

一种截断 Cole-Cole 色散媒质 CPML 的 FDTD 方案

刘广东

(阜阳师范学院 物理与电子科学学院,安徽 阜阳 236041)

摘 要:近年来,基于帕德(Padé)近似法,一种面向一般 Cole-Cole 色散媒质的时域有限差分(FDTD)方案被提出.为了应用该方案处理实际的电磁问题,发展了一种对应的卷积完全匹配层(CPML)吸收边界.该吸收边界具有复杂度低的优势,便于问题空间和吸收边界的统一处理.通过一维、三维 2 个算例,初步证实了该边界的良好吸收效果.

关键词:时域有限差分法;帕德近似法;Cole-Cole 色散媒质;卷积完全匹配层

中图分类号:O441.4

文献标志码:A

时域有限差分(finite-difference time-domain, FDTD)法是求解电磁问题的常用数值方法之一^[1].近几年来,适用的媒质类型已由常规媒质(非色散媒质,即电磁特性和频率无关的媒质)拓展到色散媒质^[2].其中,对于(生物医学工程领域的)生物组织、(地球物理勘探领域的)大地等媒质,其色散特性通常建模为 Debye 模型(经验公式)^[1].此时,由于媒质的(复)介电常数是 $j\omega$ (j 表示虚数单位, ω 表示角频率)整数次幂的函数,实现差分方案是直接的^[3].然而,通过拟合大量实验测量数据显示:与 Debye 模型相比, Cole-Cole 模型更适合建模生物组织、土壤等媒质的色散特性.因此,需要发展面向 Cole-Cole 色散媒质的 FDTD 方案^[4-6].

在 Cole-Cole 色散模型中,媒质的(复)介电常数是 $j\omega$ 分数次幂的函数, FDTD 建模需要克服差分实现分数阶导数的困难^[3].对此,近年来已提出了几种解决办法: Z 变换、卷积积分、帕德(Padé)近似法^[4-6].另外,为了利用这些方案处理辐射、散射等开放空间问题,还需要满足相应的吸收边界条件(absorbing boundary condition, ABC)^[1].对于常规媒质,完全匹配层(perfectly matched layer, PML)是目前功能最强、吸收效果最好的一大类吸收边界,其中,比较典型的有:单轴各向异性完全匹配层(uniaxial PML, UPML)、卷积完全匹配层(convolutional PML, CPML),各具特色^[1].然而,这些吸收边界一般不能直接应用到色散媒质^[1].

近年来, PML 吸收边界已经成功推广到 Debye 色散媒质;魏兵等人提出了通用的 UPML 吸收边界^[7], 颀孙旭等人提出了通用的伸缩坐标完全匹配层(stretched coordinate PML, SC-PML)吸收边界^[8], Prokopi-dis 等人提出了 CPML 吸收边界^[9].在截断常规媒质的几种 PML 吸收边界中, CPML 的突出优点是扩展性强、实现复杂度低^[1].为了 FDTD 模拟 Cole-Cole 色散媒质中的电波传播,本文将 CPML 做出了相应的改进和推广.

2 截断 Cole-Cole 色散媒质 CPML 的 FDTD 方案

对于一般的(无磁耗、线性、各向同性)多极 Cole-Cole 色散媒质,其复相对介电常数 $\dot{\epsilon}_r$ (符号顶部加点表示其值为复数,下文同)建模为^[6]

$$\dot{\epsilon}_r(r, \omega) \triangleq \epsilon_\infty(r) + \frac{\sigma_s(r)}{j\omega\epsilon_0} + \sum_{w=1}^W \frac{\Delta\epsilon_w(r)}{1 + (j\omega\tau_w(r))^{\beta_w(r)}}, \quad (1)$$

其中, $\Delta\epsilon_w = \epsilon_{s,w} - \epsilon_\infty$, ϵ_∞ 表示光学相对介电常数, $\epsilon_{s,w}$ 、 τ_w 和 β_w ($0 \leq \beta_w \leq 1$) 分别表示第 w 极的静态相对介电常数、弛豫时间和色散参数, $w = 1, 2, \dots, W$ (下文同), W 表示极数.该色散模型涵盖 5 种特例:1) 当 $W = 1$

收稿日期:2014-05-03;修回日期:2014-07-04.

