$

这里， $v_p = \frac{\omega}{k_0}$ ，为数值相速度。

首先，我们将SFDTD(4, 4)方法同高阶FDTD(2, 4)方法和传统的FDTD(2, 2)方法相比较。从图3.5(a-b)可以看出，与这些算法相比，SFDTD(4, 4)算法有明显的优势。



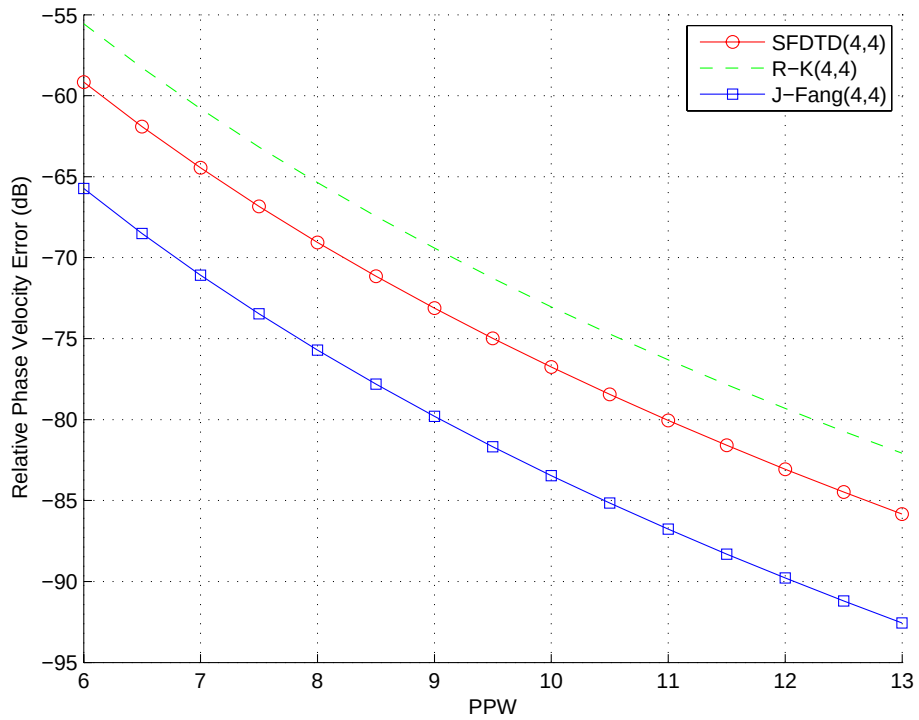
(a) 相对相速度误差随空间分辨率的变化。这里，平面波入射角度 $\theta = 60^\circ$ ， $\varphi = 30^\circ$ ，稳定度常数 $CFL = 0.4$ 。



(b) 相对相速度误差随球面角 Phi 的变化。这里，入射角度 $\theta = 30^\circ$ ，空间分辨率 $PPW = 8$ ，稳定度常数 $CFL = 0.4$ 。

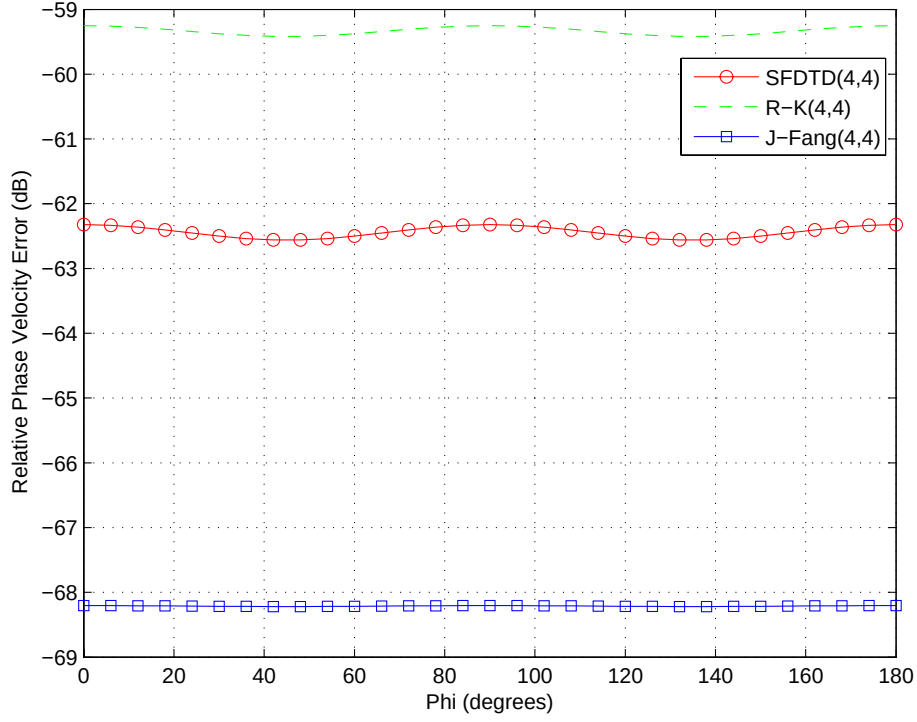
图 3.5 高阶 SFDTD(4, 4) 方法, 高阶 FDTD(2, 4) 方法, 传统的 FDTD(2, 2) 方法的色散性比较。

其次, 我们将 SFDTD(4, 4) 方法同高阶 R-K(4, 4) 方法和高阶 J-Fang(4, 4) 方法相比较。其中, R-K(4, 4) 方法使用 4 阶龙格库塔时间步进和 4 阶空间交错差分。从图 3.6(a-b) 可以看出, SFDTD(4, 4) 算法的色散性优于 R-K(4, 4) 方法但比 J-Fang(4, 4) 方法略差。虽然如此, 由于 J-Fang(4, 4) 方法使用了空间高阶导数, 因而在电磁场工程中很少应用。



(a) 相对相速度误差随空间分辨率的变化。这里, 平面波入射角度 $\theta = 60^\circ$,

$\varphi = 30^\circ$, 稳定度常数 $CFL = 0.5$ 。



(b) 相对相速度误差随球面角 Φ 的变化。这里，入射角度 $\theta = 30^\circ$ ，空间分辨率 $PPW = 8$ ，稳定性常数 $CFL = 0.577$ 。

图 3.6 高阶 SFDTD(4, 4) 方法，高阶 R-K(4, 4) 方法，高阶 J-Fang(4, 4) 方法的色散性比较。

§3.4. 数值稳定性、色散性优化

注意到， $U^\gamma = 0, \gamma \geq 2$ 和 $V^\gamma = 0, \gamma \geq 2$ ，采用泰勒级数展开 (3.11) 式的右边

$$\begin{pmatrix} I_{3 \times 3} & \{0\}_{3 \times 3} \\ d_m \Delta_t v_{3 \times 3} & I_{3 \times 3} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} I_{3 \times 3} & c_m \Delta_t u_{3 \times 3} \\ \{0\}_{3 \times 3} & I_{3 \times 3} \end{pmatrix} \dots \begin{pmatrix} I_{3 \times 3} & \{0\}_{3 \times 3} \\ d_1 \Delta_t v_{3 \times 3} & I_{3 \times 3} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} I_{3 \times 3} & c_1 \Delta_t u_{3 \times 3} \\ \{0\}_{3 \times 3} & I_{3 \times 3} \end{pmatrix} \quad (3.53)$$

这里， $u_{3 \times 3} = -\mu^{-1} \cdot \mathfrak{R}_{3 \times 3}$ ， $v_{3 \times 3} = \varepsilon^{-1} \cdot \mathfrak{R}_{3 \times 3}$ 。

类似，(3.11) 式的左边也可以扩展成

$$\begin{aligned}
 & \{\mathbf{I}\}_{6 \times 6} + \Delta_t (U_{6 \times 6} + V_{6 \times 6}) + \frac{\Delta_t^2}{2!} (U_{6 \times 6} V_{6 \times 6} + V_{6 \times 6} U_{6 \times 6}) + \frac{\Delta_t^3}{3!} (U_{6 \times 6} V_{6 \times 6} U_{6 \times 6} + V_{6 \times 6} U_{6 \times 6} V_{6 \times 6}) \\
 & + \cdots + \frac{\Delta_t^p}{p!} (\overbrace{U_{6 \times 6} V_{6 \times 6} U_{6 \times 6} \cdots V_{6 \times 6}}^p + \overbrace{V_{6 \times 6} U_{6 \times 6} V_{6 \times 6} \cdots U_{6 \times 6}}^p) \\
 & + \frac{\Delta_t^{p+1}}{(p+1)!} (\overbrace{U_{6 \times 6} V_{6 \times 6} U_{6 \times 6} V_{6 \times 6} \cdots U_{6 \times 6}}^{p+1} + \overbrace{V_{6 \times 6} U_{6 \times 6} V_{6 \times 6} U_{6 \times 6} \cdots V_{6 \times 6}}^{p+1}) + \cdots \\
 & = \begin{pmatrix} I_{3 \times 3} & \{\mathbf{0}\}_{3 \times 3} \\ \{\mathbf{0}\}_{3 \times 3} & I_{3 \times 3} \end{pmatrix} + \Delta_t \begin{pmatrix} \{\mathbf{0}\}_{3 \times 3} & u_{3 \times 3} \\ v_{3 \times 3} & \{\mathbf{0}\}_{3 \times 3} \end{pmatrix} + \frac{\Delta_t^2}{2!} \begin{pmatrix} u_{3 \times 3} v_{3 \times 3} & \{\mathbf{0}\}_{3 \times 3} \\ \{\mathbf{0}\}_{3 \times 3} & v_{3 \times 3} u_{3 \times 3} \end{pmatrix} \\
 & + \frac{\Delta_t^3}{3!} \begin{pmatrix} \{\mathbf{0}\}_{3 \times 3} & u_{3 \times 3} v_{3 \times 3} u_{3 \times 3} \\ v_{3 \times 3} u_{3 \times 3} v_{3 \times 3} & \{\mathbf{0}\}_{3 \times 3} \end{pmatrix} + \cdots + \frac{\Delta_t^p}{p!} \begin{pmatrix} \overbrace{u_{3 \times 3} v_{3 \times 3} u_{3 \times 3} \cdots v_{3 \times 3}}^p & \{\mathbf{0}\}_{3 \times 3} \\ \{\mathbf{0}\}_{3 \times 3} & \underbrace{v_{3 \times 3} u_{3 \times 3} v_{3 \times 3} \cdots u_{3 \times 3}}_p \end{pmatrix} \\
 & + \frac{\Delta_t^{p+1}}{(p+1)!} \begin{pmatrix} \{\mathbf{0}\}_{3 \times 3} & \overbrace{u_{3 \times 3} v_{3 \times 3} u_{3 \times 3} v_{3 \times 3} \cdots u_{3 \times 3}}^{p+1} \\ \underbrace{v_{3 \times 3} u_{3 \times 3} v_{3 \times 3} u_{3 \times 3} \cdots v_{3 \times 3}}_{p+1} & \{\mathbf{0}\}_{3 \times 3} \end{pmatrix} + \cdots
 \end{aligned} \tag{3.54}$$

这里, $p = 2n, n \in N$ 。

比较(3.53)和(3.54)中 Δ_t^p 的项, 令其相等, 我们可推导出高阶辛积分的阶数条件

$$p = 2n - 1, n \in N$$

$$\sum c_{l_1} d_{l_2} c_{l_3} d_{l_4} \cdots c_{l_p} = \frac{1}{p!} \quad 1 \leq l_1 \leq l_2 < l_3 \leq l_4 < \cdots < l_p \leq m \tag{3.55}$$

$$\sum d_{l_1} c_{l_2} d_{l_3} c_{l_4} \cdots d_{l_p} = \frac{1}{p!} \quad 1 \leq l_1 < l_2 \leq l_3 < l_4 \leq \cdots \leq l_p \leq m \tag{3.56}$$

$$p = 2n, n \in N$$

$$\sum c_{l_1} d_{l_2} c_{l_3} \cdots d_{l_p} = \frac{1}{p!} \quad 1 \leq l_1 \leq l_2 < l_3 \leq \cdots \leq l_p \leq m \tag{3.57}$$

$$\sum d_{l_1} c_{l_2} d_{l_3} \cdots c_{l_p} = \frac{1}{p!} \quad 1 \leq l_1 < l_2 \leq l_3 < \cdots < l_p \leq m \tag{3.58}$$

不幸的是, 方程(3.55-3.58)并不相互独立, 直接求解无法得到辛算子的具

体数值。因此，我们一般引入时间可逆 (Time-Reversible) 约束 (3.59) 或者对称 (Symmetric) 约束 (3.60)。

$$c_l = c_{m-l+1} (1 \leq l \leq m), \quad d_l = d_{m-l} (1 \leq l \leq m-1), \quad d_m = 0 \quad (3.59)$$

$$d_l = c_{m-l+1} (1 \leq l \leq m) \quad (3.60)$$

p 阶辛积分方法对应的辛算子必须满足：(A) 从1阶至 p 阶的所有阶数条件，且每个阶数条件有2个方程构成；(B) 时间可逆约束或者对称约束。

对于对称辛算子，我们联立阶数条件方程 (3.55–3.58) 和对称约束方程 (3.60)，利用MATLAB强大的符号计算功能，便可以求解出不同阶数条件下的辛算子。表3.3列出了2阶、3阶和4阶对称辛算子。通过该表我们可以看出，同样阶数条件下，辛算子有多组解。我们需要分析每组解对应辛算子的时间稳定度因子，来选择优化的辛算子。

表 3.3 对称辛算子： $d_l = c_{m-l+1} (1 \leq l \leq m)$ 。

Order (p)	Stage (m)	c_1	c_2	c_3	c_4	λ_T
2	2	$1 - \sqrt{2}/2$	$\sqrt{2}/2$			2.265
2	2	$1 + \sqrt{2}/2$	$-\sqrt{2}/2$			0.828
* 3	3	0.26833010	-0.18799162	0.91966152		4.520
3	3	1.99505719	0.70009915	-1.69515634		0.912
4	4	0.11189654	0.70350157	-0.14654317	0.33114506	3.238
4	4	0.70963113	0.24786114	-0.96247655	1.00498428	1.695
4	4	-11.77866774	13.41348887	-0.63843697	0.00361584	1.096
4	4	2.13492775	1.82345122	-0.69563510	-2.26274387	0.495

对于时间可逆辛算子，当联立阶数条件方程 (3.55–3.58) 和时间可逆约束方程 (3.59) 时，我们发现仍有一个未知数无法求解。换句话说，其它所有的辛算子，可以用该未知辛算子来表示。这里，我们提出一种方案来解决该问题。对于 p 阶时间可逆辛算子而言，我们除了需要从1阶至 p 阶的阶数条件 (3.55–3.58)，时间可逆约束 (3.59)，还需额外增加1个方程，即 $p+1$ 阶条件中的任意1个方程。形象地说，该 p 阶辛算子也就满足了一半的 $p+1$ 阶条件，一定程度上也就提高了

它的稳定性和色散性。表3.4列出了2阶、4阶时间可逆辛算子。通过该表我们可以看出，该辛算子只有偶数阶，而没有奇数阶。且同对称辛算子一样，同样阶数条件下它有多组解。我们需要分析每组解对应辛算子的时间稳定度因子，来选择优化的辛算子。

表 3.4 时间可逆辛算子: $c_l = c_{m-l+1} (1 \leq l \leq m)$, $d_l = d_{m-l} (1 \leq l \leq m-1)$, $d_m = 0$ 。

Order (p)	Stage (m)	c_1	c_2	c_3	d_1	d_2	λ_T
* 2	2	0.5	c_1		1	0	2.000
2	3	$(1/2 - \sqrt{3}/6)$	$\sqrt{3}/3$	c_1	1/2	d_1	2.632
2	3	1/6	2/3	c_1	1/2	d_1	2.450
2	3	$1/2 + \sqrt{3}/6$	$-\sqrt{3}/3$	c_1	1/2	d_1	1.593
* 4	5	0.16537923	1.35491814	-2.04059474	0.51541261	-0.01541261	3.467
4	4	0.67560359	-0.17560359	c_2	1.35120719	-1.70241438	1.573
4	5	0.77751818	-0.54407885	0.53312134	1.02979385	-0.52979385	1.298

尽管时间稳定度因子，一定程度上反映了辛积分方法在时间方向上的优劣。但对于时间多级步进方法，基于时间稳定度因子的评价标准似乎欠妥。它给人一种随着辛算子阶数增高，稳定度持续增大的假象，而实际上稳定度的增大是以步进级数的增加为代价的。所以，考虑到多级时间方法的计算复杂度，我们提出了一种新的平均稳定度标准。

众所周知，对于时域电磁仿真，需要的总时间步正比于 $1/(\Delta_x CFL_{\max})$ ，每一个时间步至少需要的迭代次数为 $m_{\min}$ 次，而每次迭代需要 $O(1/\Delta_x^3)$ 量级的乘法操作。

因此总的计算复杂度 $O(\frac{1}{\Delta_x^4 \frac{CFL_{\max}}{m_{\min}}})$ 。通过上述分析，我们可定义新的平均

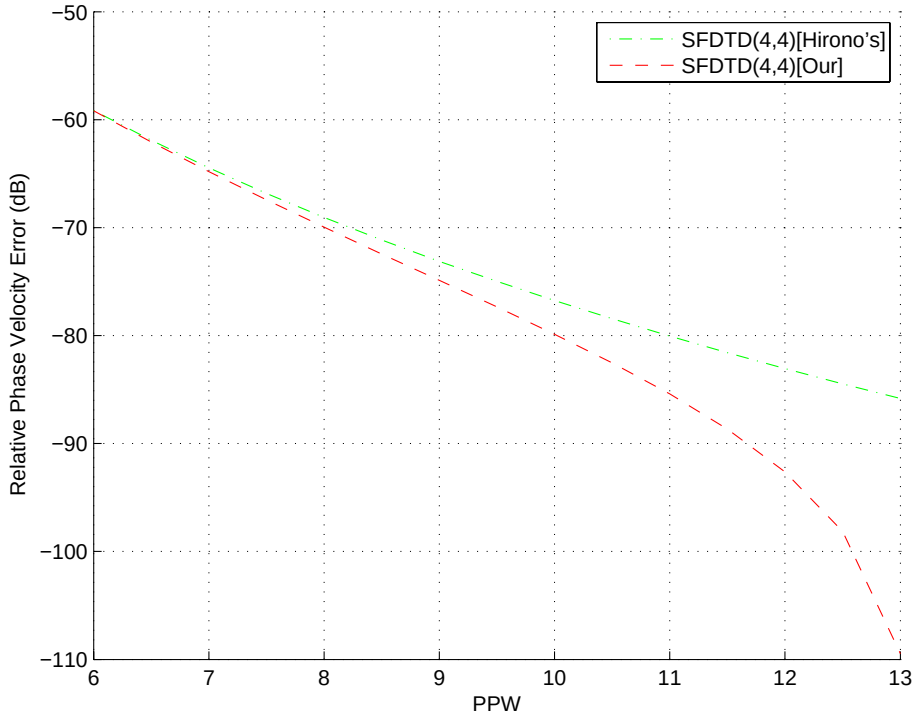
稳定度标准 (3.61)

$$\overline{CFL}_{\max} = \frac{CFL_{\max}}{m_{\min}} = \frac{\lambda_T / m_{\min}}{\lambda_S} = \frac{\bar{\lambda}_T}{\lambda_S} \quad (3.61)$$

这里，我们称 $\bar{\lambda}_T$ 为平均时间稳定度因子。对于时间可逆辛算子，因为 $d_m = 0$ ，所以在迭代操作时，我们可以把 c_1 和 c_m 进行合并，即 $m_{\min} = m - 1$ 。然而，对于

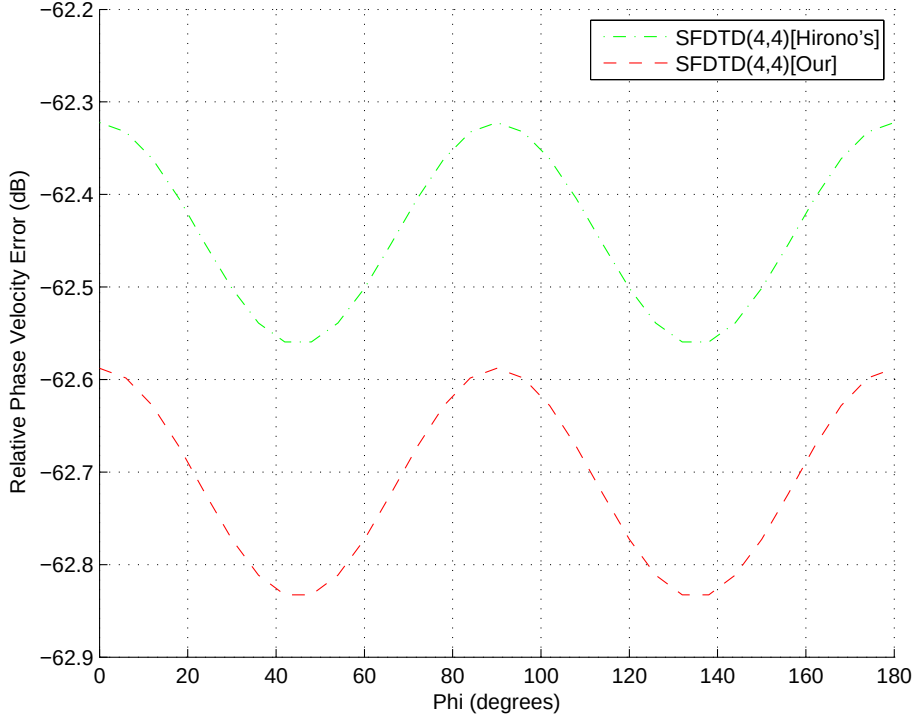
对称辛算子，这种合并操作是不可能的，因而 $m_{\min} = m$ 。

综合考虑新的平均时间稳定度因子和传统的时间稳定度因子，从表3.3和表3.4中可以选出优化的辛算子，被选中的2阶、3阶、和4阶辛算子用星号表示。这里，我们优化的4阶辛算子，其时间稳定度因子为3.467高于日本学者Hirono提出的4阶辛算子[6]的时间稳定度因子3.003。两种算法的色散性对比如图3.7所示，我们的算法也优于Hirono提出的算法。



(a) 相对相速度误差随着空间分辨率的变化。平面波入射角度 $\theta = 60^\circ$,

$\varphi = 30^\circ$, 稳定度常数 $CFL = 0.5$ 。



(b) 相对相速度误差随着球面角 Φ 的变化。入射角度 $\theta = 30^\circ$ ，空间分辨率

$PPW = 8$ ，稳定性常数 $CFL = 0.577$ 。

图 3.7 我们提出的辛算子和日本学者 Hirono 提出的辛算子的色散性比较。

我们发现，平均时间稳定度因子是随着辛算子阶数的增加而下降的，其最大值为 $\bar{\lambda}_T = 2$ 。它可以通过 m 级时间可逆辛算子实现。其中， $c_1 = c_m = 0.5/m_{\min}$ ， $c_l = 1/m_{\min}, l = 2, 3, \dots, m_{\min}$ ， $d_l = 1/m_{\min}, l = 1, 2, \dots, m_{\min}$ ， $d_m = 0$ 。特别地，如果合并 c_1 和 c_m ，每级辛算子皆相等。经验证该辛算子满足1阶条件和2阶条件。也就是说，该2阶多级辛积分方法实质上等价于2阶蛙跳算法。我们称这种每级辛算子都相等的辛积分方法为等辛算子步进方法。

从物理概念上，多级方法的时间稳定度因子是将每级步进的时间稳定度因子按某种法则进行平均。当每级的辛算子相等时，显然能获得最大的时间稳定度因子。而当它们不相等时，为了满足1阶条件， $\sum_{i=1}^m c_i = 1$ ， $\sum_{i=1}^m d_i = 1$ ，每级辛算子对应的的时间稳定度因子也就高低不同，其总体的时间稳定度因子也必然会低于每级都相等的情况。严格的数学证明已经在文献[16, 17]中给出，这里将不再赘述。

总之，传统的2阶蛙跳方法或者2阶等辛算子步进方法，能够获得最大的平均时间稳定度。但这是不是说高阶辛积分方法在时间方向上没有优势呢？答案是否定的。我们不妨进行下面的数值色散分析。

SFDTD(2, 4)方法和SFDTD(3, 4)方法的色散性对比如图3.8所示。SFDTD(3, 4)方法使用表3.3中星号标记的对称辛算子，SFDTD(2, 4)方法使用等辛算子步进方法。且为了公平比较，两者的最小迭代次数 $m_{\min}$ 皆为3，空间差分皆为4阶显式交错差分。我们采用不同的CFL稳定度常数，然后画出两种算法的相对色散误差随空间分辨率的变化图。从图3.8中我们不难看出：当CFL=0.5时，在粗网格剖分条件下，SFDTD(3, 4)方法的色散性并没有SFDTD(2, 4)方法好。而在细网格剖分条件下，SFDTD(3, 4)方法才显示出优势。但这对电大目标的仿真来说，是没有多大意义的。毕竟我们希望采用大的空间步长和时间步长，来节省内存和计算时间。然而，当CFL=1.0时，无论在粗网格剖分还是在细网格剖分条件下，SFDTD(3, 4)方法均显示出了明显的优势。这是因为，随着CFL的增大，SFDTD(2, 4)方法的数值色散效应变得明显了。究其原因是低阶的时间算法无法在大的时间步长或高的稳定度条件下取得令人满意的数值结果。类似的结论，也被学者A. Yefet发现[18]。他指出，只有在低的CFL条件下，高阶FDTD(2, 4)方法才能获得空间4阶的收敛率。这个结论和我们对SFDTD(2, 4)方法的色散性分析是一致的。

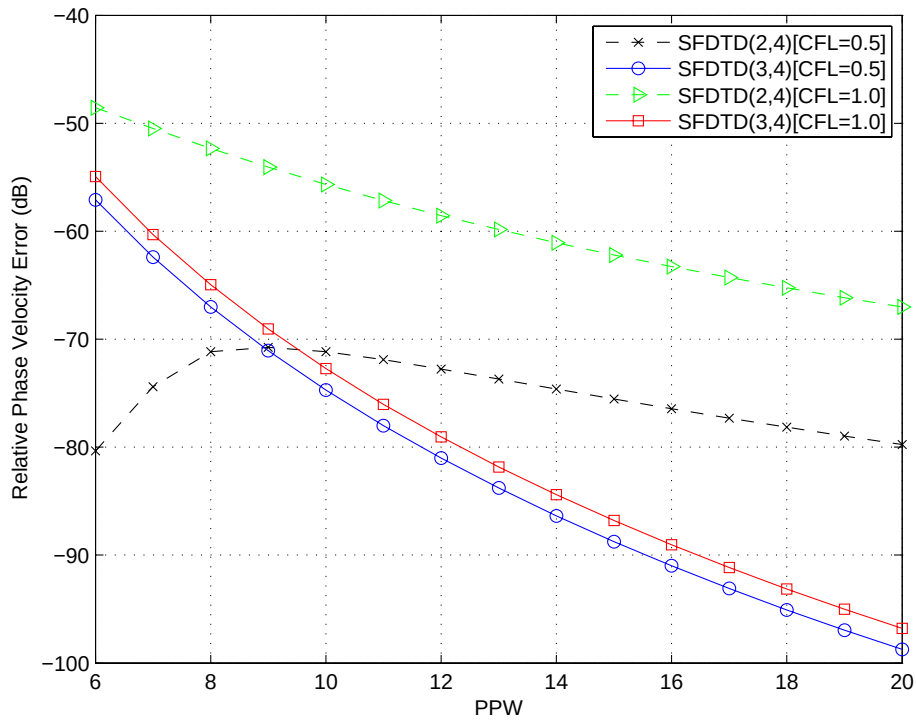


图 3.8 不同 CFL 条件下 SFDTD(2, 4) 方法和 SFDTD(3, 4) 方法的色散曲线：
 $\theta = 45^\circ$ ， $\varphi = 0^\circ$ 。

接下来，我们进行另外一组色散性分析。在时间方向上，仍采用上面的设置，保持不变。但在空间方向上使用2阶显式交错差分。我们重新画出不同CFL条件下SFDTD(2, 2)方法和SFDTD(3, 2)方法的色散曲线图3.9。与图3.8相比，无论CFL常数的大小如何变化，SFDTD(3, 2)方法均未显示任何优势，甚至还略差于SFDTD(2, 2)方法。

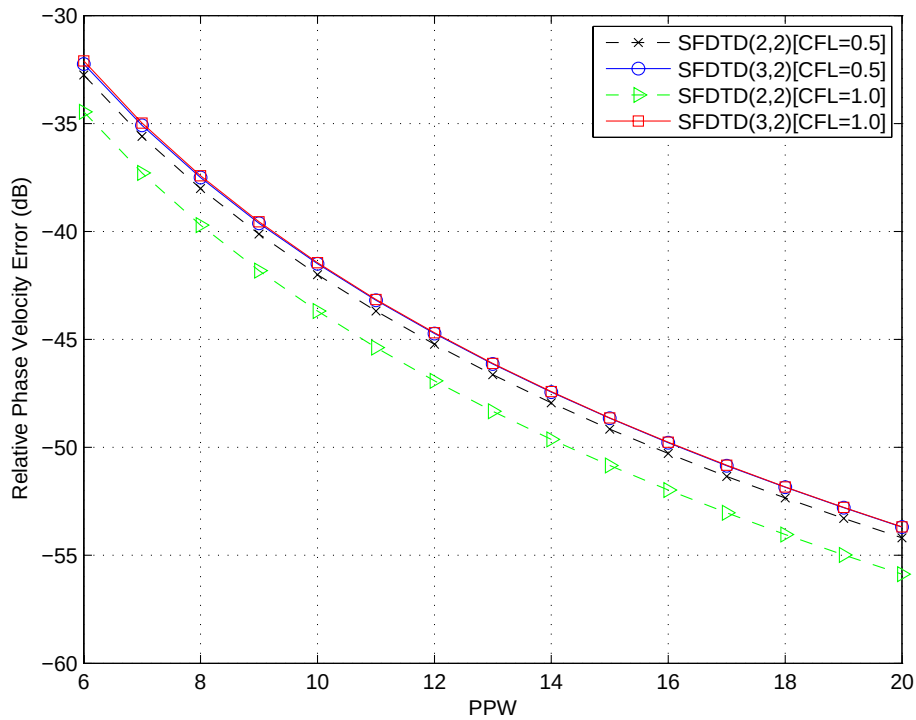


图 3.9 不同 CFL 条件下 SFDTD(2, 2) 方法和 SFDTD(3, 2) 方法的色散曲线：
 $\theta = 45^\circ$ ， $\varphi = 0^\circ$ 。

通过上面的色散性分析，我们得到一个重要的结论：即高阶的时间方法必须和高阶的空间方法相结合，才能成为真正意义上的高效时域解决方案。

为了进一步证实该结论，我们又做了三维电偶极子的数值试验。总计算区域 $67 \times 67 \times 67$ 网格，偶极子辐射源位于区域中心点 $k_s(33\frac{1}{2}, 33, 33)$ 处，场值记录点距离源点10个网格。为了吸收辐射波，我们使用10层高阶完全匹配层截断计算区域。

辐射源的加入公式

$$\hat{E}_x^{n+l/m}(k_s) = \hat{E}_x^{n+l/m}(k_s) - 2 \times 10^{-10} d_l \times CFL_\delta \times \exp\left[-\left(\frac{(n+\tau_l)\Delta_t}{\tau_0} - 3\right)^2\right] \frac{[(n+\tau_l)\Delta_t - 3\tau_0]}{\tau_0^2 \Delta_\delta^2} \quad (3.62)$$

这里, $\tau_l = \sum_{r=1}^l c_r$, $\tau_0 = 2 \times 10^{-9} s$, $\Delta_\delta = 0.1m$ 。

数值解和解析解的绝对误差被计算并显示在图3.10-3.12中。图3.10中CFL被设为0.5, SFDTD(3,4)方法并没有显示出优势。SFDTD(3,4)和SFDTD(2,4)方法的最大绝对误差 (L_1 误差) 分别为: 0.0073和0.0049。图3.11中CFL被设为1.0, 我们看出SFDTD(3,4)方法取得了更好的数值精度。两种方法的 L_1 误差分别为: 0.0052和0.0132。CFL的增大导致了FDTD(2,4)方法的 L_1 误差显著增加。图3.12中CFL仍设为1.0, 但我们采用SFDTD(3,2)方法和SFDTD(2,2)方法。从图3.12中可以看出, 两者的误差分布几乎吻合, 其 L_1 误差分别为: 0.127和0.112。因此, 作为一种优化的时域电磁仿真方案, 高阶辛积分和高阶中心差分的“强强联合”是需要的。

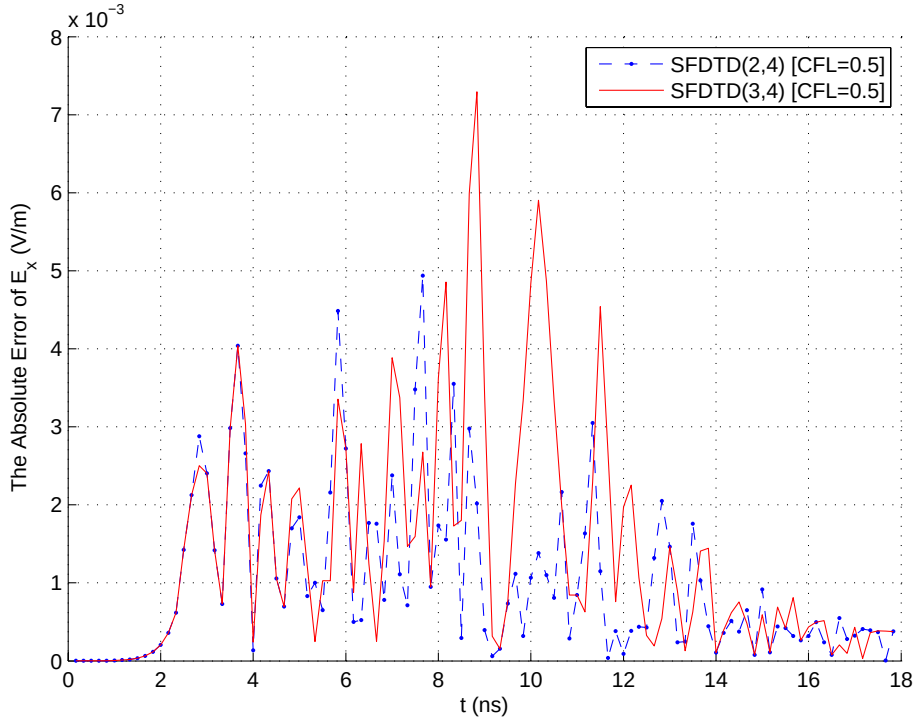


图 3.10 采用 SFDTD(2,4) 方法和 SFDTD(3,4) 方法计算 E_x 场的绝对误差:

