

# Maxwell 方程的一种显式时间高精度有限差分方法

石仁刚, 高理平\*

中国石油大学(华东)理学院计算数学系, 青岛 266580

E-mail: srg@upc.edu.cn, l.gao@upc.edu.cn

收稿日期: 2017-07-18; 接受日期: 2018-09-01; 网络出版日期: 2019-01-29; \* 通信作者

山东省自然科学基金(批准号: ZR2014AM029)、国家留学基金(批准号: 201806455012)和中央高校基础研究基金(批准号: 16CX02017A 和 18CX05003A)资助项目

**摘要** 时间离散是 Maxwell 方程数值方法研究的重要内容, 涉及方法的稳定性、收敛性、精度和计算复杂度等. 本文利用 Taylor 多项式逼近理论, 提出了一种时间离散新方法. 该方法的特点是, 显式计算, 关于时间变量具有任意阶精度, 容易与空间离散方法相结合. 将该方法与空间离散的中心差分方法结合, 提出求解三维 Maxwell 方程的一种显式有限差分方法, 记为 HAIT-FDTD (high accurate in time finite difference time domain). 理论分析表明, 新方法的精度关于空间二阶、关于时间  $M$  阶, 其中  $M$  是多项式的次数并且在计算中可以选取任意值. 利用 Fourier 分析证明了 HAIT-FDTD 稳定, 并且稳定性条件不受 CFL (Courant-Friedrichs-Lewy) 条件的限制, 同时还分析了数值弥散, 证明了数值弥散关系式收敛于连续弥散关系式. 数值实验给出了增长因子、数值弥散误差及对一个波导问题的计算和分析. 计算结果验证了理论分析, 并且发现 HAIT-FDTD 的数值弥散误差小于 Yee 格式和交替方向隐式时域有限差分方法 (alternating direction implicit finite difference time domain, ADI-FDTD) 的相应误差; 近似保持能量守恒性和电磁场散度为零的性质; 计算和程序实现简单, 具有 Yee 格式的优点, 并且时间可以采取大步长, 具有 ADI-FDTD 的特点, 比 ADI-FDTD 更节省 CPU 时间, 适于长时间计算.

**关键词** Maxwell 方程 时域有限差分方法 稳定性 数值弥散 高精度 Taylor 多项式

**MSC (2010) 主题分类** 65M06, 65M12, 65Z05

## 1 引言

时域有限差分法 (finite difference time domain, FDTD) 是直接从 Maxwell 方程出发, 由有限差分方法发展而来的一种求解电磁工程问题的数值方法 (参见文献 [1-5]). FDTD 方法有很多, 其中, 最早的 Yee 格式是 Yee<sup>[6]</sup> 在 1966 年利用交错网格技术和中心差分方法提出的一种显式方法. 自从该方法

英文引用格式: Shi R G, Gao L P. An explicit finite difference time domain method with high order accuracy in time for Maxwell's equations (in Chinese). Sci Sin Math, 2019, 49: 1139-1158, doi: 10.1360/SCM-2017-0342

提出后, 引起了许多研究工作者的兴趣和研究, 与吸收边界条件<sup>[7-12]</sup>相结合, 被广泛应用于电子和国防科学与工程中, 成为计算电磁学中一种非常流行和实用有效的方法.

