

高阶 LOD-FDTD 方法的数值特性研究

刘国胜^① 张国基^②

^①(华南理工大学计算机科学与工程学院 广州 510641)

^②(华南理工大学数学系 广州 510641)

摘要: 该文分析并证明了高阶局部 1 维时域有限差分(LOD-FDTD)方法的数值特性, 即: 稳定性、数值色散及高阶收敛性。文中首次推导出 3 维各阶 LOD-FDTD 方法的增长因子和数值色散关系的一致形式, 解析证明了这类方法均是无条件稳定的。基于此一致性关系, 首次分析了这类方法的数值色散误差随阶数的收敛情况, 并给出收敛性条件。在用此类方法计算谐振腔本征模频率的实验中, 数值结果显示高阶方法可达到更优的计算精度, 同时不显著增加计算时间。

关键词: LOD-FDTD; 高阶近似; 无条件稳定性; 数值色散; 收敛性

中图分类号: TM15

文献标识码: A

文章编号: 1009-5896(2010)06-1384-05

DOI: 10.3724/SP.J.1146.2009.00881

Study for the Numerical Properties of the Higher-Order LOD-FDTD Methods

Liu Guo-sheng^① Zhang Guo-ji^②

^①(School of Computer Science and Engineering, South China University of Technology, Guangzhou 510641, China)

^②(Department of Mathematics, South China University of Technology, Guangzhou 510641, China)

Abstract: In this paper, the numerical properties of higher-order Locally One Dimensionally Finite-Difference Time-Domain (LOD-FDTD) are investigated, i.e. stability, numerical dispersion, and convergence. The universal formulas of the amplitude factor and the numerical dispersion relationship are derived for 3D varying-order LOD-FDTD, and their unconditional stability is analytically proved. Based on this universal formula, the numerical convergence of this class of methods is discussed, and the convergence condition is presented for the first time. Numerical results in calculating the resonant frequency show that, higher-order methods can achieve better performance while not dramatically increasing computational time.

Key words: LOD-FDTD; Higher-order approximation; Unconditional stability; Numerical dispersion; Convergence

1 引言

近几十年来,时域有限差分方法(FDTD)被广泛应用于电磁兼容、散射等问题中,它有着物理含义清晰,简单易实现等优点,已经成为最主要的时域仿真方法^[1]。然而, Courant-Friedrichs-Lewy(CFL)条件的限制是 FDTD 方法面临的主要挑战。为克服这一缺点,具有无条件稳定性的隐式 FDTD 方法在近几年越来越受到重视,如:基于 Crank-Nicolson(CN)策略的 CN-FDTD 方法^[2];基于交替方向隐式(ADI)策略的 ADI-FDTD 方法^[3-5]。另外,局部 1 维(LOD)策略在 2005 年被引入 FDTD 方法中^[6],之后逐渐受到重视成为一个新的研究热点^[7-9]。作为 ADI-FDTD 方法的一种改进算法,

LOD-FDTD 方法具有更简单的实现和更高效的计算性能。虽然隐式方法是无条件稳定的,但已经证实它们的数值精度都随时间步长的增大而大大降低。文献[8]通过添加人工变量的方法,最小化 LOD-FDTD 的数值色散误差。文献[9]提出一种迭代过程以消除 LOD-FDTD 方法中的非交换误差项。本文研究高阶近似来提高 LOD-FDTD 方法的精度,它在时域中采用 2 阶差分近似,在空间域中采用高阶差分近似。理论和实验均证明,这类高阶方法同样具有无条件稳定的特性,并有更优的数值色散关系,适用于高精度要求的电磁仿真问题。

本文组织如下:在第 2 节,推导出高阶 LOD-FDTD 方法的数值公式;在第 3 节,证明这种方法是无条件稳定的,同时给出其数值色散关系,另外对高阶方法的收敛性进行研究;第 4 节用数值实验对高阶方法进行了比较;结论在第 5 节中给出。

2 高阶 LOD-FDTD 算法

3 维自由空间中的 Maxwell 方程组可用矩阵表示为

$$\frac{\partial \boldsymbol{\varphi}}{\partial t} = ([\mathbf{A}] + [\mathbf{B}])\boldsymbol{\varphi} \quad (1)$$