$CFL_{\delta} = 0.5$ 。

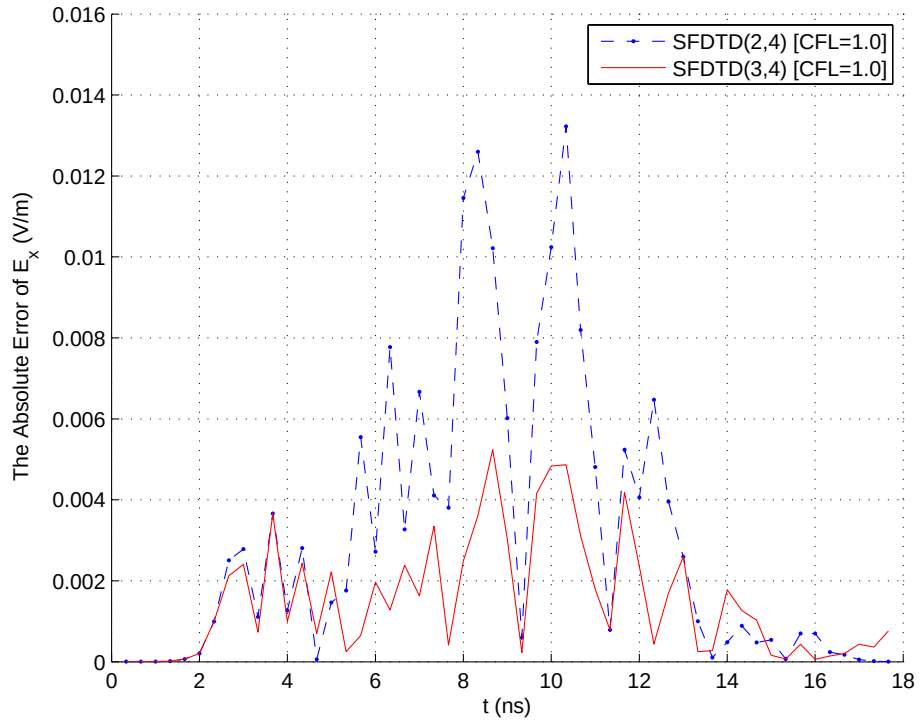


图 3.11 采用 SFDTD(2, 4) 方法和 SFDTD(3, 4) 方法计算 E_x 场的绝对误差：

$CFL_{\delta} = 1.0$ 。

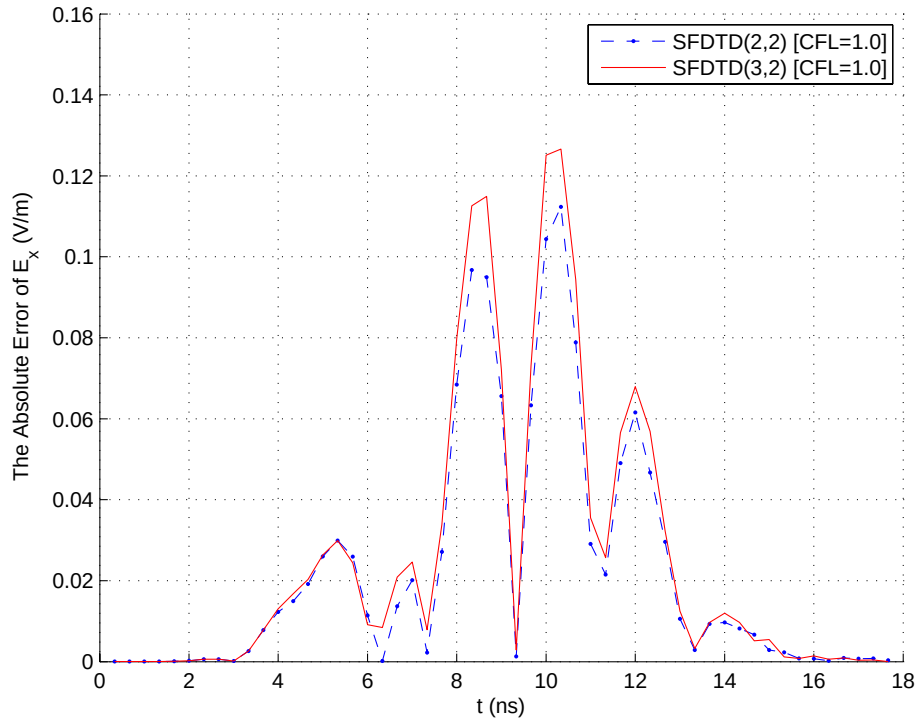


图 3.12 采用 SFDTD(2, 2) 方法和 SFDTD(3, 2) 方法计算 E_x 场的绝对误差:

$$CFL_\delta = 1.0。$$

§3.5. 小结

首先，在空间方向上对麦克斯韦方程进行离散。一方面，由于使用了Yee网格，自动满足了场量的无散条件，且电磁场之间的相互作用仍符合广义的安培环路定理和广义的法拉第电磁感应定理。更为重要的是，Yee网格保持了时间演化矩阵的正交性和辛变换性。另一方面，由于采用了高阶差分，使算法有低的数值色散性和高的数值精度，但同时也造成了非均匀边界处理的困难。

其次，在时间方向上对麦克斯韦方程进行离散。一方面，采用高阶显式辛积分方法，节省了内存，提高了算法的稳定度，并保持了麦克斯韦方程的辛结构；另一方面，由于该算法是一种时间多级步进方法，也就造成了其平均稳定度或计算复杂度的劣势。因此，在保证辛积分方法时间高阶性和高稳定度的同时，我们优化了辛算子，减少了它的迭代级数。

最后，研究了时间算法和空间算法的“匹配”问题，指出只有将高阶时间算法和高阶空间算法相结合，才能获得令人满意的理论和数值结果。然而，太高的空间差分阶数，会使非均匀边界的处理更加困难。同样地，太多的时间步进级数，会降低算法的计算复杂度。

参考文献

- [1] K. S. Yee. Numerical solution of initial boundary value problems involving Maxwell's equations in isotropic media[J]. IEEE Transactions on Antennas and Propagation, 1966, 14(3):302-307.
- [2] N. Anderson and A. M. Arthurs. Helicity and variational principles for Maxwell's equations[J]. International Journal of Electronics, 1983, 54(6):861-864.
- [3] H. Yoshida. Construction of higher order symplectic integrators[J]. Physica D: Nonlinear Phenomena, 1990, 46(3):262-268.
- [4] T. Hirono, W. W. Lui, and K. Yokoyama. Time-domain simulation of electromagnetic field using a symplectic integrator[J]. IEEE Microwave and Guided Wave Letters, 1997, 7(9):279-281.
- [5] T. Hirono, W. W. Lui, K. Yokoyama, and S. Seki. Stability and numerical dispersion of symplectic fourth-order time-domain schemes for optical field simulation[J]. Journal of Lightwave Technology, 1998, 16(10):1915-1920.
- [6] T. Hirono, W. Lui, S. Seki, and Y. Yoshikuni. A three-dimensional fourth-order

- finite-difference time-domain scheme using a symplectic integrator propagator[J]. IEEE Transactions on Microwave Theory and Techniques, 2001, 49(9):1640-1648.
- [7] S. V. Georgakopoulos, C. R. Birtcher, C. A. Balanis, and R. A. Renaut. Higher-order finite-difference schemes for electromagnetic radiation, scattering, and penetration, Part I: Theory[J]. IEEE Antennas and Propagation Magazine, 2002, 44(1):134-142.
- [8] S. V. Georgakopoulos, C. R. Birtcher, C. A. Balanis, and R. A. Renaut. Higher-order finite-difference schemes for electromagnetic radiation, scattering, and penetration, Part 2: Applications[J]. IEEE Antennas and Propagation Magazine, 2002, 44(2):92-101.
- [9] A. Taflove, etc. Advances in Computational Electrodynamics: The Finite-Difference Time-Domain Method[M]. Norwood, MA: Artech House, 1998.
- [10] J. L. Young, D. Gaitonde, and J. S. Shang. Toward the construction of a fourth-order difference scheme for transient EM wave simulation: staggered grid approach[J]. IEEE Transactions on Antennas and Propagation, 1997, 45(11):1573-1580.
- [11] J. S. Shang. High-order compact-difference schemes for time-dependent Maxwell equations[J]. Journal of Computational Physics, 1999, 153(2):312-333.
- [12] F. M. Dopico and C. R. Johnson. Complementary bases in symplectic matrices and a proof that their determinant is one[J]. Linear Algebra and Its Applications, 2006, 419(2-3):772-778.
- [13] W. C. Chew. Waves and Fields in Inhomogenous Media[M]. New York: Van Nostrand Reinhold, 1990.
- [14] S. Zhao and G. W. Wei. High-order FDTD methods via derivative matching for Maxwell's equations with material interfaces[J]. Journal of Computational Physics, 2004, 200(1):60-103.
- [15] J. Fang. Time domain finite difference computation for Maxwell's equations[D]. Berkeley, CA: Ph.D. dissertation, Univ. California, 1989.
- [16] M. Kusaf, A. Y. Oztoprak, and D. S. Daoud. Optimized exponential operator coefficients for symplectic FDTD method[J]. IEEE Microwave and Wireless Components Letters, 2005, 15(2):86-88.
- [17] M. Kusaf and A. Y. Oztoprak. Higher stability limits for the symplectic FDTD method by making use of Chebyshev polynomials[J]. IEEE Microwave and Wireless Components Letters, 2006, 16(11):579-581.
- [18] A. Yefet and P. G. Petropoulos. A staggered fourth-order accurate explicit finite difference scheme for the time-domain Maxwell's equations[J]. Journal of Computational Physics, 2001, 168(2):286-315.

第四章 高阶辛算法中的关键技术

§4.1. 引言

上一章我们已经建立了麦克斯韦方程的离散辛框架，本章我们开始探讨将高阶辛时域有限差分法具体应用到时域电磁仿真中所必需的三大关键技术：总场散射场分离技术、完全匹配层技术、近远场变换技术。

在电磁散射仿真中，平面波源的引入，主要有纯散射场技术和总场散射场分离技术[1, 2]两种。前者直接将入射场波源条件，加在导体边界或者介质体内部，且整个计算区域仿真的皆是散射场。该技术对于金属目标操作简单，只需在边界上把散射场设置成负的入射场即可。但对于介质仿真，就相对繁琐，要在其内部所有区域进行设置。纯散射场技术的另一缺点是会引入非物理的相减噪声，从而影响计算精度。而总场散射场分离技术，是将计算区域划分成总场区和散射场区，然后在区域分界面上修改电磁场分量的迭代公式。该技术可以很方便地引入平面波源，增加了计算的动态范围（约 30dB）。但对于高阶算法，如时域多分辨率方法，电磁场量之间的相互作用较传统的 FDTD 方法强，因此处理分界面的过程将十分繁琐。且受尺度函数截断误差因素的影响，在无任何散射目标的情况下，仍有少量入射波从总场区泄漏到散射场区。基于上述原因，很多高阶方法采用的是纯散射场技术而非总场散射场分离技术。

吸收边界条件的发展脉络主要分为两条，一个是基于数学中的算子理论或误差相消技术，从波动方程入手。包括简单的行波吸收边界条件[3]、Mur 吸收边界条件[4]、超吸收边界条件[5]等；另一个是基于物理概念，从阻抗匹配的角度入手。1996 年，Berenger 提出的完全匹配层（PML）吸收边界条件[6]是在这个方向上的开创性贡献。该方法在截断边界处设置一种特殊的介质层，该层介质的波阻抗与相邻介质的波阻抗完全匹配，因此入射波可以无反射的穿过分界面进入 PML 层。又因为 PML 为有耗介质，能使进入的透射波以较快速率衰减。据报道，PML 的全局反射误差在 -60dB 以下，而以前的 2 阶 Mur 吸收边界只能达到 -30dB。此后，众多学者开始了对 PML 吸收边界条件的改进和发展工作，包括能和麦克斯韦方程形式保持一致的复坐标 PML[7]，能吸收低频波的各向异性 PML[8]，更加

灵活高效的卷积 PML[9]，和吸收效果更好的混合吸收边界条件[10]等等。

为了求得远区的散射场，我们必须采用近远场外推技术。首先，要在总场和散射场连接边界与 PML 吸收边界之间建立一个虚拟的封闭表面，称为输出边界或数据存储边界；然后，根据等效原理，求出其上的等效电磁流；最后，通过基于矢量势的电磁场积分公式求解远区散射场。对于单频入射波，我们采用相位滞后的方法[11]来提取电磁场值的振幅和相位，从而求出等效电磁流；对于高斯脉冲等宽频带入射电磁波，一般采用傅里叶变换法[12]或者时域外推法[13, 14]。由于采用了交错差分，电磁场的空间位置相差半个网格，所以需要采用平均值法或双回路积分的方式[11]来克服这个缺点。最近，关于球多极子展开 (Spherical-Multipole Representation) [15]等新的近远场外推方法也在发展之中。

上述这些技术，对于传统的 FDTD 方法已经日趋成熟。但怎样将它们推广到高阶，在国际上的相关工作也仅仅是开了个头。高阶算法高精度、低色散的优势，必须靠这三种技术的支撑才能凸现。而不加改进直接将低阶技术移植到高阶，是无法取得令人满意的数值结果的。本章我们主要探讨上述三种技术的高阶推广问题。

§4.2. 高阶总场散射场分离

同低阶一样，我们根据总场和散射场分界面的场值连续性条件，来修正需要更新的场量。如果迭代公式左边的场量（需要更新的场量）在总场区，我们则需要将右侧在散射场区的场量加上入射场值；如果迭代公式左侧的场量（需要更新的场量）在散射场区，我们则需要将右侧在总场区的场量扣除入射场值。但同低阶算法不同的是，高阶算法需要在分界面附近处理更多的场量。

不失一般性，以 m 级 SFDTD($p,4$) 算法为例，假设电场 x 方向极化， z 方向传播，总场在 $[i_1, i_2] \times [j_1, j_2] \times [k_1, k_2]$ 的网格区域内。

如图 4.1 所示， $\hat{E}_x$ 场在平面 $k = k_1$ 的更新公式如下

$$\hat{E}_x^{n+l/m}(i + \frac{1}{2}, j, k_1 - 1) = \hat{E}_x^{n+l/m}(i + \frac{1}{2}, j, k_1 - 1) + \alpha_{z_2} \times H_{y,inc}^{n+l/m}(k_1 + \frac{1}{2}) \quad (4.1)$$

$$\begin{aligned} \hat{E}_x^{n+l/m}(i+\frac{1}{2}, j, k_1) &= \hat{E}_x^{n+l/m}(i+\frac{1}{2}, j, k_1) + \alpha_{z1} \times H_{y,inc}^{n+l/m}(k_1 - \frac{1}{2}) \\ &+ \alpha_{z2} \times H_{y,inc}^{n+l/m}(k_1 - \frac{3}{2}) \end{aligned} \quad (4.2)$$

$$\hat{E}_x^{n+l/m}(i+\frac{1}{2}, j, k_1+1) = \hat{E}_x^{n+l/m}(i+\frac{1}{2}, j, k_1+1) + \alpha_{z2} \times H_{y,inc}^{n+l/m}(k_1 - \frac{1}{2}) \quad (4.3)$$

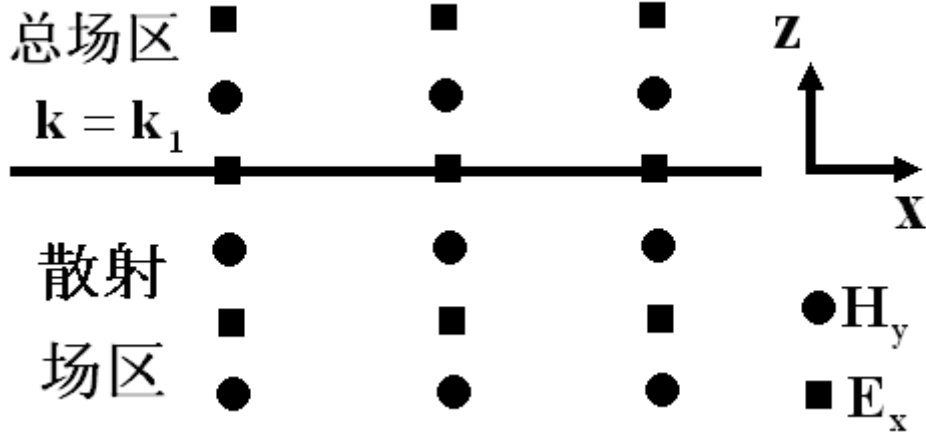


图 4.1 总场散射场区的电磁场分布图。圆圈代表 H_y 场，方框代表 E_x 场。直线上方包括直线为总场区，直线下方为散射场区。

在平面 $k = k_2$ 处， $\hat{E}_x$ 场的更新公式如下

$$\hat{E}_x^{n+l/m}(i+\frac{1}{2}, j, k_2-1) = \hat{E}_x^{n+l/m}(i+\frac{1}{2}, j, k_2-1) - \alpha_{z2} \times H_{y,inc}^{n+l/m}(k_2 + \frac{1}{2}) \quad (4.4)$$

$$\begin{aligned} \hat{E}_x^{n+l/m}(i+\frac{1}{2}, j, k_2) &= \hat{E}_x^{n+l/m}(i+\frac{1}{2}, j, k_2) - \alpha_{z1} \times H_{y,inc}^{n+l/m}(k_2 + \frac{1}{2}) \\ &- \alpha_{z2} \times H_{y,inc}^{n+l/m}(k_2 + \frac{3}{2}) \end{aligned} \quad (4.5)$$

$$\hat{E}_x^{n+l/m}(i+\frac{1}{2}, j, k_2+1) = \hat{E}_x^{n+l/m}(i+\frac{1}{2}, j, k_2+1) - \alpha_{z2} \times H_{y,inc}^{n+l/m}(k_2 - \frac{1}{2}) \quad (4.6)$$

在公式(4.1)–(4.6)中， $H_{y,inc}$ 为入射磁场。考虑到 Yee 网格离散条件下 $\hat{E}_x$ 场的空间分布，上面公式中 i, j 的范围是： $i_1 \leq i \leq i_2 - 1$ ， $j_1 \leq j \leq j_2$ 。

同理，电场 $\hat{E}_z$ 在 $i = i_1$ 平面的更新公式为：

$$\hat{E}_z^{n+l/m}(i_1-1, j, k+\frac{1}{2}) = \hat{E}_z^{n+l/m}(i_1-1, j, k+\frac{1}{2}) - \alpha_{x2} \times H_{y,inc}^{n+l/m}(k+\frac{1}{2}) \quad (4.7)$$

$$\begin{aligned} \hat{E}_z^{n+l/m}(i_1, j, k + \frac{1}{2}) &= \hat{E}_z^{n+l/m}(i_1, j, k + \frac{1}{2}) - \alpha_{x1} \times H_{y,inc}^{n+l/m}(k + \frac{1}{2}) \\ &- \alpha_{x2} \times H_{y,inc}^{n+l/m}(k + \frac{1}{2}) \end{aligned} \quad (4.8)$$

$$\hat{E}_z^{n+l/m}(i_1 + 1, j, k + \frac{1}{2}) = \hat{E}_z^{n+l/m}(i_1 + 1, j, k + \frac{1}{2}) - \alpha_{x2} \times H_{y,inc}^{n+l/m}(k + \frac{1}{2}) \quad (4.9)$$

电场 $\hat{E}_z$ 在 $i = i_2$ 平面的更新公式为

$$\hat{E}_z^{n+l/m}(i_2 - 1, j, k + \frac{1}{2}) = \hat{E}_z^{n+l/m}(i_2 - 1, j, k + \frac{1}{2}) + \alpha_{x2} \times H_{y,inc}^{n+l/m}(k + \frac{1}{2}) \quad (4.10)$$

$$\begin{aligned} \hat{E}_z^{n+l/m}(i_2, j, k + \frac{1}{2}) &= \hat{E}_z^{n+l/m}(i_2, j, k + \frac{1}{2}) + \alpha_{x1} \times H_{y,inc}^{n+l/m}(k + \frac{1}{2}) \\ &+ \alpha_{x2} \times H_{y,inc}^{n+l/m}(k + \frac{1}{2}) \end{aligned} \quad (4.11)$$

$$\hat{E}_z^{n+l/m}(i_2 + 1, j, k + \frac{1}{2}) = \hat{E}_z^{n+l/m}(i_2 + 1, j, k + \frac{1}{2}) + \alpha_{x2} \times H_{y,inc}^{n+l/m}(k + \frac{1}{2}) \quad (4.12)$$

在 (4.7-4.12) 中, $j_1 \leq j \leq j_2$, $k_1 \leq k \leq k_2 - 1$ 。

采用类似方法, 我们还需要处理 H_y 和 H_z 场量, 加上上面的 $\hat{E}_x$ 和 $\hat{E}_z$, 一共四个场量需要处理。

对于入射场的产生, 我们可利用 1 维自由空间中的迭代公式来实现。对于入射电场分量 $\hat{E}_{x,inc}$ 的迭代公式如 (4.13) 所示

$$\begin{aligned} \hat{E}_{x,inc}^{n+l/m}(k) &= \hat{E}_{x,inc}^{n+(l-1)/m}(k) - \alpha_{z1} \times [H_{y,inc}^{n+l/m}(k + \frac{1}{2}) - H_{y,inc}^{n+l/m}(k - \frac{1}{2})] \\ &- \alpha_{z2} \times [H_{y,inc}^{n+l/m}(k + \frac{3}{2}) - H_{y,inc}^{n+l/m}(k - \frac{3}{2})] \end{aligned} \quad (4.13)$$

对于入射磁场分量 $H_{y,inc}$ 的迭代公式如 (4.14) 所示

$$\begin{aligned} H_{y,inc}^{n+l/m}(k + \frac{1}{2}) &= H_{y,inc}^{n+(l-1)/m}(k + \frac{1}{2}) - \beta_{z1} \times [\hat{E}_{x,inc}^{n+(l-1)/m}(k + 1) - \hat{E}_{x,inc}^{n+(l-1)/m}(k)] \\ &- \beta_{z2} \times [\hat{E}_{x,inc}^{n+(l-1)/m}(k + 2) - \hat{E}_{x,inc}^{n+(l-1)/m}(k - 1)] \end{aligned} \quad (4.14)$$

在 $k = k_s$ 处, 我们可以馈入任意激励源 $\zeta(t)$

$$\hat{E}_{x,inc}^{n+l/m}(k_s) = \zeta^{n+l/m}((n + \tau_l)\Delta_t), \quad \tau_l = \sum_{r=1}^l c_r \quad (4.15)$$

这里, c_r 是辛传播子, 已经在式 (3.10) 中给出定义。

对于单频入射波， $\zeta(t)$ 一般用正弦源，即 $\zeta(t) = \sin(\omega t)$ ， ω 为角频率；为了缩短稳态时间，减少冲击效应，可引入升余弦函数作为开关函数，即 $\zeta(t) = \sin(\omega t) \times 0.5[1 - \cos(2\pi t/w)]$ ， $0 \leq t \leq w$ ； $\zeta(t) = \sin(\omega t)$ ， $t > w$ 。这里 w 是脉冲底座宽度，一般取正弦的 1-2 个周期时间。

为了获得目标的宽带电磁响应，我们一般选用高斯脉冲源或调制高斯脉冲源。对于前者， $\zeta(t) = \exp(-\frac{4\pi(t-T_0)^2}{W^2})$ ，其有效的频谱范围 $f \in [0, 2/W]$ ， T_0 决定了脉冲的平滑程度和上升时间。 T_0 越大，波形越光滑，但到达最大值的时间越长。对于后者， $\zeta(t) = -\cos(\omega t) \exp(-\frac{4\pi(t-T_0)^2}{W^2})$ ，由于余弦函数的频谱搬移作用，其有效的频谱范围 $f \in [\omega/2\pi - 2/W, \omega/2\pi + 2/W]$ 。

下面我们以调制高斯脉冲源为例，验证该高阶近远场变换技术。总场网格区域 $[11,30] \times [11,30] \times [11,30]$ ， x, y, z 方向空间步长均为 $3mm$ ，稳定度常数 $CFL_s = 0.7$ 。调制高斯脉冲中心频率 $10GHz$ ， $W = 1ns$ ， $T_0 = 0.325ns$ ，扫频范围 $[8GHz, 12GHz]$ 。我们记录 E_x 场在平面 $i = 20$ 的场值，算法采用 SFDTD(4, 4) 方法。在时间步 $n = 40$ 时，其波形如图 4.2 所示。从图中可以看出，没有场量泄漏到散射场区。

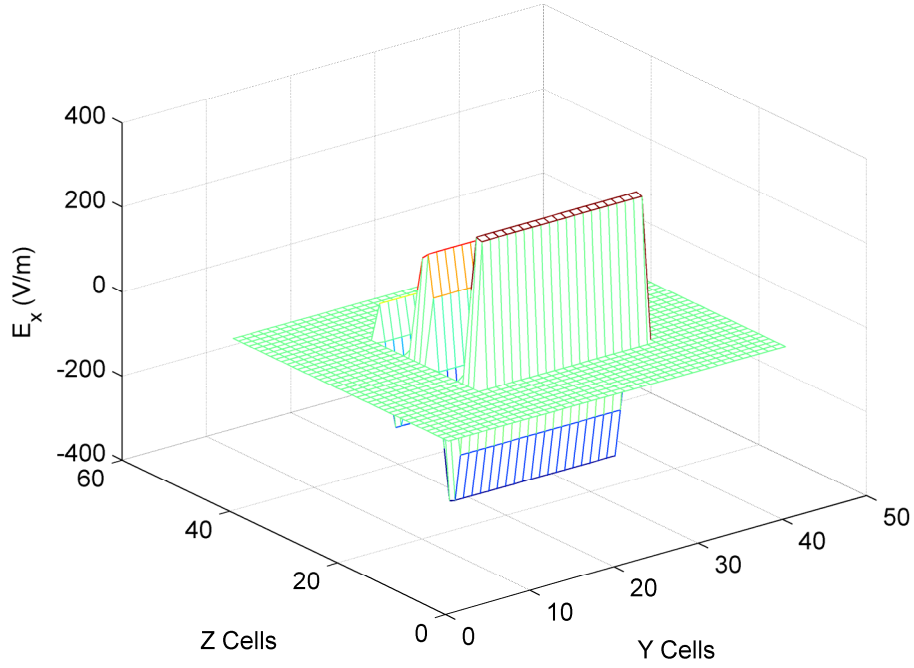


图 4.2 调制高斯脉冲入射平面波源，算法采用 SFDTD (4, 4) 方法。

为了评估高阶总场散射场分离技术的场值泄漏情况，我们将迭代时间增加到 2000 个时间步。结果，泄漏到散射场区的电场的最大值低于 10^{-11} 量级。这说明在粗网格和高的稳定度条件下，高阶总场散射场分离技术的数值结果是令人满意的。

接下来，我们用 10GHz 的余弦源进行试验，分析区域中心 (20,20,20) 处的时域场值。余弦波经过 200 个周期的行进后，我们记录其一个周期的波形(图 4.3)。稳定度常数 $CFL_s = 0.5$ ，空间分辨率每波长 6 个采样点，算法采用 FDTD (2, 2) 方法和 SFDTD (4, 4) 方法。从图中可以看出，高阶辛算法较传统的 FDTD 法有明显的优势。

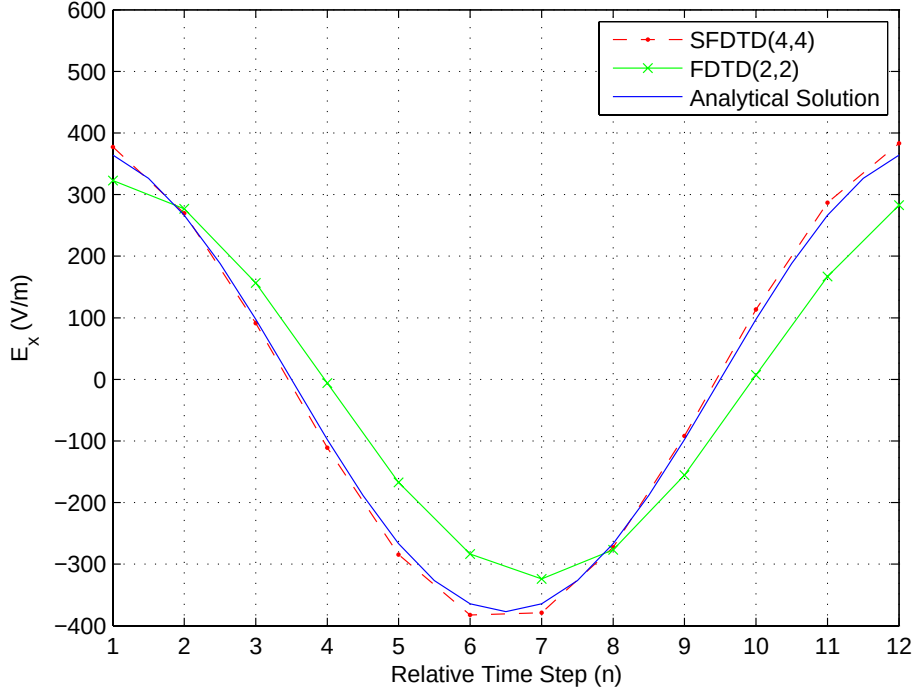


图 4.3 区域中心的 E_x 场迭代 200 个周期后的波形，算法采用 FDTD(2, 2) 方法和 SFDTD(4, 4) 方法。稳定度常数 $CFL_\delta = 0.5$ ，空间分辨率每波长 6 个采样点。

§4.3. 高阶完全匹配层

由于计算机资源的限制，为了模拟自由空间的电磁散射或辐射问题，必须采用 PML 吸收边界条件截断无限维的空间。基于分裂场技术的高阶完全匹配层和低阶完全匹配层之间并没有本质区别，只是采用了高阶指数差分的形式。

以 $\hat{E}_x$ 场为例，根据第三章有耗介质迭代公式 (3.29)，在 PML 区域内，将 x 方向极化的电场分量分解成 y 方向传播的子分量 $\hat{E}_{xy}$ 和 z 方向传播的子分量 $\hat{E}_{xz}$ 。

$$\hat{E}_x = \hat{E}_{xy} + \hat{E}_{xz} \quad (4.16)$$

其沿 y 方向传播子分量的迭代公式为

$$\begin{aligned} \hat{E}_{xy}^{n+l/m}(i + \frac{1}{2}, j, k) = & \exp(-\xi) \times \hat{E}_{xy}^{n+(l-1)/m}(i + \frac{1}{2}, j, k) + \frac{1 - \exp(-\xi)}{\xi} \times \\ & \{ \alpha_{y1} \times [H_z^{n+l/m}(i + \frac{1}{2}, j + \frac{1}{2}, k) - H_z^{n+l/m}(i + \frac{1}{2}, j - \frac{1}{2}, k)] \\ & + \alpha_{y2} \times [H_z^{n+l/m}(i + \frac{1}{2}, j + \frac{3}{2}, k) - H_z^{n+l/m}(i + \frac{1}{2}, j - \frac{3}{2}, k)] \} \end{aligned} \quad (4.17)$$

这里, $\xi = \frac{d_l \Delta_l \sigma_y(i + \frac{1}{2}, j, k)}{\varepsilon_0}$ 。

尽管理论上已证明单层半空间的 PML 就可以完全吸收不同频率和不同角度的平面波。但由于计算机资源的限制和数值误差的影响, 必须使用多层有限厚度的 PML 才能获得令人满意的吸收效果。(1) 在自由空间和 PML 层交界处(吸收边界内侧), σ_y 为 0。因此, PML 介质的阻抗和自由空间的阻抗恰好匹配。(2) 随着出射波(Outgoing Wave)沿 y 轴向 PML 区域传播, σ_y 渐变增大, PML 介质的损耗也就增大。因此, 该出射波也就逐步地衰减, 且已证明这种衰减是指数级的。

(3) 在吸收边界外侧, 一般采用金属边界截断。因此, 仍有少量的出射波被反射回 PML 层成为入射波(Incoming Wave), 传播到散射场区。为了进一步减少这种反射, 可以增大 PML 的层数, 但也就增加了额外的内存和计算时间。当然, 我们也可以在最外侧使用 Mur 吸收边界条件, 来达到同样的目的。

特别的, σ_y 的渐变规律一般采用下面的多项式形式

$$\sigma_y(\Lambda) = \sigma_{y,\max} \left(\frac{\Lambda}{\Gamma} \right)^\kappa \quad (4.18)$$

这里, Λ 是 PML 介质到吸收边界内侧的距离, Γ 是 PML 的厚度, $\sigma_{y,\max}$ 决定 PML 层的最大电导率, κ 决定电导率变化的快慢。从吸收边界内侧到吸收边界外侧, σ_y 也就从 0 增加到 $\sigma_{y,\max}$ 。一般的, PML 区域的电导率采用局部材质参数, 即 σ_y 采用电场 $\hat{E}_x(i + \frac{1}{2}, j, k)$ 的实际三维空间坐标 $((i + \frac{1}{2})\Delta_x, j\Delta_y, k\Delta_z)$ 处的电导率。根据我们三维数值试验的结果, κ 一般取 2 或 3 可以获得很好的吸收效果。且当 $\kappa = 3$ 时, $\sigma_{y,\max}$ 可设置如下

$$\sigma_{y,\max} = \frac{0.08}{\sqrt{\mu_r^b \varepsilon_r^b \Delta_y}} \quad (4.19)$$

这里, ε_r^b 和 μ_r^b 为与 PML 相邻的介质(背景介质)的相对介电常数和相对磁导率。

在求解自由空间中目标的散射或辐射问题时, μ_r^b 和 ε_r^b 皆为 1。

同理, 沿 z 方向传播子分量 $\hat{E}_{xz}$ 的迭代公式为

$$\begin{aligned} \hat{E}_{xz}^{n+l/m}(i+\frac{1}{2}, j, k) = & \exp(-\xi) \times \hat{E}_{xz}^{n+(l-1)/m}(i+\frac{1}{2}, j, k) + \frac{1-\exp(-\xi)}{\xi} \times \\ & \{-\alpha_{z1} \times [H_y^{n+l/m}(i+\frac{1}{2}, j, k+\frac{1}{2}) - H_y^{n+l/m}(i+\frac{1}{2}, j, k-\frac{1}{2})] \\ & - \alpha_{z2} \times [H_y^{n+l/m}(i+\frac{1}{2}, j, k+\frac{3}{2}) - H_y^{n+l/m}(i+\frac{1}{2}, j, k-\frac{3}{2})]\} \end{aligned} \quad (4.20)$$

这里, $\xi = \frac{d_l \Delta_l \sigma_z(i+\frac{1}{2}, j, k)}{\varepsilon_0}$ 。 σ_z 的设置方法和 σ_y 类似。