Yee 格式二阶精度和条件稳定. 利用 Fourier 方法, 文献 [13] 证明了 Yee 格式条件稳定 (需要满足 CFL 条件). 利用能量方法, 文献 [14-16] 证明了 Yee 格式关于离散  $L^2$  和  $H^1$  范数二阶收敛. 为了提高 Yee 格式的精度和稳定性, 国内外许多学者做出了努力, 在时间和空间逼近等方面取得了很多和很好的研究成果 (参见文献 [17-21]、[22-26] 和 [27-33] 及其引用文献中给出的一些方法等). 例如, 文献 [17] 提出了高阶差分方法, 其中时间和空间导数采用高阶中心差分公式近似. 文献 [18, 19] 提出了高阶紧致差分格式, 其中时间离散利用 Runge-Kutta (RK) 方法. 利用微分方程将时间导数转换成空间导数, 文献 [20, 21] 提出了时间和空间均为四阶的显式 FDTD 方法. 为了克服 CFL 条件对时间步长的限制, 利用交替方向隐式差分方法<sup>[34, 35]</sup>, 文献 [22, 23] 提出了 ADI-FDTD 方法. 利用带权的 Laguerre 多项式作为逼近时间变量函数的基函数, 文献 [24, 25] 分别提出了一般介质和完美匹配层 (perfectly matched layer, PML) 介质中 Maxwell 方程的无条件稳定的 FDTD 方法 (weighted Laguerre polynomials finite difference time domain, WLP-FDTD). 利用算子分裂和提高时间精度的误差校正技术, 文献 [26] 提出了无条件稳定的二阶分裂 FDTD 方法 (splitting-FDTD, S-FDTD). 利用算子分裂和对称思想, 文献 [27, 28] 提出了能量守恒的分裂 FDTD 方法 (energy conserved splitting FDTD, EC-S-FDTD); 文献 [29] 提出了时间二阶和空间四阶的能量守恒的 FDTD 方法. 利用 Maxwell 方程的辛结构, 文献 [30-33] 提出了保结构和能量的分裂多辛和辛方法.

时间离散方法不仅涉及格式的逼近精度、稳定性和收敛性, 而且涉及计算复杂性. 在上述 FDTD 方法中, 时间离散方法和稳定性可分为两种: 显式和条件稳定的方法 (如蛙跳方法、Runge-Kutta 方法和高阶中心差分方法), 以及隐式且无条件稳定的方法 (如 ADI-FDTD、EC-S-FDTD、WLP-FDTD 和辛方法等). 在精度方面, 这些显式时间离散方法的精度大多为二阶和四阶. 隐式方法的精度主要为二阶, 这是因为隐式方法需要求解方程组, 而且方程中电场和磁场耦合在一起, 使得隐式方法难以与高阶空间方法相结合. 因此, 研究高精度、稳定性好和计算简单的时间离散方法是一个重要的研究课题, 对于数值求解 Maxwell 方程具有重要的意义和价值.

与上述文献中的时间离散方法不同, 本文提出了 Maxwell 方程的一种新时间离散方法. 该方法从半离散的 Maxwell 方程出发, 即在交错网格上, 利用中心差分方法离散方程中的空间导数, 保持时间导数不变, 然后, 利用 Taylor 多项式逼近时间变量函数, 将半离散的微分方程组化为一组关于求解 Taylor 多项式系数的显式迭代公式. 利用这些系数可得到未知函数在任意时间层和任意网格点上的近似值, 从而形成求解 Maxwell 方程的一种新的显式 FDTD 方法, 记为 HAIT-FDTD. 在逼近精度上, 该方法关于时间  $M$  阶精度 ( $M$  为多项式的次数, 且在计算中可任意取值), 关于空间二阶精度. 在稳定性方面, 通过推导 HAIT-FDTD 的增长因子和数值弥散关系式, 我们证明了该方法稳定, 数值弥散关系式收敛于理论弥散关系式, 并且发现稳定性条件与 Taylor 多项式的次数有关, 而与 CFL 条件无关. 为了检验 HAIT-FDTD 的稳定性和数值弥散, 在数值实验中, 通过计算增长因子大小和数值弥散误差, 我们验证了 HAIT-FDTD 稳定且不受 CFL 限制, 并且发现该方法比 Yee 格式和 ADI-FDTD 的数值弥散误差小. 为了验证 HAIT-FDTD 的有效性和二阶收敛性, 我们计算和模拟了一类波导问题. 实验结果表明: (i) HAIT-FDTD 关于空间二阶收敛, 计算误差主要由空间离散方法决定; (ii) 近似保持波导问题的能量守恒性和散度为零的物理性质; (iii) 新方法具有 Yee 格式的优点: 显式计算, 实现简单, 可以采用大时间步长, 又具有 ADI-FDTD 无条件稳定的特点, 并且, HAIT-FDTD 比 ADI-FDTD 计算简单, 更节省 CPU 时间.

