

doi: 10.3788/gzxb20174608.0826001

# 基于时域有限差分算法改进卷积完全匹配层的稳定性

谢国大, 黄志祥, 王丽华, 吴先良

(安徽大学 电子信息工程学院 计算智能与信号处理教育部重点实验室, 合肥 230039)

**摘 要:** 为了克服时域有限差分算法中卷积完全匹配层对消逝波吸收效果差的缺点, 提出一种在卷积完全匹配层后添加特殊吸收层的方法. 在不增加物体与吸收层内层距离的情况下, 通过调节特殊吸收层中两个衰减因子, 使其为常数, 并令吸收因子逐层从 1 增加到 10, 来增强吸收层对消逝波的吸收性能. 平面波垂直入射到单层光子晶体的算例表明, 添加了特殊吸收层的吸收边界在与散射体相距 5 个网格的情况下仍能够保持计算结果收敛, 而传统的吸收边界则需要相距 80 个网格才能保证结果收敛, 说明该方法提高了对消逝波的吸收性能. 进一步在结构中采用此吸收边界来计算多层光子晶体的传输特性曲线, 并将其与常规方法计算所得结果做比较, 两种结果吻合较好. 数值算例验证了该方法的有效性和正确性.

**关键词:** 时域有限差分; 卷积完全匹配层; 消逝波; 特殊吸收层; 吸收性能; 长时间稳定性

中图分类号: 0441.4

文献标识码: A

文章编号: 1004-4213(2017)08-0826001-6

## Improvement of the Stability of Convolutional Perfect Matched Layer Based on Finite Difference Time-domain Algorithm

XIE Guo-da, HUANG Zhi-xiang, WANG Li-hua, WU Xian-liang

(Key Laboratory of Intelligent Computing and Signal Processing of Ministry of Education, School of Electronics and Information Engineering, Anhui University, Hefei 230039, China)

**Abstract:** In order to overcome the convolutional perfectly matched layer's shortcoming of the poor absorption effect on evanescent wave in the finite difference time domain algorithm, a method of adding special absorption layer after convolutional perfectly matched layer was proposed. Without increasing the distance between the object and the inner layer of the absorbent layer, the decay factors in the special absorption layer were adjusted to make them constants and the absorption factor was increased from 1 to 10 to enhance the absorption layer's absorption performance to the evanescent wave. An example in which the plane wave is incident vertically to the single-layer photonic crystal shows that the absorption boundary with the addition of the special absorption layer can keep the convergence of the calculation result when the distance from the scatterer is 5 mesh, while the traditional absorption boundary is required to be separated by 80 grids to ensure the results converge. By using this absorption boundary in the structure, the transmission characteristic curve of the multilayer photonic crystal was calculated and compared with the result obtained by the conventional method, the results were in good agreement with each other. The numerical results show that the method is effective and correct.

**基金项目:** 国家自然科学基金(No. 61601166)、安徽自然科学基金(No. KJ2015A202)和安徽高校自然科学研究重大项目(Nos. KJ2017ZD51, KJ2017ZD02)资助

**第一作者:** 谢国大(1991-), 男, 硕士研究生, 主要研究方向为电磁理论数值计算方法. Email: 260719802@qq.com

**导师(通讯作者):** 黄志祥(1979-), 男, 教授, 博士, 主要研究方向为电磁高性能计算及新型材料电磁特性. Email: zxhuang@ahu.edu.cn

**收稿日期:** 2017-02-16; **录用日期:** 2017-04-13

<http://www.photon.ac.cn>

**Key words:** Finite-Difference Time-Domain (FDTD); Convolutional perfectly matched layers; Evanescent wave; Special absorption layer; Absorption performance; Long-time stability