基金项目:国家自然科学基金(61071022);阜阳师范学院重点基金(2011FSKJ01ZD).

作者简介:刘广东(1972—),男,江苏灌云人,阜阳师范学院副教授,博士,研究方向为电磁散射和逆散射, E-mail: liu_guang_dong@126.com.

退化为单极情形;2)当 $\sigma_s = 0$ 时退化为文献[5]中的(1)式;3)当 $W = 1$ 且 $\sigma_s = 0$ 时退化为文献[4]中的(1)式;4)若 $\beta_w = 1$ 转化为 Debye 媒质^[7-9];5)如果 $\beta_w = 1$ 且 $\Delta\epsilon_w = 0$ 时则变为常规非色散媒质^[1].

一般来说, β_w 为小数(介于0,1之间),直接把(1)式的 $\dot{\epsilon}_r$ 变换到时域,将面临求解分数阶导数的困难.为此,首先利用帕德(Padé)近似法^[10],可得近似的相对介电常数为

$$\dot{\epsilon}_r(r, \omega) \approx \epsilon_\infty(r) + \frac{\sigma_s(r)}{j\omega\epsilon_0} + \sum_{w=1}^W \Delta\epsilon_w(r) \frac{\sum_{n=0}^4 A_{n,w}(r)(j\omega)^n}{\sum_{n=0}^4 (A_{n,w}(r) + B_{n,w}(r))(j\omega)^n}, \quad (2)$$

其中,Padé近似的分子、分母多项式均取4阶,系数 A 、 B 的具体形式、计算方法等细节参见文献[4-6].

其次,定义一组(W 个)辅助的(频域)电极化强度(矢量) \dot{P}_w 为

$$\dot{P}_w(r, \omega) \triangleq \epsilon_0 \Delta\epsilon_w(r) \frac{\sum_{n=0}^4 A_{n,w}(r)(j\omega)^n}{\sum_{n=0}^4 (A_{n,w}(r) + B_{n,w}(r))(j\omega)^n} \dot{E}(r, \omega), \quad (3)$$

然后,再由傅里叶逆变换(inverse Fourier transform, IFT),可以得到一组相对应的时域辅助微分方程(auxiliary differential equations, ADEs)为

$$\sum_{n=0}^4 (A_{n,w}(r) + B_{n,w}(r)) \frac{\partial^n P_w(r, t)}{\partial t^n} = \epsilon_0 \Delta\epsilon_w(r) \sum_{n=0}^4 A_{n,w}(r) \frac{\partial^n E(r, t)}{\partial t^n}, \quad (4)$$

其中, E 、 P_w 分别表示时域电场强度、第 w 极的电极化强度, t 表示时间.这样,由于这组方程包含了时间的整数阶偏导数,便于实现有限差分近似,具体细节参见文献[4-6].

对于常规媒质,在已经提出的几种PML吸收边界中,CPML已被证明具有明显优势:1)容易扩展到其他媒质类型,如色散媒质;2)高效吸收倏逝波、低频波;3)不仅能够提供与UPML相媲美的吸收效果,而且在编程处理棱边、角顶等特殊区域更为简洁^[1].

由于假定前述色散媒质并无磁色散,因此,磁场随时间的更新关系与常规媒质完全相同.在问题空间中,包含电色散特性的时域微麦克斯韦(Maxwell)方程(为表达简洁,省略了自变量,下文同)为^[1,6]

$$\epsilon_0 \epsilon_\infty \frac{\partial E}{\partial t} + \sigma_s E + \frac{\partial \sum_{w=1}^W P_w}{\partial t} = \nabla \times H, \quad (5)$$

其中, H 表示时域磁场强度矢量, ∇ 为哈密顿(Hamilton)算子^[1].