接下来的内容安排如下: 第 2 节详细介绍 HAIT-FDTD 方法的构造过程; 第 3 节推导新方法的增

长因子, 证明稳定性; 第 4 节推导数值弥散关系式以及计算数值弥散误差; 第 5 节是数值实验, 通过计算一个波导问题验证 HAIT-FDTD 的稳定性、收敛阶和复杂性, 并考察是否保持散度为零和能量守恒的物理性质; 第 6 节给出总结和讨论.

## 2 求解 Maxwell 方程的时间高精度时域有限差分方法

### 2.1 Maxwell 方程和一些符号定义

为了叙述方便, 考虑如下三维 Maxwell 方程:

$$\varepsilon \frac{\partial E_x}{\partial t} = \frac{\partial H_z}{\partial y} - \frac{\partial H_y}{\partial z}, \quad \varepsilon \frac{\partial E_y}{\partial t} = \frac{\partial H_x}{\partial z} - \frac{\partial H_z}{\partial x}, \quad (2.1)$$

$$\varepsilon \frac{\partial E_z}{\partial t} = \frac{\partial H_y}{\partial x} - \frac{\partial H_x}{\partial y}, \quad \mu \frac{\partial H_x}{\partial t} = \frac{\partial E_y}{\partial z} - \frac{\partial E_z}{\partial y}, \quad (2.2)$$

$$\mu \frac{\partial H_y}{\partial t} = \frac{\partial E_z}{\partial x} - \frac{\partial E_x}{\partial z}, \quad \mu \frac{\partial H_z}{\partial t} = \frac{\partial E_x}{\partial y} - \frac{\partial E_y}{\partial x}, \quad (2.3)$$

其中  $E_x$ 、 $E_y$ 、 $E_z$  和  $H_x$ 、 $H_y$ 、 $H_z$  分别是电场  $\mathbf{E} = (E_x, E_y, E_z)$  和磁场  $\mathbf{H} = (H_x, H_y, H_z)$  的分量,  $\varepsilon$  和  $\mu$  分别为介质的介电常数和磁导率. 对于  $u = x, y, z$ , 有

$$E_u = E_u(x, y, z, t), \quad H_u = H_u(x, y, z, t), \quad (x, y, z) \in \Omega, \quad t \in (0, T].$$

假设问题满足如下理想导体 (perfectly electric conductor, PEC) 边界条件:

$$\mathbf{n} \times \mathbf{E} = 0, \quad (x, y, z) \in \partial\Omega, \quad (2.4)$$

其中  $\partial\Omega$  是  $\Omega$  的边界,  $\mathbf{n}$  表示  $\partial\Omega$  的外法线方向, 以及如下初始条件:

$$\mathbf{E}(x, y, z, 0) = (E_{x0}, E_{y0}, E_{z0}), \quad \mathbf{H}(x, y, z, 0) = (H_{x0}, H_{y0}, H_{z0}), \quad (2.5)$$

其中  $E_{u0} = E_{u0}(x, y, z)$ ,  $H_{u0} = H_{u0}(x, y, z)$ ,  $u = x, y, z$ .

不失一般性, 本文假设介质齐次均匀和各向同性, 这时  $\varepsilon$  和  $\mu$  都是常数,  $\Omega = [0, 1] \times [0, 1] \times [0, 1]$ . 本文讨论的方法可以推广到其他区域和介质中.

为了定义差分格式, 下面给出剖分节点和差分算子的定义与符号. 采用 Yee 格式中的网格剖分技术, 将区域  $\Omega$  均匀离散为 6 个与电磁场分量相对应的交错网格  $\Omega_{E_x}^h$  和  $\Omega_{H_u}^h$  ( $u = x, y, z$ ):

$$\begin{aligned} \Omega_{E_x}^h &= \{(x_{i+\frac{1}{2}}, y_j, z_k)\}, & \Omega_{E_y}^h &= \{(x_i, y_{j+\frac{1}{2}}, z_k)\}, & \Omega_{E_z}^h &= \{(x_i, y_j, z_{k+\frac{1}{2}})\}, \\ \Omega_{H_x}^h &= \{(x_i, y_{j+\frac{1}{2}}, z_{k+\frac{1}{2}})\}, & \Omega_{H_y}^h &= \{(x_{i+\frac{1}{2}}, y_j, z_{k+\frac{1}{2}})\}, & \Omega_{H_z}^h &= \{(x_{i+\frac{1}{2}}, y_{j+\frac{1}{2}}, z_k)\}. \end{aligned}$$