剩下其它的 5 个场量, 在 PML 区域内也都需要采用分裂场技术进行处理。为了能吸收不同方向的出射波, PML 区域内电导率和磁阻率的设置如图 4.4 所示。

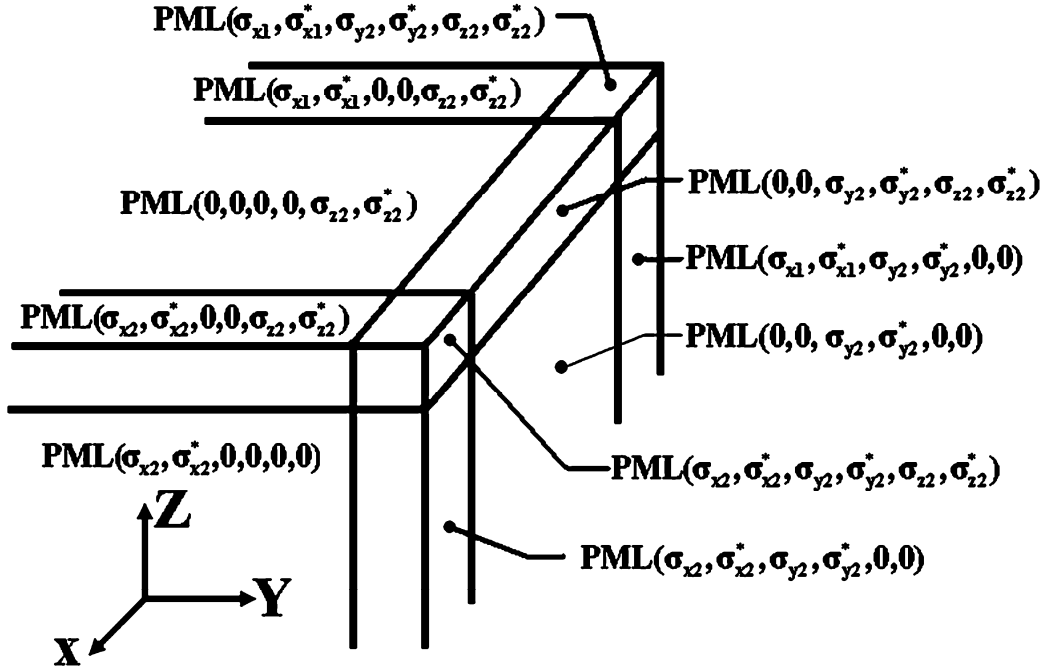


图 4.4 完全匹配层的电导率和磁阻率设置。

为了初步验证高阶 PML 的吸收效果, 我们用正弦点源进行测试。计算总区域占用 $61 \times 61 \times 61$ 网格, 其包括外侧 10 层 PML 区域。点源位于测试区域中心 $(30\frac{1}{2}, 30, 30)$ 。采用立方网格, 空间分辨率 10 点每波长, 稳定度常数 0.5。经 200 个时间步后, 画出 $i = 30\frac{1}{2}$ 平面处电场 x 分量的等值线。从图 4.5 可以看出, 等值线是非常规则的同心圆, 说明吸收效果很好。

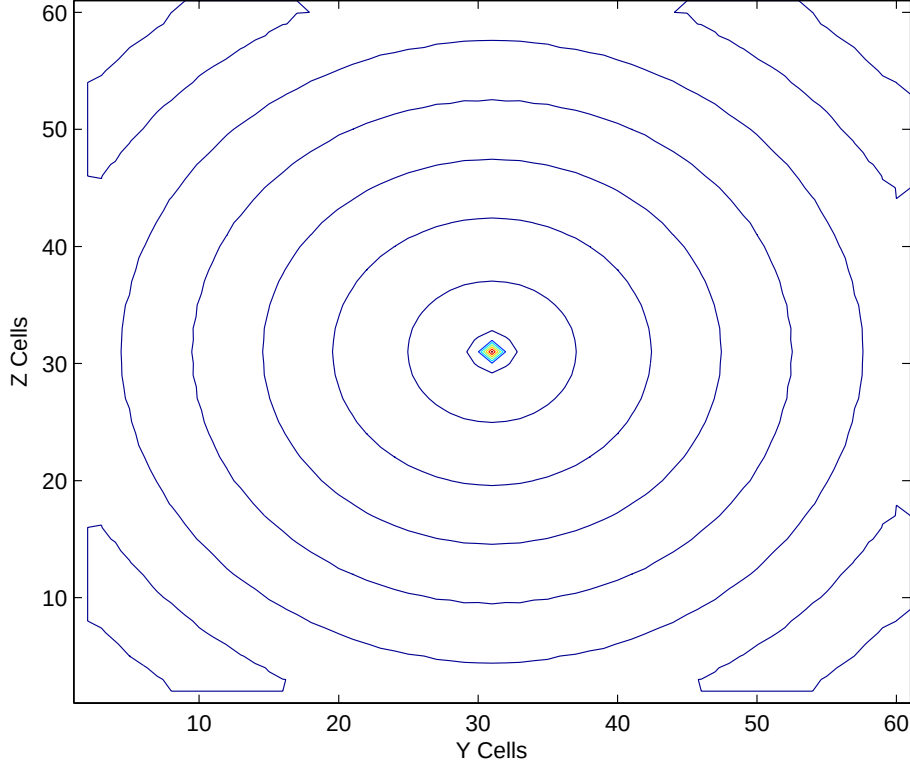


图 4.5 迭代 200 个时间步后 E_x 场的等值线，算法采用 SFDTD (4, 4) 方法。

接下来，我们对比下高阶 PML 和低阶 PML 的吸收效果。数值解总区域占用 $41 \times 41 \times 41$ 网格，其包括外侧 10 层 PML 区域。激励源位于总区域中心 $(20\frac{1}{2}, 20, 20)$ ，为宽带的调制脉冲点源，频谱范围 $[8GHz, 12GHz]$ 。我们记录下 $\hat{E}_x$ 场在 $A(12\frac{1}{2}, 20, 20)$ ， $B(12\frac{1}{2}, 12, 20)$ ， $C(12\frac{1}{2}, 12, 12)$ 三点的前 100 步时域场值 $\hat{E}_x^{Num}$ 。为了使前 100 个时间步内辐射波不会进入 PML 层，参考解的总区域被扩展到 $141 \times 141 \times 141$ 网格。我们记录下相同位置的时域场值 $\hat{E}_x^{Ref}$ 作为数值参考解。定义每个时间步的绝对反射误差

$$\rho(n) = |\hat{E}_x^{Ref}(n) - \hat{E}_x^{Num}(n)| \quad (4.21)$$

这里， n 代表第 n 个时间步。稳定度常数设为 0.5，一致空间步长 (Uniform Spatial Increment) 采用细网格和粗网格两种设置，即 $\Delta_\delta = 2.308mm$ 和 $\Delta_\delta = 4.286mm$ 。

图 4.6 中的 (a-c) 分别给出了 A、B、C 三点在细网格和粗网格条件下的绝对反射误差随时间步的变化曲线。可以看出，高阶 PML 和低阶 PML 的吸收效果是差不多的。

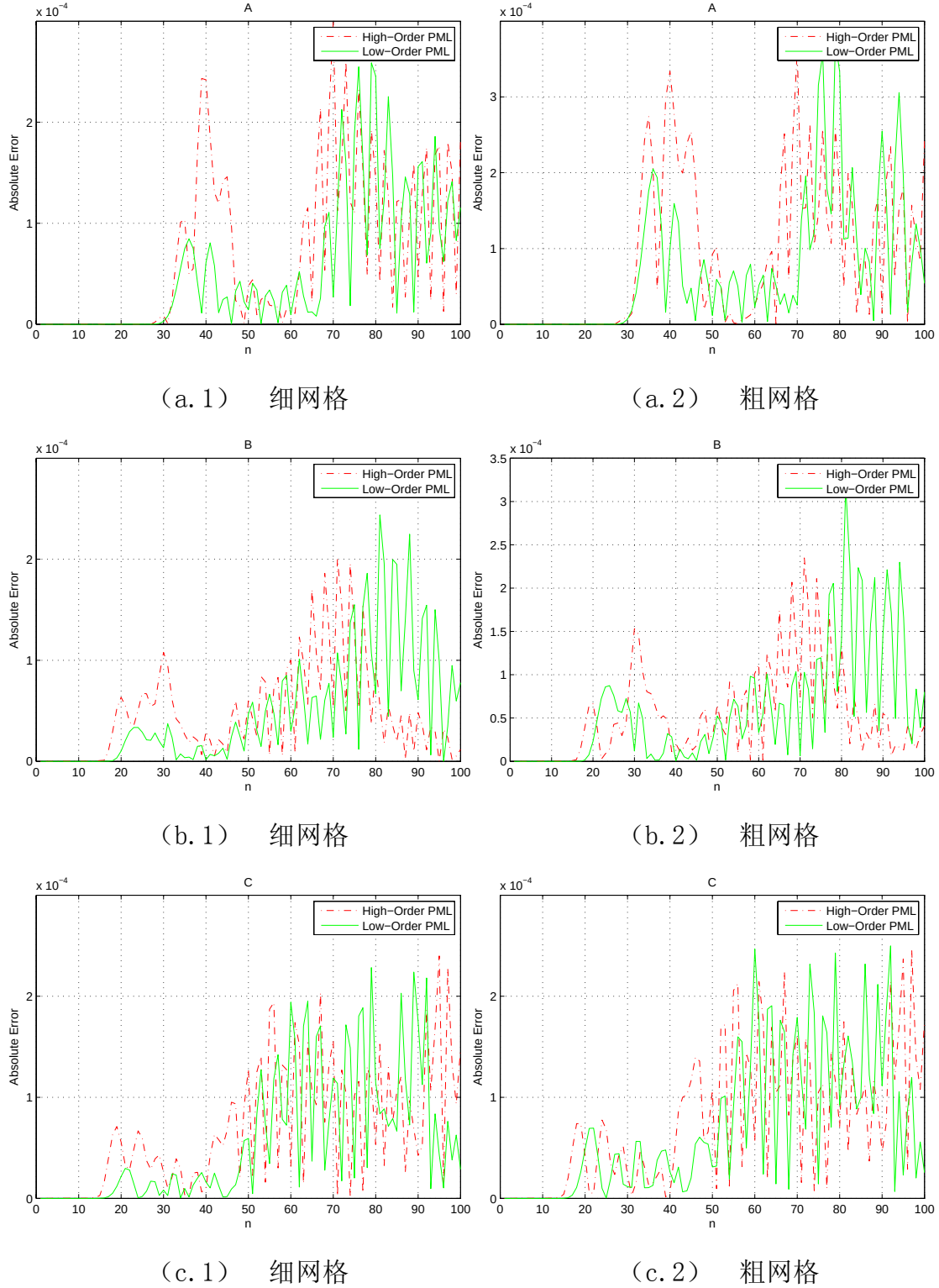


图 4.6 高阶 PML 和低阶 PML 的绝对反射误差随时间步的变化曲线。高阶 PML 在 SFDTD(4, 4) 算法中使用，低阶 PML 在 FDTD(2, 2) 算法中使用。

我们定义最大绝对误差标准

$$\rho_{\max} = \max_{\forall n} \rho(n) \quad (4.22)$$

在表 4.1 中列出了低阶 PML 和高阶 PML 的最大绝对反射误差。在粗网格条件下，高阶 PML 的最大绝对误差是优于低阶 PML 的。且随着空间步长的增加，高阶 PML 的最大绝对误差的增长速度 $\Delta\rho_{\max}$ 慢于低阶 PML。

表 4.1 细网格和粗网格条件下低阶 PML 和高阶 PML 的最大绝对误差。高阶 PML 在 SFDTD(4, 4) 算法中使用，低阶 PML 在 FDTD(2, 2) 算法中使用。

(a) 低阶 PML

$\rho_{\max} (\times 10^{-4})$	A	B	C
Fine Grid	2.589	2.439	2.283
Coarse Grid	3.730	3.174	2.499
$\Delta\rho_{\max} (\times 10^{-4})$	1.14	0.74	0.22

(b) 高阶 PML

$\rho_{\max} (\times 10^{-4})$	A	B	C
Fine Grid	2.987	2.002	2.399
Coarse Grid	3.615	2.349	2.461
$\Delta\rho_{\max} (\times 10^{-4})$	0.63	0.35	0.06

§4.4. 高阶近远场变换

为了求得远区散射场或辐射场，必须先封闭的数据存储面上采用离散时间傅里叶变换求出频域的电场和磁场值，然后根据等效原理求出所有面上的等效电磁流，最后采用近远场变换公式外推远区散射场。近远场变换的原理如图 4.7 所示。

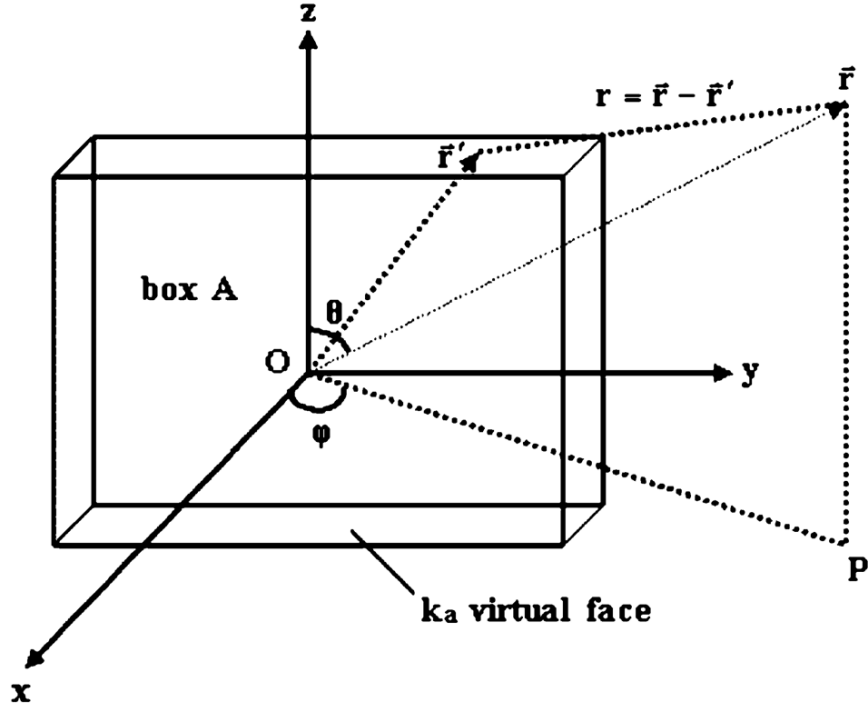


图 4.7 近远场变换图。A 是外推输出面或者数据存储面， $\mathbf{r}$ 是由源点指向场点的矢量， θ ， φ 为场点所在的球面角。

以尺度变换后时域电场的 x 分量为例，其对应的离散时间傅里叶变换

$$\tilde{E}_x(f) = \sum_{n=0}^{n_{\max}} \sum_{l=1}^m \hat{E}_x^{n+l/m}((n+\tau_l)\Delta_t) \exp(-j_0 2\pi f(n+\tau_l)\Delta_t) \quad (4.23)$$

这里， $\tilde{E}$ 是经尺度变换后的频域电场， $n_{\max}$ 是达到稳态所需要的时间步。对于不同的目标取值不同，标准物体较小，复杂目标较大，含空腔的目标最大。

频域等效电流 $\tilde{\mathbf{J}}$ 和尺度变换后的频域等效磁流 $\tilde{\mathbf{J}}_m$ 定义如下

$$\tilde{\mathbf{J}} = \mathbf{n} \times \tilde{\mathbf{H}}, \quad \tilde{\mathbf{J}}_m = -\mathbf{n} \times \tilde{\mathbf{E}} \quad (4.24)$$

这里， $\mathbf{n}$ 是数据存储面的外向法矢。

求出等效电磁流后，按下面的近远场外推公式求解远区散射场

$$\begin{aligned} \tilde{E}_\theta = & -j_0 k_0 \frac{\exp(-j_0 k_0 r)}{4\pi r} [(\tilde{f}_x \cos \theta \cos \varphi + \tilde{f}_y \cos \theta \sin \varphi - \tilde{f}_z \sin \theta) \\ & + (-\tilde{f}_{mx} \sin \varphi + \tilde{f}_{my} \cos \varphi)] \end{aligned} \quad (4.25)$$

$$\begin{aligned} \tilde{E}_\varphi = j_0 k_0 \frac{\exp(-j_0 k_0 r)}{4\pi r} [(\tilde{f}_{mx} \cos \theta \cos \varphi + \tilde{f}_{my} \cos \theta \sin \varphi - \tilde{f}_{mz} \sin \theta) \\ + (\tilde{f}_x \sin \varphi - \tilde{f}_y \cos \varphi)] \end{aligned} \quad (4.26)$$

$$\tilde{f}_\delta = \iint_A \tilde{J}_\delta(r') \exp[j_0 k_0 (x' \sin \theta \cos \varphi + y' \sin \theta \sin \varphi + z' \cos \theta)] ds' \quad (4.27)$$

$$\tilde{f}_{m\delta} = \iint_A \tilde{J}_{m\delta}(r') \exp[j_0 k_0 (x' \sin \theta \cos \varphi + y' \sin \theta \sin \varphi + z' \cos \theta)] ds' \quad (4.28)$$

这里, k_0 是自由空间的波数, r 是源场之间的距离, $\iint_A ds'$ 代表在图 4.7 所示的 6 个数据存储面上对源点进行面积分。

为了用数值方法求出面积分 (4.27-4.28), 必须先将数据存储面分成均匀的平面网格, 再求出网格中心点的等效电磁流, 最后进行求和。然而, 为了得到中心点的等效电磁流, 必须知道中心点的电场和磁场值。由于采用了交错网格而非同位网格, 一个有效的插值操作是必须的。对于传统的 FDTD 方法, 空间差分精度是 2 阶, 因此只需要 2 阶的插值公式就能保持算法的 2 阶精度。而对于高阶辛算法, 由于空间差分是 4 阶的, 所以必须采用 4 阶的插值公式, 才能维持算法的高精度。这个高阶的插值公式在粗网格离散的情况下尤为重要。

对于电场, 我们以 $k = k_a$ 数据存储平面为例, 其高阶插值公式

$$\begin{aligned} \bar{\hat{E}}_x^{n+l/m}(i+\frac{1}{2}, j+\frac{1}{2}, k_a) = \frac{-1}{16} \times [\hat{E}_x^{n+l/m}(i+\frac{1}{2}, j-1, k_a) + \hat{E}_x^{n+l/m}(i+\frac{1}{2}, j+2, k_a)] \\ + \frac{9}{16} \times [\hat{E}_x^{n+l/m}(i+\frac{1}{2}, j, k_a) + \hat{E}_x^{n+l/m}(i+\frac{1}{2}, j+1, k_a)] \end{aligned} \quad (4.29)$$

这里, $\bar{\hat{E}}_x$ 是网格中心点的电场值, 它可以看作是周围电场分量值的平均。低阶的平均只用到了邻近的 2 个电场分量, 而高阶平均则用到了邻近的 4 个电场分量。

对于磁场的处理, 我们可以借鉴由一维小波生成二维小波所采用的张量积 (Tensor Product) 思想。图 4.8 中, 对于中心点的磁场值, 可由邻近的 16 个磁场分量插值得到。而每一个插值点的插值系数 $W_{x,y}$ 是其在两个正交坐标轴投影的插值系数的乘积

$$W_{x,y} = W_x W_y, x \in [i-1 : i+2], y \in [k_a - \frac{3}{2} : k_a + \frac{3}{2}] \quad (4.30)$$

显然, 所有插值点的插值系数之和应为 1, 即 $\sum W_{x,y} = 1$ 。

根据以上阐述，我们不难得到网格中心点磁场的插值公式。以磁场的 x 分量为例，其插值公式如下

$$\begin{aligned}
 \bar{H}_x^{n+l/m}(i+\frac{1}{2}, j+\frac{1}{2}, k_a) = & \frac{1}{256} \times [H_x^{n+l/m}(i-1, j+\frac{1}{2}, k_a-\frac{3}{2}) + H_x^{n+l/m}(i+2, j+\frac{1}{2}, k_a-\frac{3}{2}) \\
 & + H_x^{n+l/m}(i-1, j+\frac{1}{2}, k_a+\frac{3}{2}) + H_x^{n+l/m}(i+2, j+\frac{1}{2}, k_a+\frac{3}{2})] \\
 & + \frac{-9}{256} \times [H_x^{n+l/m}(i, j+\frac{1}{2}, k_a-\frac{3}{2}) + H_x^{n+l/m}(i+1, j+\frac{1}{2}, k_a-\frac{3}{2}) \\
 & + H_x^{n+l/m}(i-1, j+\frac{1}{2}, k_a-\frac{1}{2}) + H_x^{n+l/m}(i+2, j+\frac{1}{2}, k_a-\frac{1}{2}) \\
 & + H_x^{n+l/m}(i-1, j+\frac{1}{2}, k_a+\frac{1}{2}) + H_x^{n+l/m}(i+2, j+\frac{1}{2}, k_a+\frac{1}{2}) \\
 & + H_x^{n+l/m}(i, j+\frac{1}{2}, k_a+\frac{3}{2}) + H_x^{n+l/m}(i+1, j+\frac{1}{2}, k_a+\frac{3}{2})] \\
 & + \frac{81}{256} \times [H_x^{n+l/m}(i, j+\frac{1}{2}, k_a-\frac{1}{2}) + H_x^{n+l/m}(i+1, j+\frac{1}{2}, k_a-\frac{1}{2}) \\
 & + H_x^{n+l/m}(i, j+\frac{1}{2}, k_a+\frac{1}{2}) + H_x^{n+l/m}(i+1, j+\frac{1}{2}, k_a+\frac{1}{2})]
 \end{aligned} \tag{4.31}$$

这里， $\bar{H}_x$ 是网格中心点的磁场值，它是邻近 16 个磁场分量值的平均。

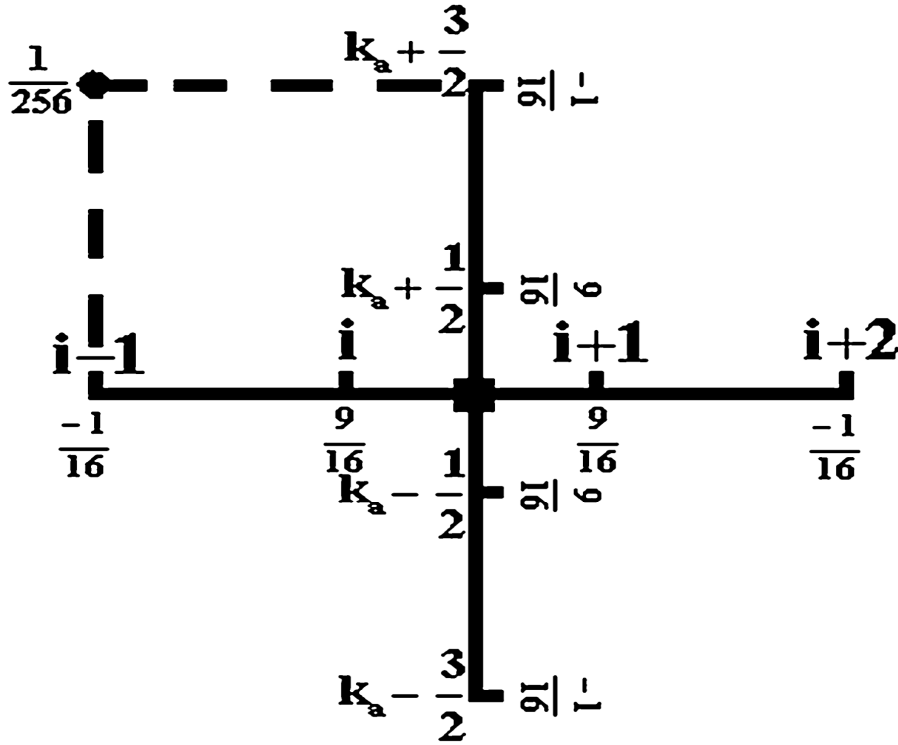


图 4.8 磁场插值示意图。中心方形代表被插值点，左上角的原点代表其中一个插值点。可验证它的插值系数是其在两个正交坐标轴投影的插值系数的乘积。

为了证明该高阶近远场变换技术的有效性，我们分别对立方体和平板的电磁散射问题进行研究。

算例 1。介质立方体的双站散射问题。极化方向沿 x 轴，传播方向沿 z 轴的 10GHz 平面波入射到边长 3cm，相对介电常数 $\varepsilon_r = 2$ 的介质方柱上。一致的空间步长 $\Delta_\delta = 3/8\text{cm}$ ，稳定度常数 $CFL_\delta = 0.5$ 。算法采用 SFDTD(4, 4) 方法，近远场变换分别采用高阶插值和传统的低阶插值两种技术。图画出了 $\theta \in [0^\circ, 90^\circ]$ 范围的 H 面 ($\varphi = 90^\circ$) 双站 RCS ($r_{CS_{dBsm}} = 10\log_{10}(r_{CS_{m^2}})$, $r_{CS_{m^2}} = \lim_{r \rightarrow \infty} 4\pi r^2 \frac{|\mathbf{E}_{sca}|^2}{|\mathbf{E}_{inc}|^2}$) 的绝对误差曲线。参考解采用 FDTD(2, 2) 方法，其空间步长为介质波长的 1/40。从图 4.9 中可以看出，在粗网格条件下，高阶插值的总体误差比低阶插值要小。

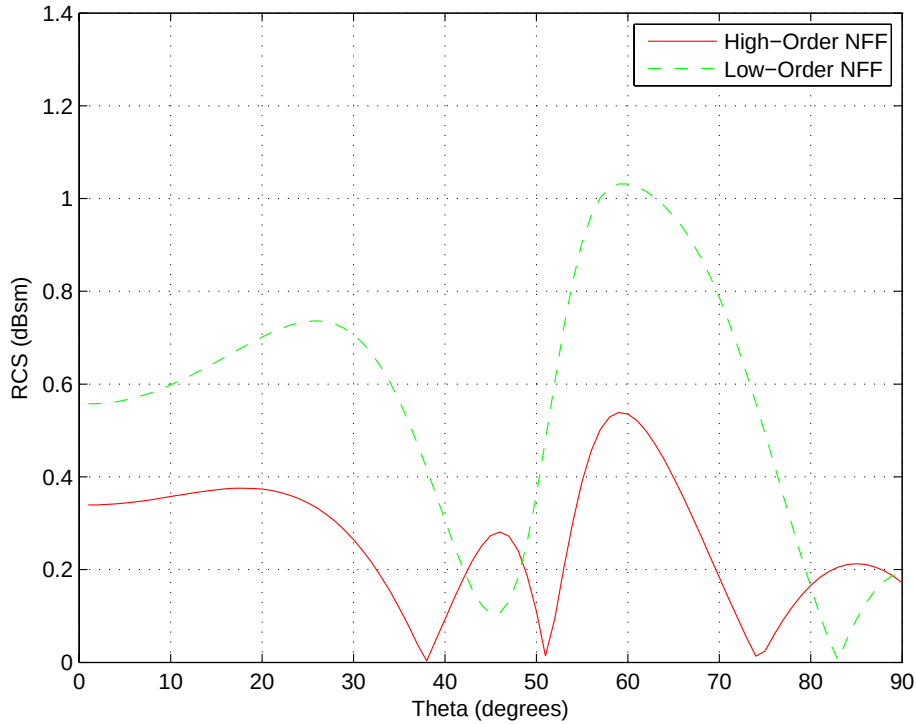


图 4.9 高阶近远场变换和低阶近远场变换的双站 RCS 误差对比。算法采用 SFDTD(4, 4) 方法。

算例 2。导体平板的单站散射问题。极化方向沿 x 轴，传播方向沿 z 轴的调制高斯脉冲入射到边长 3cm 的导体平板上。平板位于 xoy 平面，一致的空间步长

$\Delta_s = 0.3\text{cm}$ ，稳定度常数 $CFL_s = 0.5$ ，调制高斯脉冲频谱范围 $[8\text{GHz}, 12\text{GHz}]$ 。图 4.10 画出了后向 ($\theta = 180^\circ, \varphi = 180^\circ$) 单站 RCS 的扫频曲线。参考解采用 FDTD (2, 2) 方法，其空间步长为真空波长的 $1/40$ 。可以看出，低阶近远场变换的结果有明显的歪曲。

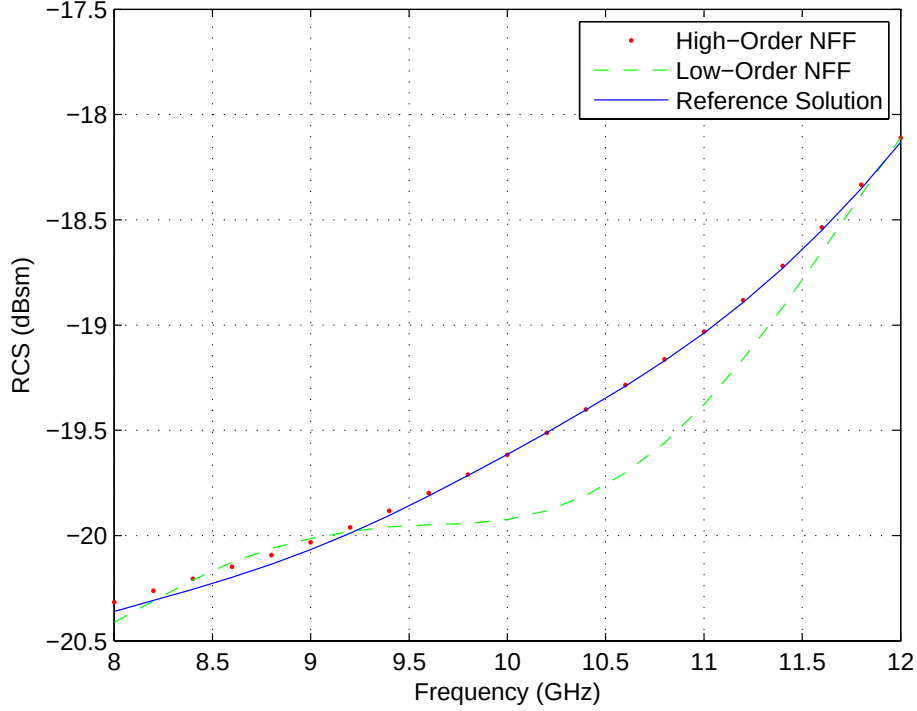


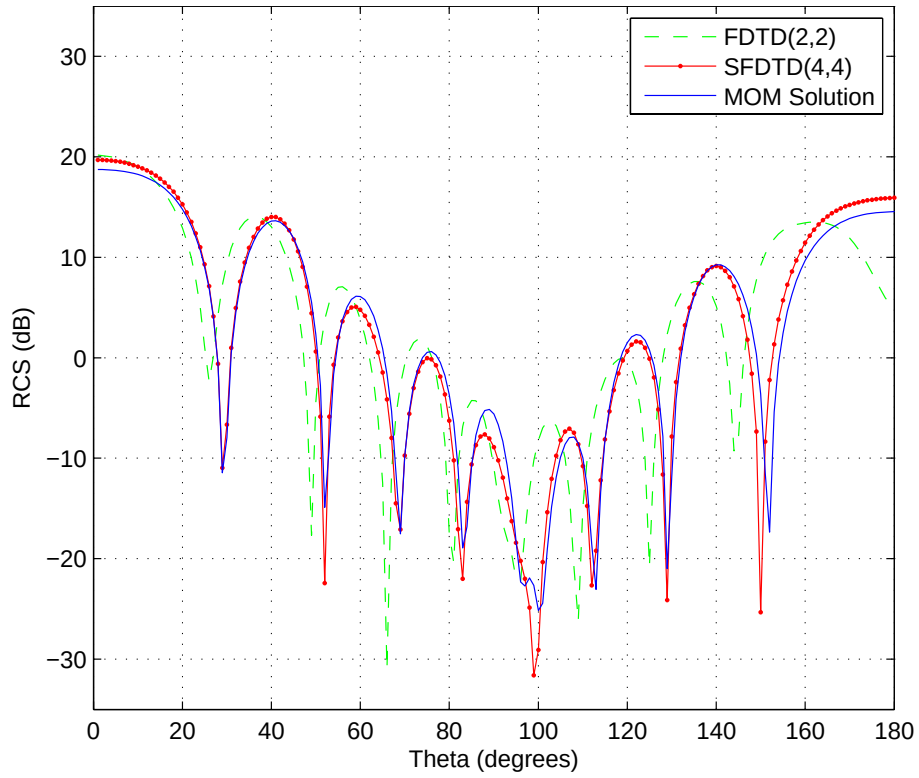
图 4.10 高阶近远场变换和低阶近远场变换计算后向单站 RCS。算法采用 SFDTD (4, 4) 方法。

§4.5. 数值算例

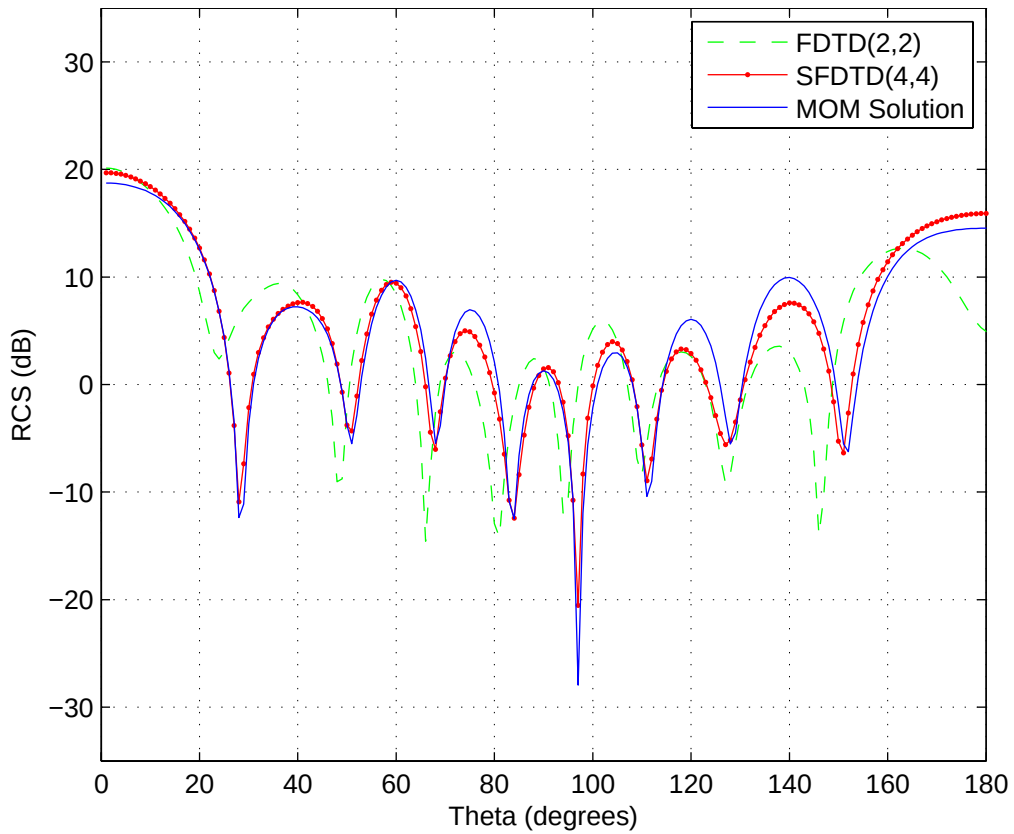
为了深入验证上述三大技术，我们再进行一些数值试验。入射平面波，极化方向 x 方向，传播方向 z 方向，频率 300MHz 。采用 10 层高阶 PML 吸收散射波。从总场散射场边界到吸收边界内侧共 12 个网格，输出边界（数据存储面）位于两者中间。从物体边界到总场散射场边界共 4 个网格。