三维直角坐标系下,在前述色散媒质的CPML中,方程(5)的3个分量式分别扩展为

$$\epsilon_0 \epsilon_\infty \frac{\partial E_x}{\partial t} + \sigma_x E_x + \frac{\partial \sum_{w=1}^W P_{w,x}}{\partial t} = \frac{1}{\kappa_y^e} \frac{\partial H_z}{\partial y} - \frac{1}{\kappa_z^e} \frac{\partial H_y}{\partial z} + \xi_y^e * \frac{\partial H_z}{\partial y} - \epsilon_z^e * \frac{\partial H_y}{\partial z}, \quad (6)$$

$$\epsilon_0 \epsilon_\infty \frac{\partial E_y}{\partial t} + \sigma_y E_y + \frac{\partial \sum_{w=1}^W P_{w,y}}{\partial t} = \frac{1}{\kappa_z^e} \frac{\partial H_x}{\partial z} - \frac{1}{\kappa_x^e} \frac{\partial H_z}{\partial x} + \xi_z^e * \frac{\partial H_x}{\partial z} - \epsilon_x^e * \frac{\partial H_z}{\partial x}, \quad (7)$$

$$\epsilon_0 \epsilon_\infty \frac{\partial E_z}{\partial t} + \sigma_z E_z + \frac{\partial \sum_{w=1}^W P_{w,z}}{\partial t} = \frac{1}{\kappa_x^e} \frac{\partial H_y}{\partial x} - \frac{1}{\kappa_y^e} \frac{\partial H_x}{\partial y} + \xi_x^e * \frac{\partial H_y}{\partial x} - \epsilon_y^e * \frac{\partial H_x}{\partial y}, \quad (8)$$

其中,*表示卷积算子(可通过递归算法实现^[1]), E_k 表示时域电场分量, k 表示坐标分量 x 、 y 或 z , $P_{w,k}$ 表示第 w 极的电极化强度分量,参数 $\kappa_k^e \geq 1$,函数 ξ_k^e 等于^[1]

$$\epsilon_k^e(t) = -\frac{\sigma_k^e}{\epsilon_0 (\kappa_k^e)^2} \exp\left[-\left(\frac{\sigma_k^e}{\epsilon_0 \kappa_k^e} + \frac{\alpha_k^e}{\epsilon_0}\right)t\right] u(t), \quad (9)$$

其中,参数 $\alpha_k^e \geq 0$, σ_k^e 为CPML中电导率, $u(t)$ 表示单位阶跃函数.

可见,CPML吸收边界和问题空间(多极 Cole-Cole 电色散媒质)的公式相比,除了多出了2项卷积运算以外,其余部分完全相同,这有利于统一处理.假定已知 $n\Delta t$ (n , Δt 分别表示时间步指标、时间步长)时刻的电

场强度 E^n 、第 w 极的电极化强度 P_w^n 和 $(n + \frac{1}{2})\Delta t$ 时刻的磁场强度 $H^{n+\frac{1}{2}}$, 则 CPML 中各场量的时间步进顺序可简述如下.

1) 计算(引入定义的)辅助矢量

$$\Phi_w \triangleq (\zeta_{2,w}^4)^{-1} \sum_{m=-2}^1 (\theta_{m,w}^4 E^{n-1+m} - \zeta_{m,w}^4 P_w^{n-1+m}). \quad (10)$$

2) 计算 $(n+1)\Delta t$ 时刻的电场强度

$$E^{n+1} = \frac{(\epsilon_0 \epsilon_\infty - \Delta t \sigma_s / 2) E^n + \sum_{w=1}^W P_w^n - \sum_{w=1}^W \Phi_w + \Delta t \nabla \times H^{n+\frac{1}{2}}}{\epsilon_0 \epsilon_\infty + \sum_{w=1}^W (\zeta_{2,w}^4)^{-1} \theta_{2,w}^4 + \frac{\Delta t \sigma_s}{2}}. \quad (11)$$

3) 更新 $(n+1)\Delta t$ 时刻的电场强度.

