

文章编号: 1001-4322(2006)08-1315-04

# 粒子模拟软件吸收边界的研究\*

胡 旻, 祝大军, 刘大刚, 周 俊, 刘盛纲

(电子科技大学 物理电子学院, 成都 610054)

**摘 要:** 实现了时域有限差分法的 Gedney 完全匹配层吸收边界条件, 并进行了数值验证和参数优化。从结果可以看出其有较低的反射, 性能优良; 对吸收媒质厚度和电导率分布阶数的参数优化结果与 Gedney 经验值基本一致。将此吸收边界模块加入到国产粒子模拟软件 CHIPIC 中, 同美国商业粒子模拟软件 MAGIC 相比有更好的吸收效果。通过对 2 维极坐标下磁控管的模拟, 证明了此吸收边界具有实际应用价值。

**关键词:** 吸收边界; 完全匹配层(PML); PIC 模拟; 磁控管

**中图分类号:** O411.3

**文献标识码:** A

随着高速大容量计算机技术的不断发展, 等离子体粒子模拟技术也有了长足的进步。在空间物理、自由电子激光和一般等离子体问题的研究中, 等离子体粒子模拟方法得到广泛的应用, 大大缩短了研究周期, 节约了研究成本。目前, 国外已经有许多成功的商业等离子体粒子模拟软件, 如美国的 MAGIC 软件, 俄罗斯的 KARAT 软件。CHIPIC 软件是由我国自主研制开发、拥有自主知识产权的粒子模拟软件。

CHIPIC 软件主要采用时域有限差分(finite difference time domain-FDTD)的方法。FDTD 方法由于简单有效, 自从 1966 年 K. S. YEE 提出以来, 得到了极其广泛的应用。差分格式、解的稳定性和吸收边界条件是 FDTD 法的三个基本要素。许多的实际问题(如电磁场的辐射、散射)的边界是开放的, 电磁场将占据无限大的空间。但计算机的内存总是有限的, 故只能模拟有限的空间。在实际的模拟中, 就需要我们在有限的空间中模拟无限空间的问题, 因此, 模拟区域的边界设置就成了一个重要的工作。这个问题的关键是如何设置边界条件, 使得电磁波向外传播时能被边界吸收而不产生反射。

本文基于 Gedney 完全匹配层(PML)吸收边界条件<sup>[1-3]</sup>, 在 CHIPIC 软件 2 维(直角坐标系、柱坐标系、极坐标系)、3 维(直角坐标系)版本中加入了吸收边界条件模块(Freespace 模块), 从而在 CHIPIC 软件中实现损耗介质功能。损耗介质模块的加入可以实现吸收外向传输波、开放边界等功能。

## 1 理论模型

Gedney 完全匹配层是在边界处设置一定厚度的单轴高损耗各向同性媒质<sup>[4-6]</sup>。基于 Maxwell 方程组, 可得在 PML 吸收边界中, Maxwell 旋度方程为

$$\nabla \times \mathbf{E} = \omega \mu_0 \mu_r \boldsymbol{\mu} \mathbf{H}, \quad \nabla \times \mathbf{H} = \omega \epsilon_0 \epsilon_r \boldsymbol{\epsilon} \mathbf{E} \quad (1)$$

式中:  $\epsilon_r, \mu_r$  是各向同性媒质中的相对介电常数和相对导磁率, 对于单轴各向同性媒质, 张量  $\boldsymbol{\epsilon}, \boldsymbol{\mu}$  定义为

$$\boldsymbol{\epsilon} = \begin{bmatrix} a & 0 & 0 \\ 0 & a & 0 \\ 0 & 0 & b \end{bmatrix}, \quad \boldsymbol{\mu} = \begin{bmatrix} c & 0 & 0 \\ 0 & c & 0 \\ 0 & 0 & d \end{bmatrix} \quad (2)$$

由此可以推出在 PML 层中的色散方程, 并由此推出无反射条件:  $a=c=b^{-1}=d^{-1}$ , 取  $a=1+\sigma_z/j\omega\epsilon_0$ 。将此单轴媒质设置为高损耗, 就可以使入射的电磁波无反射地进入其中并能迅速地衰减。得到

$$\boldsymbol{\epsilon} = \boldsymbol{\mu} = \begin{bmatrix} 1+\sigma_z/j\omega\epsilon_0 & 0 & 0 \\ 0 & 1+\sigma_z/j\omega\epsilon_0 & 0 \\ 0 & 0 & 1/(1+\sigma_z/j\omega\epsilon_0) \end{bmatrix} \quad (3)$$