算例 1. 多体散射问题。两个导体方柱中心沿 z 方向相距 4 个波长，每个方柱边长都为 1 个波长，三个方向采用一致的空间步长，每波长 6 个点，稳定度常数 $CFL_s = 0.5$ 。其 E 面 ($\varphi = 0^\circ$) 和 H 面 ($\varphi = 90^\circ$) 双站 RCS ($r_{cs_{dB}} = 10 \log_{10}(\frac{r_{cs}}{\lambda^2})$)

如图 4.11 所示，算法采用 FDTD (2, 2) 方法和 SFDTD (4, 4) 方法。同传统的时域有限差分法相比，高阶辛算法同矩量法吻合地更好。



(a) E 面



(b) H 面

图 4.11 多体方柱的双站 RCS。算法采用 FDTD(2, 2) 方法和 SFDTD(4, 4) 方法，矩量法作为参考解。采用一致的空间步长，每波长 6 个点，稳定度常数 $CFL_{\delta} = 0.5$ 。

算例 2。包层体散射问题。外包层为 1.5m 的介质方柱($\epsilon_r = 2.2$)，内部是边长 1m 的导体方柱。入射波为调制高斯脉冲，频谱范围[200MHz,400MHz]。一致空间步长 0.125m，稳定度常数 CFL=0.5。图中给出了前向($\theta = 0^\circ$, $\varphi = 0^\circ$) RCS 的扫频结果，有限元方法作为参考解。可以看出，高阶辛算法的精确求解范围可达到 370MHz，而传统时域有限差分法只能到 290MHz。

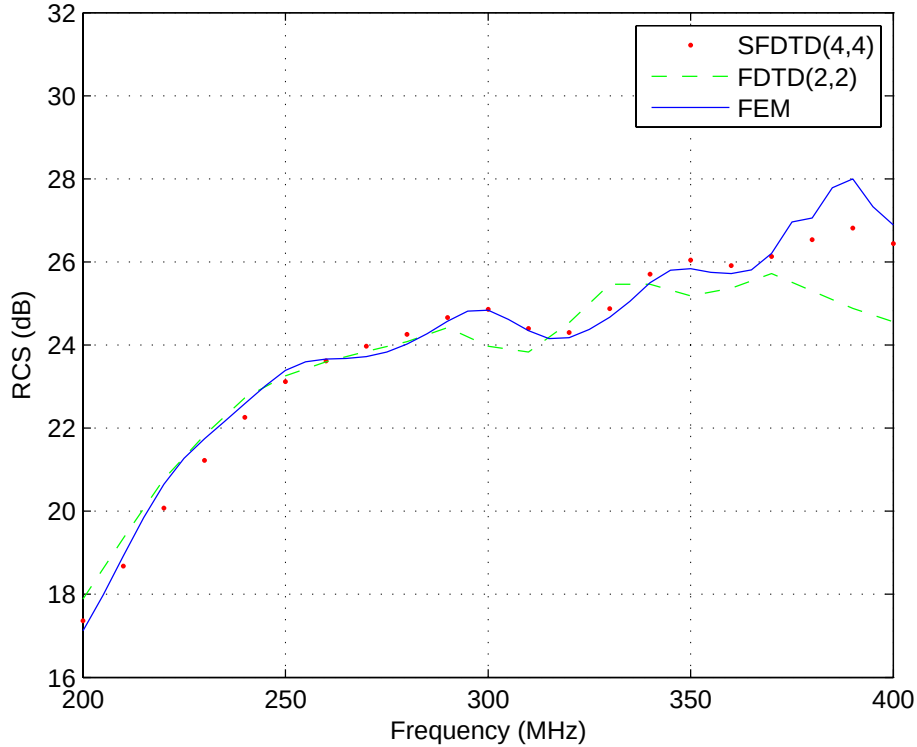


图 4.12 包层体前向扫频 RCS。算法采用 FDTD(2, 2) 方法和 SFDTD(4, 4) 方法，有限元法作为参考解。一致空间步长 0.125m，稳定度常数 CFL=0.5。

§4.6. 小结

本章我们主要研究高阶辛算法的三大关键技术：高阶总场散射场分离技术、高阶完全匹配层技术、和高阶近远场变换技术。

对于高阶总场散射场分离技术，同传统的低阶技术相比，它在总场散射场分

界面上的处理要繁琐,但基本的思路仍是保持场量的连续性。同多分辨率技术所采用的纯散射场技术相比,高阶总场散射场分离技术增大了计算的动态范围。

基于分裂场技术的高阶完全匹配层,采用了高阶指数差分,保证了在粗网格条件下的吸收效果。且随着空间步长的增大,其反射误差的增长率较低阶 PML 要慢。

基于立方插值的高阶近远场变换技术,对电场和磁场分量均做了高阶的平均处理。同低阶近远场变换技术相比,保证了在大的空间步长条件下,精确预估目标的单、双站电磁散射特性。

使用上述三大关键技术,我们仿真了多体目标、包层体目标的电磁散射,获得了令人满意的数值结果。然而,本章中所有目标的建模均采用了结构网格(Structured Grid)或阶梯近似模型。对非曲面散射体(如:立方体、平板等),结构网格可获得工程上需要的精度。但对于曲面目标(如:球、圆柱等)必须采用十分精细的网格剖分(每波长 40 个网格),才能满足工程需求。如此精细的剖分,阻碍了高阶空间差分优势的发挥。因此,我们必须发展若干新的技术,来处理材质的不连续性和模拟金属曲面。

参考文献

- [1] A. Taflové and M. E. Brodwin. Numerical-solution of steady-state electromagnetic scattering problems using time-dependent Maxwell's equations[J]. IEEE Transactions on Microwave Theory and Techniques, 1975, 23(8):623-630.
- [2] A. Taflové. Application of the finite-difference time-domain method to sinusoidal steady-state electromagnetic-penetration problems[J]. IEEE Transactions on Electromagnetic Compatibility, 1980, 22(3):191-202.
- [3] B. Engquist and A. Majda. Absorbing boundary conditions for numerical simulation of waves[J]. Mathematics of Computation, 1977, 31(139):629-651.
- [4] G. Mur. Absorbing boundary conditions for the finite-difference approximation of the time-domain electromagnetic field equations[J]. IEEE Transactions on Electromagnetic Compatibility, 1981, 23(4):377-382.
- [5] J. Fang and K. K. Mei. A super-absorbing boundary algorithm for solving electromagnetic problems by time-domain finite-difference method[C]. Antennas and Propagation Society International Symposium: 1988.
- [6] J. P. Berenger. Three-dimensional perfectly matched layer for the absorption of electromagnetic waves[J]. Journal of Computational Physics, 1996, 127(2):363-379.
- [7] W. C. Chew, J. M. Jin, and E. Michielssen. Complex coordinate stretching as a generalized absorbing boundary condition[J]. Microwave and Optical Technology Letters, 1997, 15(6):363-369.
- [8] S. D. Gedney. An anisotropic PML absorbing media for the FDTD simulation of fields in lossy

- and dispersive media[J]. Electromagnetics, 1996, 16(4):399-415.
- [9] J. A. Roden and S. D. Gedney. Convolution PML (CPML): an efficient FDTD implementation of the CFS-PML for arbitrary media[J]. Microwave and Optical Technology Letters, 2000, 27(5):334-339.
- [10] 王秉中. 计算电磁学[M]. 北京: 科学出版社, 2002.
- [11] 葛德彪, 闫玉波. 电磁波时域有限差分方法[M]. 西安: 西安电子科技大学, 2005.
- [12] A. Taflove. Review of the formulation and applications of the finite-difference time-domain method for numerical modeling of electromagnetic-wave interactions with arbitrary structures[J]. Wave Motion, 1988, 10(6):547-582.
- [13] K. S. Yee, D. Ingham, and K. Shlager. Time-domain extrapolation to the far field based on FDTD calculations[J]. IEEE Transactions on Antennas and Propagation, 1991, 39(3):410-413.
- [14] R. Luebbers, D. Ryan, and J. Beggs. A 2-dimensional time-domain near-zone to far-zone transformation[J]. IEEE Transactions on Antennas and Propagation, 1992, 40(7):848-851.
- [15] C. C. Oetting and L. Klinkenbusch. Near-to-far-field transformation by a time-domain spherical-multipole analysis[J]. IEEE Transactions on Antennas and Propagation, 2005, 53(6):2054-206.

第五章 网格剖分及高阶边界处理

§5.1. 引言

高阶辛算法采用了 4 阶空间交错差分, 有很好的数值色散性和数值精度。从理论上说, 其可在粗网格条件下, 获得和 2 阶差分一样的数值结果。众所周知, 三维时域算法的内存消耗反比于空间步长的 3 次方, 计算复杂度反比于空间步长的 4 次方。所以, 设置大的空间步长对节省计算资源是相当有效的。不幸的是, 不加处理的高阶差分的数值精度只能在均匀媒质中维持, 其在非均匀边界处的精度不到 2 阶甚至更低。且由于采用结构网格对曲面边界进行近似, 若对飞机、导弹等复杂电大目标进行散射分析, 得到的仿真结果将不具有工程参考意义。

对于非均匀边界的电磁建模问题, 亚网格技术[1]、共形网格技术[2-5]、材质平均技术[6]等已经用于传统的 FDTD 方法, 且在网格生成、稳定度控制、自适应剖分等方面都日趋成熟, 产生了像 XFDTD, CST 等常用的工程软件, 其通用性和可靠性都达到了工业级水准。但由于 FDTD 算法本身色散性和稳定性的限制, 对于电大目标的仿真, 如大型的军事目标、天线阵等, 其需要的计算机资源是惊人的。虽然虚拟内存技术, 似乎使内存看似“取之不尽, 用之不竭”, 但这必然是以牺牲计算时间为代价的。从计算机硬件的角度上看, 存取速度的快慢排序依次是: 缓存 (Cache), 内存, 硬盘。虚拟内存本质上利用了硬盘的空间, 因此计算速度极慢。

时空高阶算法的色散性和稳定性令人满意, 但将上述低阶非均匀边界处理技术推广到高阶有相当难度。因而, 高阶算法的材质不连续性和金属曲面处理, 是国际计算电磁学界公认的“Challenging Problems”。为了解决相关问题, 一些学者作了很好的工作。对于 MRTD 方法, 多镜像技术[7]的提出, 部分解决了非曲面目标的边界处理和完全匹配层的边界处理问题, 但其仍采用是结构网格 (阶梯近似) 来近似金属曲面。类似的是 4 阶交错差分中的一侧导数 (One-Sided Difference) 技术[8]和导数匹配 (Derivative Matching) 技术[9], 较多镜像方法, 其收敛率可达 4 阶。但后时不稳定 (Late-Time Stability) 现象和繁琐的操作, 使其无法推广。尽管空间滤波的方法[10]改善了不稳定的问题, 但该方

法和多镜像法一样，忽略了目标自身的曲面几何信息。另外一种可行的方案是，混合亚网格 (Hybrid-Subgridding) 技术 [11]。其思想是在目标边界附近采用 FDTD (2, 2) 方法，网格是细网格，远离边界处采用高阶 FDTD (2, 4) 方法，网格是粗网格。由于差分精度、网格尺寸、稳定度等因素的不同，其需要采用时间和空间的双插值方案，来减少粗细网格之间的非物理反射，这必然会带来计算精度的降低。

在前面学者所做工作的基础上，我们提出了高阶子网格 (High-Order Subcell) 技术来处理材质不连续性问题，提出了高阶共形网格 (High-Order Conformal Grid) 技术来处理金属曲面的电磁建模问题。

§5.2. 阶梯近似模型

在介绍新的高阶子网格技术和高阶共形网格技术之前，我们先回顾下高阶差分中的阶梯近似模型 [12]，这个模型和传统 FDTD 方法使用的模型是一致的。

对于任意 Yee 元胞 (长方体) 的中心点可表示为 $P(i + \frac{1}{2}, j + \frac{1}{2}, k + \frac{1}{2})$ ，其对应的空间三维坐标是： $x = (i + \frac{1}{2})\Delta_x$ ， $y = (j + \frac{1}{2})\Delta_y$ ， $z = (k + \frac{1}{2})\Delta_z$ 。我们根据这个空间三维坐标，可以判断元胞中心点和待仿真目标的位置关系。每个元胞包含的所有电场分量和磁场分量的属性，都由元胞中心点的电磁属性决定。如果该中心点在某导体目标内部，则其所在元胞的全部电磁场场量值都需要置 0；如果该中心点在某介质目标内部，则其所在元胞的全部电磁场场量的材质参数就由该介质决定。

中心点 $P(i + \frac{1}{2}, j + \frac{1}{2}, k + \frac{1}{2})$ 所在元胞包含的电场分量为

$$\begin{aligned} &E_x(i + \frac{1}{2}, j, k), \quad E_x(i + \frac{1}{2}, j + 1, k), \quad E_x(i + \frac{1}{2}, j, k + 1), \quad E_x(i + \frac{1}{2}, j + 1, k + 1) \\ &E_y(i, j + \frac{1}{2}, k), \quad E_y(i + 1, j + \frac{1}{2}, k), \quad E_y(i, j + \frac{1}{2}, k + 1), \quad E_y(i + 1, j + \frac{1}{2}, k + 1) \\ &E_z(i, j, k + \frac{1}{2}), \quad E_z(i + 1, j, k + \frac{1}{2}), \quad E_z(i, j + 1, k + \frac{1}{2}), \quad E_z(i + 1, j + 1, k + \frac{1}{2}) \end{aligned}$$

这 12 个电场分量实际上对应着 Yee 元胞 12 条棱边的中点。

中心点 $P(i + \frac{1}{2}, j + \frac{1}{2}, k + \frac{1}{2})$ 所在元胞包含的磁场分量为

$$H_x(i, j + \frac{1}{2}, k + \frac{1}{2}), \quad H_x(i + 1, j + \frac{1}{2}, k + \frac{1}{2})$$

$$H_y(i+\frac{1}{2}, j, k+\frac{1}{2}), H_y(i+\frac{1}{2}, j+1, k+\frac{1}{2})$$

$$H_z(i+\frac{1}{2}, j+\frac{1}{2}, k), H_z(i+\frac{1}{2}, j+\frac{1}{2}, k+1)$$

这 6 个磁场分量实际上对应着 Yee 元胞 6 个平面的中心。Yee 元胞电场和磁场的位置排布，是一种交错的拓扑结构。它使电场自动满足无散条件，也使麦克斯韦方程的时间演化保持辛结构，但同时造成非均匀边界处理的困难。

然而，上述的阶梯近似模型似乎有个问题，即很难决定公共棱边对应的电场或公共平面对应的磁场，到底属于哪个元胞。事实上，Yee 元胞生成的无穷维空间拓扑中，每条棱边被 4 个元胞共享，每个平面被 2 个元胞共享。对于一个独立的元胞，共有 12 条棱边和 6 个平面。而以全局的无穷维空间考虑，实际上一个元胞包含 3 条棱边和 3 个平面。其中，3 条棱边的中点对应 3 个电场 $E_x(i+\frac{1}{2}, j, k)$, $E_y(i, j+\frac{1}{2}, k)$, $E_z(i, j, k+\frac{1}{2})$ ，3 个平面的中心对应 3 个磁场 $H_x(i, j+\frac{1}{2}, k+\frac{1}{2})$, $H_y(i+\frac{1}{2}, j, k+\frac{1}{2})$, $H_z(i+\frac{1}{2}, j+\frac{1}{2}, k)$ 。结果，一个元胞恰好对应 6 个电磁场分量。图 5.1 画出了 Yee 元胞和它包含的电磁场分量。

对一般目标的阶梯近似建模，首先要生成由三角形张成的表面模型，然后再用“射线穿越”(Ray-Crossing)的方法[13]判断元胞中心点与目标的空间位置关系，最后给每个元胞所对应的电磁场赋上相应的边界条件标识(Identifier)或电磁参数。

图5.2给出了一些散射体的阶梯近似模型。

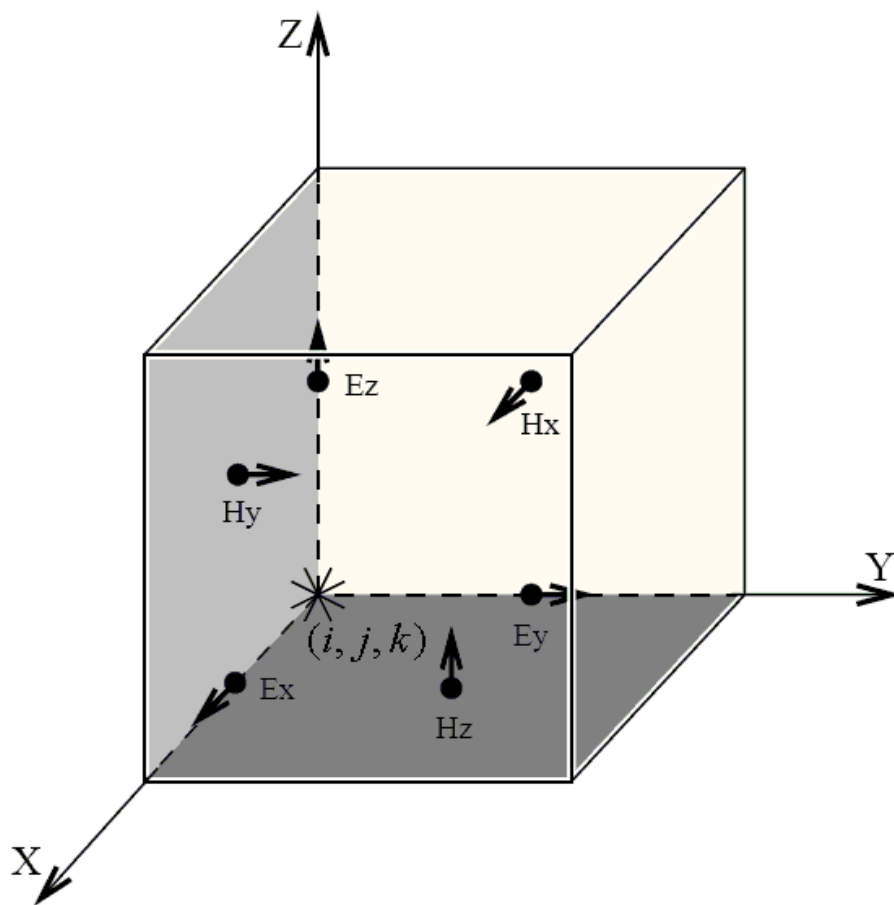
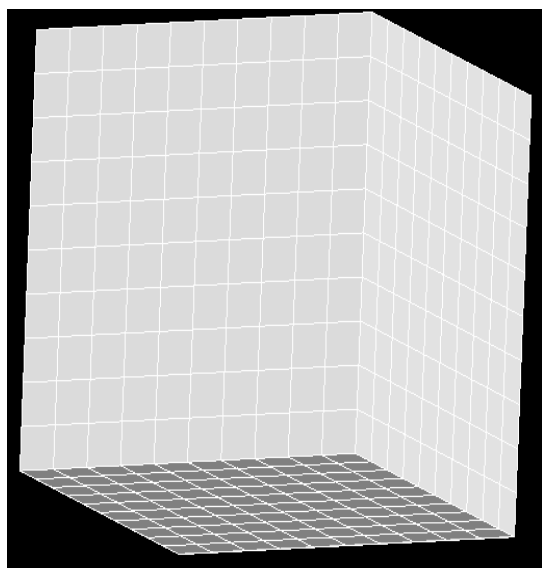
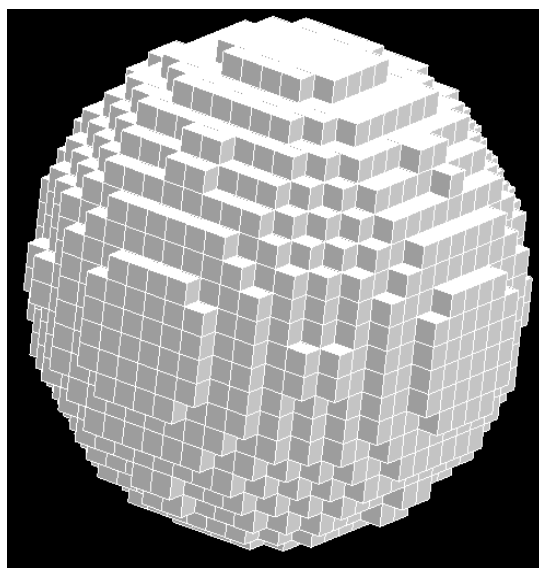


图5.1 Yee元胞和其包含的电磁场分量。其中，星号位置 (i, j, k) 是元胞最内侧的角点。



(a) 立方体



(b) 球

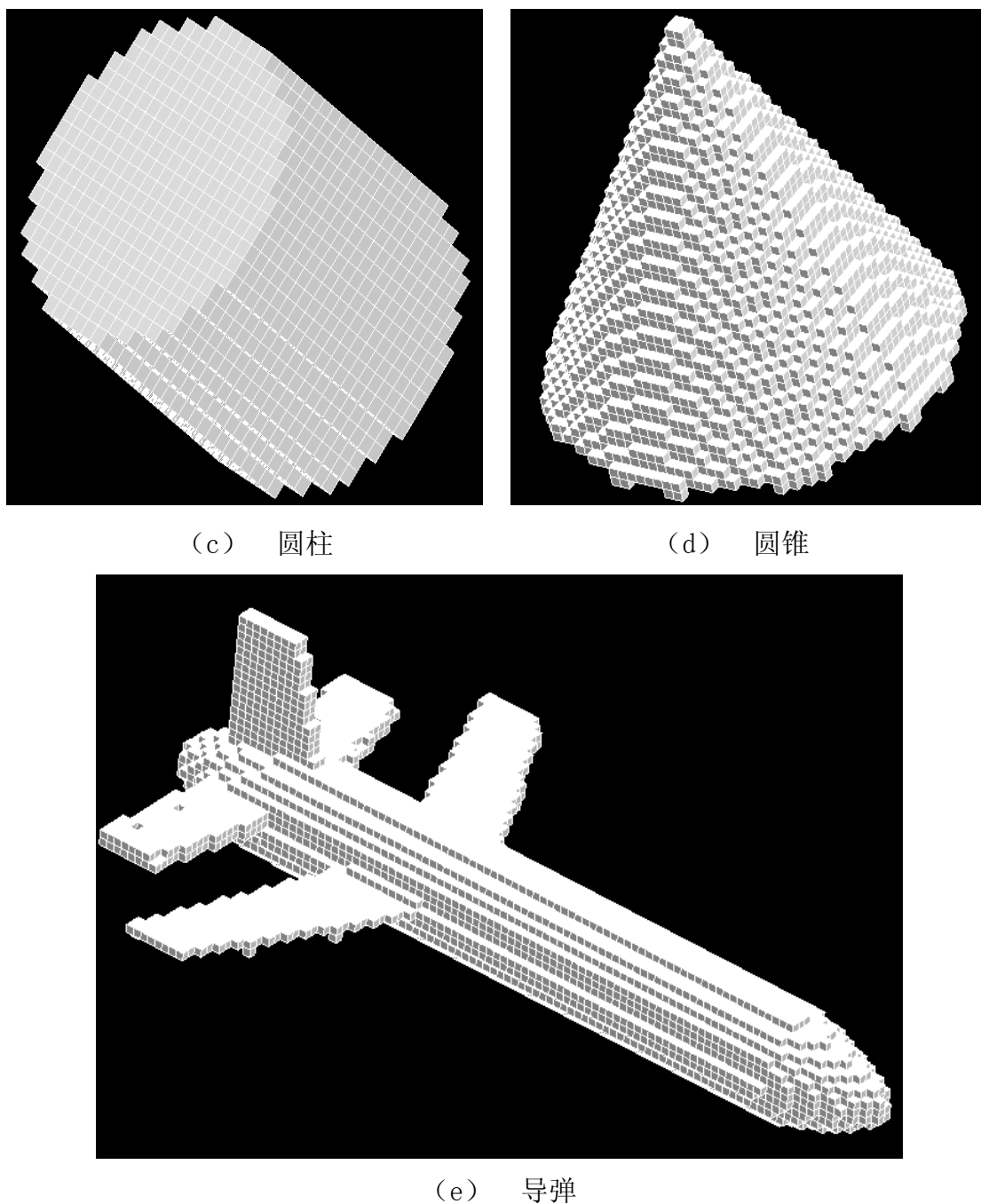


图5.2 散射体的阶梯近似模型。

§5.3. 高阶子网格技术

处理不连续材质的分界面，其核心问题是找到正确的平均电磁参数，包括介电常数、电导率、磁导率、磁阻率。众所周知，麦克斯韦方程的积分形式能够推导出电磁场量的连接边界条件。因此，传统的 FDTD 方法使用安培环路定理和法拉弟电磁感应定理推导平均电磁参数。而根据第三章的论述，高阶差分本质上符

合广义的安培定理和广义的法拉弟电磁感应定理，只不过将与空间 2 阶差分等价的单环路积分转化成与空间 4 阶差分等价的双环路积分。

由于大多数常见的介质，都是非磁性的。即 $\mu_r = 1$ ， $\sigma^* = 0$ 。不失一般性，我们推导电介质的平均电磁参数。

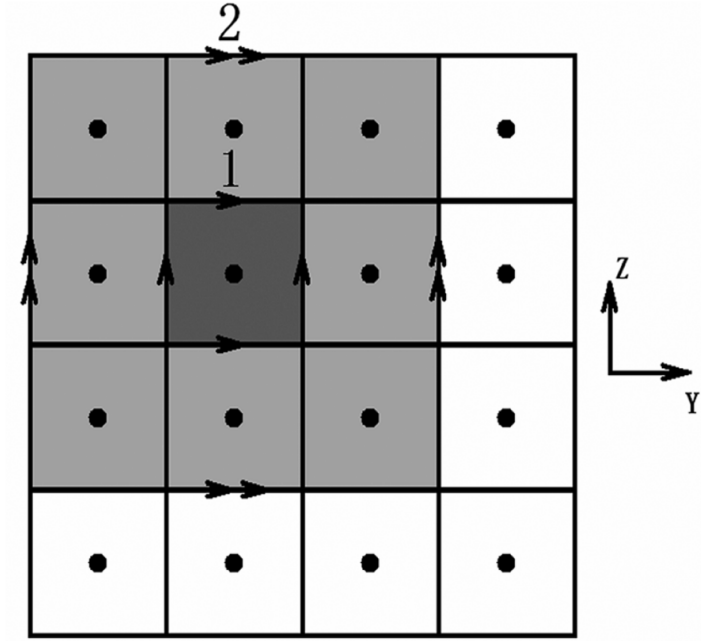


图 5.3 广义安培环路。点号代表 $\hat{E}_x$ ，水平箭头代表 H_y ，垂直箭头 H_z 。4 个单箭头围成内环路 L_1 ，4 个双箭头围成外环路 L_2 。

以 $\hat{E}_x$ 场为例，高阶辛算法对应的广义安培环路如图 5.3 所示，其内环路和外环路积分形式

$$\frac{\partial}{\partial t} \iint_{S_1} \varepsilon_{r1} \hat{\mathbf{E}} \cdot d\mathbf{S}_1 + \frac{1}{\varepsilon_0} \iint_{S_1} \sigma_1 \hat{\mathbf{E}} \cdot d\mathbf{S}_1 = \frac{1}{\sqrt{\mu_0 \varepsilon_0}} \oint_{L_1} \mathbf{H} \cdot d\mathbf{L}_1 \quad (5.1)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \iint_{S_2} \varepsilon_{r2} \hat{\mathbf{E}} \cdot d\mathbf{S}_2 + \frac{1}{\varepsilon_0} \iint_{S_2} \sigma_2 \hat{\mathbf{E}} \cdot d\mathbf{S}_2 = \frac{1}{\sqrt{\mu_0 \varepsilon_0}} \oint_{L_2} \mathbf{H} \cdot d\mathbf{L}_2 \quad (5.2)$$

这里， ε_{r1} 和 ε_{r2} 分别是区域 S_1 和区域 S_2 的局部相对介电常数， σ_1 和 σ_2 分别是区

域 S_1 和区域 S_2 的局部电导率, S_1 是由内环路 L_1 围绕的深灰色区域, S_2 是由外环路 L_2 围绕的浅灰色区域。

在对材质不连续性处理前, 我们进行如下两条假设

- (1) 在内环路或外环路的棱边中点的磁场值等于沿着该条棱边磁场的平均值;
- (2) 在区域 S_1 或区域 S_2 中心点的电场值等于电场在整个区域的平均值。

首先, 将时间连续的空间积分方程 (5.1) 转化成时间连续的空间差分方程

$$\begin{aligned} & \frac{\partial \hat{E}_x(i+\frac{1}{2}, j, k, t)}{\partial t} \times \bar{\varepsilon}_{r1} + \frac{\hat{E}_x(i+\frac{1}{2}, j, k, t)}{\varepsilon_0} \times \bar{\sigma}_1 \\ &= \frac{1}{\sqrt{\mu_0 \varepsilon_0}} \times \left[\frac{H_z(i+\frac{1}{2}, j+\frac{1}{2}, k, t) - H_z(i+\frac{1}{2}, j-\frac{1}{2}, k, t)}{\Delta_y} \right. \\ & \quad \left. - \frac{H_y(i+\frac{1}{2}, j, k+\frac{1}{2}, t) - H_y(i+\frac{1}{2}, j, k-\frac{1}{2}, t)}{\Delta_z} \right] \end{aligned} \quad (5.3)$$

这里, $\bar{\varepsilon}_{r1} = \frac{1}{A_{S_1}} \iint_{S_1} \varepsilon_{r1} dS_1$ 为区域 S_1 的平均相对介电常数, $\bar{\sigma}_1 = \frac{1}{A_{S_1}} \iint_{S_1} \sigma_1 dS_1$ 为区域 S_1 的平均电导率, A_{S_1} 为区域 S_1 的面积。

其次, 将时间连续的空间积分方程 (5.2) 转化成时间连续的空间差分方程

$$\begin{aligned} & \frac{\partial \hat{E}_x(i+\frac{1}{2}, j, k, t)}{\partial t} \times \bar{\varepsilon}_{r2} + \frac{\hat{E}_x(i+\frac{1}{2}, j, k, t)}{\varepsilon_0} \times \bar{\sigma}_2 \\ &= \frac{1}{\sqrt{\mu_0 \varepsilon_0}} \times \left[\frac{H_z(i+\frac{1}{2}, j+\frac{3}{2}, k, t) - H_z(i+\frac{1}{2}, j-\frac{3}{2}, k, t)}{3\Delta_y} \right. \\ & \quad \left. - \frac{H_y(i+\frac{1}{2}, j, k+\frac{3}{2}, t) - H_y(i+\frac{1}{2}, j, k-\frac{3}{2}, t)}{3\Delta_z} \right] \end{aligned} \quad (5.4)$$

这里, $\bar{\varepsilon}_{r2} = \frac{1}{A_{S_2}} \iint_{S_2} \varepsilon_{r2} dS_2$ 为区域 S_2 的平均相对介电常数, $\bar{\sigma}_2 = \frac{1}{A_{S_2}} \iint_{S_2} \sigma_2 dS_2$ 为区域 S_2 的平均电导率, A_{S_2} 为区域 S_2 的面积。

再次, 根据麦克斯韦方程的积分形式和微分形式的等价性, 我们将

(5.3) $\times \frac{9}{8} - (5.4) \times \frac{1}{8}$, 得到

$$\begin{aligned}
 & \frac{\partial \hat{E}_x(i + \frac{1}{2}, j, k, t)}{\partial t} \times \bar{\varepsilon}_r + \frac{\hat{E}_x(i + \frac{1}{2}, j, k, t)}{\varepsilon_0} \times \bar{\sigma} \\
 &= \frac{1}{\sqrt{\mu_0 \varepsilon_0}} \times \left\{ \frac{9}{8} \times \left[\frac{H_z(i + \frac{1}{2}, j + \frac{1}{2}, k, t) - H_z(i + \frac{1}{2}, j - \frac{1}{2}, k, t)}{\Delta_y} \right. \right. \\
 & \quad \left. \left. - \frac{H_y(i + \frac{1}{2}, j, k + \frac{1}{2}, t) - H_y(i + \frac{1}{2}, j, k - \frac{1}{2}, t)}{\Delta_z} \right] \right. \\
 & \quad \left. - \frac{1}{24} \times \left[\frac{H_z(i + \frac{1}{2}, j + \frac{3}{2}, k, t) - H_z(i + \frac{1}{2}, j - \frac{3}{2}, k, t)}{\Delta_y} \right. \right. \\
 & \quad \left. \left. - \frac{H_y(i + \frac{1}{2}, j, k + \frac{3}{2}, t) - H_y(i + \frac{1}{2}, j, k - \frac{3}{2}, t)}{\Delta_z} \right] \right\}
 \end{aligned} \tag{5.5}$$

这里, 两个区域合成的平均介电常数 $\bar{\varepsilon}_r$ 和平均电导率 $\bar{\sigma}$ 为

$$\bar{\varepsilon}_r = \frac{9}{8} \bar{\varepsilon}_{r1} - \frac{1}{8} \bar{\varepsilon}_{r2} = \frac{9}{8A_{S_1}} \iint_{S_1} \varepsilon_{r1} dS_1 - \frac{1}{8A_{S_2}} \iint_{S_2} \varepsilon_{r2} dS_2 \tag{5.6}$$

$$\bar{\sigma} = \frac{9}{8} \bar{\sigma}_1 - \frac{1}{8} \bar{\sigma}_2 = \frac{9}{8A_{S_1}} \iint_{S_1} \sigma_1 dS_1 - \frac{1}{8A_{S_2}} \iint_{S_2} \sigma_2 dS_2 \tag{5.7}$$

式(5.6-5.7)就是和电场 x 分量对应的平均电磁参数。其它电场分量的平均相对介电常数和平均电导率的推导也可仿照上面的步骤。

最后, 将(5.5)式在时间上离散化, 我们便可得到 $\hat{E}_x$ 场的迭代公式

$$\begin{aligned}
 \hat{E}_x^{n+l/m}(i+\frac{1}{2}, j, k) &= \exp(-\frac{d_l \Delta_l \bar{\sigma}(i+\frac{1}{2}, j, k)}{\bar{\varepsilon}(i+\frac{1}{2}, j, k)}) \times \hat{E}_x^{n+(l-1)/m}(i+\frac{1}{2}, j, k) \\
 &+ \frac{1 - \exp(-\frac{d_l \Delta_l \bar{\sigma}(i+\frac{1}{2}, j, k)}{\bar{\varepsilon}(i+\frac{1}{2}, j, k)})}{\frac{d_l \Delta_l \bar{\sigma}(i+\frac{1}{2}, j, k)}{\bar{\varepsilon}(i+\frac{1}{2}, j, k)}} \times \frac{1}{\bar{\varepsilon}_r(i+\frac{1}{2}, j, k)} \\
 &\times \{ \alpha_{y1} \times [H_z^{n+l/m}(i+\frac{1}{2}, j+\frac{1}{2}, k) - H_z^{n+l/m}(i+\frac{1}{2}, j-\frac{1}{2}, k)] \\
 &- \alpha_{z1} \times [H_y^{n+l/m}(i+\frac{1}{2}, j, k+\frac{1}{2}) - H_y^{n+l/m}(i+\frac{1}{2}, j, k-\frac{1}{2})] \\
 &+ \alpha_{y2} \times [H_z^{n+l/m}(i+\frac{1}{2}, j+\frac{3}{2}, k) - H_z^{n+l/m}(i+\frac{1}{2}, j-\frac{3}{2}, k)] \\
 &- \alpha_{z2} \times [H_y^{n+l/m}(i+\frac{1}{2}, j, k+\frac{3}{2}) - H_y^{n+l/m}(i+\frac{1}{2}, j, k-\frac{3}{2})] \} \quad (5.8)
 \end{aligned}$$