类似地, 将时间区间  $[0, T]$  离散为  $0 = t^0 < t^1 < \dots < t^N = T$ . 网格剖分中的符号定义为

$$\begin{aligned} x_i &= i\Delta x, & x_{i+\frac{1}{2}} &= x_i + \frac{1}{2}\Delta x, & y_j &= j\Delta y, & y_{j+\frac{1}{2}} &= y_j + \frac{1}{2}\Delta y, \\ z_k &= k\Delta z, & z_{k+\frac{1}{2}} &= z_k + \frac{1}{2}\Delta z, & t^n &= n\Delta t, & t^{n+\frac{1}{2}} &= t^n + \frac{1}{2}\Delta t, \\ x_I &= 1, & y_J &= 1, & z_K &= 1, & N\Delta t &= T, & \Delta t^n &= (\Delta t)^n, \end{aligned}$$

其中  $\Delta x$ 、 $\Delta y$ 、 $\Delta z$  是沿  $x$ 、 $y$  和  $z$  方向的剖分步长,  $\Delta t$  是时间剖分步长,  $i$ 、 $j$ 、 $k$  和  $n$  为非负整数,  $I$ 、 $J$ 、 $K$  和  $N$  为正整数.

假设  $F_{\alpha,\beta,\gamma} = F(x_\alpha, y_\beta, z_\gamma)$  表示网格函数在空间一点处的值, 其中  $\alpha$  取  $i$  或  $i + 1/2$ ,  $\beta$  取  $j$  或  $j + 1/2$ ,  $\gamma$  取  $k$  或  $k + 1/2$ . 定义中心差分算子  $\delta_u$  ( $u = x, y, z$ ):

$$\begin{aligned}\delta_x F_{\alpha,\beta,\gamma} &= \frac{F_{\alpha+\frac{1}{2},\beta,\gamma} - F_{\alpha-\frac{1}{2},\beta,\gamma}}{\Delta x}, \\ \delta_y F_{\alpha,\beta,\gamma} &= \frac{F_{\alpha,\beta+\frac{1}{2},\gamma} - F_{\alpha,\beta-\frac{1}{2},\gamma}}{\Delta y}, \\ \delta_z F_{\alpha,\beta,\gamma} &= \frac{F_{\alpha,\beta,\gamma+\frac{1}{2}} - F_{\alpha,\beta,\gamma-\frac{1}{2}}}{\Delta z}.\end{aligned}$$

## 2.2 显式时间高精度时域有限差分方法

在上述剖分和差分算子的基础上, 下面构造 (2.1)–(2.5) 的显式时间高精度的时域有限差分方法.

(i) 空间离散. 分别在交错网格  $\Omega_{E_x}^h$ 、 $\Omega_{E_y}^h$ 、 $\Omega_{E_z}^h$ 、 $\Omega_{H_x}^h$ 、 $\Omega_{H_y}^h$  和  $\Omega_{H_z}^h$  上, 利用空间导数的中心差分公式, 将 (2.1)–(2.3) 中的 6 个方程离散为如下半离散形式:

$$\varepsilon \frac{\partial E_x}{\partial t} \Big|_{i+\frac{1}{2},j,k} = (\delta_y H_z - \delta_z H_y) \Big|_{i+\frac{1}{2},j,k}, \quad (2.6)$$

$$\varepsilon \frac{\partial E_y}{\partial t} \Big|_{i,j+\frac{1}{2},k} = (\delta_z H_x - \delta_x H_z) \Big|_{i,j+\frac{1}{2},k}, \quad (2.7)$$

$$\varepsilon \frac{\partial E_z}{\partial t} \Big|_{i,j,k+\frac{1}{2}} = (\delta_x H_y - \delta_y H_x) \Big|_{i,j,k+\frac{1}{2}}, \quad (2.8)$$