式(1)中向量 $\boldsymbol{\varphi} = [E_x, E_y, E_z, H_x, H_y, H_z]^T$ 由 6 个电场和磁场分量组成, 空间微分算子 $[\mathbf{A}] = \text{adiag}\{\varepsilon_0^{-1}\mathbf{R}, \mu_0^{-1}\mathbf{R}^T\}$, $[\mathbf{B}] = \text{adiag}\{-\varepsilon_0^{-1}\mathbf{R}^T, -\mu_0^{-1}\mathbf{R}\}$, 其中

$$\mathbf{R} = \begin{bmatrix} 0 & 0 & \partial/\partial y \\ \partial/\partial z & 0 & 0 \\ 0 & \partial/\partial x & 0 \end{bmatrix} \quad (2)$$

ε_0 , μ_0 分别是真空中的介电常数和磁导率常数。

对式(1)在 $t = (n + 1/2)\Delta t$ 时刻应用 CN 策略, 可以得到

$$\begin{aligned} & \left([\mathbf{I}] - \frac{\Delta t}{2}[\mathbf{A}] - \frac{\Delta t}{2}[\mathbf{B}] \right) \boldsymbol{\varphi}^{n+1} \\ & = \left([\mathbf{I}] + \frac{\Delta t}{2}[\mathbf{A}] + \frac{\Delta t}{2}[\mathbf{B}] \right) \boldsymbol{\varphi}^n \end{aligned} \quad (3)$$

进一步对式(3)进行分解(两边同时添加 $\Delta t^2/4[\mathbf{A}][\mathbf{B}]$ 项)得到

$$\boldsymbol{\varphi}^{n+1} = \frac{\left([\mathbf{I}] + \frac{\Delta t}{2}[\mathbf{A}] \right) \left([\mathbf{I}] + \frac{\Delta t}{2}[\mathbf{B}] \right)}{\left([\mathbf{I}] - \frac{\Delta t}{2}[\mathbf{A}] \right) \left([\mathbf{I}] - \frac{\Delta t}{2}[\mathbf{B}] \right)} \boldsymbol{\varphi}^n \quad (4)$$

传统的 ADI 方法和 LOD 方法均可用于将式(4)分解成两个子过程, 它们分别对应两种不同的隐式方法: ADI-FDTD 和 LOD-FDTD 方法。本文着重讨论 LOD-FDTD 方法, 其分步形式为

前半时间步 ($n \rightarrow n + 1/2$)

$$\left([\mathbf{I}] - \frac{\Delta t}{2}[\mathbf{A}] \right) \boldsymbol{\varphi}^{n+1/2} = \left([\mathbf{I}] + \frac{\Delta t}{2}[\mathbf{A}] \right) \boldsymbol{\varphi}^n \quad (5a)$$

后半时间步 ($n + 1/2 \rightarrow n + 1$)

$$\left([\mathbf{I}] - \frac{\Delta t}{2}[\mathbf{B}] \right) \boldsymbol{\varphi}^{n+1} = \left([\mathbf{I}] + \frac{\Delta t}{2}[\mathbf{B}] \right) \boldsymbol{\varphi}^{n+1/2} \quad (5b)$$

现在, 对空间偏导数进行高阶离散化处理, 对 1 阶偏导数定义一个 N 阶 (N 为偶数) 中心差商近似如下:

$$\begin{aligned} D_x^{(N)} f(x) &= \sum_{m=1}^{N/2} \gamma_{N,m} \cdot \frac{f\left(x + \frac{2m-1}{2}\Delta x\right) - f\left(x - \frac{2m-1}{2}\Delta x\right)}{\Delta x} \end{aligned} \quad (6)$$

其中 $\gamma_{N,k}$ 的计算公式将在后文给出, 式(6)中隐含数值精度关系:

$$D_x^{(N)} f(x) = f'(x) + O\{(\Delta x)^N\}, \quad \Delta x \rightarrow 0 \quad (7)$$

将近似式(6)应用于式(5a)和式(5b)便可得到高

阶 LOD-FDTD 数值公式。以下仅列出 E_x 和 H_z 分量的计算公式, 其它分量可类似处理:

前半时间步 ($n \rightarrow n + 1/2$)

$$\begin{aligned} E_x^{n+1/2}(i+1/2, j, k) &= E_x^n(i+1/2, j, k) + \Delta t/2\varepsilon_0 \\ &\quad \cdot D_y^{(N)}\{H_z^{n+1/2}(i+1/2, j, k) \\ &\quad + H_z^n(i+1/2, j, k)\} \end{aligned} \quad (8a)$$

$$\begin{aligned} H_z^{n+1/2}(i+1/2, j+1/2, k) &= H_z^n(i+1/2, j+1/2, k) \\ &\quad + (\Delta t/2\mu_0)D_y^{(N)} \\ &\quad \cdot \{E_x^{n+1/2}(i+1/2, j+1/2, k) \\ &\quad + E_x^n(i+1/2, j+1/2, k)\} \end{aligned} \quad (8b)$$

后半时间步 ($n + 1/2 \rightarrow n + 1$)

$$\begin{aligned} E_x^{n+1}(i+1/2, j, k) &= E_x^{n+1/2}(i+1/2, j, k) - \Delta t/2\varepsilon_0 \\ &\quad \cdot D_z^{(N)}\{H_y^{n+1}(i+1/2, j, k) \\ &\quad + H_y^{n+1/2}(i+1/2, j, k)\} \end{aligned} \quad (9a)$$

$$\begin{aligned} H_z^{n+1}(i+1/2, j+1/2, k) &= H_z^{n+1/2}(i+1/2, j+1/2, k) \\ &\quad - (\Delta t/2\mu_0)D_x^{(N)}\{E_y^{n+1}(i+1/2, \\ &\quad j+1/2, k) + E_y^{n+1/2}(i+1/2, \\ &\quad j+1/2, k)\} \end{aligned} \quad (9b)$$

在每个子过程中, LOD-FDTD 方法都要求首先隐式更新 3 个电(磁)场分量, 然后显式更新 3 个磁(电)场分量。隐式更新过程等价于对一个矩阵方程的求解, 其中系数矩阵是一个带状对角矩阵, 带宽为 $2N-1$ 随阶数升高而增大。另外, LOD-FDTD 更新过程中需要用到某一场分量前半时间步的场值, 因此需要分配 16.7% 的额外内存空间(相对 FDTD 而言)。例如: 如果在式(8)中采用隐式求解 E_x , 显式求解 H_z , 那么在计算 $E_x^{n+1/2}$ 之前, 需要将 E_x^n 存储起来以用于式(8b)中计算 $H_z^{n+1/2}$ 。

3 数值分析

这一节主要分析高阶 LOD-FDTD 方法的数值特性。离散 Fourier 分析被证实是分析差分格式数值特性的一种有效方法^[1,3,5], 本文采用此方法来分析高阶 LOD-FDTD 方法的稳定性和数值色散关系。

(1) 稳定性 3 维数值平面波定义为

$$\boldsymbol{\varphi}_{(i_x, i_y, i_z)}^n = \boldsymbol{\varphi}_0 \xi^n \exp\left\{j \sum_{\alpha=x,y,z} k_\alpha i_\alpha \Delta x\right\} \quad (10)$$

其中 $j = \sqrt{-1}$, 另外 k_α , i_α 和 Δx 分别是 α ($\alpha = x, y, z$) 方向的数值波数、网格标号和空间步长 ($\mathbf{k} = k(\sin\theta \cos\phi, \sin\theta \sin\phi, \cos\theta)$); ξ 表示增长因子, 以下用 ξ^l ($l = 1, 2$ 分别代表前后半个时间步过程)代替

ξ 。现在, 通过计算增长因子 ξ 来分析算法的稳定性, 其稳定性区域将由 $|\xi| \leq 1$ 导出。

为计算 ξ^1 , 将式(10)代入到式(8a), 式(8b)(同时代入那些被省略的公式中), 为方便起见, 引入记号:

$$p_\alpha = \frac{2}{\Delta\alpha} \sum_{m=1}^{N/2} \gamma_{N,m} \sin \frac{(2m-1)k_\alpha \Delta\alpha}{2} \quad (11)$$

我们发现代入过程相当于做如下变换:

$$D_\alpha^{(N)} \rightarrow p_\alpha \quad (12)$$

整理后可以得到增长因子 ξ^1 的表达式为

$$\xi_\alpha^1 = \frac{1 - r_\alpha^2 \pm 2jr_\alpha}{1 + r_\alpha^2} \quad (13)$$