对于  $z$  轴旋转对称的完全匹配单轴各向异性媒质, FDTD 差分格式和矩阵形式的 Maxwell 旋度方程为

\* 收稿日期: 2006-02-14; 修订日期: 2006-05-10

基金项目: 国家 863 计划项目资助课题

作者简介: 胡 旻(1981—), 男, 博士, 研究方向为高功率微波器件粒子模拟; hu\_m@tom.com。

$$\begin{bmatrix} \partial H_z / \partial y - \partial H_y / \partial z \\ \partial H_x / \partial z - \partial H_z / \partial x \\ \partial H_y / \partial x - \partial H_x / \partial y \end{bmatrix} = j\omega \epsilon_0 \epsilon_r \begin{bmatrix} 1 + \sigma_z / j\omega \epsilon_0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 + \sigma_z / j\omega \epsilon_0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 / (1 + \sigma_z / j\omega \epsilon_0) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} E_x \\ E_y \\ E_z \end{bmatrix} \quad (4)$$

$$\begin{bmatrix} \partial E_z / \partial y - \partial E_y / \partial z \\ \partial E_x / \partial z - \partial E_z / \partial x \\ \partial E_y / \partial x - \partial E_x / \partial y \end{bmatrix} = -j\omega \mu_0 \mu_r \begin{bmatrix} 1 + \sigma_z / j\omega \epsilon_0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 + \sigma_z / j\omega \epsilon_0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 / (1 + \sigma_z / j\omega \epsilon_0) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} H_x \\ H_y \\ H_z \end{bmatrix} \quad (5)$$

以电场为例,可以看出,(4)式中  $E_x, E_y$  与各向同性有耗媒质中的公式完全一致,可采用标准的 FDTD 差分格式。对于  $E_z$ ,需要进行单独处理。定义  $\bar{E}_z = E_z / (1 + \sigma_z / j\omega \epsilon_0)$ , 将其代入标准 FDTD 差分格式进行迭代,可得

$$\begin{aligned} \bar{E}_z^{n+1}(i, j, k + \frac{1}{2}) = \bar{E}_z^n(i, j, k + \frac{1}{2}) + \frac{\Delta t}{\epsilon} \left\{ \left[ H_y^{n+1/2}(i + \frac{1}{2}, j, k + \frac{1}{2}) - H_y^{n+1/2}(i - \frac{1}{2}, j, k + \frac{1}{2}) \right] / \Delta x - \right. \\ \left. \left[ H_x^{n+1/2}(i, j + \frac{1}{2}, k + \frac{1}{2}) - H_x^{n+1/2}(i, j - \frac{1}{2}, k + \frac{1}{2}) \right] / \Delta y \right\} \end{aligned} \quad (6)$$

通过时域表达式  $\partial \bar{E}_z / \partial t + (\sigma_z / \epsilon_0) \bar{E}_z = \partial E_z / \partial t$ , 用中心差分可得到差分格式  $E_z^{n+1} = E_z^n + (1 + \sigma_z \Delta t / 2\epsilon_0) \bar{E}_z^{n+1} - (1 - \sigma_z \Delta t / 2\epsilon_0) \bar{E}_z^n$ , 为了简化计算,我们将  $E_z^n$  定义为  $E_z^n = (1 + \sigma_z \Delta t / \epsilon_0) \bar{E}_z^n$ 。

为了避免在 PML 表面引入反射,要求  $\sigma_z, \rho_z$  从表面起渐变增加,定义  $\sigma_z$  为  $\sigma_z(z) = \sigma_{\max} |z - z_0|^m / d_z^m$ , 其中  $d_z$  为 PML 层的厚度,  $z_0$  是 PML 表面坐标。根据文献[1]中的经验公式,我们取  $\sigma_{\max} = (m+1) / (150\pi\Delta\sqrt{\epsilon_r})$ , 其中  $m=4, d_z = (8 \sim 10)\Delta_z$ 。