这里, $\bar{\varepsilon} = \varepsilon_0 \bar{\varepsilon}_r$ 。可以看出, 上式和第三章的 (3.29) 式在形式上是完全一致的, 只不过采用了平均电磁参数。

下面我们介绍怎样采用高阶子网格算法求解式 (5.6) 和式 (5.7)。由于积分离散化后就是一种求和, 所以式 (5.6) 和 (5.7) 可以离散化为

$$\bar{\varepsilon}_r = \frac{9}{8} \times (\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \varepsilon_{r1}^i) - \frac{1}{8} \times (\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \varepsilon_{r2}^i), \quad \bar{\sigma} = \frac{9}{8} \times (\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \sigma_1^i) - \frac{1}{8} \times (\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \sigma_2^i) \quad (5.9)$$

这里, ε_{r1}^i 和 σ_1^i 分别是区域 S_1 积分采样点处的局部相对介电常数和局部电导率,

ε_{r2}^i 和 σ_2^i 分别是区域 S_2 积分采样点处的局部相对介电常数和局部电导率。

我们先将每个区域都划分成子网格, 然后在每个子网格的中心进行采样, 最后利用式 (5.9) 得出其平均电磁参数。高阶子网格划分和其对应的积分采样点如图 5.4 所示。图中叉号对应的是 1×1 子网格的情况, 即式 (5.9) 中 $n=1$ 。这时区域 S_1 和区域 S_2 各有唯一的采样点在其中心, 且两个区域的采样点位置恰好重合。结果, 平均电磁参数也就等价于中心点的局部电磁参数。这也证明了这种高阶子网格算法可以推导出一般的局部材质模型。图 5.4 中点号对应的是 3×3 子网格的

情况，即式(5.9)中 $n=9$ 。这时，区域 S_1 和区域 S_2 都有9个子网格，且每个子网格的中心有1个采样点。结果，区域 S_1 或区域 S_2 的平均电磁参数，就是9个采样点局部电磁参数的求和平均。而总区域的平均电磁参数，是将 S_1 区域的平均电磁参数和 S_2 区域的平均电磁参数赋予不同的权值 $9/8$ 和 $-1/8$ 后的再次叠加。随着子网格加密，求出的平均电磁参数就越准确，对电介质的电磁仿真效果就越好。一般当子网格的边长小于 $1/40$ 介质波长时，就可达到工程要求。计算平均电磁参数的操作，可在整个电磁仿真的预处理环节执行。同主程序相比，能在很短的CPU时间内完成。

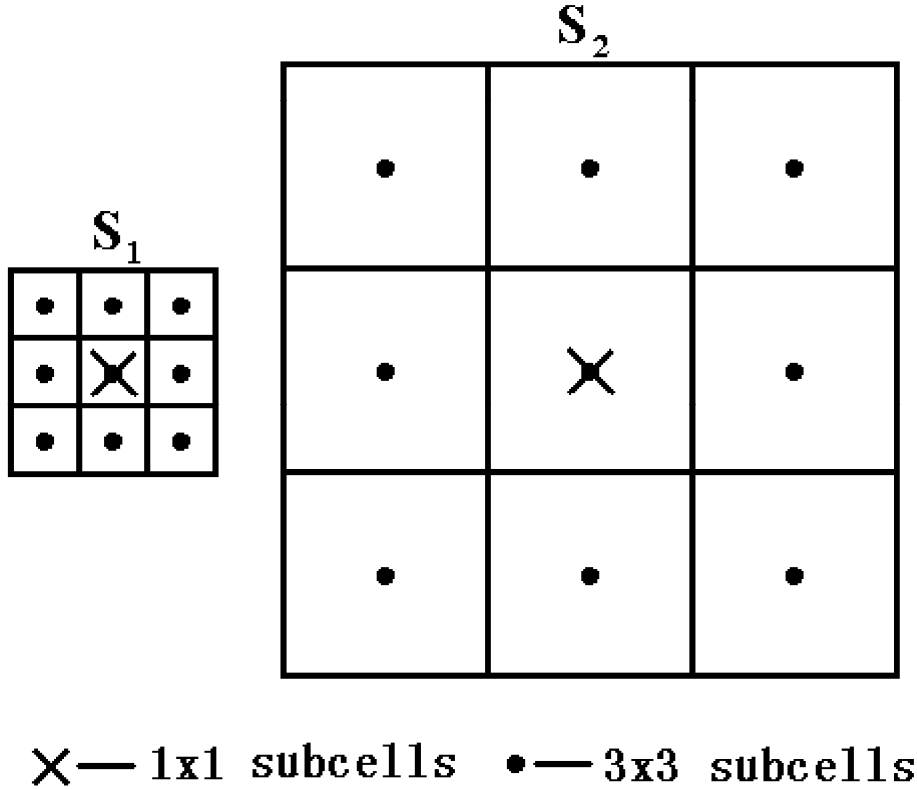


图 5.4 高阶子网格和积分采样点。该图给出了用 1×1 子网格和 3×3 子网格离散化区域 S_1 和区域 S_2 的情况。 1×1 子网格离散后，每个子网格的积分采样点用叉号表示。 3×3 子网格离散后，每个子网格的积分采样点用点号表示。

接下来，我们分别从近场和远场两个方面证明该高阶子网格方法的优势。

算例 1。有耗介质球的频域近场分析。电场 z 方向传播， x 方向极化。介质

球半径 10cm ，相对介电常数 30 ，电导率 0.3 。采用一致的空间步长，参数设置如下： $\Delta_\delta = 2\text{cm}$ ， $CFL_\delta = 0.7$ ， $f = 200\text{MHz}$ 。我们用离散时间傅里叶变换，计算 $x = \Delta_\delta/2$ ， $y = 0$ 处 E_x 场沿 z 轴的频域波形。算法采用 SFDTD(4, 4) 方法，空气介质分界面的处理分别采用局部材质模型（ 1×1 子网格）和平均材质模型（ 9×9 子网格）。从图 5.5 中可以看出，采用平均材质模型后，其分界面处的电场值和 Mie 级数解吻合良好。而局部材质模型得到的曲线，有明显的“上翘”现象。

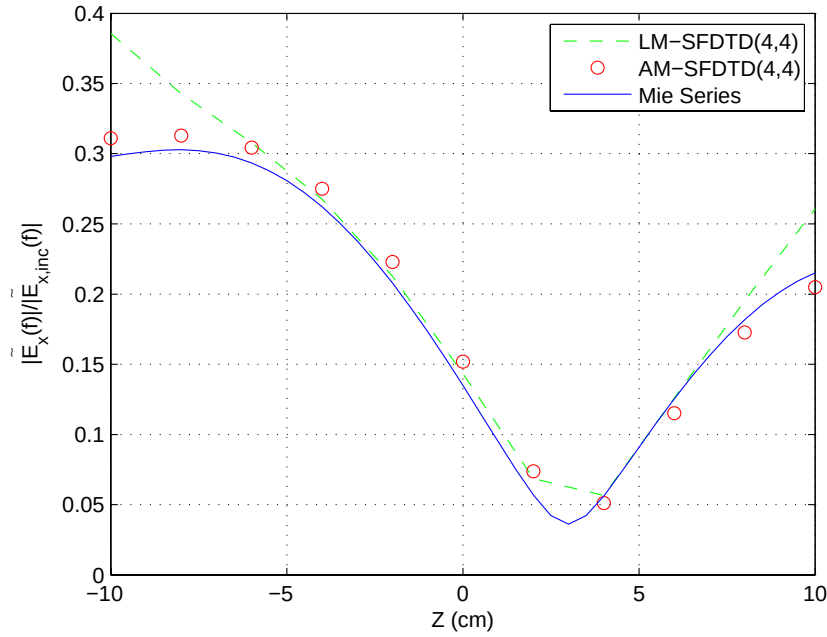


图 5.5 有耗介质球 E_x 场沿 z 方向的频域近场值。算法采用 SFDTD(4, 4) 方法，空气介质分界面采用局部材质模型（LM）和平均材质模型（AM）。

我们将稳定度常数重新设置为： $CFL_\delta = 0.5$ ，重复上述数值试验。一致空间步长分别设置成： 2.0cm ， 1.0cm ， 0.5cm 。采用 FDTD(2, 2) 和 SFDTD(4, 4) 两种算法。空气介质分界面的处理分别采用：局部材质模型（LM）、阶梯近似模型（SM）、平均材质模型（AM）。和局部材质模型不同的是，阶梯近似模型中每个电场分量对应的电磁参数不取决于该分量实际空间位置的电磁参数，而是取决于它所属 Yee 元胞中心点的电磁参数。我们计算频域 E_x 场值和 Mie 级数解的误差，并使用两种误差标准来评价各种方案，即全局相对误差 $\hat{\rho}_{L_2}$ 和最大局部相对误差 $\hat{\rho}_{L_1}$ 。

$$\hat{\rho}_{L_2} = \frac{\|Num - Mie\|_2}{\|Mie\|_2}, \quad \hat{\rho}_{L_1} = \max_{\forall i} \left\{ \frac{|Num^i - Mie^i|}{|Mie^i|} \right\} \quad (5.10)$$

这里， Mie 代表 Mie 级数参考解， Num 代表数值解。我们按照误差大小，给每种方案排名。排名越低，误差越低，数值精度越高。通过表 5.1 的结果，我们可得出如下结论：

- 1 无论采用什么方案，空间步长越小，误差越小，数值精度越高。
- 2 无论采用 FDTD(2, 2) 算法或是 SFDTD(4, 4) 算法，阶梯近似模型能够获得低的全局误差但引入较高的局部误差。相反地，局部材质模型可以消减局部误差，但却增大了全局误差。
- 3 无论采用什么误差评价标准，SFDTD(4, 4) 算法和平均材质模型相结合的方案能够获得最好的数值精度。同基于平均材质模型的 FDTD(2, 2) 算法[14]和基于局部材质模型的 SFDTD(4, 4) 算法相比，该方案至少消减了 75% 的数值误差。且基于平均材质模型的 SFDTD(4, 4) 算法 (AM-SFDTD(4, 4)) 的收敛率也略高于基于平均材质模型的 FDTD(2, 2) 算法 (AM-FDTD(2, 2))。若限定同样的全局相对误差条件，AM-SFDTD(4, 4) 方案的空间分辨率只需是 AM-FDTD(2, 2) 方案的 50%。因此，AM-SFDTD(4, 4) 方案也就节省了大量内存和计算时间。

表 5.1 有耗介质球近场误差对比。采用 FDTD(2, 2) 和 SFDTD(4, 4) 两种算法。空气介质分界面的处理分别采用：局部材质模型 (LM)、阶梯近似模型 (SM)、平均材质模型 (AM)。全局相对误差 ($\hat{\rho}_{L_2}$) 和最大局部相对误差 ($\hat{\rho}_{L_1}$) 两种标准被使用。一致空间步长设置为 $2.0cm$ 、 $1.0cm$ 、和 $0.5cm$ ，稳定度常数 0.5。排名 (Rank) 越低，方案的误差越小，数值精度越高。

Method	$\Delta_s(\text{cm})$	$\hat{\rho}_{L_2}$	Rank	$\hat{\rho}_{L_1}$	Rank
FDTD (LM)	2.0	8.04×10^{-2}		1.82×10^{-1}	
FDTD (LM)	1.0	3.59×10^{-2}	5	9.55×10^{-2}	2
FDTD (LM)	0.5	2.17×10^{-2}		6.40×10^{-2}	
FDTD (SM)	2.0	5.77×10^{-2}		3.38×10^{-1}	
FDTD (SM)	1.0	2.96×10^{-2}	3	2.54×10^{-1}	6
FDTD (SM)	0.5	1.66×10^{-2}		1.14×10^{-1}	
FDTD (AM)	2.0	7.24×10^{-2}		3.16×10^{-1}	
FDTD (AM)	1.0	3.64×10^{-2}	4	1.72×10^{-1}	4
FDTD (AM)	0.5	1.77×10^{-2}		1.03×10^{-1}	
SFDTD (LM)	2.0	8.21×10^{-2}		2.11×10^{-1}	
SFDTD (LM)	1.0	3.76×10^{-2}	6	1.05×10^{-1}	3
SFDTD (LM)	0.5	2.26×10^{-2}		6.80×10^{-2}	
SFDTD (SM)	2.0	5.60×10^{-2}		3.05×10^{-1}	
SFDTD (SM)	1.0	2.88×10^{-2}	2	2.50×10^{-1}	5
SFDTD (SM)	0.5	1.62×10^{-2}		1.15×10^{-1}	
SFDTD (AM)	2.0	1.38×10^{-2}		4.49×10^{-2}	
SFDTD (AM)	1.0	7.17×10^{-3}	1	2.49×10^{-2}	1
SFDTD (AM)	0.5	2.85×10^{-3}		1.42×10^{-2}	

算例 2。无耗介质球的频域远场分析。球半径 0.5 米，相对介电常数 4。入射

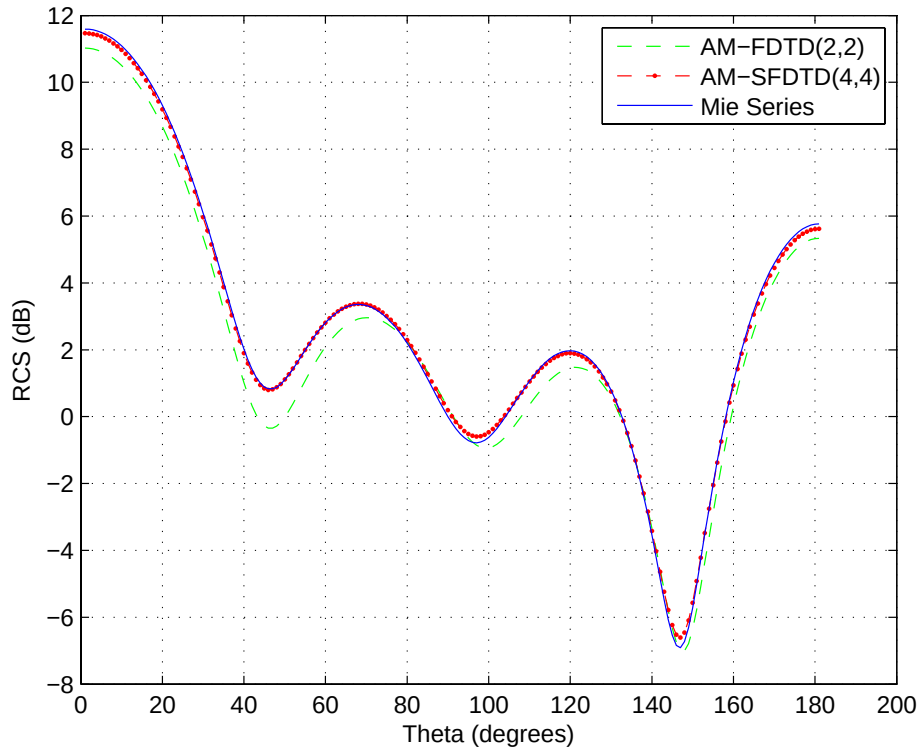
波沿 z 方向传播， x 方向极化，频率 300MHz 。一致空间步长设置为： $\Delta_\delta = 0.1m, 0.05m, 0.025m$ ，稳定度常数 $CFL_\delta = 0.4$ 。采用 SFDTD(4, 4) 算法仿真介质球的 E 面和 H 面双站 RCS。空气介质分界面采用三种模型处理，包括：日本学者 Hirono 提出的平均材质模型[15]、局部材质模型（ 1×1 子网格）、我们提出的基于高阶子网格的平均材质模型（ 9×9 子网格）。利用全局误差 ρ_{L_2} 和最大局部误差 ρ_{L_1} 两种标准来比较不同方案与 Mie 级数解的数值误差。从表 5.2 可以看出，在粗网格条件下，我们提出的高阶子网格方案能够获得最好的数值精度。而日本学者的方案，在处理曲面介质中的表现是不令人满意的。

表 5.2 无耗介质球的远场误差对比。算法采用 SFDTD(4, 4) 方法。空气介质分界面采用三种模型处理，包括：日本学者 Hirono 提出的模型（Hirono's）、局部材质模型（LM）、我们提出的平均材质模型（AM）。全局误差 ρ_{L_2} 和最大局部误差 ρ_{L_1} 两种标准被使用。一致空间步长设置为 $\Delta_\delta = 0.1m, 0.05m, 0.025m$ ，稳定度常数 0.4。

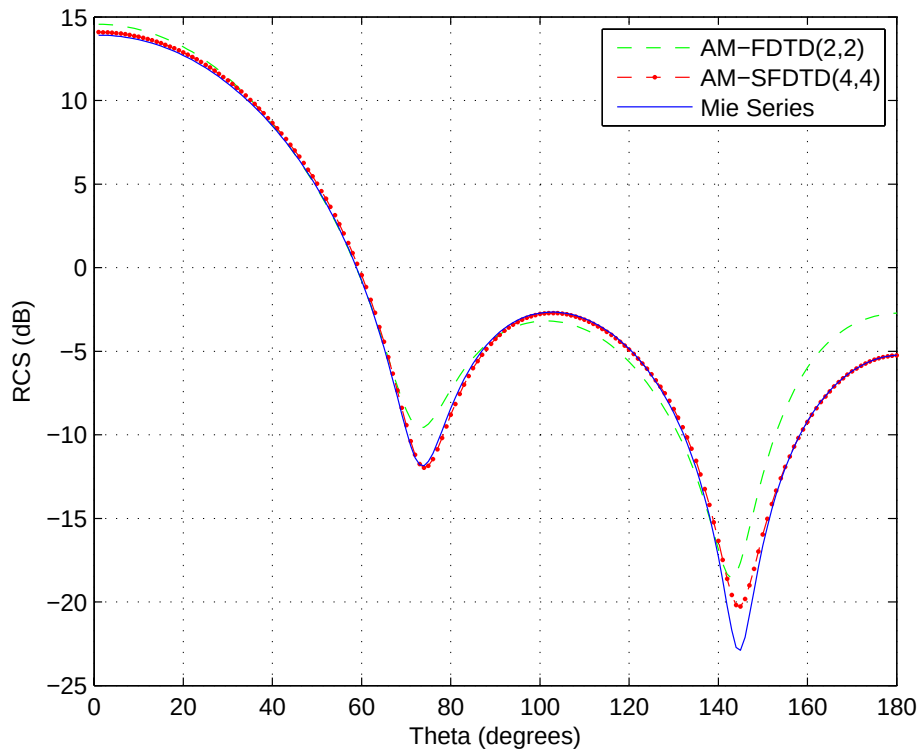
Scheme	Δ_δ (m)	ρ_{L_2}		ρ_{L_1}		Accuracy
		E – Plane	H – Plane	E – Plane	H – Plane	
Hirono's	1/10	22.5138	34.3362	3.8656	13.9930	Worst
	1/20	8.4244	10.8060	1.2779	4.1624	
	1/40	1.8844	3.9441	0.2459	0.7813	
LM	1/10	13.9278	29.6971	2.1138	14.5136	Median
	1/20	6.0265	9.1277	1.1345	3.8568	
	1/40	1.6388	3.0270	0.3441	0.4972	
AM	1/10	10.4780	8.1334	1.5343	1.9795	Best
	1/20	4.4222	5.2730	0.7507	1.2484	
	1/40	1.0232	2.9098	0.1569	0.9868	

当一致空间步长 $\Delta_\delta = 0.05m$ 时，即每介质波长 10 个点，这是 FDTD(2, 2) 算法设置的经验空间步长。对 FDTD(2, 2) 算法，采用文献[14]中提出的低阶子网格模型(平均材质)。对 SFDTD(4, 4) 算法，采用本章提出的高阶子网格模型（平均材质）。图 5.6 给出了 AM-FDTD(2, 2) 和 AM-SFDTD(4, 4) 方案的双站 RCS 计算结果。可以看出，在一般的网格剖分条件下，基于高阶子网格技术的 SFDTD(4, 4) 算法

仍显示出了优势。



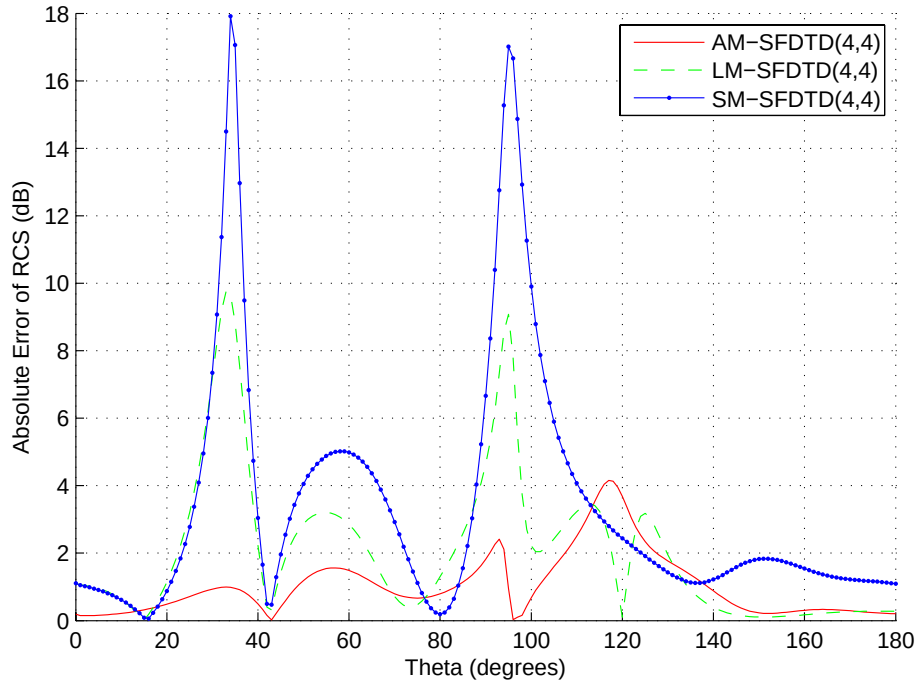
(a) E 面



(b) H 面

图 5.6 无耗介质球双站 RCS。介质球相对介电常数 4，一致空间步长 0.05m，稳定度常数 0.4。采用 AM-FDTD(2, 2) 和 AM-SFDTD(4, 4) 两种方案。

算例 3。有耗介质方柱测试。介质方柱的相对介电常数 3.3，电导率 0.3，边长 1 米。入射波 x 方向极化， z 方向传播，频率 300MHz 。一致空间步长 0.1 米，稳定度常数 0.5。算法采用 SFDTD(4,4) 方法。材质不连续性处理分别采用阶梯近似模型 (SM)、局部材质模型 (LM)、平均材质模型 (AM)。我们计算三种方案与矩量法参考解的数值误差。从图 5.7 中可以看出，平均材质模型的数值精度是最好的。



(a) E 面

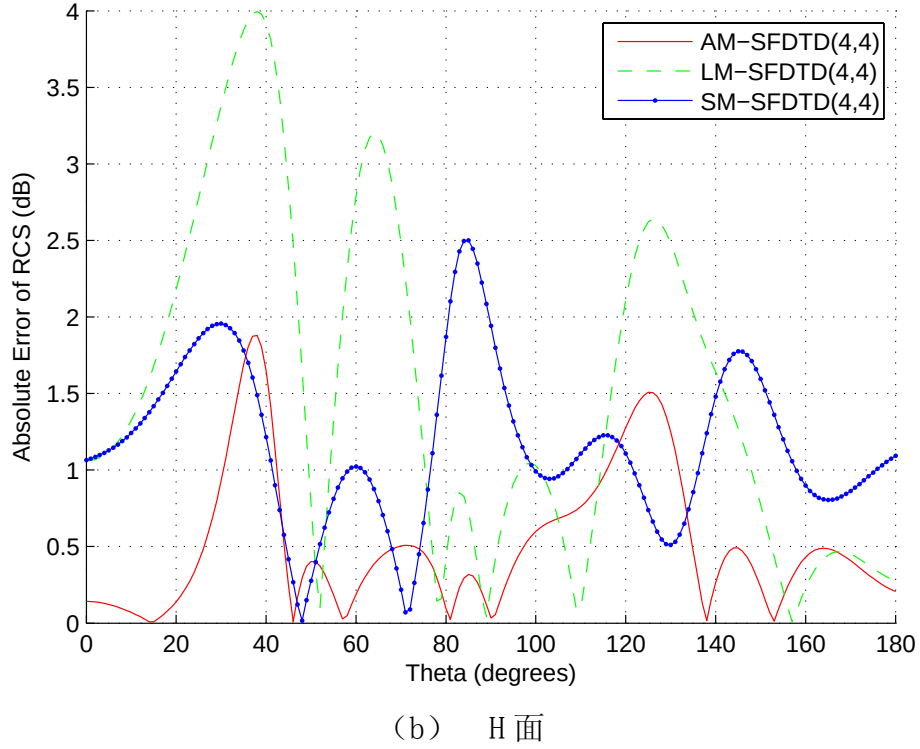
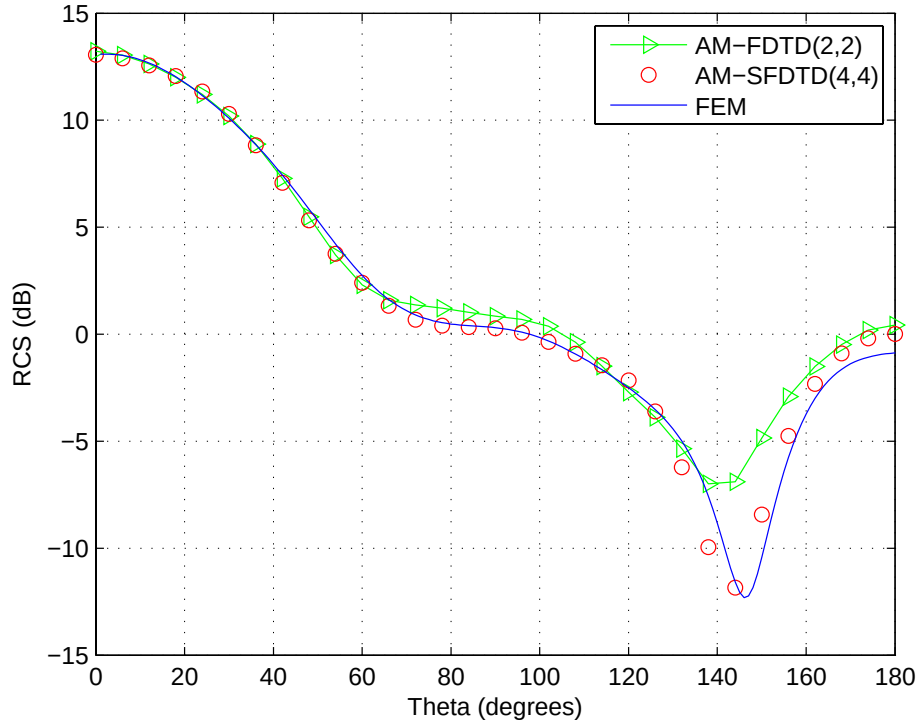
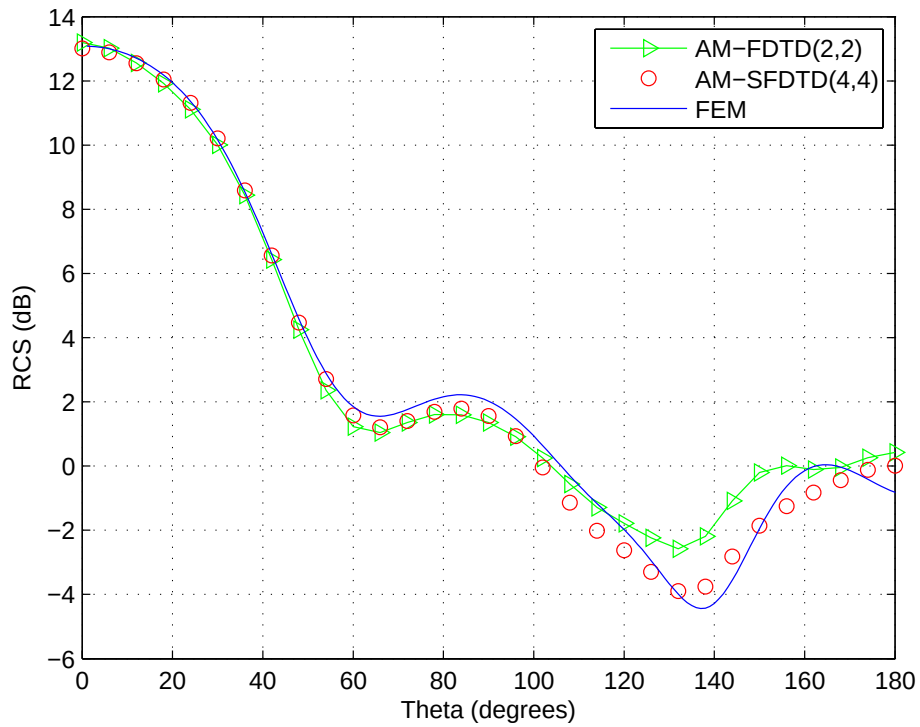


图 5.7 有耗介质方柱的双站 RCS 误差。介质方柱相对介电常数 3.3, 电导率 0.3, 一致空间步长 0.1m, 稳定度常数 0.5。采用 AM-SFDTD(4, 4)、LM-SFDTD(4, 4)、SM-SFDTD(4, 4) 三种方案, 矩量法作为参考解。

算例 4。无耗介质圆锥测试。介质圆锥的相对介电常数 3.1, 底面半径 0.5 米, 高 1 米, 轴向沿 z 方向。入射波 x 方向极化, z 方向传播, 频率 300MHz 。一致空间步长 0.1 米, 稳定度常数 0.5。方案分别采用基于平均材质的 FDTD(2, 2) 算法和基于平均材质的高阶辛算法 SFDTD(4, 4) 算法。图 5.8 给出了粗网格条件下圆锥双站 RCS 的计算结果。可以看出, 基于平均材质的高阶辛算法的数值结果和有限元法吻合得更好。



(a) E 面



(b) H 面

图 5.8 无耗介质圆锥的双站 RCS。介质圆锥相对介电常数 3.1，一致空间步长 0.1m，稳定度常数 0.5。采用 AM-FDTD(2,2) 和 AM-SFDTD(4,4) 两种方案，有限元法作为参考解。

§5.4. 高阶共形网格技术

在对自由空间中的金属曲面进行电磁建模之前，我们先进行如下假设：

(1) 因为电场分量是由磁场分量决定的，所以我们只修正磁场分量，而保持电场分量的迭代公式不变。这点和传统 FDTD 方法中的局部共形技术[3, 16]是一致的。

(2) 在修正磁场分量时，我们只修正距离其半个网格的电场围成的内环路，而不修正距离其 1 个半网格的电场围成的外环路。这样做的原因有二。其一，使高阶共形网格生成技术和传统 FDTD 方法中的低阶共形网格生成技术无异，保持了良好的兼容性。其二，根据文献[16]，局部低阶共形技术假设：在金属外部棱边中点的电场值近似等于整条棱边中点的电场值，在金属外部区域中心的磁场值近似等于整个区域中心的磁场值。这样，电场和磁场分量就保持了原有的空间位置，而无需插值操作。这种假设成立的条件是棱边的尺寸和区域的面积比较小。然而，外环路对应的棱边尺度和区域面积都比较大，所以不宜采用共形处理。

对于电场分量，我们对它的迭代公式不做任何修正。采用 SFDTD($p,4$) 算法，以 $\hat{E}_x$ 场为例

$$\begin{aligned}
 \hat{E}_x^{n+l/m}(i+\frac{1}{2},j,k) &= \hat{E}_x^{n+(l-1)/m}(i+\frac{1}{2},j,k) \\
 &+ \alpha_{y1} \times [H_z^{n+l/m}(i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2},k) - H_z^{n+l/m}(i+\frac{1}{2},j-\frac{1}{2},k)] \\
 &- \alpha_{z1} \times [H_y^{n+l/m}(i+\frac{1}{2},j,k+\frac{1}{2}) - H_y^{n+l/m}(i+\frac{1}{2},j,k-\frac{1}{2})] \\
 &+ \alpha_{y2} \times [H_z^{n+l/m}(i+\frac{1}{2},j+\frac{3}{2},k) - H_z^{n+l/m}(i+\frac{1}{2},j-\frac{3}{2},k)] \\
 &- \alpha_{z2} \times [H_y^{n+l/m}(i+\frac{1}{2},j,k+\frac{3}{2}) - H_y^{n+l/m}(i+\frac{1}{2},j,k-\frac{3}{2})]
 \end{aligned} \tag{5.11}$$

对于磁场分量的迭代公式，广义法拉弟积分定律可写为(5.12-5.13)式，对应的回路如图 5.9 所示。

$$\frac{\partial}{\partial t} \iint_{S_1} \mathbf{H} \cdot d\mathbf{S}_1 = \frac{-1}{\sqrt{\mu_0 \epsilon_0}} \oint_{L_1} \hat{\mathbf{E}} \cdot d\mathbf{L}_1 \tag{5.12}$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \iint_{S_2} \mathbf{H} \cdot d\mathbf{S}_2 = \frac{-1}{\sqrt{\mu_0 \epsilon_0}} \oint_{L_2} \hat{\mathbf{E}} \cdot d\mathbf{L}_2 \quad (5.13)$$

这里， L_1 是距离磁场 0.5 网格长度的 4 个电场围成的内回路， S_1 为该内回路对应的区域； L_2 是距离磁场 1.5 网格长度的 4 个电场围成的外回路， S_2 为该外回路对应的区域。