$$\mu \frac{\partial H_x}{\partial t} \Big|_{i,j+\frac{1}{2},k+\frac{1}{2}} = (\delta_z E_y - \delta_y E_z) \Big|_{i,j+\frac{1}{2},k+\frac{1}{2}}, \quad (2.9)$$

$$\mu \frac{\partial H_y}{\partial t} \Big|_{i+\frac{1}{2},j,k+\frac{1}{2}} = (\delta_x E_z - \delta_z E_x) \Big|_{i+\frac{1}{2},j,k+\frac{1}{2}}, \quad (2.10)$$

$$\mu \frac{\partial H_z}{\partial t} \Big|_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2},k} = (\delta_y E_x - \delta_x E_y) \Big|_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2},k}, \quad (2.11)$$

其中  $E_u|_{\alpha,\beta,\gamma} \approx E_u(x_\alpha, y_\beta, z_\gamma, t)$  和  $H_u|_{\alpha,\beta,\gamma} \approx H_u(x_\alpha, y_\beta, z_\gamma, t)$  ( $u = x, y, z$ ) 分别表示  $E_u$  和  $H_u$  在网格点  $(x_\alpha, y_\beta, z_\gamma)$  处和时刻  $t$  的近似值, 它们都是关于时间变量  $t$  连续的函数.

(ii) 时间离散. 利用 Taylor 多项式逼近, 对 (2.6)–(2.11) 中的时间变量函数在时间层  $t^n = n\Delta t$  ( $n \geq 0$ ) 展成或近似为如下形式:

$$E_x \Big|_{i+\frac{1}{2},j,k} \approx C_{x_{i+\frac{1}{2},j,k,n}}^0 + C_{x_{i+\frac{1}{2},j,k,n}}^1 (t - t^n)^1 + \cdots + C_{x_{i+\frac{1}{2},j,k,n}}^M (t - t^n)^M, \quad (2.12)$$

$$E_y \Big|_{i,j+\frac{1}{2},k} \approx C_{y_{i,j+\frac{1}{2},k,n}}^0 + C_{y_{i,j+\frac{1}{2},k,n}}^1 (t - t^n)^1 + \cdots + C_{y_{i,j+\frac{1}{2},k,n}}^M (t - t^n)^M, \quad (2.13)$$

$$E_z \Big|_{i,j,k+\frac{1}{2}} \approx C_{z_{i,j,k+\frac{1}{2},n}}^0 + C_{z_{i,j,k+\frac{1}{2},n}}^1 (t - t^n)^1 + \cdots + C_{z_{i,j,k+\frac{1}{2},n}}^M (t - t^n)^M, \quad (2.14)$$

$$H_x \Big|_{i,j+\frac{1}{2},k+\frac{1}{2}} \approx D_{x_{i,j+\frac{1}{2},k+\frac{1}{2},n}}^0 + D_{x_{i,j+\frac{1}{2},k+\frac{1}{2},n}}^1 (t - t^n)^1 + \cdots + D_{x_{i,j+\frac{1}{2},k+\frac{1}{2},n}}^M (t - t^n)^M, \quad (2.15)$$

$$H_y \Big|_{i+\frac{1}{2},j,k+\frac{1}{2}} \approx D_{y_{i+\frac{1}{2},j,k+\frac{1}{2},n}}^0 + D_{y_{i+\frac{1}{2},j,k+\frac{1}{2},n}}^1 (t - t^n)^1 + \cdots + D_{y_{i+\frac{1}{2},j,k+\frac{1}{2},n}}^M (t - t^n)^M, \quad (2.16)$$

$$H_z |_{i+\frac{1}{2}, j+\frac{1}{2}, k} \approx D_{z_{i+\frac{1}{2}, j+\frac{1}{2}, k, n}}^0 + D_{z_{i+\frac{1}{2}, j+\frac{1}{2}, k, n}}^1 (t-t^n)^1 + \dots + D_{z_{i+\frac{1}{2}, j+\frac{1}{2}, k, n}}^M (t-t^n)^M, \quad (2.17)$$