**OCIS Codes:** 260.2065; 230.4170; 230.5298; 290.3770; 350.5610

## 0 引言

自 Berenger 于 1994 年提出完全匹配层 (Perfectly Matched Layer, PML)<sup>[1]</sup> 吸收边界条件以来, PML 已经成为一种有效的吸收边界条件技术, 被广泛地应用到复杂电磁模型仿真中<sup>[2-3]</sup>. 但是, 基于分裂场技术的 PML 对计算内存要求较高, 并且对高有耗介质中的波和消逝波的吸收效果并不十分理想. 为了改善 PML 的吸收效果, 1996 年, Gedney 等<sup>[4]</sup> 提出了各向异性 PML (Uniaxial Perfectly Matched Layer, UPML), UPML 不需要进行场分裂处理, 概念简单, 编程容易, 常用作高有耗介质或有消逝波时的吸收边界. 2003 年, Ramada 等<sup>[5]</sup> 基于数值信号处理技术将 UPML 应用到时域有限差分法 (Finite Different Time-Domain, FDTD) 计算区域中, 扩大了 UPML 的应用范围. 2005 年, Semichaevsky<sup>[6]</sup> 成功地应用 UPML 截断具有负折射效应的介质区域. 尽管 UPML 对消逝波和低频波有一定的吸收效果, 但仍有待提高. 2000 年, Roden 等<sup>[7]</sup> 提出了基于伸缩坐标方程的卷积完全匹配层技术 (Convolutional Perfectly Matched Layer, CPML), 对消逝波和低频波的吸收效果有了进一步的提高. 2006 年, 李建雄<sup>[8]</sup> 等利用 Z 变换方法实现了 CPML 技术, 使得 CPML 可应用到任意媒质中. 2010 年, Gedney 等<sup>[9]</sup> 又提出了基于辅助差分方程的 CPML 技术, 让 CPML 在高阶 FDTD 算法<sup>[10-11]</sup> 中的应用变得更加容易. 但上述方法都没有对有消逝波存在时, CPML 的长时间稳定做进一步的分析. 理论上, 电磁波经过 PML 吸收层后能达到无反射的状态, 2015 年. 文献[12]指出 CPML 方程在实际离散化时会因时间不同步问题产生离散误差, 影响 CPML 的吸收性能, 并提出了解决的办法, 改进后的 CPML 增强了对真空中入射波的吸收效果, 但对消逝波的吸收效果提高不明显. 实际上, 对于一般电磁计算问题, 进行较短时间的仿真即可得到满意的结果, 但对于一些复杂结构的仿真, 如模拟带有光子晶体的波导结构等的传输特性时, 由于计算时间相对较长很容易导致一些消逝波在其结构体内部震荡而最终无法得到正确的收敛结果. 目前, 国内外学者对 PML 吸收层的使用方式进行了深入的探讨, 文献[13]指出, 可增大物体与 PML 吸收层的距离来减缓或消除消逝波对算法长时间稳定性的影响. 2009 年, Oskooi 等<sup>[14]</sup> 提出增加 PML 的层数也能达到长时间稳定的目的. 这些方法在小规模计算中得到广泛采用, 但是在大规模计算中, 计算区域的增大, 将会导致计算效率的降低. 2011 年, Zeng<sup>[15]</sup> 提出在 PML 吸收边界的所有方向都引入衰减因子来增强 PML 的稳定, 然而这使得整体的吸收效果变差.

本文采用了一种在传统 CPML 层后添加特殊吸收层的方法, 通过调节特殊吸收层中衰减因子  $\sigma$  和  $\alpha$ , 使其为常数, 并令吸收因子  $k$  逐层从 1 增加到 10, 该方法可增强对消逝波的吸收性能, 在不增大吸收层与结构中物体距离的情况, 保证算法长时间的稳定.

## 1 CPML 理论

在频域和拉伸坐标中, 根据安培定律, 三维情况下  $x$  方向的麦克斯韦方程为

$$j\omega D_x = \frac{1}{s_y} \frac{\partial H_z}{\partial y} - \frac{1}{s_z} \frac{\partial H_y}{\partial z} \quad (1)$$

式中,  $s_u$  ( $u = x, y, z$ ) 为坐标伸缩因子<sup>[4]</sup>, 即

$$s_u = 1 + \frac{\sigma_u}{j\omega \epsilon} \quad (2)$$

应用复数频率移位 (Complex Frequency Shift, CFS) 算法<sup>[7]</sup>, 可将式(2)修改为

$$s_u = k_u + \frac{\sigma_u}{j\omega \epsilon + \alpha_u} \quad (3)$$

式中,  $u \in (x, y, z)$ ,  $\sigma_u$  和  $k_u$  是非零实数, 可以被定义为  $u$  方向的一维数组.