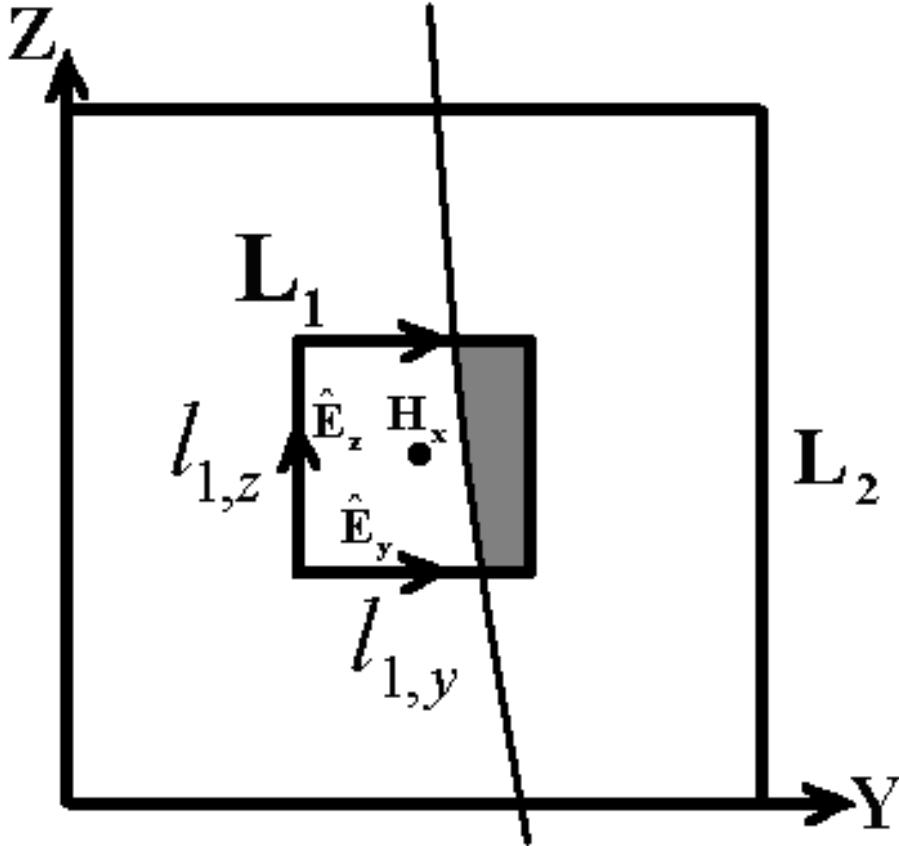


图 5.9 广义法拉弟积分回路。中心黑点表示磁场 H_x 。距离磁场 0.5 网格长度的 4 个电场围成内回路 L_1 ，距离磁场 1.5 网格长度的 4 个电场围成外回路 L_2 。我们仅对内回路 L_1 进行修正。其中， $l_{1,y}$ 和 $l_{1,z}$ 为内回路 L_1 的 $\hat{E}_y$ 和 $\hat{E}_z$ 节点对应棱边在金属外部（电场不为零）的长度，灰色区域表示内回路 L_1 在金属内部的区域。

下面以磁场的 x 分量为例，具体论述如何修正磁场的迭代公式。

首先，我们不修正 H_x 场对应的外回路 L_2 。将时间连续的积分方程 (5.13) 直接转化成时间连续的差分方程 (5.14)

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} H_x(i, j + \frac{1}{2}, k + \frac{1}{2}, t) = & \frac{1}{\sqrt{\mu_0 \epsilon_0}} \times \left[\frac{\hat{E}_y(i, j + \frac{1}{2}, k + 2, t) - \hat{E}_y(i, j + \frac{1}{2}, k - 1, t)}{3\Delta_z} \right. \\ & \left. - \frac{\hat{E}_z(i, j + 2, k + \frac{1}{2}, t) - \hat{E}_z(i, j - 1, k + \frac{1}{2}, t)}{3\Delta_y} \right] \end{aligned} \quad (5.14)$$

其次, 我们将 H_x 场对应的内回路 L_1 分成变形网格 (和金属曲面相交的网格) 和非变形网格 (和金属曲面不相交的网格) 两种。对于非变形网格, 我们将 (5.12) 式直接转换成差分方程。对于变形网格, 我们采用局部共形技术[3]对其进行处理。将时间连续的积分方程 (5.12) 修正成时间连续的差分方程 (5.15)

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} H_x(i, j + \frac{1}{2}, k + \frac{1}{2}, t) = & \frac{1}{\Delta S_1^*} \times \frac{1}{\sqrt{\mu_0 \epsilon_0}} \\ & \times \{ [\hat{E}_y(i, j + \frac{1}{2}, k + 1, t) l_{1,y}(i, j, k + 1) - \hat{E}_y(i, j + \frac{1}{2}, k, t) l_{1,y}(i, j, k)] \\ & - [\hat{E}_z(i, j + 1, k + \frac{1}{2}, t) l_{1,z}(i, j + 1, k) - \hat{E}_z(i, j, k + \frac{1}{2}, t) l_{1,z}(i, j, k)] \} \end{aligned} \quad (5.15)$$

其中 $l_{1,y}$ 和 $l_{1,z}$ 为内回路 L_1 的 $\hat{E}_y$ 和 $\hat{E}_z$ 节点对应棱边在金属外部 (电场不为零) 的长度, 里面的标号是棱边起始端点的网格索引, ΔS_1^* 为内回路 L_1 在金属外部的面积。

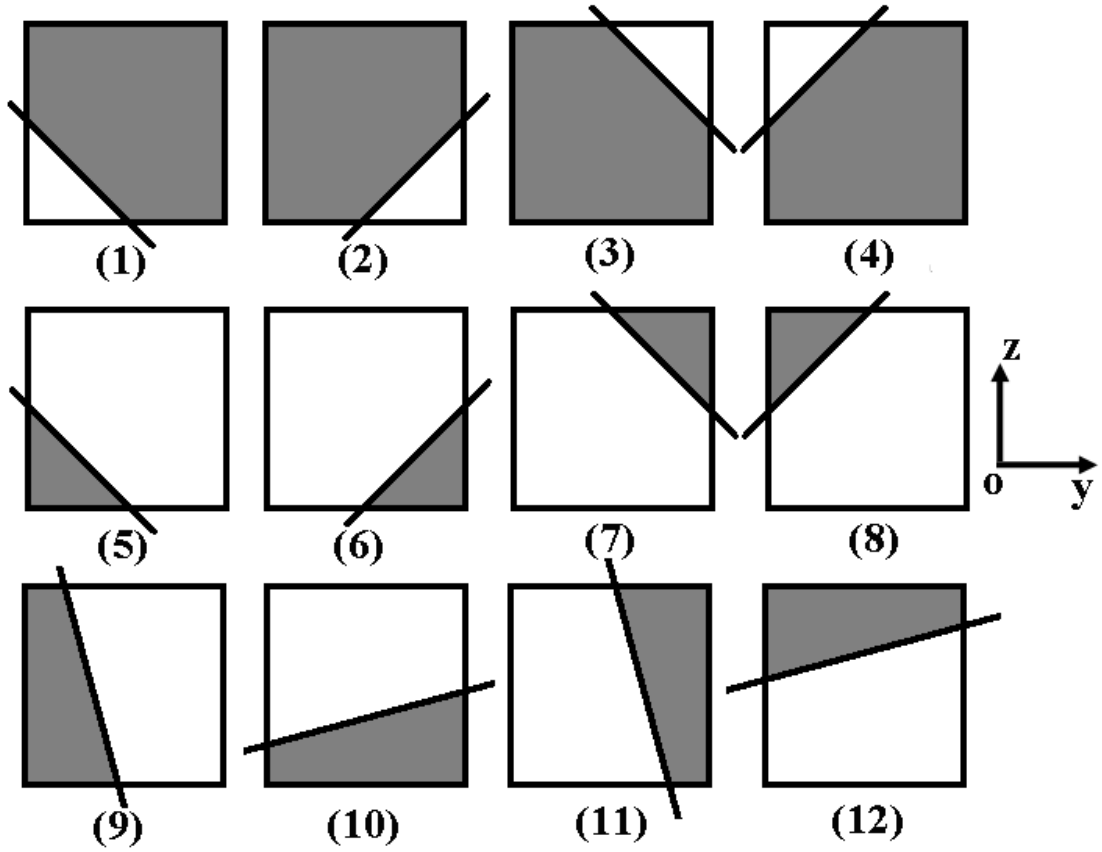


图 5.10 共形网格常见的 12 种情况。其中灰色区域代表金属内部。

对于 ΔS_1^* 的计算，一般可以分为如图 5.10 中给出的 12 种情况。情况 (1-12)

对应的 ΔS_1^* 计算公式：

$$(1) \Delta S_1^* = 0.5 \cdot l_{1,y}(i, j, k) l_{1,z}(i, j, k)$$

$$(2) \Delta S_1^* = 0.5 \cdot l_{1,y}(i, j, k) l_{1,z}(i, j+1, k)$$

$$(3) \Delta S_1^* = 0.5 \cdot l_{1,y}(i, j, k+1) l_{1,z}(i, j+1, k)$$

$$(4) \Delta S_1^* = 0.5 \cdot l_{1,y}(i, j, k+1) l_{1,z}(i, j, k)$$

$$(5) \Delta S_1^* = \Delta_y \Delta_z - 0.5 \cdot [\Delta_y - l_{1,y}(i, j, k)] \cdot [\Delta_z - l_{1,z}(i, j, k)]$$

$$(6) \Delta S_1^* = \Delta_y \Delta_z - 0.5 \cdot [\Delta_y - l_{1,y}(i, j, k)] \cdot [\Delta_z - l_{1,z}(i, j+1, k)]$$

$$(7) \Delta S_1^* = \Delta_y \Delta_z - 0.5 \cdot [\Delta_y - l_{1,y}(i, j, k+1)] \cdot [\Delta_z - l_{1,z}(i, j+1, k)]$$

$$(8) \Delta S_1^* = \Delta_y \Delta_z - 0.5 \cdot [\Delta_y - l_{1,y}(i, j, k+1)] \cdot [\Delta_z - l_{1,z}(i, j, k)]$$

$$(9) \Delta S_1^* = 0.5 \cdot \Delta_z \cdot [l_{1,y}(i, j, k+1) + l_{1,y}(i, j, k)]$$

$$(10) \Delta S_1^* = 0.5 \cdot \Delta_y \cdot [l_{1,z}(i, j+1, k) + l_{1,z}(i, j, k)]$$

$$(11) \Delta S_1^* = 0.5 \cdot \Delta_z \cdot [l_{1,y}(i, j, k+1) + l_{1,y}(i, j, k)]$$

$$(12) \Delta S_1^* = 0.5 \cdot \Delta_y \cdot [l_{1,z}(i, j+1, k) + l_{1,z}(i, j, k)]$$

可以看出, (9) 和 (11) 的计算公式是一样的, (10) 和 (12) 的计算公式也是一样的。所以可以合并成 10 种常见情况。需要指出的是, 在求解 ΔS_1^* 过程中, 金属曲面在 $yo z$ 平面的投影曲线被近似成直线来处理。

再次, 和高阶子网格法类似, 根据根据麦克斯韦方程的积分形式和微分形式的等价性, 我们将 (5.15) 乘以 $9/8$ 加上 (5.14) 乘以 $-1/8$, 便可得到时间连续空间离散的 H_x 场迭代公式

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} H_x(i, j + \frac{1}{2}, k + \frac{1}{2}, t) &= \frac{9}{8} \times \frac{1}{\sqrt{\mu_0 \epsilon_0} \Delta S_1^*} \\ &\times \{ [\hat{E}_y(i, j + \frac{1}{2}, k+1, t) l_{1,y}(i, j, k+1) - \hat{E}_y(i, j + \frac{1}{2}, k, t) l_{1,y}(i, j, k)] \\ &- [\hat{E}_z(i, j+1, k + \frac{1}{2}, t) l_{1,z}(i, j+1, k) - \hat{E}_z(i, j, k + \frac{1}{2}, t) l_{1,z}(i, j, k)] \} \\ &- \frac{1}{24} \times \frac{1}{\sqrt{\mu_0 \epsilon_0}} \times [\frac{\hat{E}_y(i, j + \frac{1}{2}, k+2, t) - \hat{E}_y(i, j + \frac{1}{2}, k-1, t)}{\Delta_z} \\ &- \frac{\hat{E}_z(i, j+2, k + \frac{1}{2}, t) - \hat{E}_z(i, j-1, k + \frac{1}{2}, t)}{\Delta_y}] \end{aligned} \quad (5.16)$$

最后, 在时间上采用 m 级 p 阶辛积分方法, 得到 H_x 场第 l 级迭代公式

$$\begin{aligned}
 H_x^{n+l/m}(i, j + \frac{1}{2}, k + \frac{1}{2}) &= H_x^{n+(l-1)/m}(i, j + \frac{1}{2}, k + \frac{1}{2}) + \frac{9}{8} \times \frac{c_l \Delta_t}{\sqrt{\mu_0 \varepsilon_0} \Delta S_1^*} \\
 &\times \{ [\hat{E}_y^{n+(l-1)/m}(i, j + \frac{1}{2}, k + 1) l_{1,y}(i, j, k + 1) - \hat{E}_y^{n+(l-1)/m}(i, j + \frac{1}{2}, k) l_{1,y}(i, j, k)] \\
 &- [\hat{E}_z^{n+(l-1)/m}(i, j + 1, k + \frac{1}{2}) l_{1,z}(i, j + 1, k) - \hat{E}_z^{n+(l-1)/m}(i, j, k + \frac{1}{2}) l_{1,z}(i, j, k)] \} \quad (5.17) \\
 &+ \beta_{z2} \times [\hat{E}_y^{n+(l-1)/m}(i, j + \frac{1}{2}, k + 2) - \hat{E}_y^{n+(l-1)/m}(i, j + \frac{1}{2}, k - 1)] \\
 &- \beta_{y2} \times [\hat{E}_z^{n+(l-1)/m}(i, j + 2, k + \frac{1}{2}) - \hat{E}_z^{n+(l-1)/m}(i, j - 1, k + \frac{1}{2})]
 \end{aligned}$$

实际上, 对于非变形网格的情况, $\Delta S_1^* = \Delta_y \Delta_z$, $l_{1,y} = \Delta_y$, $l_{1,z} = \Delta_z$ 。因此, 公式 (5.17) 的形式就和第三章的 (3.19) 式保持了一致。对于其它磁场场量的高阶共形处理也是类似的。

由于采用了变形网格, ΔS_1^* 小于未修正的非变形网格区域的面积。为了保证时域电磁仿真的稳定性和精确性, 我们令

$$\Delta S_1^* = \begin{cases} \Delta S_1^*, \Delta S_1^* \geq \gamma \Delta S_1 \\ 0, \Delta S_1^* < \gamma \Delta S_1 \end{cases} \quad (5.18)$$

其中, ΔS_1 为未修正的内回路 L_1 对应的面积 (非变形网格的面积)。式 (5.18) 表明当变形网格在金属外部的面积小于某个设定的阈值时, 我们则用金属材质完全填充该网格。阈值 γ 控制了该算法的数值精度和最大稳定度。 γ 越小, 数值精度越高, 最大稳定度越低。

一致空间步长条件下, 高阶共形 SFDTD($p, 4$) 算法的全局最大稳定度 (Global Maximum Stability) 可由 (5.19) 估计

$$CFL_{\max}^* = \frac{\lambda_T}{\lambda_S^*}, \quad \lambda_S^* = \max_{\forall L_1} (2 \times | \frac{1}{24} + \frac{9}{8} \cdot \frac{\max_{\forall \delta} (l_{1,\delta}) \Delta_\delta}{\Delta S_1^*} |) \quad (5.19)$$

这里, λ_T 是时间稳定度因子, 空间共形处理后, 它并不改变。对称辛算子和时间可逆辛算子的时间稳定度因子已经在第三章的表 3.3 和表 3.4 中列出。对于任意磁场分量对应的内回路 L_1 , $\max_{\forall \delta} (l_{1,\delta})$ 是 L_1 包含的 4 条棱边在金属外部长度的最大值。我们计算每一个内回路对应的空间稳定度因子, 再找出所有因子中最大的那个, 就是全局空间稳定度因子 λ_S^* 。共形处理后, λ_S^* 显然比处理前要偏大, 因

此全局最大稳定度比共形处理前要减小。事实上，公式(5.19)有些太过严格，原因有二。其一，我们只将磁场对应的内环路做了共形处理，而电场对应的内、外环路均未修正。全局稳定度是电磁场共同决定的，所以实际中我们可将(5.19)算出的最大稳定度 $CFL_{\max}^*$ 和算法原始的最大稳定度 $CFL_{\max}$ 相乘后开根号，作为稳定度常数的设定标准。其二，全局空间稳定度因子不应该是所有内环路对应的空间稳定度因子的最大值，而应该是按某种法则求出的平均值。通过大量的数值试验，当 $\gamma = 0.01$ 时，高阶共形辛算法可获得令人满意的数值结果，算法的最大稳定度减小到非共形处理的 40%。

接下来，我们做一些数值试验，来验证该高阶共形技术的优势。在下面算例中，入射平面波沿 z 方向传播， x 方向极化，频率 300MHz 。 x, y, z 三个方向的空间步长一致，即 $\Delta_x = \Delta_y = \Delta_z = \Delta_\delta$ 。阈值 $\gamma = 0.01$ 。对于高阶共形辛算法，其稳定度减小到非共形处理的 40%。对于低阶共形 FDTD 法，其稳定度减小到非共形处理的 35%。

算例 1。电小导体圆柱的散射问题。圆柱高 2 米，半径 1 米，对称轴沿 y 方向。方案采用高阶共形 SFDTD(3, 4) 算法(HC-SFDTD(3, 4))、高阶阶梯近似 SFDTD(3, 4) 算法(HS-SFDTD(3, 4))、低阶共形 FDTD(2, 2) 算法(LC-FDTD(2, 2))。我们计算三种方案的 E 面双站 RCS 与矩量法(参考解)的全局相对误差 $\bar{\rho}_{L_2}$ ，然后画出误差随空间分辨率变化的曲线。从图 5.11 可以看出，无论在粗网格还是在细网格条件下，高阶共形辛算法的数值精度都是最好的。

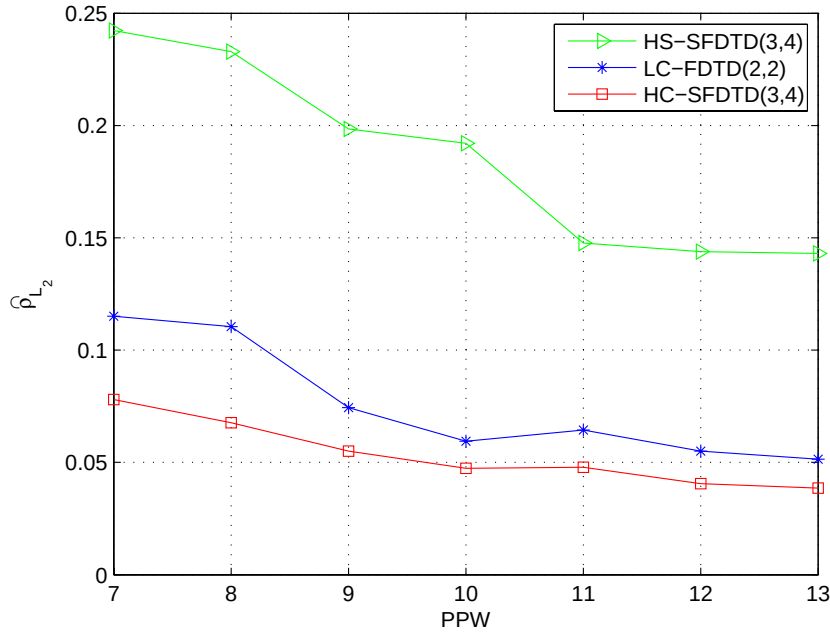
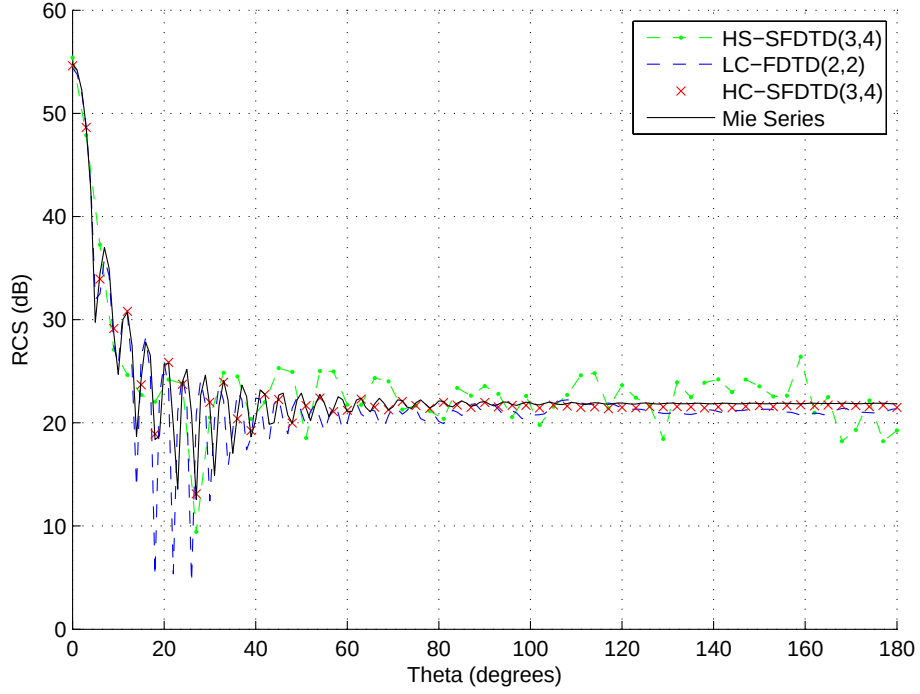


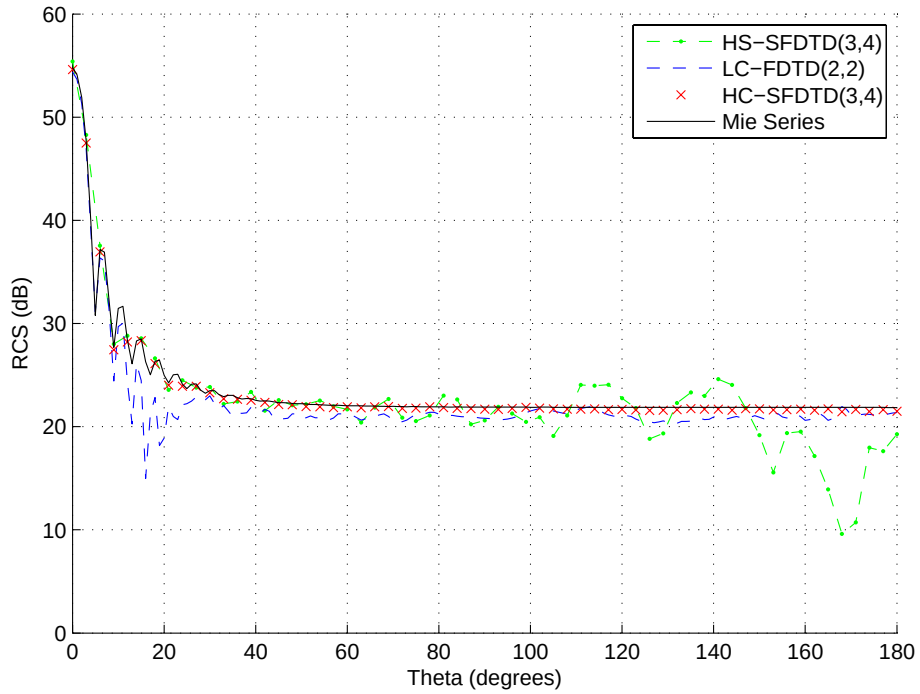
图 5.11 导体圆柱 E 面双站 RCS 的全局相对误差随空间分辨率变化的曲线。采用 HC-SFDTD(3, 4)、HS-SFDTD(3, 4)、LC-FDTD(2, 2) 三种方案。

算例 2。电大导体球的散射问题。球直径 14 米，空间分辨率取每波长 7 个点。方案采用高阶共形 SFDTD(3, 4) 算法、高阶阶梯近似 SFDTD(3, 4) 算法、低阶共形 FDTD(2, 2) 算法。在计算后向小角度 ($165^\circ - 180^\circ$) 内的远区散射场时，为了得到精确的数值结果，我们忽略了前向外推输出面的贡献[17]。图 5.12 画出了导体球的 E 面和 H 面双站 RCS。此外，表 5.3 给出了三种方案的双站 RCS 与 Mie 级数解的全局相对误差 $\hat{\rho}_{L_2}$ 。可以看出，对于电大目标，由于高阶共形辛算法的数值色散很低且使用了局部共形网格，因此获得了极其精确的数值结果。特别的，与电小目标不同的是，对于电大目标，高阶阶梯近似 SFDTD(3, 4) 方案的 E 面双站 RCS 误差要低于低阶共形 FDTD(2, 2) 方案。这是因为，随着目标电尺寸的增大，这种阶梯近似的影响越来越小，而数值色散对仿真结果起到了更为关键的作用。在图 5.12(a) 中，阶梯近似 SFDTD(3, 4) 的数值结果在解析解附近的“幅度”摆动比较大，这是采用了规则的结构网格造成的。不同的是，低阶共形 FDTD(2, 2) 方案在 $\theta = 20^\circ$ 附近的 RCS 曲线有明显的“错位”和“歪曲”现象，这是由于其明显的数值色散而引入的相位误差造成的。对于高阶共形 SFDTD(3, 4) 方案，一方

面空间高阶差分和时间高阶辛积分保证其有低的数值色散性,另一方面局部共形网格保证了其能有效的模拟金属曲面。因此,该高阶共形辛算法尤其适用于电大导体目标的电磁仿真。



(a) E 面



(b) H 面

图 5.12 直径 14 米的导体球双站 RCS。采用 HC-SFDTD (3, 4)、HS-SFDTD (3, 4)、LC-FDTD (2, 2) 三种方案。空间分辨率每波长 7 个点。

表 5.3 导体球双站 RCS 的误差对比。采用 HC-SFDTD(3, 4)、HS-SFDTD(3, 4)、LC-FDTD(2, 2) 三种方案。空间分辨率每波长 7 个点。全局相对误差标准 $\hat{\rho}_{L_2}$ 被使用。

$\hat{\rho}_{L_2}$	HS-SFDTD(3,4)	LC-FDTD(2,2)	HC-SFDTD(3,4)
E-Plane	9.89%	11.08%	1.35%
H-Plane	12.33%	7.31%	0.85%

我们设定同样的 H 面 RCS 误差限制 ($\hat{\rho}_{L_2} = 1\%$)，上述三种方案消耗的计算时间和内存如表 5.4 所示。可以看出，高阶共形辛算法能够节省大量的计算机资源。

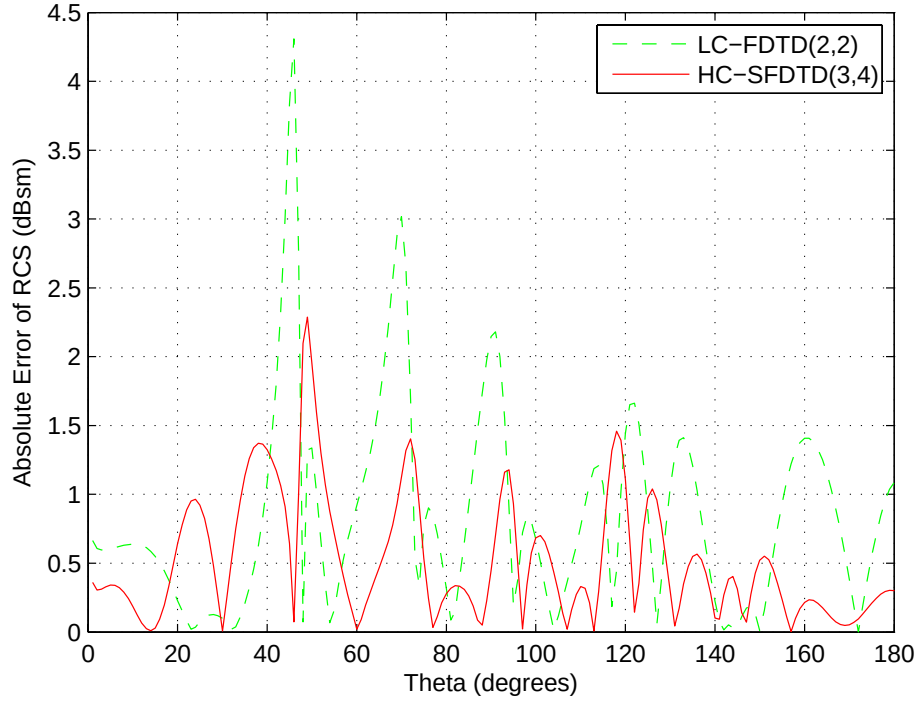
表 5.4 同样的 H 面 RCS 误差限制条件下不同方案消耗的计算时间和内存。

Strategy	PPW	CFL	Time (s)	Memory (MB)
HC-SFDTD(3,4)	7	0.50	5891	258
HS-SFDTD(3,4)	16	1.00	56279	1318
LC-FDTD(2,2)	13	0.20	23359	820

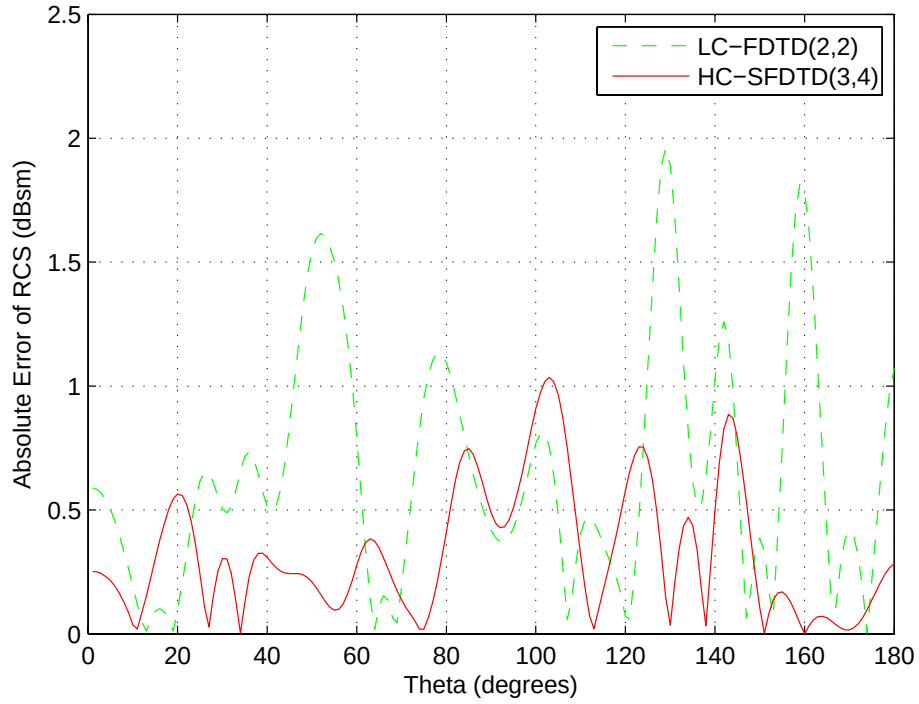
算例 3。导体椭球的散射问题。为了验证高阶共形技术是否适用于曲率变化的金属曲面，我们测试了导体椭球的例子。椭球方程

$$\frac{x^2}{a^2} + \frac{y^2}{b^2} + \frac{z^2}{c^2} = 1 \quad (5.20)$$

这里， $a = 0.6m$ ， $b = 0.8m$ ， $c = 1.0m$ 。入射波 400MHz，z 方向传播，x 方向极化。一致空间步长 $\Delta_\delta = 0.1m$ ，方案采用低阶共形 FDTD(2, 2) 算法和高阶共形 SFDTD(3, 4) 算法。在 $\Delta_\delta = 0.025m$ 条件下，采用 LC-FDTD(2, 2) 方案作为参考解。计算细网格条件下的参考解和粗网格条件下的数值解的 RCS 绝对误差，并将结果显示在图 5.13 中。可以看出，高阶共形方案的整体误差明显小于低阶共形方案，且高阶共形方案消减了 50% 的最大局部误差。



(a) E 面



(b) H 面

图 5.13 导体椭球的双站 RCS 绝对误差。入射波频率 400MHz，一致空间步长 $\Delta_s = 0.1m$ ，采用 LC-FDTD(2, 2) 和 HC-SFDTD(3, 4) 两种方案。在 $\Delta_s = 0.025m$ 条件下，采用 LC-FDTD(2, 2) 方案作为参考解。

§5.5. 小结

本章我们致力于高阶子网格和高阶共形网格的研究。两者的推导思路都是基于广义的安培环路定理或者广义的法拉第电磁感应定理。先将时间连续的积分方程修正成时间连续的差分方程,然后在时间方向上采用显式辛积分方法最终得到电磁场分量的迭代公式。我们证明:在均匀媒质空间中,这些修正后的公式可以和第三章原始的迭代公式保持形式上的一致。

对于材质不连续性处理问题,高阶子网格技术能够有效求解介质分界面处的平均电磁参数。一方面,它可还原成局部材质模型;另一方面,通过设置一定的子网格划分密度,它能获得令人满意的近场和远场结果。

对于金属曲面的电磁建模问题,高阶共形技术是一种局部非结构(Unstructured)网格技术。一方面,它只将磁场对应的内环路进行修正,可采用和传统 FDTD 方法一致的共形网格生成技术,且能够有效的模拟金属曲面;另一方面,空间高阶差分和时间高阶辛积分的结合,使该高阶共形辛算法有良好的数值精度和数值色散性,其在电大目标和电小目标的测试中均有优势。

无论高阶子网格技术还是高阶共形网格技术,其都能在粗网格条件下取得和 FDTD 细网格条件下相同的数值精度。因此,若给定相同的数值误差限制,高阶辛算法将节省大量的内存和计算时间。

参考文献

- [1] M. Okoniewski, E. Okoniewska, and M. A. Stuchly. Three-dimensional subgridding algorithm for FDTD[J]. IEEE Transactions on Antennas and Propagation, 1997, 45(3):422-429.
- [2] T. G. Jurgens, A. Taflove, K. Umashankar, and T. G. Moore. Finite-difference time-domain modeling of curved surfaces[J]. IEEE Transactions on Antennas and Propagation, 1992, 40(4):357-366.
- [3] S. Dey and R. Mittra. A locally conformal finite-difference time-domain algorithm for modeling three-dimensional perfectly conducting objects[J]. IEEE Microwave and Guided Wave Letters, 1997, 7(9):273-275.
- [4] W. H. Yu and R. Mittra. A conformal FDTD algorithm for modeling perfectly conducting objects with curve-shaped surfaces and edges[J]. Microwave and Optical Technology Letters, 2000, 27(2):136-138.
- [5] I. A. Zagorodnov, R. Schuhmann, and T. Weiland. A uniformly stable conformal FDTD-method in Cartesian grids[J]. International Journal of Numerical Modelling-Electronic Networks Devices and Fields, 2003, 16(2):127-141.
- [6] 余文华, 苏涛, 刘永峻, R. Mittra. 并行时域有限差分[M]. 北京: 中国传媒大学出版社, 2005.