其中  $C_{u_{\alpha, \beta, \gamma, n}}^m$  和  $D_{u_{\alpha, \beta, \gamma, n}}^m$  ( $u = x, y, z$ ) 是多项式的系数,  $m = 0, 1, \dots, M$  表示展开式系数序数或者其中每一项关于  $t$  的阶数,  $M$  是多项式的次数 (在计算中,  $M$  的值根据稳定性条件或其他方法确定). 将近似表达式 (2.12)–(2.17) 代入 (2.6)–(2.11) 中, 比较相应的系数, 得到递推公式:

$$\varepsilon C_{x_{i+\frac{1}{2}, j, k, n}}^{m+1} = \frac{1}{m+1} (\delta_y D_{z_{i+\frac{1}{2}, j, k, n}}^m - \delta_z D_{y_{i+\frac{1}{2}, j, k, n}}^m), \quad (2.18)$$

$$\varepsilon C_{y_{i, j+\frac{1}{2}, k, n}}^{m+1} = \frac{1}{m+1} (\delta_z D_{x_{i, j+\frac{1}{2}, k, n}}^m - \delta_x D_{z_{i, j+\frac{1}{2}, k, n}}^m), \quad (2.19)$$

$$\varepsilon C_{z_{i, j, k+\frac{1}{2}, n}}^{m+1} = \frac{1}{m+1} (\delta_x D_{y_{i, j, k+\frac{1}{2}, n}}^m - \delta_y D_{x_{i, j, k+\frac{1}{2}, n}}^m), \quad (2.20)$$

$$\mu D_{x_{i, j+\frac{1}{2}, k+\frac{1}{2}, n}}^{m+1} = \frac{1}{m+1} (\delta_z C_{y_{i, j+\frac{1}{2}, k+\frac{1}{2}, n}}^m - \delta_y C_{z_{i, j+\frac{1}{2}, k+\frac{1}{2}, n}}^m), \quad (2.21)$$

$$\mu D_{y_{i+\frac{1}{2}, j, k+\frac{1}{2}, n}}^{m+1} = \frac{1}{m+1} (\delta_x C_{z_{i+\frac{1}{2}, j, k+\frac{1}{2}, n}}^m - \delta_z C_{x_{i+\frac{1}{2}, j, k+\frac{1}{2}, n}}^m), \quad (2.22)$$

$$\mu D_{z_{i+\frac{1}{2}, j+\frac{1}{2}, k, n}}^{m+1} = \frac{1}{m+1} (\delta_y C_{x_{i+\frac{1}{2}, j+\frac{1}{2}, k, n}}^m - \delta_x C_{y_{i+\frac{1}{2}, j+\frac{1}{2}, k, n}}^m). \quad (2.23)$$

(iii) 迭代公式 (2.18)–(2.23) 的应用. 为使符号简短, 令  $\bar{i} = i + 1/2, \bar{j} = j + 1/2, \bar{k} = k + 1/2$ . 定义初始迭代值为

$$\begin{cases} C_{x_{\bar{i}, j, k, n}}^0 = E_{x_{\bar{i}, j, k}}^n, & C_{y_{i, \bar{j}, k, n}}^0 = E_{y_{i, \bar{j}, k}}^n, & C_{z_{i, j, \bar{k}, n}}^0 = E_{z_{i, j, \bar{k}}}^n, \\ D_{x_{i, \bar{j}, \bar{k}, n}}^0 = H_{x_{i, \bar{j}, \bar{k}}}^n, & D_{y_{\bar{i}, j, \bar{k}, n}}^0 = H_{y_{\bar{i}, j, \bar{k}}}^n, & D_{z_{\bar{i}, j, k, n}}^0 = H_{z_{\bar{i}, j, k}}^n, \end{cases} \quad (2.24)$$