用多项式缩比模型来定义 CPML 层内的基本参数, 即

$$\sigma_u(u) = \sigma_{\max} (\rho/d)^{m_1} \quad (4)$$

$$\alpha_u(u) = \alpha_{\max} (\rho/d)^{m_1} \quad (5)$$

$$k_u(u) = 1 + (k_{\max} - 1)(\rho/d)^{m_1} \quad (6)$$

$$\sigma_{\max} = \sigma_{\text{opt}} = \frac{(m_1 + 1)}{150\pi\Delta} \quad (7)$$

其中,  $\rho$  为自由空间与 PML 内层交界面到 PML 层的距离的变化,  $d$  为 PML 层厚度,  $m_1$  表示多项式的阶数.

由于式(1)中伸缩因子  $s_u(u=x, y, z)$  与频率有关, 所以过渡到时域时式(1)右端出现卷积<sup>[6]</sup>, 即

$$\frac{\partial D_x}{\partial t} = \frac{1}{k_y} \frac{\partial H_z}{\partial y} - \frac{1}{k_z} \frac{\partial H_z}{\partial z} + \zeta_y(t) * \frac{\partial H_z}{\partial y} - \zeta_z(t) * \frac{\partial H_y}{\partial z} \quad (8)$$

式中,  $*$  代表时间卷积. 为了得到式(8)中卷积的有效计算表达式, 根据文献[7]的介绍, 可以将冲击响应  $\zeta_u(t)$  离散并定义为

$$Z_{ou}(m) = \int_{m\Delta t}^{(m+1)\Delta t} \zeta_u(\tau) d\tau = -\frac{\sigma_u}{\epsilon_0 k_u^2} \int_{m\Delta t}^{(m+1)\Delta t} \exp\{-[(\sigma_u/\epsilon_0 k_u) + (\alpha_u/\epsilon_0)]\tau\} d\tau = c_u \exp\{-[(\sigma_u/k_u) + \alpha_u](m\Delta t/\epsilon_0)\} \quad (9)$$

式中,  $c_u = \frac{\sigma_u}{\sigma_u k_u + k_u^2 \alpha_u} \{\exp[-(\sigma_u/k_u + \alpha_u)(\Delta t/\epsilon_0)] - 1\}$ .

根据式(9), 式(8)可以在时间和空间上离散成

$$\frac{D_{x_{i+1/2,j,k}}^{n+1} - D_{x_{i+1/2,j,k}}^n}{\partial t} = \frac{H_{z_{i+1/2,j+1/2,k}}^{n+1/2} - H_{z_{i+1/2,j-1/2,k}}^{n+1/2}}{k_y \Delta y} - \frac{H_{y_{i+1/2,j,k+1/2}}^{n+1/2} - H_{y_{i+1/2,j,k-1/2}}^{n+1/2}}{k_z \Delta z} + \sum_{m=0}^n Z_{oy}^m(m) \frac{H_{z_{i+1/2,j+1/2,k}}^{n-m+1/2} - H_{z_{i+1/2,j-1/2,k}}^{n-m+1/2}}{\Delta y} - \sum_{m=0}^n Z_{oz}^m(m) \frac{H_{y_{i+1/2,j,k+1/2}}^{n-m+1/2} - H_{y_{i+1/2,j,k-1/2}}^{n-m+1/2}}{\Delta z} \quad (10)$$

式中右端由离散卷积导出的求和项不便于 FDTD 时域步进计算, 根据文献[10]介绍的递归方法可以得到适合 FDTD 时域步进计算的公式. 文献[12]指出, 式(10)右端后两项的时域值更新发生在  $(n+1)\Delta t$  时刻, 而右端前两项磁场的空间偏导以及左端电场的时间偏导发生在  $(n+1/2)\Delta t$  时刻, 因此整个离散过程会因为时间不同步的问题而产生离散误差, 从而在应用 CPML 截断 FDTD 计算区域时, 在截断边界处仍有反射波的存在.