## 2 数值模拟及验证

根据上述理论推导,我们在我国自主开发的高功率微波器件粒子模拟软件 CHIPIC 的 2 维和 3 维程序中加入了吸收边界模块(Freespace 模块)。在 2 维程序中,吸收边界是一个面,只能吸收平面上两个坐标系方向的场,而第三方向上的场,将放置于相应的网格点上,并不会在进入吸收边界区域时被吸收衰减;在 3 维程序中,吸收边界是一个体,对于某一个方向的场量是一个单轴的各向异性材料,因此,需要我们在编写相应的输入文件时指明吸收边界的对称轴的轴向。由于吸收边界对于各个方向的场分量变化是独立的,因此我们可以指定某些场量的吸收,而此外的其他场量进入吸收边界时并不被吸收,而是如同在自由空间中传输一样。

为了验证上述方法,并设置最理想的吸收边界参数,我们对实际模拟中最常用的波在波导中的传输进行了模拟验证。由于 2 维 TM 波电场只有一个分量,只用这一个电场分量就可以反映波的传播特性。我们模拟一个 TM 波在一个 2 维波导中传播的情况。图 1 是此矩形波导的纵向界面图。

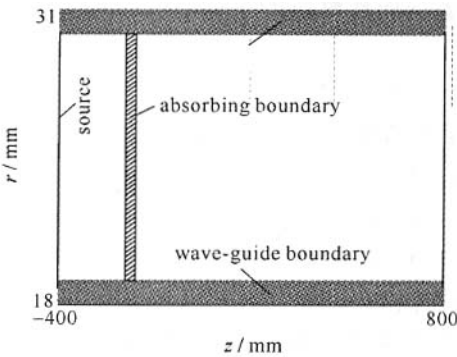


Fig. 1 Schematic of simulation space

图 1 数值模拟空间示意图

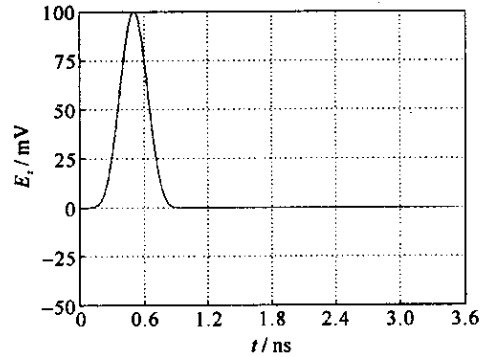


Fig. 2 Input pulse wave

图 2 源脉冲波形

我们在波导的最左端设置一个线微波源,其激发出一如图 2 所示的窄脉冲波,定义为

$$E_z = \begin{cases} 1 / [320(10 - 15\cos\omega_1 t + 6\cos\omega_2 t - \cos\omega_3 t)], & t \leq \tau \\ 0, & t > \tau \end{cases} \quad (7)$$

式中:  $\tau = 1 \text{ ns}$ ,  $\omega_i = 2\pi i / \tau$  ( $i=1, 2, 3$ )。

在源与吸收边界之间设置了  $200 \times 10$  的空间网格考察区域。当设置吸收边界时,电场  $E_z$  向右传播遇到吸收边界而被吸收。而不设置吸收边界时,电场  $E_z$  一直向右传播,在遇到后边界且反射波未进入考察区域时,

我们认为考察区域中的场与在无限长波导中传播的场一致。比较分析这两种情况下,考察区域中的  $E_z$  场量的差别,就能反映出吸收边界条件的性能。

定义考察区域中  $t$  时刻电场  $E_z$  的全局误差为

$$\epsilon_t = \sum_{i=1}^{200} \sum_{j=1}^{10} [E_{zf}(i,j) - E_{zh}(i,j)]^2 \quad (8)$$

式中:  $E_{zf}(i,j)$  是  $t$  时刻存在吸收边界条件时空间  $(i,j)$  点上的  $E_z$  的场值;  $E_{zh}(i,j)$  是  $t$  时刻不存在吸收边界条件时空间  $(i,j)$  点上的  $E_z$  的场值。

图 3 给出了不同电导率分布的 PML 性能测试结果。可以看出,随着电导率分布阶数  $m$  的增加,Gedney-PML 吸收效果也随着增加,但是当  $m$  大于 5 以后,吸收效果有衰退的趋势。因此,最终我们选取  $m=4$  作为理想结果。从此可以看出,吸收边界条件的参数优化值与 Gedney-PML 中给出的经验值基本一致。