- [7] Q. S. Cao, Y. C. Chen, and R. Mittra. Multiple image technique (MIT) and anisotropic perfectly matched layer (APML) in implementation of MRTD scheme for boundary truncations of microwave structures[J]. IEEE Transactions on Microwave Theory and Techniques, 2002, 50(6):1578-1589.
- [8] A. Yefet and P. G. Petropoulos. A staggered fourth-order accurate explicit finite difference scheme for the time-domain Maxwell's equations[J]. Journal of Computational Physics, 2001, 168(2):286-315.
- [9] S. Zhao and G. W. Wei. High-order FDTD methods via derivative matching for Maxwell's equations with material interfaces[J]. Journal of Computational Physics, 2004, 200(1):60-103.
- [10] J. S. Shang. High-order compact-difference schemes for time-dependent Maxwell equations[J]. Journal of Computational Physics, 1999, 153(2):312-333.
- [11] S. V. Georgakopoulos, C. R. Birtcher, C. A. Balanis, and R. A. Renaut. HIRF penetration and PED coupling analysis for scaled fuselage models using a hybrid subgrid FDTD(2,2)/FDTD(2,4) method[J]. IEEE Transactions on Electromagnetic Compatibility, 2003, 45(2):293-305.
- [12] A. Taflov. Computational Electrodynamics: the Finite-Difference Time-Domain Method[M]. Norwood, MA: Artech House, 1995.
- [13] Y. Srisukh, J. Nehrbass, F. L. Teixeira, J. F. Lee, and R. Lee. An approach for automatic grid generation in three-dimensional FDTD simulations of complex geometries[J]. IEEE Antennas and Propagation Magazine, 2002, 44(4):75-80.
- [14] D. M. Sullivan. Electromagnetic Simulation Using the FDTD Method[M]. New York: Wiley-IEEE Press, 2000.
- [15] T. Hirono, W. Lui, S. Seki, and Y. Yoshikuni. A three-dimensional fourth-order finite-difference time-domain scheme using a symplectic integrator propagator[J]. IEEE Transactions on Microwave Theory and Techniques, 2001, 49(9):1640-1648.
- [16] S. Dey, R. Mittra, and S. Chebolu. A technique for implementing the FDTD algorithm on a nonorthogonal grid[J]. Microwave and Optical Technology Letters, 1997, 14(4):213-215.
- [17] X. Li, A. Taflov, and V. Backman. Modified FDTD near-to-far-field transformation for improved backscattering calculation of strongly forward-scattering objects[J]. IEEE Antennas and Wireless Propagation Letters, 2005, 4:35-38.

第六章 高阶辛算法在波导仿真中的应用

§6.1. 引言

各种波导元器件和其组成的子系统，如谐振器、衰减器、滤波器、耦合器，在微波集成电路的设计中有重要作用。由于微波系统的电尺寸可能极其庞大且集成元件的种类复杂（甚至含有射频电路），有限的计算机资源不可能支撑整个系统仿真的耗费。因此，我们先对每个元件或者子系统进行电磁仿真，求出相关的特性参数，然后采用网络分析法对整个系统进行各种分析。这些分析包括一些常用的工程参数：输入输出阻抗、增益、系统传递函数等，也包括一些工程上关心的系统特性：电磁兼容、信号完整性等。根据上述陈述，对单个波导器件或者相关子系统的谐振模式分析、散射参数分析、不连续性的分析对整个微波系统特性的研究有很强的指导和参考意义。

传统的 FDTD 方法在微波集成电路仿真中的研究至今仍在发展和完善中，很多国内外学者作了大量的研究工作，主要可以概括成以下几点。第一，激励源和激励方法的研究。从空间分布上看，有点源、线源和面源[1]之分；从性质特点上看，有硬源和软源[2]之分；从传播方向看，有双方向性源[3]和单方向性源（类似于平面波源）[4]之分。激励方法包括，电流激励法、磁流激励法、电磁流混合激励法[5]。第二，吸收边界的研究。包括模式匹配、阻抗匹配吸收边界条件[6]，完全匹配层[7, 8]、广义完全匹配层[9]、强康态完全匹配层[10]吸收边界条件。第三，参数提取的研究。对于特征值参数的提取（截止频率或谐振频率），包括单点提取法[11]、整个空间能量提取法。对于模式电流或电压的提取，包括线积分方法（常用于微带）[2]，面积分方法（常用于波导）[12]。对于散射参数的提取，包括两次提取法[13, 14]和一次提取法[15]。

时域高阶算法在微波集成电路的仿真研究，也有不少报道。常见的是时域多分辨率方法。基于多镜像技术，该方法能够以很低的空间分辨率对矩形波导、简单的微带线等进行精确仿真，大大节省了内存和计算时间。但对于含曲面结构的微波器件，时域多分辨率方法只能采用阶梯近似模型，精度很差，因此报道鲜见。其它的一些文献也只局限于特征值参数的提取和简单的场传播分析，对于散射参

数提取等一些较复杂的情况，涉及极少。本章我们将高阶辛时域有限差分法初步应用于波导的仿真，并对相关的技术进行探讨。

§6.2. 关键技术

矩形波导是波导元器件家族中的代表，也是构成微波系统不可或缺的功率传输和转换设备。它的功率容量大、结构简单、损耗小，但集成度较差。最近，由于基片集成技术的提出，使导波结构和微带结构的集成问题取得了突破性的进展。而基片集成波导的性质和矩形波导相近，两者在工程上具有简单的经验等价公式。因此，高阶辛算法在矩形波导仿真中的研究，仍具有普遍的代表性。在本节中我们针对矩形波导的仿真问题，来探讨相关技术的高阶推广。

§6.2.1. 源的加入

在对矩形波导仿真的早期研究中[4]，一般利用横向场量的时空解析表达式，采用类似于总场散射场分离技术中的单方向性源，使入射波沿着波导纵向的正方向传播，而反射波则沿着纵向的反方向传播。对于矩形波导的不连续性问题，该单方向性源的最大优点是可以方便地提取反射系数。对于单频激励，该源是很不错的选择。但工程上更关心的是器件的宽带响应。对于宽频脉冲激励，矩形波导传输的是横磁波或横电波，我们不可能得到其横向场的时域解析表达式。因此，该单方向性源不可能在宽带仿真中得到推广。

对于宽带仿真，常用的是双方向性源[3]。一般此源加在波导某个横截面上，然后沿纵轴正反方向两个方向传播。该源加入操作简单，能用于宽带仿真，但不易提取反射波。

常用的激励源为电流源，但文献[5]报导单一的电流源不能充分激励高次模。所以，我们一般采用电流源和磁流源共同激励的方式。

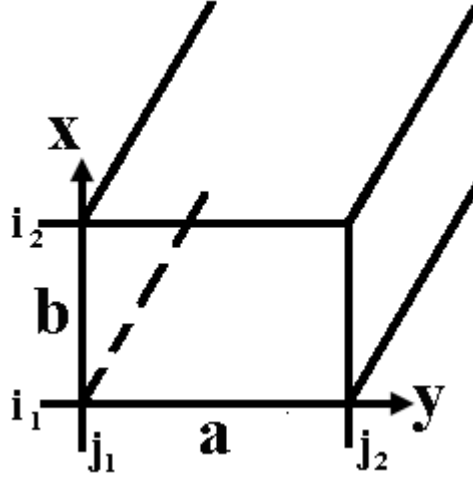


图 6.1 金属波导示意图。波导的窄边沿 x 方向长度为 b ，宽边沿 y 方向长度为 a ，入射波沿 z 轴正方向传播。

如图 6.1 所示，假设矩形波导的窄边沿 x 方向长度为 b ，宽边沿 y 方向长度为 a ，入射波沿 z 轴正方向传播。横截面 $b \times a$ 的网格范围 $[i_1, i_2] \times [j_1, j_2]$ 。为了充分激励不同的传输模式，我们采用电磁流混合激励。在 $k = k_s$ 平面，电流激励如 (6.1) 式和磁流激励如 (6.2) 式。

$$\hat{E}_x^{n+l/m}(i + \frac{1}{2}, j, k_s) = \hat{E}_x^{n+l/m}(i + \frac{1}{2}, j, k_s) + J_{inc}^{n+l/m}(i + \frac{1}{2}, j, k_s - \frac{1}{2}) \quad (6.1)$$

$$H_y^{n+l/m}(i + \frac{1}{2}, j, k_s - \frac{1}{2}) = H_y^{n+l/m}(i + \frac{1}{2}, j, k_s - \frac{1}{2}) + \hat{J}_{m,inc}^{n+(l-1)/m}(i + \frac{1}{2}, j, k_s) \quad (6.2)$$

这里， $i_1 \leq i \leq i_2 - 1$ ， $j_1 \leq j \leq j_2$ 。

式 (6.1-6.2) 中的电磁流可写成如下时空分布的形式

$$\Pi(t, x, y) = \zeta(t) \cdot \mathcal{G}(x, y), \quad \Pi = J_{inc}, \hat{J}_{m,inc} \quad (6.3)$$

源的时间变化 $\zeta(t)$ 采用正弦或余弦调制的高斯脉冲，即

$$\zeta(t) = -\cos(\omega t) \exp[-\frac{4\pi(t - T_0)^2}{W^2}] \quad (6.4)$$

扫频的中心频率为 $f_0 = \omega / 2\pi$ ， $2/W$ 为偏移中心频率的频谱宽度，调制高斯脉冲的有效频谱范围 $f \in [\omega / 2\pi - 2/W, \omega / 2\pi + 2/W]$ 。 T_0 决定脉冲的平滑程度和达到最大值的时间。 T_0 越大，平滑度越好，但到达最大值的时间也越长。选择参数后，

我们可利用快速傅里叶变换来观察时域波形的频谱，验证是否满足仿真的要求。

源的空间变化 $\mathcal{G}(x, y)$ 取决于矩形波导的横向场分布，即

$$\mathcal{G}(x, y) = \sum_m \sum_n \sin\left(\frac{m\pi y}{a}\right) \cos\left(\frac{n\pi x}{b}\right) \quad (6.5)$$

这里， a 和 b 分别是矩形波导的宽边和窄边尺寸， m 和 n 根据激励模式的需要选取。若激励主模 TE_{10} 模式，则 $m=1$ ， $n=0$ 。

§6.2.2. 金属边界处理

考虑到矩形波导的几何形状，我们将时域多分辨率算法中使用多镜像技术 [16] 引入到 4 阶空间差分中。对于完美金属边界条件 (Perfectly Conductor Condition)，该镜像技术的基本原则是：(1) 对于金属波导外部的电场切向分量和磁场法向分量，我们采用反对称延拓；(2) 对于金属波导外部的电场法向分量和磁场切向分量，我们采用对称延拓。

以 $i=i_1$ 平面为例，电场分量的处理如下

$$\hat{E}_y(i_1 - 1, j + \frac{1}{2}, k) = -\hat{E}_y(i_1 + 1, j + \frac{1}{2}, k), \quad j_1 \leq j \leq j_2 - 1 \quad (6.6)$$

$$\hat{E}_z(i_1 - 1, j, k + \frac{1}{2}) = -\hat{E}_z(i_1 + 1, j, k + \frac{1}{2}), \quad j_1 \leq j \leq j_2 \quad (6.7)$$

磁场分量的处理如下

$$H_y(i_1 - \frac{1}{2}, j, k + \frac{1}{2}) = H_y(i_1 + \frac{1}{2}, j, k + \frac{1}{2}), \quad j_1 \leq j \leq j_2 \quad (6.8)$$

$$H_y(i_1 - \frac{3}{2}, j, k + \frac{1}{2}) = H_y(i_1 + \frac{3}{2}, j, k + \frac{1}{2}), \quad j_1 \leq j \leq j_2 \quad (6.9)$$

$$H_z(i_1 - \frac{1}{2}, j + \frac{1}{2}, k) = H_z(i_1 + \frac{1}{2}, j + \frac{1}{2}, k), \quad j_1 \leq j \leq j_2 - 1 \quad (6.10)$$

$$H_z(i_1 - \frac{3}{2}, j + \frac{1}{2}, k) = H_z(i_1 + \frac{3}{2}, j + \frac{1}{2}, k), \quad j_1 \leq j \leq j_2 - 1 \quad (6.11)$$

其它的几个平面也可仿此处理。

§6.2.3. 吸收边界条件

对于矩形波导谐振腔的仿真，不需要吸收边界条件。而分析矩形波导中不连续性的影响时，我们需要在波导两个端口设置完全匹配层，如图 6.2 所示。

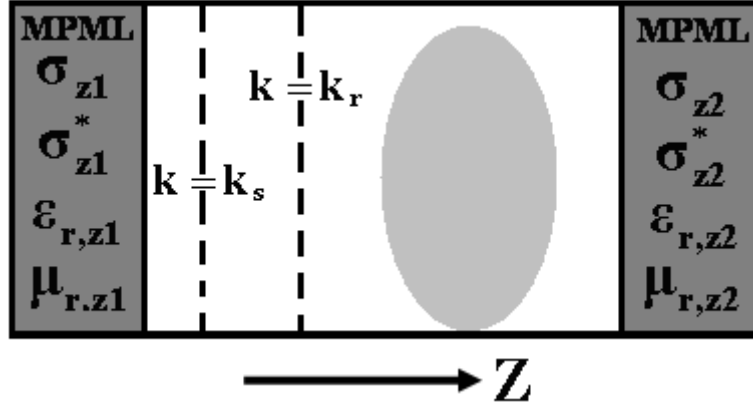


图 6.2 矩形波导侧视投影图。中间浅灰色区域代表波导中的不连续性，纵向 z 方向两端深灰色区域代表修正的 PML（MPML），附加参数 $\varepsilon_{r,z}$ 和 $\mu_{r,z}$ 是为了吸收消失波。 $k = k_s$ 平面为激励源平面， $k = k_r$ 平面为散射参数抽取平面。

对于传统的 PML，是不能吸收消失波（衰减模式）的。常采用的措施是增加波导的纵向长度，使消失波能够经过一定距离传播后而衰减。不幸的是，消失波数值衰减的速度慢于理论的衰减速度，因此必须进一步增加波导的纵向长度，这将增加计算机的资源耗费。国内学者方大刚报道[17]，在完全匹配层中引入渐变的相对介电常数和相对磁导率，可以有效地吸收消失波。接下来，我们将该技术推广到高阶。

以 $\hat{E}_x$ 场为例，将其分解成沿 y 方向传播的子分量 $\hat{E}_{xy}$ 和 z 方向传播的子分量 $\hat{E}_{xz}$ 之和，即 $\hat{E}_x = \hat{E}_{xy} + \hat{E}_{xz}$ 。由于 y 方向为金属边界，无需 PML， $\hat{E}_{xy}$ 的迭代公式为

$$\begin{aligned} \hat{E}_{xy}^{n+l/m}(i+\frac{1}{2}, j, k) &= \hat{E}_{xy}^{n+(l-1)/m}(i+\frac{1}{2}, j, k) \\ &+ \alpha_{y1} \times [H_z^{n+l/m}(i+\frac{1}{2}, j+\frac{1}{2}, k) - H_z^{n+l/m}(i+\frac{1}{2}, j-\frac{1}{2}, k)] \\ &+ \alpha_{y2} \times [H_z^{n+l/m}(i+\frac{1}{2}, j+\frac{3}{2}, k) - H_z^{n+l/m}(i+\frac{1}{2}, j-\frac{3}{2}, k)] \end{aligned} \quad (6.12)$$

而 z 方向设置了 PML， $\hat{E}_{xz}$ 的迭代公式为

$$\begin{aligned}
 \hat{E}_{xz}^{n+l/m}(i+\frac{1}{2}, j, k) &= \exp(-\xi) \times \hat{E}_{xz}^{n+(l-1)/m}(i+\frac{1}{2}, j, k) + \frac{1-\exp(-\xi)}{\xi} \times \\
 &\frac{1}{\varepsilon_{r,z}(i+\frac{1}{2}, j, k)} \times \{-\alpha_{z1} \times [H_y^{n+l/m}(i+\frac{1}{2}, j, k+\frac{1}{2}) - H_y^{n+l/m}(i+\frac{1}{2}, j, k-\frac{1}{2})] \\
 &- \alpha_{z2} \times [H_y^{n+l/m}(i+\frac{1}{2}, j, k+\frac{3}{2}) - H_y^{n+l/m}(i+\frac{1}{2}, j, k-\frac{3}{2})]\} \\
 \text{这里, } \xi &= \frac{d_l \Delta_t \sigma_z(i+\frac{1}{2}, j, k)}{\varepsilon_z(i+\frac{1}{2}, j, k)}, \quad \varepsilon_z = \varepsilon_0 \varepsilon_{r,z}。
 \end{aligned} \tag{6.13}$$

σ_z 的设置和第四章传统的 PML 是一样的, 类似于 (4.18-4.19) 式。而相对介电常数 $\varepsilon_{r,z}$ 的渐变规律采用下面的多项式形式

$$\varepsilon_{r,z}(\Lambda) = 1 + \varepsilon_{r,z \max} \left(\frac{\Lambda}{\Gamma} \right)^\kappa \tag{6.14}$$

这里, Λ 是 PML 介质到吸收边界内侧的距离, Γ 是 PML 的厚度, κ 控制 $\varepsilon_{r,z}$ 变化的快慢且和 (4.18) 式中的 κ 保持一致。从吸收边界内侧到吸收边界外侧, $\varepsilon_{r,z}$ 从 1 增加到 $1 + \varepsilon_{r,z \max}$ 。 $\varepsilon_{r,z \max}$ 太大吸收效果不好, $\varepsilon_{r,z \max}$ 太小则算法不稳定。一般的, $\varepsilon_{r,z \max} \in [5, 20]$, 且采用局部材质参数。用类似的分裂场技术也可推导出磁场分量在 PML 区域的迭代公式, 其参数设置要满足阻抗匹配条件 $\frac{\sigma^*}{\mu_0 \mu_{r,z}} = \frac{\sigma}{\varepsilon_0 \varepsilon_{r,z}}$ 。

由于吸收边界内侧的相对介电常数和相对磁导率都是 1, 电导率和磁阻率都是 0, 所以也就保持了和自由空间波阻抗的一致性。

§6.2.4. 参数抽取

对于特征值参数的提取, 包括谐振频率和截止频率, 一般有单点提取和区域能量提取两种方法。两种方法都必须利用离散时间傅里叶变换。前者计算复杂度低, 且提取点必须小心放置避开波节点的位置; 后者计算复杂高, 但可准确提取特征值参数。

为了求解矩形波导不同模式 (主模和高次模) 的截止频率, 我们可利用横向场谐振时电磁场能量守恒条件。即利用横向区域总电场或总磁场的能量峰值

来定位截止频率。在横向区域内，频域电场的平均能量公式

$$\Sigma_E^S = \frac{\epsilon}{4} \iint_S \tilde{\mathbf{E}} \cdot \tilde{\mathbf{E}}^H dS = \frac{\epsilon}{4} \iint_S (|\tilde{E}_x|^2 + |\tilde{E}_y|^2 + |\tilde{E}_z|^2) dS \quad (6.15)$$

同理，对于矩形波导谐振腔的谐振频率，我们只需要定位整个矩形长方体区域内的总电场或总磁场的能量峰值。在矩形长方体区域内，频域电场的平均能量公式

$$\Sigma_E^V = \frac{\epsilon}{4} \iiint_V \tilde{\mathbf{E}} \cdot \tilde{\mathbf{E}}^H dV = \frac{\epsilon}{4} \iiint_V (|\tilde{E}_x|^2 + |\tilde{E}_y|^2 + |\tilde{E}_z|^2) dV \quad (6.16)$$

为了抽取散射参量或者反射系数，传统的方法是运行程序两次。第一次程序运行时，去除不连续性的影响，在 $k = k_r$ 平面记录纯入射波 $\tilde{V}_{inc}$ 。第二次程序运行时，加入不连续性的影响，同样在 $k = k_r$ 平面记录反射波和入射波之和 $\tilde{V}_{tot}$ 。

根据两次计算结果，频域反射系数或 $\tilde{S}_{11}$ 参数可写为 $\tilde{S}_{11} = \frac{\tilde{V}_{tot} - \tilde{V}_{inc}}{\tilde{V}_{inc}}$ 。该方法抽取

散射参量的精度较高，但需要耗费更多的计算时间。

最近提出的一次性参数提取方法能够节省一半的计算时间，但精度略差。其具体步骤，可概括如下

(1) 定义矩形波导传输状态下的模式电压 $\tilde{V}$ 和模式电流 $\tilde{I}$ 。

$$\tilde{V} = \iint_S [\tilde{\mathbf{E}}(x, y, z_r) \times \tilde{\mathbf{h}}(x, y)] \cdot d\mathbf{S} \quad (6.17)$$

$$\tilde{I} = \iint_S [\tilde{\mathbf{e}}(x, y) \times \tilde{\mathbf{H}}(x, y, z_r)] \cdot d\mathbf{S} \quad (6.18)$$

这里， $\tilde{\mathbf{e}}(x, y)$ 和 $\tilde{\mathbf{h}}(x, y)$ 分别为横向电场和横向磁场在某个频率时的模式函数（本征函数）， $z_r = k_r \Delta_z$ 为散射参数抽取平面的纵向坐标， $\tilde{\mathbf{E}}(x, y, z_r)$ 和 $\tilde{\mathbf{H}}(x, y, z_r)$ 为 $k = k_r$ 平面上的频域矢量电场和频域矢量磁场，其值可由离散时间傅里叶变换求出。

(2) 采用微分方法[15]，求解频域特性阻抗 $\tilde{Z}$

$$\tilde{Z} = \sqrt{\frac{\tilde{V} \cdot (d\tilde{V}/dz)}{\tilde{I} \cdot (d\tilde{I}/dz)}} \quad (6.19)$$

这里， $d\tilde{V}/dz$ 和 $d\tilde{I}/dz$ 分别表示模式电压和模式电流沿纵向正方向的导数。考虑

到电磁场的交错位置且为了保持算法的高精度,我们提出下面的高阶离散化处理

$$\tilde{V}|_{z=z_r} = \tilde{V}(k_r) \quad (6.20)$$

$$\tilde{I}|_{z=z_r} \approx \frac{9}{16} \times [\tilde{I}(k_r + 0.5) + \tilde{I}(k_r - 0.5)] - \frac{1}{16} \times [\tilde{I}(k_r + 1.5) + \tilde{I}(k_r - 1.5)] \quad (6.21)$$

$$\frac{d\tilde{V}}{dz}|_{z=z_r} \approx \frac{2}{3} \times \frac{\tilde{V}(k_r + 1) - \tilde{V}(k_r - 1)}{\Delta_z} - \frac{1}{12} \times \frac{\tilde{V}(k_r + 2) - \tilde{V}(k_r - 2)}{\Delta_z} \quad (6.22)$$

$$\frac{d\tilde{I}}{dz}|_{z=z_r} \approx \frac{9}{8} \times \frac{\tilde{I}(k_r + 0.5) - \tilde{I}(k_r - 0.5)}{\Delta_z} - \frac{1}{24} \times \frac{\tilde{I}(k_r + 1.5) - \tilde{I}(k_r - 1.5)}{\Delta_z} \quad (6.23)$$

(3) 求出特性阻抗、模式电压和模式电流后,入射电压波 $\tilde{V}_{inc}$ 和反射电压波

$\tilde{V}_{ref}$ 可分别写成

$$\tilde{V}_{inc} = \frac{\tilde{V} + \tilde{Z} \cdot \tilde{I}}{2\sqrt{\tilde{Z}}} \quad (6.24)$$

$$\tilde{V}_{ref} = \frac{\tilde{V} - \tilde{Z} \cdot \tilde{I}}{2\sqrt{\tilde{Z}}} \quad (6.25)$$

频域散射参量 $\tilde{S}_{11}$ (反射系数) 可以表示为

$$\tilde{S}_{11} = \frac{\tilde{V}_{ref}}{\tilde{V}_{inc}} \quad (6.26)$$

§6.3. 数值算例

算例 1. 分析矩形波导 R120 的谐振频率, 算法采用 FDTD(2, 2)、FDTD(2, 4) 和 SFDTD(3, 4) 方法。波导谐振腔尺寸 $a \times b \times c = 19.050mm \times 9.525mm \times 14.288mm$, 空间步长 $\Delta_s = 2.381mm$, 稳定度常数 $CFL = 0.4$, 计算时间步 $n_{max} = 10000$ 。调制高斯脉冲源频谱范围 $[12GHz, 21GHz]$, 扫频间隔 $0.01GHz$ 。在扫频范围内, 可激励的谐振模式包括 TE_{101} , TE_{110} (TM_{110}), TE_{011} , TE_{111} (TM_{111})。对于 FDTD(2, 4) 方法和 SFDTD(3, 4) 方法, 金属边界采用镜像技术处理。为了能够充分激励各种谐振模式 (包括 TE 模式和 TM 模式), 我们要设置 $n = 0$ 时刻的纵向电场和纵向磁场的初始条件

$$H_z^0(i + 1/2, j + 1/2, k) = \exp\left\{-\frac{(i + 1/2 - i_c)^2 + (j + 1/2 - j_c)^2}{2\tau_g^2}\right\} \quad (6.27)$$

$$\hat{E}_z^0(i, j, k + \frac{1}{2}) = \exp\left\{-\frac{(i-i_c)^2 + (j-j_c)^2}{2\tau_g^2}\right\} \quad (6.28)$$

这里, i_c, j_c, k_c 是波导中心对应的网格索引, τ_g 是空间脉冲宽度, i, j, k 的取值范围可设置为: $i_c \leq i \leq i_2, j_c \leq j \leq j_2, k_c \leq k \leq k_2$ 。通过上面的设置, 高斯脉冲的空间分布便具有不对称性, 因而能激励出所有可能的模式。我们先采用离散时间傅里叶变换计算频域电场值, 然后用 (6.16) 式计算整个谐振腔内部的电场总能量, 其峰值对应的频率就是谐振频率。在图 6.3 中, 电场总能量按最大值进行了归一化处理。可以看出, 高阶辛算法和解析解吻合地很好, 而传统的时域有限差分法和高阶 FDTD(2, 4) 方法对应的谐振频率有明显的偏移。

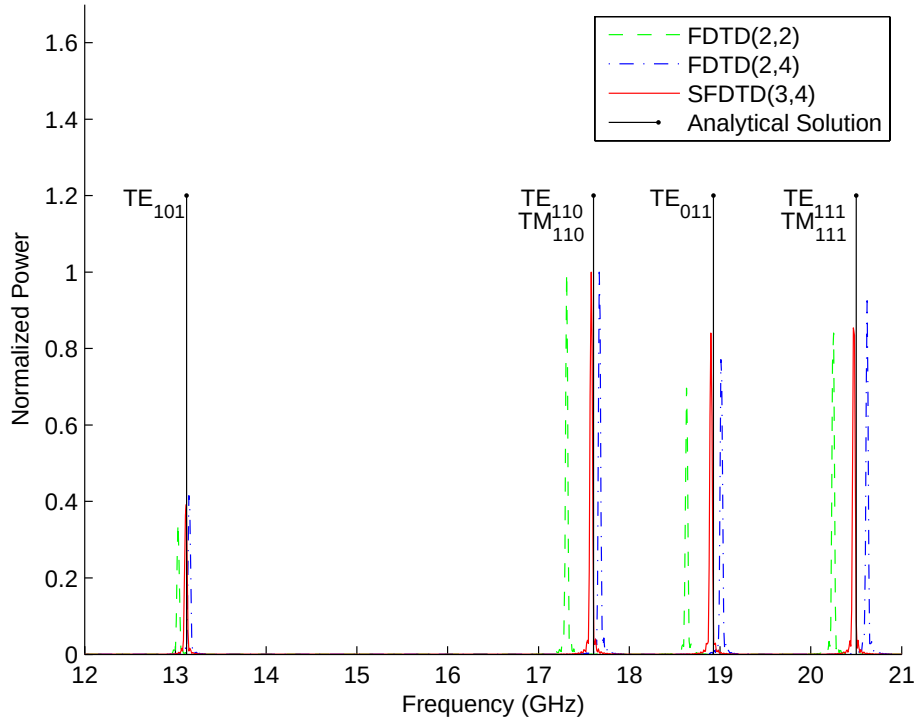


图 6.3 矩形波导谐振腔的频域电场总能量。能量峰值对应的频率为该波导的谐振频率。波导尺寸 $19.050\text{mm} \times 9.525\text{mm} \times 14.288\text{mm}$, 空间步长 $\Delta_s = 2.381\text{mm}$, 稳定度常数 $CFL = 0.4$, 算法采用 FDTD(2, 2) 方法、FDTD(2, 4) 方法和 SFDTD(4, 4) 方法。

算例 2。填充介质的 R2600 波导。波导横向尺寸 $a \times b = 0.864\text{mm} \times 0.432\text{mm}$, 两端用 10 层修正的 PML (MPML) 作为吸收边界条件, MPML 区域的最大相对介电

常数和最大相对磁导率设置为： $\mu_{r,z\max} = \varepsilon_{r,z\max} = 20$ ，电导率和磁阻率设置参照 (4.19)。一致空间步长 $\Delta_\delta = 0.072mm$ ，稳定度常数 $CFL = 0.5$ 。

首先，我们测试下 MPML 的吸收效果，算法使用 SFDTD(3,4) 方法。调制高斯脉冲参数 $T_0 = 10.58ps$ ， $W = 25ps$ ，频谱范围 $f \in [180GHz, 340GHz]$ 。波导纵向长度占据 41 个网格，点源位于整个波导中心，记录点位于波导横向面的中心且纵向距 MPML 两个网格。首先，记录前 200 个时间步内的 $\hat{E}_x$ 场场值 $\hat{E}_x^{Num}$ 。然后，将纵向长度增加到 241 个网格，获得数值参考解 $\hat{E}_x^{Ref}$ 。定义每个时间步的相对反射误差

$$\hat{\rho}(n) = 20 \log_{10} \frac{|\hat{E}_x^{Ref}(n) - \hat{E}_x^{Num}(n)|}{\max_n |\hat{E}_x^{Ref}(n)|} \quad (6.29)$$

图 6.4 给出了相对反射误差随时间的变化曲线。可以看出吸收率在 -60dB 左右。

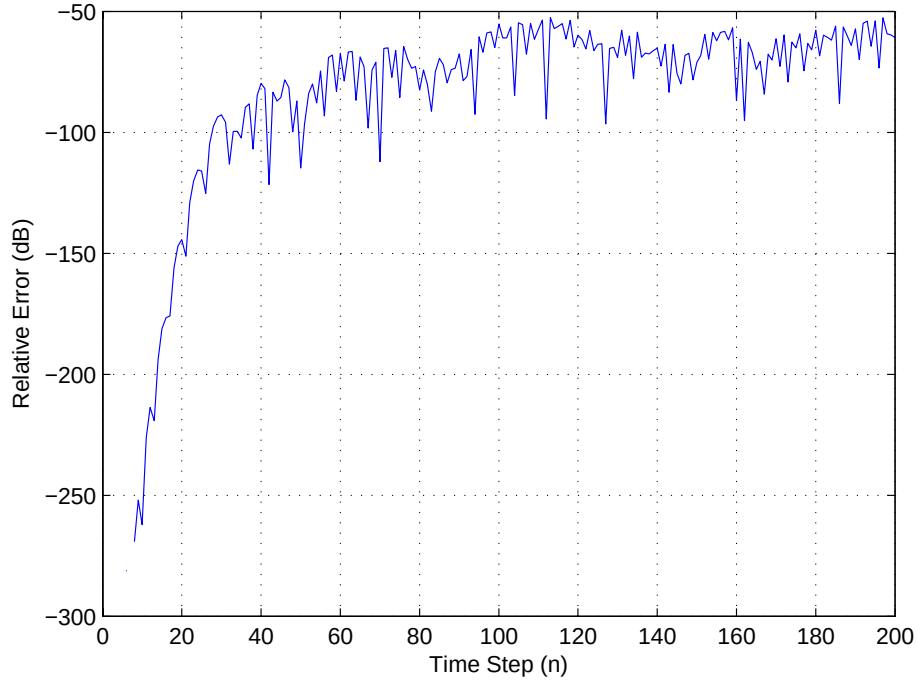
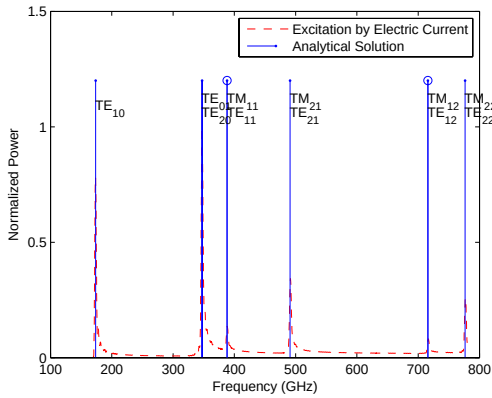


图 6.4 MPML 的相对反射误差随时间的变化曲线。

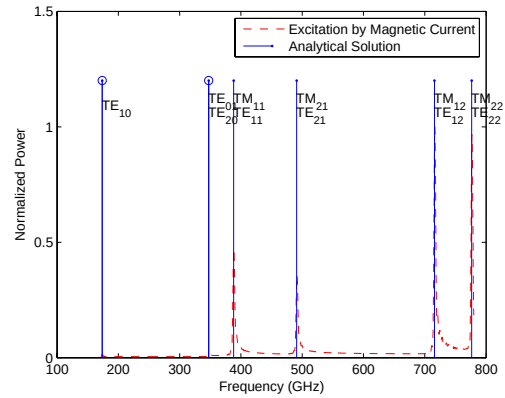
而若我们使用传统的 PML（不引入相对介电常数和磁导率）且 PML 区域内的电导率和磁阻率的设置同 MPML 保持一致，则经过长时间仿真后该传统的 PML 是不稳定的。因为分裂场 PML 本身是弱康态（Weakly Well-Posed）的，而该 3 阶对称

辛算子的数值变化较为剧烈，因此导致了传统 PML 不稳定。若仍想正常操作传统的 PML，也就必须降低最大电导率 $\sigma_{\max}$ 和磁阻率 $\sigma_{\max}^*$ 的数值，这也就影响了吸收的效果。而对于修正的 PML 除了可获得良好的吸收效果外，它也能够保持长时间的稳定性，相关的数学证明值得进一步的研究。