## 2 理论分析和数值验证

在一些简单结构的电磁仿真中, 只需要进行较短时间的仿真即可得到所需结果. 但对于复杂结构, 如研究带有光子晶体的周期结构的传输特性时, 当波入射到光子晶体上时会产生消逝波. 由于常规 CPML 对消逝波的吸收效果差, 大部分的消逝波需要长时间多次反射以后才会被吸收, 余下的一些散杂波形成驻波后继续在结构中震荡. 这些散杂波与 CPML 相互作用会使得其波形幅度慢慢以指数形式的增大<sup>[14-15]</sup>, 这种现象会造成在使用 FDTD 方法计算周期结构的传输特性时无法得到正确的收敛结果.

采用平面电磁波入射到周期结构中的方式, 观察电磁波在其内部的演化过程. 图 1 所示的是单层光子晶体的周期单元, 由相对介电常数  $\epsilon=5$  的无限长圆柱组成. 其中圆柱的半径为  $1 \mu\text{m}$ , 周期单元的长度为  $10 \mu\text{m}$ . 整个计算区域采用均匀网格剖分, 网格大小  $\Delta r=0.05 \mu\text{m}$ , 时间步长为  $\Delta t=\Delta r/(2c)$ ,  $c$  为光速. 激励源采用微分高斯源, 源的频率范围在  $8.6 \times 10^{13} \sim 6 \times 10^{14} \text{ Hz}$  内. 在非周期方向设置 CPML 吸收边界条件, 用于吸收仿真过程中产生的反射波和透射波来模拟无穷大空间的情形, 整个仿真的总时间取决于电磁场在其内部的消散过程. 垂直入射条件下, 在图 1 算例中, 设置物体与 CPML 层的距离为 5 个网格 (即  $L=5\Delta r$ ). 由图 2 可知, 当时间步迭代到 60 000 步时 (总的迭代步数为 100 000 步), 数值计算结果开始出现发散的趋势.

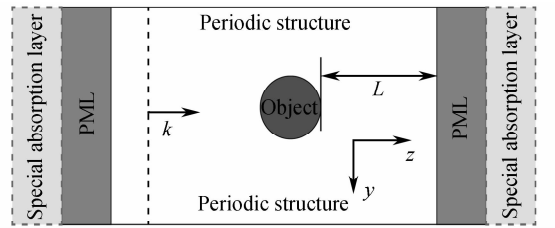


图 1 带有单层光子晶体的周期结构模型  
Fig. 1 Periodic structure model with single layer photonic crystal

通过增加结构体与 CPML 吸收层之间的距离, 可以有效地减缓或者消除发散现象的出现, 但会增大计算区域, 在长时间仿真时, 极大地降低计算效率. 通过数值算例探讨结构体和 CPML 层之间距离  $L$  的大小对数值结果的影响. 在其它条件不变的情况下, 把距离  $L$  增大到  $80\Delta r$ , 观察图 3 可知, 并没有出现相应的数值

发散的情况.

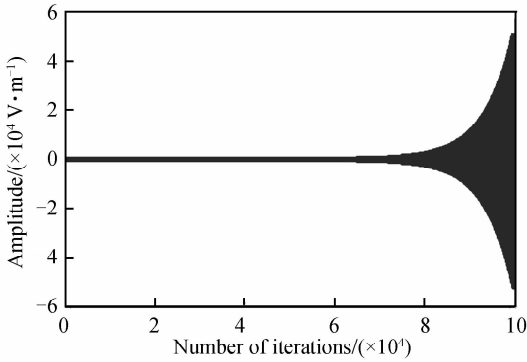


图2  $L=5\Delta r$  时电场分量随时间步的变化情况

Fig. 2 Electric field components changing with the time step when  $L=5\Delta r$

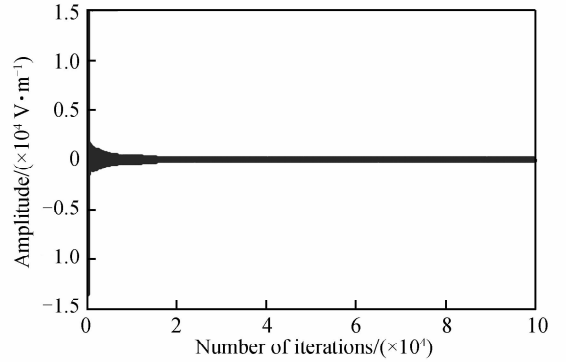


图3  $L=80\Delta r$  时电场分量随时间步的变化情况

Fig. 3 Electric field components changing with the time step when  $L=20\Delta r$

由对比分析可知,通过增加物体与 PML 吸收层之间的距离可以消除发散现象,这种方法虽然可以保证整个仿真过程中的稳定性,但是计算空间的增大很大程度上降低了模拟计算的性能<sup>[16]</sup>. 这在大规模计算中并不可取.