例如, 对 E_x 分量来说, 分别需要对 $(y, z$ 轴方向的 4 个截断边界区) 进行更新, 其中, 对 y 轴(正、负)方向的 2 个截断边界区, 更新(引入定义的)辅助场

$$\psi_{cy}^{n+1/2}(i, j, k) \triangleq b_{cy} \psi_{cy}^{n-1/2}(i, j, k) + a_{cy} [H_z^{n+1/2}(i, j, k) - H_z^{n+1/2}(i, j-1, k)], \quad (12)$$

其中, (i, j, k) 表示 Yee 元胞位置, 参数 a_{cy}, b_{cy} 分别为^[1]

$$a_{cy} = \frac{\sigma_y^e}{\Delta y |\sigma_y^e \kappa_y^e + \alpha_y^e (\kappa_y^e)^2|} (b_{cy} - 1), \quad (13)$$

$$b_{cy} = \exp\left[-\left(\frac{\sigma_y^e}{\kappa_y^e} + \alpha_y^e\right) \frac{\Delta t}{\epsilon_0}\right], \quad (14)$$

其中, Δy 表示 y 轴方向空间步长, 则 $n+1$ 时刻的 E_x 按如下方式更新

$$E_x^{n+1} = E_x^{n+1} + C_{jexy} \cdot \psi_{cy}^{n+1/2}, \quad (15)$$

其中, 辅助场的系数 $C_{jexy} = \Delta y \cdot C_{exhz}$, C_{exhz} 是指问题空间更新 E_x 时 H_z 项的系数, 因此在 CPML 中需要预先更新为 $C_{exhz} = C_{exhz} / \kappa_y^e$. z 轴方向的更新可类似地获得.

类似地, 可以获得 E_y, E_z 分量的更新.

4) 计算 $(n+1)\Delta t$ 时刻的电极化强度

$$P_w^{n+1} = \Phi_w + (\zeta_{2,w}^4)^{-1} \theta_{2,w}^4 E^{n+1}. \quad (16)$$

5) 计算 $(n + \frac{3}{2})\Delta t$ 时刻的磁场强度

$$H^{n+\frac{3}{2}} = -\frac{\Delta t}{\mu_r \mu_0} \nabla \times E^{n+1} + H^{n+\frac{1}{2}}. \quad (17)$$

其中, μ_0, μ_r 分别表示真空磁导率、相对磁导率.

6) 更新 $(n + \frac{3}{2})\Delta t$ 时刻的磁场强度(与截断常规媒质完全相同^[1]).

可见, 上述方案中, 计算磁场的时(以乘法运算次数来衡量)、所需的存储量均与常规媒质相同, 而对于每个离散网格, 计算每个电场分量的时、存储量分别为 $9W+3, 5W+4$, 较常规媒质均有所增加.

总结起来, 截断 Cole-Cole 色散媒质 CPML 的 FDTD 方案的时间步进流程如图 1 所示.

3 结果与讨论

为了检验前述 FDTD 方案的可行性和数值精度, 以下给出针对多极无磁($\mu_r = 1$) Cole-Cole 媒质的 2 个算例, 分别处理一维和三维问题.

3.1 算例 1

2 极($W = 2$) 均匀 Cole-Cole 媒质(媒质参数取自文献[5], 分别为 $\epsilon_\infty = 2, \sigma_s = 0$ S/m, $\epsilon_{s,1} = 30, \epsilon_{s,2} = 25, \tau_1 = 53$ ps, $\tau_2 = 2000$ ps, $\beta_1 = 0.9, \beta_2 = 0.95$) 充满 $z \geq 0$ 的半空间, 其余为自由空间. 一列电场沿 x 方向极化的入射平面波沿 $+z$ 方向传播, 平面波由下述的超宽带(ultra-wideband, UWB) 调制高斯脉冲源 s 激

励所产生^[5].

$$s(t) = e^{-a^2(t-4/a)^2} \sin(2\pi f_c(t-4/a)), \quad (18)$$

其中,参数 $a = 1.57 \times 10^{10} \text{ s}^{-1}$, 中心频率 $f_c = 5 \text{ GHz}$, 该脉冲频谱主要包含 $0.01 \text{ GHz} \sim 10 \text{ GHz}$ ^[5].