其中 $r_\alpha = c\Delta t/2p_\alpha$ 。

对第 2 过程应用相同方法, 可以得到 ξ^2 如下:

$$\xi_{1,2}^2 = 1, \quad \xi_{3-6}^2 = \frac{1 - r^2 \pm 2jr}{1 + r^2} \quad (14)$$

其中 $r = \sqrt{r_x^2 + r_y^2 + r_z^2}$ 。

从以上分析可以得到高阶 LOD-FDTD 方法的增长因子 $|\xi^1| = |\xi^2| = 1$ 。所以, LOD-FDTD 方法是无条件稳定的, 它的稳定性不随阶数升高而变化, 并且由于增长因子振幅严格等于 1, 此类方法均是耗散的。

(2)色散关系 为分析算法的数值色散性质, 在式(10)中取

$$\xi^n = \exp\{j\omega n\Delta t\} \quad (15)$$

将式(10)和式(15)代入到式(4)中, 此时相当做如下替换:

$$\varphi^{n+1} \rightarrow \varphi^n \exp\{j\omega\Delta t\}, \quad \partial/\partial\alpha \rightarrow jp_\alpha \quad (16)$$

于是得到

$$\left\{ \left(\mathbf{I} - j\frac{\Delta t}{2}\mathbf{A} \right) \left(\mathbf{I} - j\frac{\Delta t}{2}\mathbf{B} \right) \exp(j\omega\Delta t) - \left(\mathbf{I} + j\frac{\Delta t}{2}\mathbf{A} \right) \left(\mathbf{I} + j\frac{\Delta t}{2}\mathbf{B} \right) \right\} \varphi^n = \mathbf{0} \quad (17)$$

矩阵 \mathbf{A} , \mathbf{B} 是由 $[\mathbf{A}]$ $[\mathbf{B}]$ 中的偏导做替换得到。要使式(17)有非零解, 则其系数矩阵的行列式必为 0。利用 matlab6.5 中的符号计算工具箱, 可以得到

$$\tan^2 \left(\frac{\omega\Delta t}{2} \right) = \frac{r_x^2 + r_y^2 + r_z^2 + r_x^2 r_y^2 + r_y^2 r_z^2 + r_x^2 r_z^2}{1 + r_x^2 r_y^2 r_z^2} \quad (18)$$

这就是各阶 LOD-FDTD 方法的数值色散关系。同时我们发现, 与 2 阶情况类似, 高阶 LOD-FDTD 方法与 ADI-FDTD 方法有相同的色散关系^[5], 且式(18)比文献[5]中给出的色散关系更简洁、更具有一般性, 易于用于分析更复杂的情况。图 1 给出了在与 Z 轴成 45° 角方向的 2 阶、4 阶、6 阶和 8 阶方法的数值色散误差的比较。

(3)收敛性 现在分析式(18)对空间域高阶差分

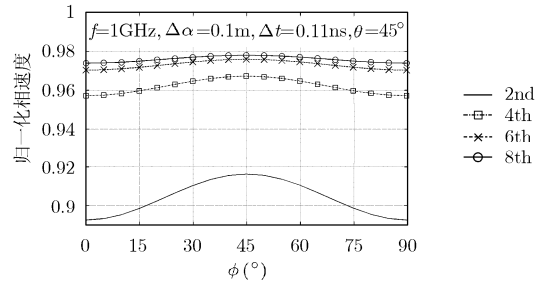


图 1 高阶 LOD-FDTD 方法的数值各向异性

策略的收敛性。首先假设时间步长趋向无限小, 即 $\Delta t \rightarrow 0$, 则数值色散关系式(18)变为

$$\frac{\omega^2}{c^2} = p_x^2 + p_y^2 + p_z^2 \quad (19)$$

可以由 Taylor 展开式确定高阶近似式(6)中的系数 γ 为

$$\gamma_{N,m} = \frac{(-1)^{m+1}}{2(m-1/2)^2} \frac{[(N-1)!!]^2}{N!!(N-2)!!} \prod_{i=1}^{m-1} \left(1 - \frac{m}{N/2+i} \right) \approx \frac{2}{\pi} \approx 1 \quad (20)$$