### 3 特殊吸收层的应用

#### 3.1 模型分析

在不改变结构体与 CPML 吸收层之间距离的基础上,只需在传统 CPML 层后添加一种特殊吸收层来达到吸收消逝波的目的(如图 1). 特殊吸收层的厚度取 10 个网格,并在 CPML 参数  $\kappa_z$  的设置中使其逐层变化至最大值 10,同时保证  $\sigma_z = \sigma_{max}$ ,  $\alpha_z = \alpha_{max}$ . 同样在图 1 算例的基础上,观察采用了该模型后的效果. 图 4 描述了当结构体和 CPML 吸收层的距离  $L$  为  $5\Delta r$  时,添加了特殊吸收层的模型的电场分量的场值变化,在迭代步数达到 100 000 步的情况下,依然能保证很好的稳定性,表明特殊吸收层对数值结果的发散起到了很好的抑制作用. 为了进一步对比没有添加特殊吸收层的效果,将特殊吸收层去除,同时在原有 PML 层的基础上再增加与特殊吸收层相同厚度的 PML,保证两种 PML 设置方式在其他计算条件上的一致性. 由图 5 的可知,当时间步持续增加到一定程度时,没有添加特殊吸收层的结构出现了发散的情况. 对比可知本文所采用的方法能够保证长时间计算过程中算法的稳定性. 图 5 的结果也同时说明当物体与 PML 层相距很近时,增加 PML 层数只会减缓数值计算结果发散的速度.

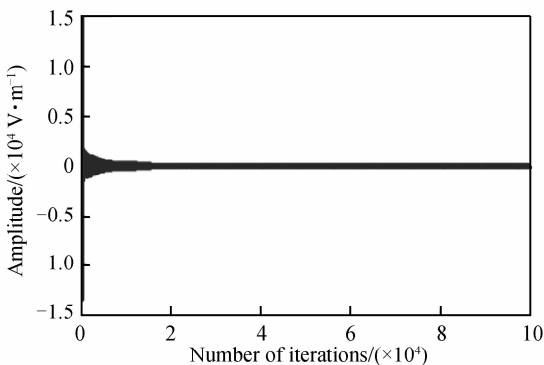


图4  $L=5\Delta r$  时,添加了特殊吸收层后电场变化情况

Fig. 4 Change of electric field with the addition of special absorbing layer when  $L=5\Delta r$

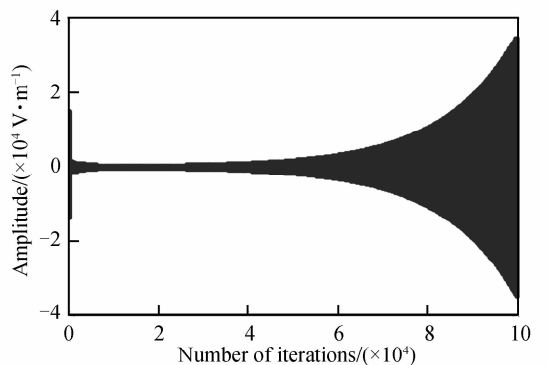


图5  $L=5\Delta r$  时,没有添加特殊吸收层电场变化情况

Fig. 5 Change of electric field without the addition of special absorbing layer when  $L=5\Delta r$

#### 3.2 算例应用和分析

为了进一步研究所提方法的有效性,通过计算多层光子晶体的传输曲线进行验证. 当电磁波传播进入光子晶体中,有部分特定频率的电磁波不能实现传输而形成光子带隙(Photonic Band Gap, PBG)<sup>[17]</sup>. 目前,利用光子晶体的特性已经设计出了多种复合结构光子晶体<sup>[18-19]</sup>.

如图 6,采用的 PBG 周期单元由三个无限长的圆柱( $\epsilon=4, \sigma=2$ )组成. 其中圆柱的半径为  $0.4 \mu\text{m}$ , 相邻圆柱之间的距离为  $1.2 \mu\text{m}$ . 周期单元沿  $y$  方向进行排列, 添加了特殊吸收层的 PML 设置在  $z$  方向, 它和结构体之间的距离  $L$  为  $5\Delta r$ , 波沿  $z$  方向垂直入射( $\theta=0^\circ$ )到周期结构中.