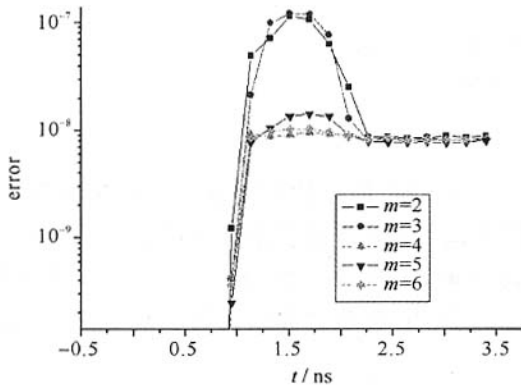


Fig. 3 Results of different distribution of conductance

图 3 不同电导率分布的测试结果

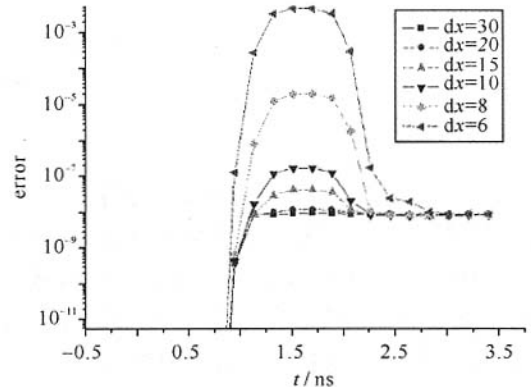


Fig. 4 Results of different thickness of PML

图 4 不同 PML 厚度的测试结果

图 4 给出了不同吸收边界层厚度的性能测试结果。从图中可以看出,当吸收边界层数在 10 个网格之下时,吸收效果非常不理想,有比较大的反射。随着吸收边界层网格数的增长,吸收效果有着明显的提高。但是,当吸收边界层在 15 个网格以上时,这个效果将不再明显。这一结论与 Gedney-PML 中给出的经验值基本一致。因此,在实际应用中,为了达到比较理想的效果,设置吸收边界层厚度时,应在 20 个网格以上。

图 5 中给出了与 MAGIC 软件的比较结果,可以看出 CHIPIC 软件的吸收边界的误差在  $10^{-8} \sim 10^{-9}$ ,基本达到了 Gedney-PML 吸收边界条件的效果,同 MAGIC 软件  $10^{-3} \sim 10^{-4}$  的误差相比,有比较大的提高<sup>[7]</sup>。

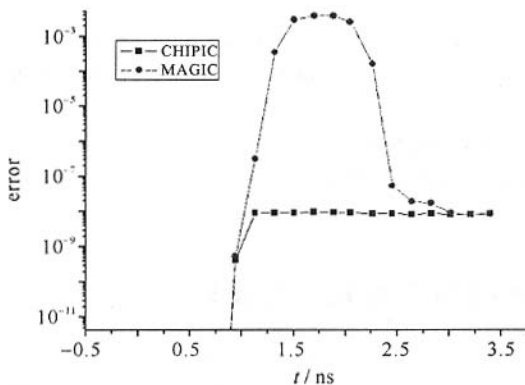


Fig. 5 Results compared with MAGIC software

图 5 同 MAGIC 软件比较结果

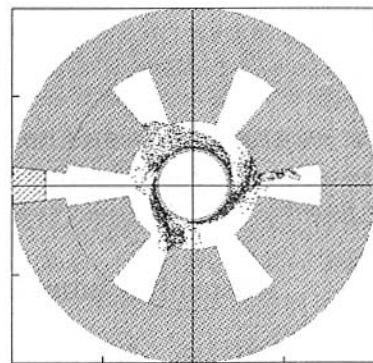


Fig. 6 Phase space of magnetron

图 6 磁控管电子轨迹图

### 3 数值应用及算例模拟

为了进一步验证此吸收边界在高功率微波器件模拟中的应用,我们使用 CHIPIC 软件对 6A 磁控管进行了数值模拟。图 6 是该磁控管的电子轨迹相空间图。在极坐标系下构建了该磁控管的模型,采用了从侧边提取测量输出功率的方法。因此在此模型下不能使用单线的边界条件(例如 MAGIC 中 Port 命令)。使用上述边界条件,激励源为 450 kV 的脉冲,轴向磁场大小为 0.55 T,得到的平均输出功率为 13.86 GW,频率为 2.32