式(20)中第 2 项是著名的“Wallis”公式。

$$\frac{\pi}{2} = \frac{2}{1} \cdot \frac{2}{3} \cdot \frac{4}{3} \cdot \frac{4}{5} \cdot \frac{6}{5} \cdot \frac{6}{7} \cdot \frac{8}{7} \dots \quad (21)$$

它由 Wallis 于 1655 年给出用于计算圆周率 π 值。另外, 当 N 趋于无穷时, 式(20)中最后一项的极限为 1。所以, 系数收敛于

$$\gamma_{\infty,m} = \frac{(-1)^{m+1}}{\pi(m-1/2)^2} \quad (22)$$

我们发现 $\gamma_{\infty,m}$ 是周期函数 $f(x)$ (周期为 2π) Fourier 级数系数, $f(x)$ 的图像和表达式见图 2。将式(11)的极限写成 Fourier 级数形式:

$$\lim_{N \rightarrow \infty} p_\alpha = \frac{2}{\Delta\alpha} \sum_{m=1}^{+\infty} \gamma_{N,m} \sin \frac{(2m-1)k_\alpha \Delta\alpha}{2} = \frac{2}{\Delta\alpha} f \left(\frac{k_\alpha \Delta\alpha}{2} \right) \quad (23)$$

于是当且仅当 $\left| \frac{k_\alpha \Delta\alpha}{2} \right| \leq \frac{\pi}{2}$ 时, 式(23)收敛到 k_α , 即数值波数收敛到理想值。

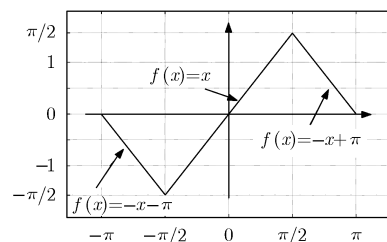


图 2 函数 $f(x)$ 的图像(周期为 2π)

考虑到 $k=2\pi/\lambda$, 收敛性条件 $\left| \frac{k_x \Delta\alpha}{2} \right| \leq \frac{\pi}{2}$ 可写为

$$\frac{\lambda}{\max(\Delta x, \Delta y, \Delta z)} \geq 2 \quad (24)$$

其中 λ 是波在媒质中波长。这其实是著名的香农采样定理, 即在离散信号中, 每一周期至少采样 2 次才能完整保留原始连续信号的信息。当空间离散率满足条件式(24)时, 高阶 LOD-FDTD 方法的数值色散关系收敛到理想情况。

$$\frac{\omega^2}{c^2} = k_x^2 + k_y^2 + k_z^2 \quad (25)$$

从以上分析可以看出, 单纯增加空间网格差分近似的阶数并不能保证算法收敛, 空间网格剖分必须满足香农定理。

4 数值仿真

为对前面的理论分析进行验证, 本文分别用 2 阶, 4 阶, 6 阶和 8 阶 LOD-FDTD 方法计算一个矩形谐振腔的谐振频率。所采用的矩形谐振腔尺寸如图 3 所示, 此腔体内部用数目 $10 \times 10 \times 20$ 的网格进行剖分, 即采用边长 $\Delta\alpha = 5 \text{ mm}$ 的立方体网格, 而边界处均用良导体(PEC)边界条件截断。为便于观察空间离散精度对计算结果的影响, 取一个较小的时间步长, $\Delta t = 1.67 \text{ ps}$ 。用时域方法计算谐振腔的本征值问题中, 可以采用设置初值法或添加激励源法来产生本征模, 但由于对隐式方法如何添加激励源问题还处于研究探讨阶段, 因此本文采用前一种方法, 在矩形谐振腔内部空间设置一个高斯分布的初值函数, 形如:

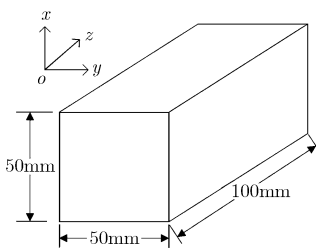


图 3 矩形谐振腔

$$g(\mathbf{r}) = \exp\{-4\pi|\mathbf{r} - \mathbf{r}_0|\}$$

其中 \mathbf{r} 是空间位置向量, \mathbf{r}_0 取为腔体中心, 将此函数用于电场分量 \mathbf{E} 。在模拟中记录腔体内某点场强的时域信号序列, 然后用离散傅里叶变换得到频域分布, 图 4 给出了计算得到的 TE_{101} 结果和与理想值 f_{101} 对比情况, 模拟迭代次数为 3 万次, 4 种方法所用的计算时间分别为: 457 s, 529 s, 580 s 和 628 s。从图中可以看出, 随着阶数升高, 计算精度有显著