图 7 表示两种 PML 设置方式下, 计算所得 PBG 结构的透射系数曲线随波长的变化情况, 可知在模型中添加了特殊吸收层后, 整个仿真过程中并没有场值发散的情况出现. 另外, 添加特殊吸收层后, 计算所得的 PBG 的透射曲线与采用传统 PML 设置方式( $L=80\Delta r$ )所得计算结果相同, 这表明该模型的应用并没有对计算多层光子晶体的传输特性造成影响, 在提高计算效率的前提下也保证了计算结果的正确性.

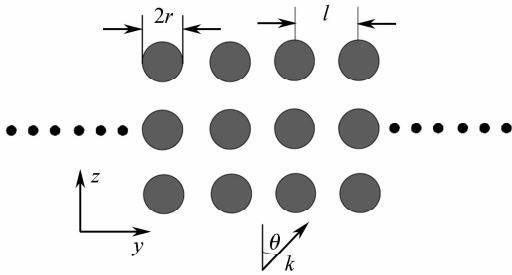


图 6 PBG 结构示意图  
Fig. 6 PBG structure diagram

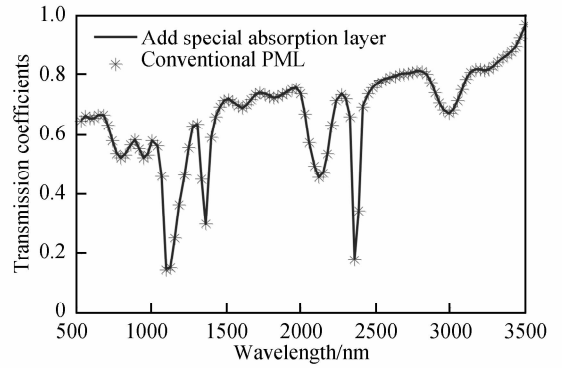


图 7 透射系数随频率的变化曲线  
Fig. 7 Transmission coefficient changing with the frequency

## 4 结论

本文介绍了一种在 CPML 层后添加特殊吸收层的方法, 有效抑制了长时间仿真过程中消逝波对数值结果的影响. 文中算例表明, 该方法在不破坏光子晶体传输特性的前提下, 极大增强了对消逝波的吸收作用, 从而消除了散杂波对数值结果的影响, 保持了算法长时间的稳定性. 此外, 在不影响计算精度的前提下, 和传统的方法即增加 PML 层与物体距离的方法相比, 本文所采用的增加特殊吸收层的方法能有效地提高计算效率, 这为研究更加复杂模型的电磁特性提供了有利的仿真条件.

## 参考文献

- [1] BERENGER J P. A perfectly matched layer for the absorption of electromagnetic waves[J]. *Journal of Computational Physics*, 1994, **114**(2): 185-200.
- [2] XU Jing, DAI Dao-xin, HE Sai-ling. A finite difference method with a PML boundary treatment and its application to the calculation of the optical waveguide[J]. *Acta Photonic Sinica*, 2003, **32**(12): 1426-1429.  
徐静, 戴道新, 何赛灵. 基于 PML 边界的有限差分法及其在光波导泄露损耗计算中的应用[J]. *光子学报*, 2003, **32**(12): 1426-1429.
- [3] SONG Lei, LI Kang, KONG Fan-min, et al. Analysis of negative refractive index materials with the PML-FDTD method[J]. *Acta Photonic Sinica*, 2007, **36**(8): 1422-1425.  
宋磊, 李康, 孔繁敏, 等. PML-FDTD 法在分析负折射率材料中的应用[J]. *光子学报*, 2007, **36**(8): 1422-1425.
- [4] GEDNEY S D. An anisotropic PML absorbing media for the FDTD simulation of fields in lossy and dispersive media[J]. *Electromagnetics*, 1996, **16**(4): 399-415.
- [5] RAMADA O. Digital filtering technique for the FDTD implementation of anisotropic perfectly matched layer[J]. *IEEE Microwave and Wireless Components Letters*, 2003, **13**(8): 499-501.
- [6] SEMICHAEVSKY A, AKYURTLU A. A new uniaxial perfectly matched layer absorbing boundary condition for chiral metamaterials[J]. *IEEE Antennas and Wireless Propagation Letters*, 2005, **4**(1): 51-54.
- [7] RODEN J A, GEDNEY S D. Convolutional PML (CPML): an efficient FDTD implementation of CFS-PML for arbitrary media[J]. *Microwave and Optical technology letters*, 2000, **27**(5): 334-339.
- [8] LI Jian-xiong, DAI Jun-feng. Z-transform implementation of the CFS-PML [J]. *IEEE Antennas and Wireless Propagation Letters*, 2006, **42**(17): 953-955.
- [9] GEDNEY S D, ZHAO Bo. An auxiliary differential equation formulation for the complex-frequency shifted PML[J]. *IEEE Transactions on Antennas and Propagation*, 2010, **58**(3): 838-847.
- [10] GE De-biao, YAN Yu-bo. Finite-difference time-domain method for electromagnetic waves[M]. 3rd ed., Xi'an: Xidian University Press, 2011.