其中函数值  $(E_{x_{\bar{i}, j, k}}^n, E_{y_{i, \bar{j}, k}}^n, E_{z_{i, j, \bar{k}}}^n) =: \mathbf{E}^n$  和  $(H_{x_{i, \bar{j}, \bar{k}}}^n, H_{y_{\bar{i}, j, \bar{k}}}^n, H_{z_{\bar{i}, j, k}}^n) =: \mathbf{H}^n$  ( $n \geq 0$ ) 由模型问题的初始条件或计算过程给出. 另外, (2.18)–(2.23) 中的边界条件由已知边界条件 (2.4) 给出, 即

$$C_{x_{i', j', k, n}}^m = C_{x_{\bar{i}, j, k', n}}^m = C_{y_{i', j, \bar{k}, n}}^m = C_{y_{i, \bar{j}, k', n}}^m = C_{z_{i', j, \bar{k}, n}}^m = C_{z_{\bar{i}, j', k, n}}^m = 0, \quad (2.25)$$

其中  $i' = 0, I, j' = 0, J, k' = 0, K$  表示边界节点对应的指标. 在以下论述中,  $\bar{i}, \bar{j}$  和  $\bar{k}$ , 以及  $i', j'$  和  $k'$  的定义与 (2.24) 和 (2.25) 中的符号定义相同. 由 (2.18)–(2.25), 可以求得 Taylor 多项式 (2.12)–(2.17) 的各个系数.

(iv) 差分分解的表示. 令  $\mathbf{E}^n$  和  $\mathbf{H}^n$  表示电场和磁场的近似值, 即

$$\begin{aligned} (E_{x_{\bar{i}, j, k}}^n, E_{y_{i, \bar{j}, k}}^n, E_{z_{i, j, \bar{k}}}^n) &\approx (E_x(x_{\bar{i}}, y_j, z_k, t^n), E_y(x_i, y_{\bar{j}}, z_k, t^n), E_z(x_i, y_j, z_{\bar{k}}, t^n)), \\ (H_{x_{i, \bar{j}, \bar{k}}}^n, H_{y_{\bar{i}, j, \bar{k}}}^n, H_{z_{\bar{i}, j, k}}^n) &\approx (H_x(x_i, y_{\bar{j}}, z_{\bar{k}}, t^n), H_y(x_{\bar{i}}, y_j, z_{\bar{k}}, t^n), H_z(x_{\bar{i}}, y_j, z_k, t^n)). \end{aligned}$$

在 (2.12)–(2.17) 中令  $t = t^{n+1}$ , 得到  $t^{n+1}$  时刻的近似值  $\mathbf{E}^{n+1}$  和  $\mathbf{H}^{n+1}$ :

$$E_{x_{i+\frac{1}{2}, j, k}}^{n+1} = \sum_{m=0}^M C_{x_{i+\frac{1}{2}, j, k, n}}^m \Delta t^m, \quad E_{y_{i, j+\frac{1}{2}, k}}^{n+1} = \sum_{m=0}^M C_{y_{i, j+\frac{1}{2}, k, n}}^m \Delta t^m, \quad (2.26)$$

$$E_{z_{i, j, k+\frac{1}{2}}}^{n+1} = \sum_{m=0}^M C_{z_{i, j, k+\frac{1}{2}, n}}^m \Delta t^m, \quad H_{x_{i, j+\frac{1}{2}, k+\frac{1}{2}}}^{n+1} = \sum_{m=0}^M D_{x_{i, j+\frac{1}{2}, k+\frac{1}{2}, n}}^m \Delta t^m, \quad (2.27)$$

$$H_{y_{i+\frac{1}{2}, j, k+\frac{1}{2}}}^{n+1} = \sum_{m=0}^M D_{y_{i+\frac{1}{2}, j, k+\frac{1}{2}, n}}^m \Delta t^m, \quad H_{z_{i+\frac{1}{2}, j+\frac{1}{2}, k}}^{n+1} = \sum_{m=0}^M D_{z_{i+\frac{1}{2}, j+\frac{1}{2}, k, n}}^m \Delta t^m, \quad (2.28)$$