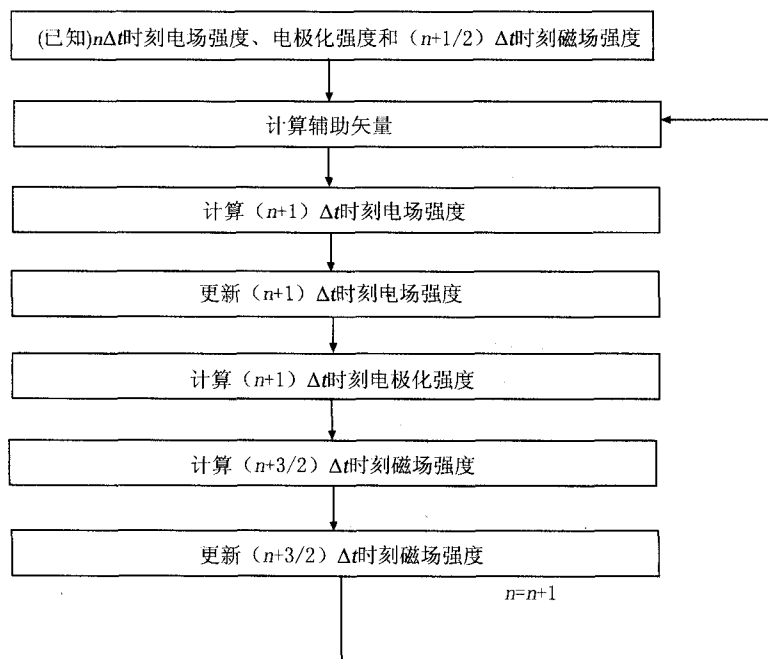


图1 FDTD时间步进流程图

分别对空间、时间离散化,步长分别取 $\Delta z = 1.1 \text{ mm}$ 和 $\Delta t = 1.77 \text{ ps}$, 离散后得到的网格总数、时间步总数分别为 $n_x = 300, n_t = 2000$. 2 边的 CPML 吸收边界均采用 5 层.

类似于文献[3-4,6]的方法,在 FDTD 仿真过程中,存储 Cole-Cole 媒质中 $z, z+d$ 两个不同位置的时域电场 $E_x(z, t), E_x(z+d, t)$. 仿真结束后,通过傅里叶变换后处理分别获得复波数的实部 γ_R 和虚部 γ_I , 则复相对介电常数的 FDTD 估计值 $\hat{\epsilon}_r$ 可通过下式获得^[3-4,6]

$$\hat{\epsilon}_r(d, \omega) = - (c_0(\gamma_R + j\gamma_I)/\omega)^2, \quad (19)$$

其中, c_0 表示真空光速.

选取 $d=30\Delta z$ 时,分别由公式(1)、(2)和(19),获得复值相对介电常数实部和负虚部的解析值、Padé 近似值、FDTD 估计值随频率变化的对比关系分别如图 2、3 所示(这里频率轴采用了对数坐标).

与文献[5]对比发现,图 2、3 分别与文献[5]的图 1、图 2 符合较好. 这初步表明:前述 FDTD 方案可行;取 4 阶 Padé 近似已具备较高的数值精度;对于网格总数较少的一维问题,采用较少的(5 层)CPML 已能产生较为满意的吸收效果.

3.2 算例 2

自由空间中有一半径为 45 mm 的 4 极($W=4$)均匀 Cole-Cole 介质球(设媒质类型为浸润型脂类组织,模型参数取自实验测量^[11],分别为 $\epsilon_\infty = 2.5, \sigma_s = 0.035 \text{ S/m}, \Delta\epsilon_1 = 9.0, \Delta\epsilon_2 = 35, \Delta\epsilon_3 = 3.3 \times 10^4, \Delta\epsilon_4 = 1.0 \times 10^7, \tau_1 = 7.96 \text{ ps}, \tau_2 = 15.92 \text{ ps}, \tau_3 = 159.15 \mu\text{s}, \tau_4 = 15.915 \text{ ms}, \beta_1 = 0.80, \beta_2 = 0.90, \beta_3 = 0.95, \beta_4 = 0.99$),入射的平面波与算例 1 相同,计算介质球的后向雷达散射截面(radar cross section, RCS)^[1].

空间离散化采用均匀网格,尺寸为 $\Delta = \Delta_x = \Delta_y = \Delta_z = 3 \text{ mm} \times 3 \text{ mm} \times 3 \text{ mm}$ 、时间步长取 $\Delta t = \Delta/(2 \cdot c_0)$,时间步总数取为 $n_t = 900$. x, y 或 z 的正、负方向均采用 10 层 CPML 吸收边界.