- 葛德彪, 闫玉波. 电磁波时域有限差分方法[M]. 3版. 西安: 西安电子科技大学出版社, 2011.
- [11] MIN Zhu, CAO Qun-sheng, ZHAO Lei. Study and analysis of a novel Runge-Kutta high order finite-difference time-domain[J]. *IEEE IET, Microwave Antenna & Propagation*, 2014, **8**(12): 951-958.
- [12] GIANNAKIS I, GIANNOPOULOS A A. Time-synchronized convolutional perfectly matched layer for improved absorbing performance in FDTD[J]. *IEEE Antennas and wireless propagation letters*, 2015, **14**: 690-693.
- [13] TAFIOVE A, HAGNESS S C. Computational Electrodynamics; The finite difference time domain method[M]. 3rd ed. Boston: American, 2005.
- [14] OSKOOI A F, ZHANG L, AVNIEL Y, *et al.* The failure of perfectly matched layers, and towards their redemption by adiabatic absorbers[J]. *Optics Express*, 2008, **16**(15): 11376-11392.
- [15] ZENG Chong, XIA Jiang-hai, RICHARD D M, *et al.* Application of the multiaxial perfect matched layer (M-PML) to near-surface seismic modeling with Rayleigh waves[J]. *Geophysics*, 2011, **76**(3): T43-T52.
- [16] WANG Yue, WANG Jian-guo, ZHANG Dian-hui, *et al.* Conformal convolutional perfectly matched layer with uniform stability [J]. *High Power laser and Particle Beams*, 2013, **2**(25): 441-445.  
王玥, 王建国, 张殿辉, 等. 全局稳定性一致的共形卷积完全匹配层[J]. *强激光与粒子束*, 2013, **2**(25): 441-445.
- [17] ZHOU Li-bin, HU Man-li, JIA Fang, *et al.* Effect on bandgap of two-dimensional square photonic crystal with different incidence angle[J]. *Acta Photonic Sinica*, 2008, **37**(11): 2213-2216.  
周利斌, 忽满利, 贾昉, 等. 斜入射对二维正方形光子晶体带隙的影响[J]. *光子学报*, 2008, **37**(11): 2213-2216.
- [18] WU Zhen-hua, LI Si-min, ZHANG Wen-tao, *et al.* Back reflector solar cells consisting of one-dimensional photonic crystal and double-layer two-dimensional photonic crystal[J]. *Acta Photonic Sinica*, 2016, **45**(2): 0223003.  
武振华, 李思敏, 张文涛, 等. 一维和双层二维光子晶体太阳能电池背反射器[J]. *光子学报*, 2016, **45**(2): 159-163.
- [19] HE Feng-tao, SUN Li, XI Zhan-qiang, *et al.* Design and research of polarization optical splitter based on fluorine doped dual core photonic crystal fiber[J]. *Acta Photonic Sinica*, 2016, **45**(9): 0923002.  
贺锋涛, 孙力, 惠战强, 等. 基于氟掺杂双芯光子晶体光纤偏振光分束器的设计及研究[J]. *光子学报*, 2016, **45**(9): 0923002.