GHz。输出功率及场频谱如图 7 所示。由此可以看出,此吸收边界条件在实际模拟中是可信的。

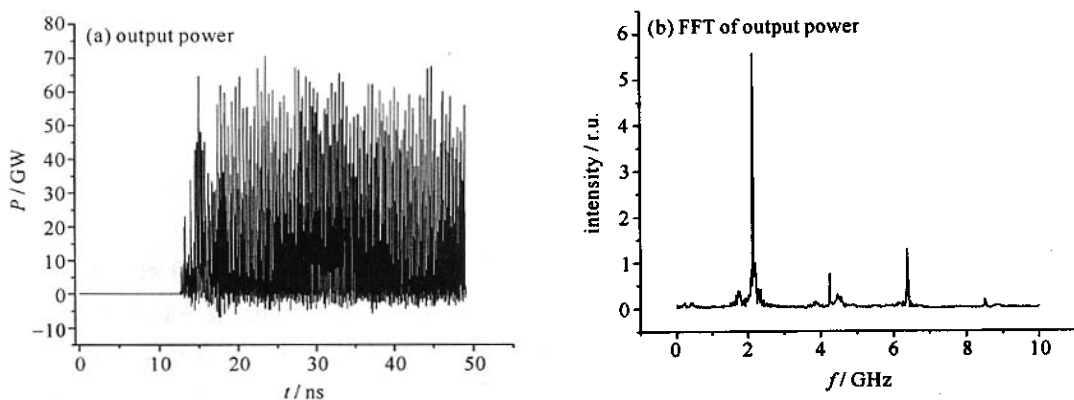


Fig. 7 Output power and its FFT of magnetron

图 7 磁控管输出功率及场频谱

## 4 结 论

本文实现了 Gedney-PML 的吸收边界条件,完成了 2 维和 3 维粒子模拟软件吸收边界模块的设计,并进行了数值验证及参数优化。结果表明,我们的吸收边界条件同美国商业粒子模拟软件 MAGIC 相比有了比较大的提高,吸收效果也基本达到 Gedney-PML 吸收边界条件的效果。通过对 2 维极坐标系下 6A 磁控管的模拟,证明了此吸收边界条件在实际运用中是可行可信的。Gedney-PML 吸收边界条件的实现对完善我们的高功率微波器件粒子模拟软件有着重要的意义。

## 参考文献:

- [1] Gedney S D. An anisotropic perfectly matched layer-absorbing medium for the truncation of FDTD lattices[J]. *IEEE Trans on Antennas and Propagation*, 1996, **44**:1630-1639.
- [2] Berenger J P. A perfectly match layer for the absorption of electromagnetic waves[J]. *Journal of Computational Physics*, 1994, **114**:185-200.
- [3] Mur G. Absorbing boundary conditions for the finite-difference approximation of the time-domain electromagnetic-field equations[J]. *IEEE Trans on Electromagnetic Compatibility*, 1981, **23**(4):377-382.
- [4] 王秉中. 计算电磁学[M]. 北京: 科学出版社, 2002:140-152. (Wang B Z. Electromagnetics calculation. Beijing: Science Press, 2002:140-152)
- [5] 孔繁敏, 李康, 刘新, 等. 波动方程 FDTD 算法的 PML 吸收边界条件的实现与验证[J]. 微波学报, 2004, **20**(1):1-4. (Kong F M, Li K, Liu X, et al. Implementation and validation of the PML absorbing boundary condition for wave equation FDTD method. *Journal of Microwave*, 2004, **20**(1):1-4)
- [6] 马双武, 高攸纲. 时域有限差分法中几种吸收边界条件的比较与数值验证[J]. 长沙大学学报, 1999, **13**(4):1-4. (Ma S W, Gao Y G. Comparison between some absorbing boundary conditions and numerical validation. *Journal of Changsha University*, 1999, **13**(4):1-4)
- [7] ATK Mission Research. Magic[OL]. <http://www.mrcwdc.com/Magic>.

## Absorbing boundary condition of software CHIPIC

HU Min, ZHU Da-jun, LIU Da-gang, ZHOU Jun, LIU Sheng-gang

(School of Physical Electronics, University of Electronics Science and Technology of China, Chengdu 610054, China)

**Abstract:** In this paper, the Gedney-perfectly matched layer(PML) absorbing boundary condition for the finite-difference time-domain(FDTD) method is implemented and validated. And also, the Gedney-PML parameters are optimized. The results show that the numerical reflection is lower than other absorbing boundaries. The optimization of the thickness of the medium and the conductance distributing factor are in agreement with Gedney's empirical values. The module of this PML is added into the homemade software CHIPIC and enables the latter better wave absorbing than MAGIC. In addition, this module is proved applicable by simulating the model of magnetron in 2D polar coordinates system.

**Key words:** Absorbing boundary condition; Perfectly matched layer; PIC simulation; Magnetron