为了检验 CPML 对较大问题空间的吸收效果,首先,不使用吸收边界,而是通过额外扩大问题空间,以至于电磁波尚未达到边界时获得 E_x 的时域波形,视为参考解 $E_x^{\text{Ref}[1]}$;其次,使用 10 层 CPML 吸收边界,在介质球外的观察点处(距离吸收边界 3Δ)获得 E_x 的时域波形 E_x^{CPML} ,二者对比如图 4 所示.可见二者符合较

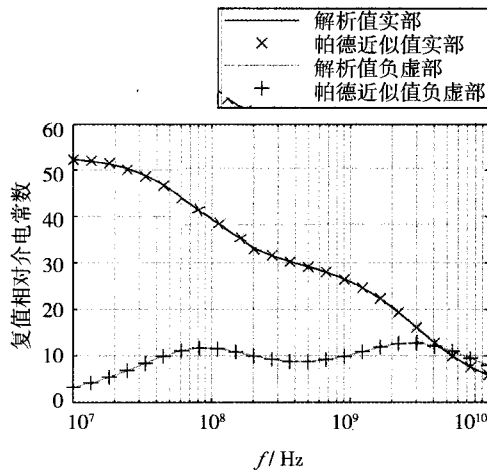


图2 相对介电常数的解析值、帕德近似值对比

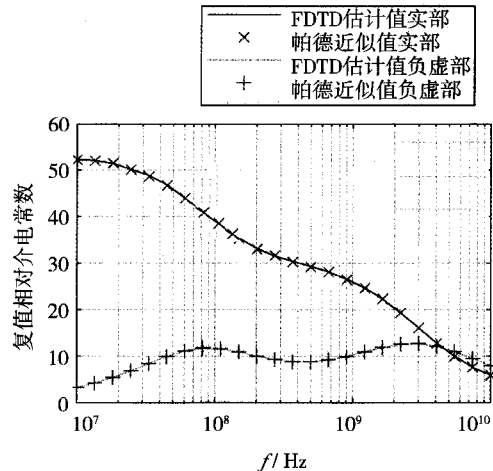


图3 相对介电常数的FDTD估计值、帕德近似值对比

好,这也表明:随着问题空间的变化,为了保证较好的吸收效果,所需 CPML 的层数也应做出相应调整(通常的做法是通过数值测试,在数值精度和内存开销之间折中选择)。

其次,为了检验 FDTD 的数值精度,介质球的后向 RCS 的解析值通过米(Mie)级数法获得^[1],其 FDTD 计算值、解析值随频率的变化关系的结果对比如图 5 所示.分析图 5 发现:在超宽带频率范围,FDTD 计算三维均匀 Cole-Cole 介质球的后向 RCS 所得结果,和解析值相比较,仍然符合较好(引入先进的网格剖分技术有望进一步减小误差^[1])。