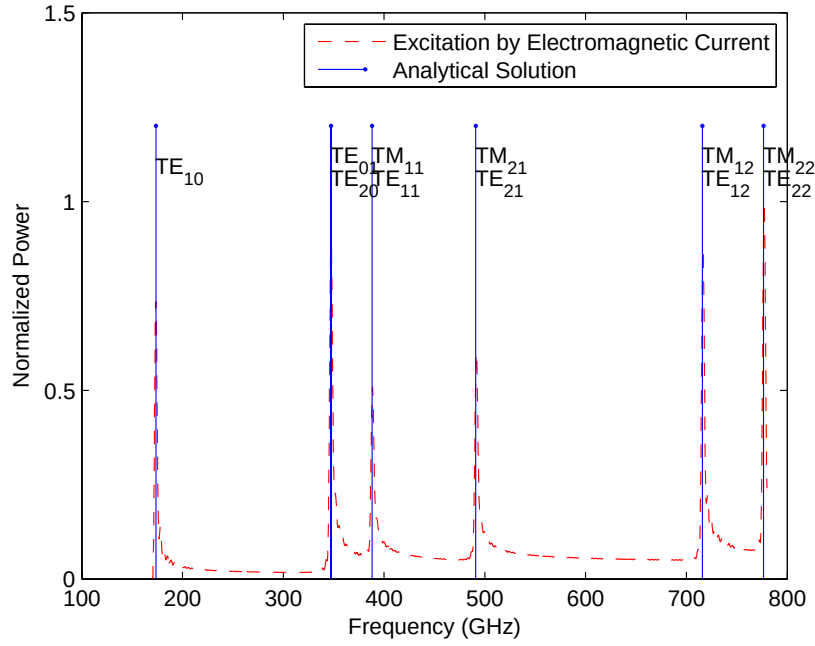
其次，求该波导的截止频率，算法使用 SFDTD (3, 4) 方法。激励源位于 $k_y = 12$ 平面， $k_x = 33$ 处为特征值参数抽取平面。激励源频谱范围 $[170\text{GHz}, 780\text{GHz}]$ ，其时空描述采用 (6.3-6.5) 式，且 $m \in [0, 2]$ ， $n \in [0, 2]$ ，因此可激励的模式包括 TE_{10} ， TE_{01} ， TE_{20} ， TE_{11} (TM_{11})， TE_{21} (TM_{21})， TE_{12} (TM_{12})， TE_{22} (TM_{22})。程序运行 10000 步后，在特征值参数抽取平面，采用 (6.15) 式计算频域电场总能量，其峰值对应的频率就是截止频率。在图 6.5 中，电场总能量按最大值进行了归一化处理。我们不难看出，只采用电流源激励时， TE_{11} (TM_{11}) 和 TE_{12} (TM_{12}) 模式未被充分激励。只采用磁流源激励时， TE_{10} ， TE_{01} ，和 TE_{20} 模式未被充分激励。而采用电磁流混合激励时，所有模式均被充分激励，且能量峰值对应的数值截止频率和解析解吻合地很好。



(a) 纯电流源激励



(b) 纯磁流源激励



(c) 电磁流混合激励

图 6.5 不同激励源的激励效果。红色虚线代表用数值解求出的波导横向面的频域电场总能量，其能量峰值对应的频率为波导截止频率。蓝色竖线给出了解析解求出的波导截止频率。竖线上的圆圈表示未能充分激励的模式。

最后，分析波导不连续性问题，算法使用 SFDTD (3, 4) 方法和传统的 FDTD (2, 2) 方法。激励源位于 $k_s = 12$ 平面，频谱范围 $f \in [180\text{GHz}, 340\text{GHz}]$ ，波导工作于主模 TE_{10} 模式。波导中加载一电介质块，横向尺寸和波导尺寸一致，纵向长度 0.504mm ，相对介电常数 3.7。波导纵向长度占据 48 个网格，介质块的中心位于第 25 个网格。为了提取入射波和反射波，在 $k_{r1} = 17$ 处设置左侧端口抽取平面。为了提取透射波，在 $k_{r2} = 33$ 处设置右侧端口抽取平面。采用微分方法，一次性提取散射参数。图 6.6 给出了 $\tilde{S}_{11}$ 和 $\tilde{S}_{21}$ 参数的计算结果，有限元法作为参考解。可以看出，SFDTD (3, 4) 算法和参考解吻合良好，而传统的 FDTD (2, 2) 算法有明显的歪曲。

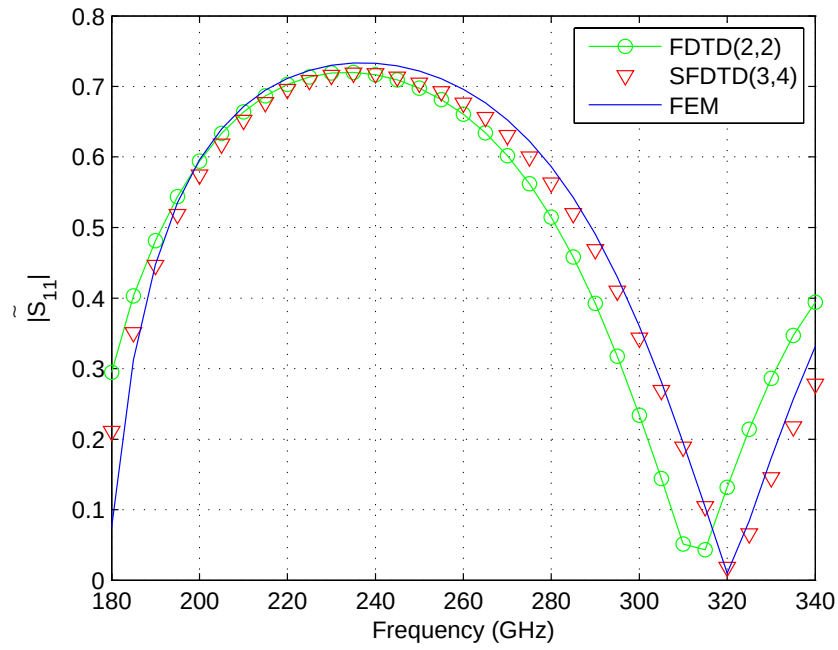
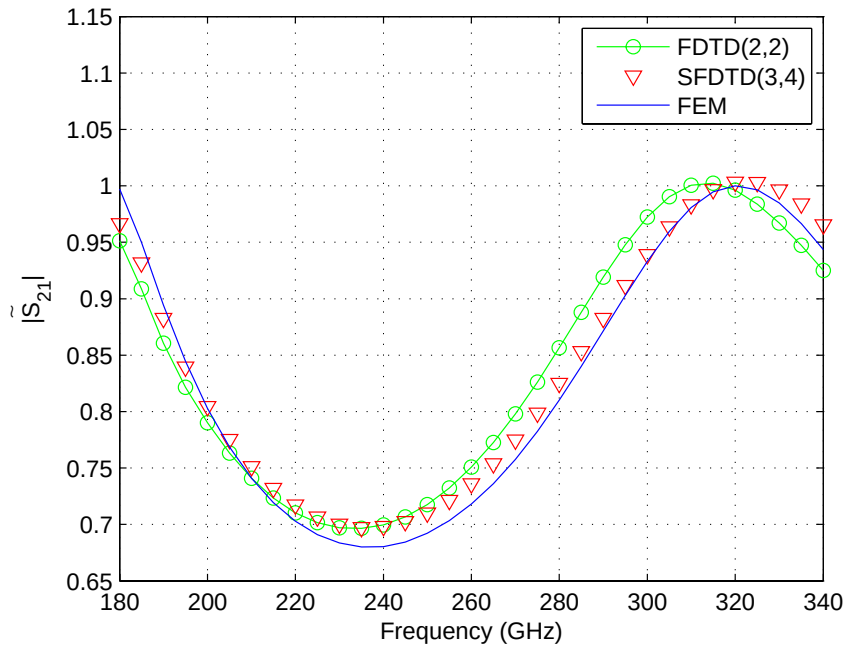
(a) $\tilde{S}_{11}$ 参数(b) $\tilde{S}_{21}$ 参数

图 6.6 加载介质块的矩形波导的散射参数。算法采用 SFDTD(3,4) 方法和 FDTD(2,2) 方法。波导横向尺寸 $0.864\text{mm} \times 0.432\text{mm}$ 。介质尺寸 $0.864\text{mm} \times 0.432\text{mm} \times 0.504\text{mm}$ ，相对介电常数 3.7。一致空间步长 0.072mm ，稳定性常数 0.5。

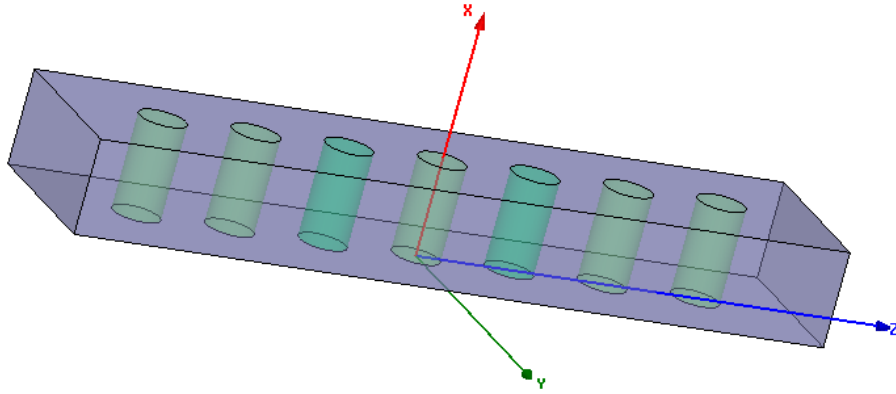


图 6.7 R40 矩形波导 PBG 结构。波导横向尺寸 $a \times b = 58.170\text{mm} \times 29.083\text{mm}$ ，7 个无耗电介质圆柱呈周期性分布，直径 $b/2$ ，间距 b ，相对介电常数 3.0。

算例 3。R40 矩形波导光子带隙 (Photonic Band Gap) 结构[18]，方案采用 AM-SFDTD(3, 4)算法和 AM-FDTD(2, 2)算法。如图 6.7 所示，矩形波导横向尺寸 $a \times b = 58.170\text{mm} \times 29.083\text{mm}$ ，7 个无耗电介质圆柱呈周期性分布，直径 $b/2$ ，间距 b ，相对介电常数 3.0。调制高斯脉冲扫频范围 $[2.7\text{GHz}, 5.1\text{GHz}]$ ，波导工作于主模 TE_{10} 模式。空间步长 $\Delta_x = 14.542\text{mm}$ ， $\Delta_y = 4.847\text{mm}$ ， $\Delta_z = 7.271\text{mm}$ ，时间步长 $\Delta_t = 80.783\text{ps}$ 。对于高阶辛算法，采用基于高阶子网格技术的平均电磁参数来处理材质的不连续性。对于传统的 FDTD(2, 2)算法，采用基于低阶子网格技术的平均电磁参数。波导 PBG 结构散射参数的抽取结果如图 6.8 所示。可以看出，随着频率增大，传统时域有限差分法的数值结果有偏移。

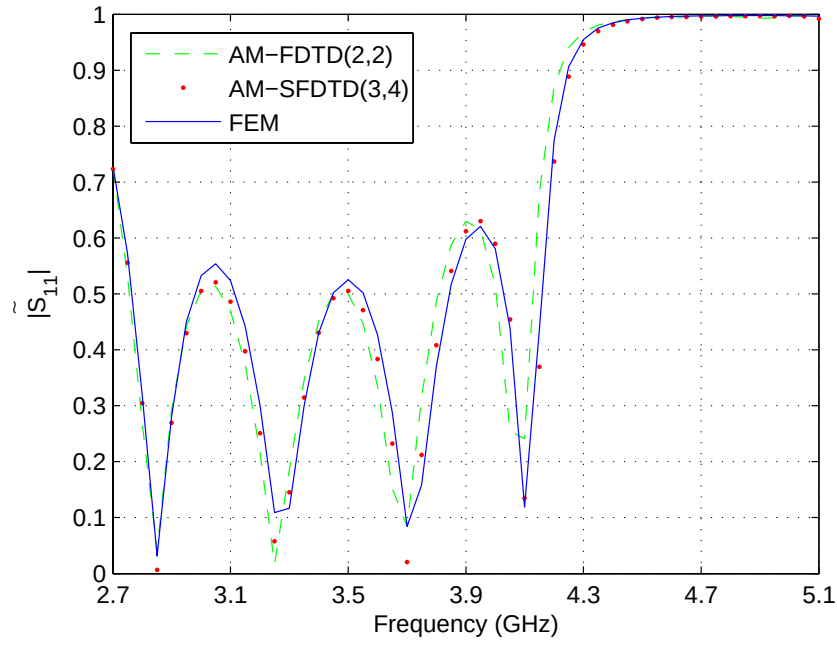
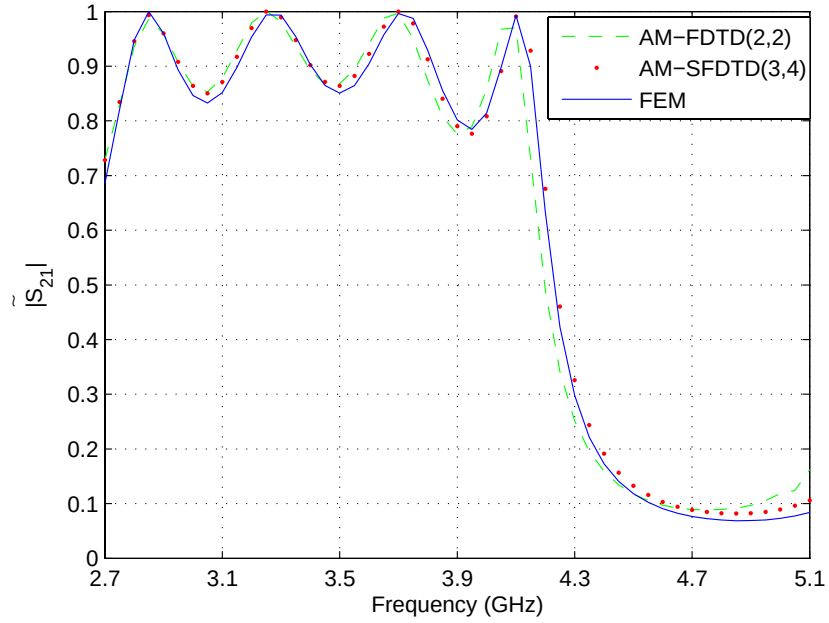
(a) $\tilde{S}_{11}$ 参数(b) $\tilde{S}_{21}$ 参数

图 6.8 矩形波导 PBG 结构的散射参数。方案采用 AM-FDTD(2, 2) 算法和 AM-SFDTD(3, 4) 算法。空间步长 $\Delta_x = 14.542\text{mm}$, $\Delta_y = 4.847\text{mm}$, $\Delta_z = 7.271\text{mm}$, 时间步长 $\Delta_t = 80.783\text{ps}$ 。

§6.4. 小结

本章我们将高阶辛时域有限差分法初步应用于波导仿真,并将相关技术推广到高阶。为了充分激励高次模,采用了电磁流混合激励的方式;为了吸收消失波,将渐变介电常数和磁导率引入到高阶完全匹配层;为了有效抽取特征值参数,采用计算总区域能量的方法;为了有效抽取散射参数,将微分方法推广到高阶。通过一系列的数值算例,证明了上述高阶技术的有效性。且与传统的时域有限差分法相比,高阶辛算法在波导仿真中已初显优势。

参考文献

- [1] 葛德彪, 闫玉波. 电磁波时域有限差分方法[M]. 西安: 西安电子科技大学, 2005.
- [2] D. M. Sullivan. Electromagnetic Simulation Using the FDTD Method[M]. New York: Wiley-IEEE Press, 2000.
- [3] A. P. Zhao and A. V. Raisanen. Application of a simple and efficient source excitation technique to the FDTD analysis of waveguide and microstrip circuits[J]. IEEE Transactions on Microwave Theory and Techniques, 1996, 44(9):1535-1539.
- [4] S. T. Chu, W. P. Huang, and S. K. Chaudhuri. Simulation and analysis of wave-guide based optical integrated-circuits[J]. Computer Physics Communications, 1991, 68(1-3):451-484.
- [5] S. Wang and F. L. Teixeira. An equivalent electric field source for wideband FDTD simulations of waveguide discontinuities[J]. IEEE Microwave and Wireless Components Letters, 2003, 13(1):27-29.
- [6] T. Shibata and T. Itoh. Generalized-scattering-matrix modeling of waveguide circuits using FDTD field simulations[J]. IEEE Transactions on Microwave Theory and Techniques, 1998, 46(11):1742-1751.
- [7] J. P. Berenger. Three-dimensional perfectly matched layer for the absorption of electromagnetic waves[J]. Journal of Computational Physics, 1996, 127(2):363-379.
- [8] J. P. Berenger. Effective PML for the absorption of evanescent waves in waveguides[J]. IEEE Microwave and Guided Wave Letters, 1998, 8(5):188-190.
- [9] J. Fang and Z. Wu. Generalized perfectly matched layer for the absorption of propagating and evanescent waves in lossless and lossy media[J]. IEEE Transactions on Microwave Theory and Techniques, 1996, 44(12):2216-2222.
- [10] G. X. Fan and Q. H. Liu. A strongly well-posed PML in lossy media[J]. IEEE Antennas and Wireless Propagation Letters, 2003, 2(1):97-100.
- [11] 张晓燕, 周庆, 戴宏. 2D-FDTD 法计算波导截止频率的激励源设计与取样[J]. 云南大学学报, 2003, 25(6):507-510.
- [12] W. K. Gwarek and M. Celuch-Marcysiak. Wide-band S-parameter extraction from FD-TD simulations for propagating and evanescent modes in inhomogeneous guides[J]. IEEE Transactions on Microwave Theory and Techniques, 2003, 51(8):1920-1928.
- [13] A. Christ and H. L. Hartnagel. Three-dimensional finite-difference method for the analysis of microwave-device embedding[J]. IEEE Transactions on Microwave Theory and Techniques, 1987, 35(8):688-696.

- [14] D. V. Krupezevic, V. J. Brankovic, and F. Arndt. Wave-equation FD-TD method for the efficient eigenvalue analysis and S-matrix computation of waveguide structures[J]. IEEE Transactions on Microwave Theory and Techniques, 1993, 41(12):2109-2115.
- [15] W. K. Gwarek and M. Celuch-Marcysiak. Differential method of reflection coefficient extraction from FDTD simulations[J]. IEEE Microwave and Guided Wave Letters, 1996, 6(5):215-217.
- [16] Q. S. Cao, Y. C. Chen, and R. Mittra. Multiple image technique (MIT) and anisotropic perfectly matched layer (APML) in implementation of MRTD scheme for boundary truncations of microwave structures[J]. IEEE Transactions on Microwave Theory and Techniques, 2002, 50(6):1578-1589.
- [17] B. Chen, D. G. Fang, and B. H. Zhou. Modified Berenger PML absorbing boundary condition for FDTD meshes[J]. IEEE Microwave and Guided Wave Letters, 1995, 5(11):399-401.
- [18] 闫敦豹, 袁乃昌, 付云起. 基于 FDTD 的波导介质层 PBG 结构的研究[J]. 电子与信息学报, 2004, 26(1):118-123.

结束语

科学计算对人类科技和文明的发展起到了不可磨灭的推动作用,各个国家对此高度重视,投入了大量的人力、物力和财力。科学计算渗透在各个学科、各个领域内,形成了计算物理、计算化学、计算生物等一系列新的研究方向。在这期间,各类学科专业、学术报导、科研项目、实验中心激增,商业软件和实际产品也不断涌现。由于科学计算为各个领域提供了新的思路、方法和指导,因此表现出高速的发展态势和强大的生命力。作为计算物理的重要分支,计算电磁学是科学计算、电磁场理论及电磁场工程的结合和再生,在材料、航空航天、遥感、无线通讯、微电子等领域都有重要的应用和发展。

近半个世纪来,计算电磁学算法不断革新,解决问题也逐步趋向工业实际。以宽带、电大、复杂为目标,以有限元法、矩量法、时域有限差分法为主线,以软件技术和硬件技术为依托,计算电磁学一路走来成果颇丰,几经辉煌。虽然有所突破,但目前仍有很多机遇与挑战。

作为计算电磁学算法的杰出代表之一,时域有限差分法从 1966 年 Yee 网格提出至今 40 年有余,其学术论文、著作逐年递增,也出现了 CST, XFDTD, CFDTD 等商业软件。时域有限差分法是直接离散麦克斯韦方程的时域解决方案,它的演进是以时空离散方法和网格为方向,其一是改进数值色散性和数值稳定性,其二是改进结构网格造成的阶梯近似。

本论文也是针对上述两条展开了对高阶辛时域有限差分法的系统研究工作。时间上的离散方式采用高阶辛积分,改善稳定性;空间上的离散方式采用高阶差分,改善色散性;非均匀边界处理采用高阶子网格和高阶共形网格,改善阶梯近似。通过离散方法和网格之间的相互配合,达到快速度、低内存、高精度电磁仿真的目标。本文所做的工作,对高阶时域方法的理论发展和工程推广有重要的意义。

对于高阶辛算法,仍有许多新的方向值得研究,仍有许多新的思路值得探讨。关于将来的工作,作者认为应从以下几个方面进行更深入的研究和改善:

(1) 由于辛积分方法是更精确、精细的时间步进方法,因此需要发展时间方向上的高阶插值方案。该方案可以使混合亚网格(Hybrid-Subgridding)技术、

平面波斜入射技术在高阶辛时域有限差分法中得以推广。

(2) 由麦克斯韦方程的辛性质可知, 任意时刻电磁场场值可由初始时刻的场值连续决定。该性质在偏微分领域被称作“强康态”。因此, 强康态完全匹配层是和高阶辛算法更为匹配的吸收边界条件。特别的, 对于数值剧烈变化的辛算子而言, 传统的分裂场完全匹配层是弱稳定甚至是不稳定的。强康态完全匹配层的使用有望克服该问题。此外, 怎样能将强康态完全匹配层用于波导仿真也值得研究。

(3) 在粗网格条件下, 高阶共形技术能获得较高的数值精度, 但需要减小时间步长。最近提出了一些新的低阶共形技术, 无须减小时间步长且能够获得令人满意的数值精度。将来可以考虑将这些新技术推广到高阶。

(4) 高阶辛时域有限差分法在色散媒质、各向异性媒质中的应用还鲜见报导。而这些媒质的高阶边界处理, 也是很有挑战性的课题。

(5) 高阶辛时域有限差分法的并行研究问题。是否存在时间方向上并行的可能? 空间方向上并行时, 不同节点电磁场场值的数据交换应怎样操作?

(6) 将高阶辛积分和其它空间高阶方法相结合。可以对辛伪谱方法、辛紧差分方法、辛多分辨率方法等进行系统研究。

致谢

五年攻博路，一篇辛苦文。在安徽大学的多年时光，总像青春窗前一块平滑而美丽的布，时常在深夜为学术和生活冥思时，随风摇摆。就这样注视着成长清晰的轨迹，注视着知识悄然的累积，注视着校园惊喜的变迁，注视着同学匆忙的运去，一时间感慨良多，历历在目。

首先感谢恩师吴先良教授。当每次课堂讲授时，他总能做到认真细致，倾囊相授，足见其学术风范；当每次学术研讨时，他总能把握计算电磁学的发展脉络和相关技术难点，足见其学术水平；当我意欲研究当时已成熟的某个算法时，他建议我将选题定位于辛算法，足见其敏锐的学术眼光；当我每次参加学术会议或外出研习时，他都大力支持、尽心引荐，给我提供了自由的学术氛围和可贵的学习机会；当我组织的舞台剧，没有场地、经费困难时，他多方联系，关怀备至，在生活上给予我尽情展现的舞台。从研究上的悉心指导，到生活上的关心鼓励，我取得的每一点进步和成绩，都凝结着他的心血与汗水。

其次感谢我的母亲。她提前退了休，不辞劳苦的来合肥照顾我，料理我的生活，使我把大部分精力投入到了科学研究中，对此我无以回报。除了对她说声谢谢，也只能更加努力地工作。

感谢中国科学技术大学的徐善驾教授，感谢他在我的博士开题报告上对我将来工作的建议和他对我博士后申请给予的帮助和支持；感谢东南大学的崔铁军教授、美国 Kansas 大学的惠荣庆教授，对我博士后申请的帮助和支持；感谢 Journal of Computational Physics 期刊的副主编 E. Turkel 教授，他肯定了我的工作并给我修改文章的机会，使我在计算电磁学的研究之路上树立了信心；感谢美国波士顿大学的 Robert Kotiuga 教授，感谢他对我将来工作的建议和博士后申请中给我的帮助；感谢荷兰格罗宁根大学的 Hans De Raedt 教授，和我探讨了与麦克斯韦方程相关的数学证明问题；感谢香港大学的 Weng Cho Chew 教授，提供我继续从事计算电磁学研究的机会；感谢我在北京航空航天大学学习期间，给予我帮助的王宝发教授、刘铁军教授、及秦德华同学；感谢解放军电子工程学院的尹成友教授在全国挑战杯大赛中给我的帮助；感谢在国防科学技术大学学习期间，给予我帮助的袁乃昌教授、张伟军同学、及李毅同学；感谢国防科学技术大学的葛哲

致谢

学老师，很荣幸能和他合作撰写一本小波方面的书籍；感谢中国科学技术大学的陈卫东教授及其研究小组的张冬晨和徐亚忠同学，和你们一起合作收获很大。

感谢电磁场微波专业的宋开宏、李民权、孙玉发、赵谨、吴萍老师，感谢您们对我学术上的教导和生活上的关心；感谢陈明生和黄志祥博士，感谢王丽华和王健硕士，和你们在一起探讨学术问题、一起参加项目和比赛、一起生活和相处，让我受益匪浅和终生难忘；感谢实验室的刘亮、杨扬、赵佳、庞艳红同学，和你们一起学习和生活，我感到快乐；感谢研究生时的同学唐礼兵、李朝杰、刘路路、吕术佳、王文丽，你们给予了我称之为生命的东西和一种心灵的力量；还要感谢很多我不能一一列出名字的我的老师、亲人、同学和朋友，衷心地感谢你们。

沙威

安徽大学

2008年3月1日

作者攻博期间发表的刊物

专著

葛哲学, 沙威, 《小波分析理论与 MATLAB R2007 实现》. 北京: 中国电子工业出版社, 2007 年 10 月.

期刊论文

1. **Wei Sha**, Xianliang Wu, Zhixiang Huang, and Mingsheng Chen, “A New Conformal FDTD(2,4) Scheme for Modeling Three-Dimensional Curved Perfectly Conducting Objects”, **IEEE Xplore**, *IEEE Microwave and Wireless Components Letters*, vol. 18, no. 3, pp. 149-151, 2008. (SCI, EI)
<http://dx.doi.org/10.1109/LMWC.2008.916772>
2. **Wei Sha**, Zhixiang Huang, Mingsheng Chen, and Xianliang Wu, “Survey on Symplectic Finite-Difference Time-Domain Schemes for Maxwell's Equations”, **IEEE Xplore**, *IEEE Transactions on Antennas and Propagation*, vol. 56, no. 2, pp. 493-500, 2008. (SCI, EI)
<http://dx.doi.org/10.1109/TAP.2007.915444>
3. **Wei Sha**, Zhixiang Huang, Xianliang Wu, and Mingsheng Chen, “Application of the Symplectic Finite-Difference Time-Domain Scheme to Electromagnetic Simulation”, **Elsevier**, *Journal of Computational Physics*, vol. 225, no. 1, pp. 33-50, 2007. (SCI)
<http://dx.doi.org/10.1016/j.jcp.2006.11.027>
4. **Wei Sha**, Mingsheng Chen, Xianliang Wu, and Zhixiang Huang, “Application of the High-Order Symplectic FDTD Scheme to the Curved Three-Dimensional Perfectly Conducting Objects”, **Wiley**, *Microwave and Optical Technology Letters*, vol. 49, no. 4, pp. 931-934, 2007. (SCI, EI)
<http://dx.doi.org/10.1002/mop.22306>
5. **Wei Sha**, Zhixiang Huang, Xianliang Wu, and Mingsheng Chen, “Total Field and Scattered Field Technique for Fourth-Order Symplectic Finite-Difference Time-Domain Method”, **IOP**, *Chinese Physics Letters*, vol. 23, no. 1, pp. 103-105, 2006. (SCI)
<http://dx.doi.org/10.1088/0256-307X/23/1/030>
6. **Wei Sha**, Xianliang Wu, Mingsheng Chen, and Yufa Sun, “The Application of Improved Periodic Wavelets Method for Scattering”, *Chinese Journal of Electronics*, vol. 14, no. 2, pp. 345-348, 2005. (SCI, EI)
7. Zhixiang Huang, **Wei Sha**, Xianliang Wu, and Mingsheng Chen, “Decomposition Methods for Time-Domain Maxwell's Equations”, **Wiley**, *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, vol. 56, no. 9, pp. 1695-1704, 2008. (SCI)

<http://dx.doi.org/10.1002/fld.1569>

8. Zhixiang Huang, **Wei Sha**, Xianliang Wu, and Mingsheng Chen, “A Novel High-Order Time-Domain Scheme for Three-Dimensional Maxwell’s Equations”, **Wiley, *Microwave and Optical Technology Letters***, vol. 48, no. 6, pp. 1123-1125, 2006. (SCI, EI)
<http://dx.doi.org/10.1002/mop.21563>
9. Zhixiang Huang, Xianliang Wu, **Wei Sha**, and Mingsheng Chen, “Optimal Symplectic Integrators for Numerical Solution of Time-Domain Maxwell’s Equations”, **Wiley, *Microwave and Optical Technology Letters***, vol. 49, no. 3, pp. 545-547, 2007. (SCI, EI)
<http://dx.doi.org/10.1002/mop.22193>
10. Mingsheng Chen, Xianliang Wu, **Wei Sha**, and Zhixiang Huang, “Fast and Accurate Radar Cross Section Computation over a Broad Frequency Band Using the Best Uniform Rational Approximation”, **IEEE Xplore, *IET Microwaves, Antennas & Propagation***, vol. 2, no. 2, pp. 200-204, 2008. (SCI, EI)
<http://dx.doi.org/10.1049/iet-map:20070155>
11. Mingsheng Chen, Xianliang Wu, **Wei Sha**, and Zhixiang Huang, “Hybrid Lifting Wavelet-Like Transform for Solution of Electromagnetic Integral Equation”, **IOP, *Chinese Physics Letters***, vol. 25, no. 3, pp. 1000-1003, 2008. (SCI)
<http://dx.doi.org/10.1088/0256-307X/25/3/053>
12. Mingsheng Chen, Xianliang Wu, **Wei Sha**, and Zhixiang Huang, “Fast Frequency Sweep Scattering Analysis for Multiple PEC Objects”, ***Applied Computational Electromagnetics Society Journal***, vol. 22, no. 2, pp. 250-253, 2007. (SCI, EI)
http://aces.ee.olemiss.edu/cgi-bin/Test_2.idc?pid=672
13. Mingsheng Chen, Xianliang Wu, and **Wei Sha**, “The Asymptotic Waveform Evaluation Technique Based on Lifting Wavelet Transform”, ***Applied Computational Electromagnetics Society Journal***, vol. 21, no. 1, pp. 99-104, 2006. (SCI, EI)
http://aces.ee.olemiss.edu/cgi-bin/Test_2.idc?pid=606
14. Mingsheng Chen, Xianliang Wu, Zhixiang Huang, and **Wei Sha**, “Chebyshev Approximation for Fast Frequency Sweep Analysis of Electromagnetic Scattering Problem”, ***Chinese Journal of Electronics***, vol. 15, no. 4, pp. 736-738, 2006. (SCI, EI)
15. Mingsheng Chen, Xianliang Wu, Zhixiang Huang, and **Wei Sha**, “Accurate Computation of Wide-Band Response of Electromagnetic Scattering Problems via Maehly Approximation”, **Wiley, *Microwave and Optical Technology Letters***, vol. 49, no. 5, pp. 1144-1146, 2007. (SCI, EI)
<http://dx.doi.org/10.1002/mop.22367>
16. 沙威, 吴先良, “快速提升小波变换在介质体散射中的运用”, ***合肥工业大学学报***, 29 卷, 2 期, 238-241 页, 2006 年.

17. 陈明生, 孙玉发, 沙威, 吴先良, “应用 DWT-GMRES 方法快速计算二维电大介质目标 RCS”, *电波科学学报*, 21 卷, 2 期, 220-223 页, 2006 年. (EI)
18. 张量, 沙威, 吴先良, “矩形波导时域仿真中的激励源设置和参数提取”, *合肥工业大学学报*, 30 卷, 2 期, 233-236 页, 2007 年.
19. 刘尧, 吴先良, 沙威, “高阶有限元-边界积分法在二维介质体散射中的运用”, *合肥工业大学学报*, 30 卷, 12 期, 1698-1701+1714 页, 2007 年.
20. 王璐, 陈明生, 沙威, 吴先良, “基于双正交小波变换的介质目标电磁散射特性研究”, *合肥工业大学学报*, 31 卷, 3 期, 476-478+483 页, 2008 年.
21. 沙威, 吴先良, “应用高阶共形辛时域有限差分法求解金属曲面目标的电磁散射”, *中国科技论文在线*, 2007 年.
22. 汪忠柱, 吴先良, 沙威, “一维光子晶体平板波导特性研究”, *中国科技论文在线*, 2007 年.
23. 陈明生, 吴先良, 沙威, 黄志祥, “应用最佳一致有理逼近分析目标宽带电磁散射特性”, *中国科技论文在线*, 2007 年.

会议论文

24. Wei Sha, Xianliang Wu, Zhixiang Huang, and Mingsheng Chen, “The Symplecticness of Maxwell’s Equations”, *2008 International Conference on Microwave and Millimeter Wave Technology*, Accepted for Publication. (ISTP)
25. 沙威, 吴先良, “应用高阶共形辛算法求解金属曲面目标的散射问题”, *海峡两岸三地无线科技研讨会*, 安徽合肥, 2007 年.
26. Wei Sha, Mingsheng Chen, and Xianliang Wu, “A Diagonal Split-Cell Model for the High-Order Symplectic FDTD Scheme”, *Progress in Electromagnetics Research Symposium*, vol. 2, no. 6, pp. 715-719, 2006. (ISTP)
<http://dx.doi.org/10.2529/PIERS060903035033>
27. 沙威, 吴先良, “Total Field and Scattered Field Approach to High-Order Symplectic Finite-Difference Time-Domain Scheme”, *超宽带短脉冲电磁学会议*, 江苏镇江, 2005 年.
28. 沙威, 陈明生, “Improved Periodic Wavelet Technique for Moment Methods”, *电磁散射与逆散射会议*, 四川成都, 2004 年.

作者攻博期间参加的科研项目

1. 国家自然科学基金“基于辛算法的复杂目标 RCS 高效计算方法的研究”，基金号：No.60371041。
2. 国家自然科学基金“基于高阶辛算法的时域电磁散射计算理论及其应用研究”，基金号：No.60671051。
3. 教育部博士点基金“基于 PE 算法的电磁散射计算理论及其应用研究”，基金号：No.20060357004。
4. 解放军总装备部项目“带隐身材料层的典型部件 RCS 计算研究”。
5. 合作项目“卫星的逆合成孔径雷达成像”。
6. 企业项目“基于小波变换和傅里叶变换的血压自动测量技术”。

作者攻博期间获得的奖励和荣誉

2007 年——第四届中国青少年科技创新奖

2007 年——第四届全国研究生数学建模竞赛一等奖（评为优秀论文）

2006 年——第三届全国研究生数学建模竞赛二等奖

2005 年——第九届“挑战杯”全国大学生课外学术科技作品竞赛三等奖

2005 年——安徽省首届“挑战杯”大学生课外学术科技作品竞赛一等奖

2005 年——安徽省优秀三好学生

2004 年——安徽大学三好学生标兵

2006 年——安徽大学一等奖奖学金

2005 年——安徽大学二等奖奖学金

2004 年——安徽大学一等奖奖学金

2003 年——安徽大学一等奖奖学金