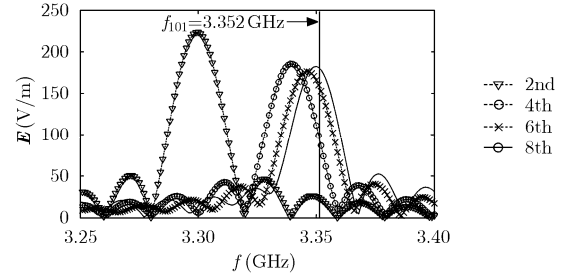


图 4 矩形谐振腔 TE_{101} 模的谐振频率

提升, 用 4 阶或以上的计算方法计算结果误差均可控制在 1% 以内。通常来讲, 4 阶方法可满足大多数应用的精度要求。

5 总结

本文给出了高阶 LOD-FDTD 方法的计算公式, 并分析其稳定性和色散关系。结果表明, 高阶 LOD-FDTD 方法两个计算过程的增长因子都不超过 1, 因此它是无条件稳定的。另外, 文中给出了 LOD-FDTD 方法色散关系的一致形式, 并研究它随阶数的变化情况。我们发现, 当且仅当满足香农采样定理式(24)时, 色散关系才能收敛到理想情况。因此, 增加有限差分近似阶数和增加空间网格离散率这两种做法并不是完全等价的。幸运的是, 收敛性条件式(24)是一个很弱的条件, 它在通常情况下都会被满足。文中对矩形谐振腔本征模频率的计算同时说明, 提高离散精度会使计算结果有所改善, 通常来讲, 4 阶方法是精度可靠、易实现和计算复杂度较低的一种方法, 值得推荐。

参考文献

- [1] 葛德彪, 闫玉波. 电磁波时域有限差分方法. 第二版, 西安: 西安电子科技大学出版社, 2005: 8-31.
Ge D B and Yan Y B. Finite-Difference Time-Domain Method for Electromagnetic Waves. Second Edition, Xi'an: the Press of Xidian University, 2005: 8-31.
- [2] Sun G and Trueman C W. Unconditionally stable Crank-Nicolson scheme for solving the two-dimensional Maxwell's equations [J]. *Electronics Letters*, 2003, 39(7): 595-597.
- [3] Namiki T. A new FDTD algorithm based on alternating-direction implicit method [J]. *IEEE Transactions on Microwave and Theory Techniques*, 1999, 47(10): 2003-2007.
- [4] Liu G S, Zhang G J, and Hu B J. Numerical analysis for an improved ADI-FDTD method [J]. *IEEE Microwave and Wireless Components Letters*, 2008, 18(9): 569-571.
- [5] Fu W and Tan E L. Stability and dispersion analysis for higher order 3-D ADI-FDTD method [J]. *IEEE Transactions on Antennas and Propagation*, 2005, 53(11): 3691-3696.
- [6] Shibayama J, Muraki M, and Yamauchi J, et al. Efficient

- implicit FDTD algorithm based on locally one-dimensional scheme [J]. *Electronics Letters*, 2005, 41(19): 1046–1047.
- [7] Ahmed I, Chua E K, and Li E P, *et al.* Development of the three-dimensional unconditionally stable LOD-FDTD method [J]. *IEEE Transactions on Antennas and Propagation*, 2008, 56(11): 3596–3600.
- [8] Li E, Ahmed I, and Vahldieck R. Numerical dispersion analysis with an improved LOD-FDTD method [J]. *IEEE Microwave and Wireless Components Letters*, 2007, 17(5): 319–321.
- [9] Jung K Y and Teixeira F L. An iterative unconditionally stable LOD-FDTD method [J]. *IEEE Microwave and Wireless Components Letters*, 2008, 18(2): 76–78.
- 刘国胜: 男, 1983 年生, 博士生, 研究方向为计算电磁学、并行算法和数值软件设计.
- 张国基: 男, 1953 年生, 教授, 博士生导师, 研究方向为计算电磁学、人工智能和计算机应用技术.