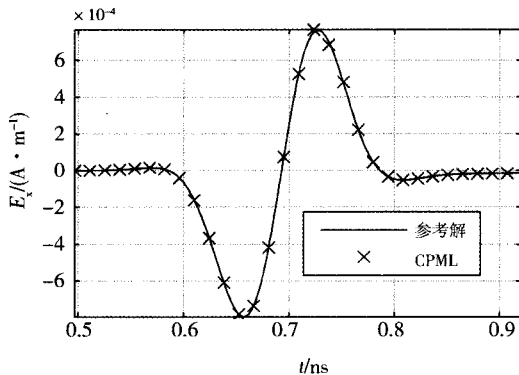


图4 填充介质球时采样点的时域波形

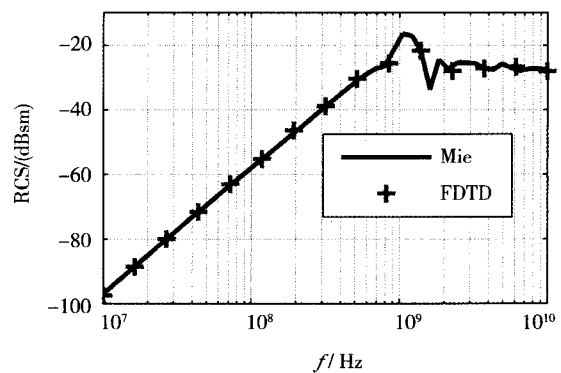


图5 介质球后向RCS随频率的变化关系

总结起来,利用 CPML 吸收边界截断一般多极 Cole-Cole 色散媒质的问题空间,分别计算相对介电常数、后向 RCS 等目标参数所产生的误差,均处在一般的工程应用能够接受的范围之内(<1%)。这些算例的结果初步证实:本文提出的 FDTD 方案是可行的。

4 结 语

近年来,基于 Padé 近似法,Rekanos 等人提出了一种处理一般多极 Cole-Cole 色散媒质电磁问题的 FDTD 新方案.为了应用该方案处理实际问题,本文提出了一种相适应的卷积完全匹配层(CPML)吸收边界,较传统的 UPML 吸收边界实现简单.一维、三维两个算例的结果初步显示:在超宽带(UWB)频谱范围,CPML 能够提供较好的吸收效果。

参 考 文 献

[1] 葛德彪,闫玉波. 电磁波时域有限差分法 [M]. 3 版. 西安:西安电子科技大学出版社, 2011.

[2] 麻来宜,张厚,张晨新. 改进的磁化等离子体 SO-FDTD 方法[J]. 河南师范大学学报:自然科学版, 2010, 38(1): 75-81.

[3] Rekanos I T. FDTD schemes for wave propagation in Davidson-Cole dispersive media using auxiliary differential equations[J]. IEEE

- Transactions on Antennas and Propagation, 2012, 60(3):1467-1478.
- [4] Rekanos I T, Papadopoulos T G. An auxiliary differential equation method for FDTD modeling of wave propagation in Cole-Cole dispersive media[J]. IEEE Transactions on Antennas and Propagation, 2010, 58(11):3666-3674.
- [5] Rekanos I T, Papadopoulos T G. FDTD modeling of wave propagation in Cole-Cole media with multiple relaxation times[J]. IEEE Antennas and Wireless Propagation Letters, 2010, 9:67-69.
- [6] 刘广东, 张开银, 范士民. 一种处理 Cole-Cole 色散媒质的 FDTD 改进方案[J]. 计算物理, 2014, 31(2):257-264.
- [7] 魏 兵, 李小勇, 王 飞, 等. 一种色散介质 FDTD 通用吸收边界[J]. 物理学报, 2009, 58(9):6174-6178.
- [8] 颀孙旭, 马西奎. 一种适用于任意阶空间差分时空有限差分方法的色散介质通用吸收边界条件算法[J]. 物理学报, 2012, 61(11):110206.
- [9] Prokopicid K P, Zografopoulos D C. A unified FDTD/PML scheme based on critical points for accurate studies of plasmonic structures [J]. Journal of Lightwave Technology, 2013, 31(15):2467-2476.
- [10] Baker G A, Graves-Morris P. Padé Approximants[M]. New York: Cambridge University Press, 1996.
- [11] Gabriel S, Lau R W, Gabriel C. The dielectric properties of biological tissues III. Parametric models for the dielectric spectrum of tissues[J]. Physics in Medicine and Biology, 1996, 41:2271-2293.

A FDTD Scheme for CPML Matched to Cole-Cole Dispersive Media

LIU Guangdong

(School of Physics and Electronics, Fuyang Teachers College, Fuyang 236041, China)

Abstract: Based on the Padé approximant method, a finite-difference time-domain (FDTD) scheme for general Cole-Cole media was presented. To apply this scheme to solve real-world electromagnetic (EM) problems, a corresponding absorbing boundary, convolutional perfectly matched layer (CPML), is developed in this paper. The presented CPML possesses low complexity such that the FDTD scheme for problem space and ABC could be implemented simultaneously. Its high absorption efficiency is preliminarily validated by one-dimensional (1D) and three-dimensional (3D) examples.

Keywords: Finite-difference time-domain (FDTD) method; Padé approximant method; Cole-Cole dispersive media; convolutional perfectly matched layer (CPML)