其中  $n = 0, 1, \dots, N - 1$ , 系数  $C_u^0, C_u^1, \dots, C_u^M$  和  $D_u^0, D_u^1, \dots, D_u^M$  由 (2.18)–(2.25) 求出. 在初始时刻  $n = 0$ , 初始值 (2.24) 可由初始条件 (2.5) 直接求出, 即

$$\begin{aligned} C_{x_{i,j,k},0}^0 &= E_{x0}(x_i, y_j, z_k), & C_{y_{i,j,k},0}^0 &= E_{y0}(x_i, y_j, z_k), & C_{z_{i,j,k},0}^0 &= E_{z0}(x_i, y_j, z_k), \\ D_{x_{i,j,k},0}^0 &= H_{x0}(x_i, y_j, z_k), & D_{y_{i,j,k},0}^0 &= H_{y0}(x_i, y_j, z_k), & D_{z_{i,j,k},0}^0 &= H_{z0}(x_i, y_j, z_k). \end{aligned}$$

这样, 由 (2.18)–(2.25) 和 (2.26)–(2.28) 形成一种求解 Maxwell 方程的方法, 称为时间高精度时域有限差分方法, 简记为 HAIT-FDTD 方法, 因为这种方法关于时间的逼近具有高阶 ( $M$  阶) 精度.

HAIT-FDTD 的实施步骤如下: 将上述  $n = 0$  时的初始迭代值代入 (2.18)–(2.25) 和 (2.26)–(2.28), 求出电磁场在  $n = 1$  时刻和各个网格点的值:  $(E_{x_{i,j,k}}^1, E_{y_{i,j,k}}^1, E_{z_{i,j,k}}^1)$  和  $(H_{x_{i,j,k}}^1, H_{y_{i,j,k}}^1, H_{z_{i,j,k}}^1)$ . 重复上述过程, 可以得到在时间层  $n = 2, 3, \dots, N$  上的近似值  $(E_{x_{i,j,k}}^n, E_{y_{i,j,k}}^n, E_{z_{i,j,k}}^n)$  和  $(H_{x_{i,j,k}}^n, H_{y_{i,j,k}}^n, H_{z_{i,j,k}}^n)$ .

**注 2.1** (内存量分析和截断误差) (1) 从 (2.18)–(2.25) 看出, HAIT-FDTD 是显式方法, 因为每个未知函数展开式的系数由公式直接求出, 不需要解方程组. 但是, 在内存方面, HAIT-FDTD 比 Yee 格式或者 ADI-FDTD 增加 6 个数组, 计算和储存展开系数的值 (见 (2.26)–(2.28)). 在计算量方面, HAIT-FDTD 比 Yee 格式的计算量增加不多, 因为不需要解方程组, 且主要的计算是加法.

(2) 假设问题的解足够光滑, 由 Taylor 定理可推出 HAIT-FDTD 的截断误差为  $O((\Delta t)^{M+1} + h^2)$ , 其中  $h$  是空间步长的最大值,  $M$  是多项式的次数. 在实际计算时,  $M$  的值可由稳定性条件确定, 并且可以令  $M$  取一个比较大的数值. 这就意味着 HAIT-FDTD 关于时间可达任意阶精度.

### 3 HAIT-FDTD 方法的稳定性分析

本节用 Fourier 方法推导 HAIT-FDTD 的增长因子, 分析稳定性, 然后数值模拟增长因子, 并与 Yee 格式和 ADI-FDTD 进行比较. 最后给出确定多项式次数  $M$  的一种方法.

#### 3.1 增长因子推导和稳定性分析

为了使用矩阵表示迭代公式, 定义列向量

$$\mathbf{E}^n = (E_{x_{i,j,k}}^n, E_{y_{i,j,k}}^n, E_{z_{i,j,k}}^n)^T, \quad \mathbf{H}^n = (H_{x_{i,j,k}}^n, H_{y_{i,j,k}}^n, H_{z_{i,j,k}}^n)^T$$

为 HAIT-FDTD 方法的解, 其中  $T$  为矩阵的转置. 首先, 我们推导  $\mathbf{E}^n, \mathbf{H}^n$  与  $\mathbf{E}^{n+1}, \mathbf{H}^{n+1}$  之间的关系. 记  $\mathbf{C}^m = (C_{x_{i,j,k},n}^m, C_{y_{i,j,k},n}^m, C_{z_{i,j,k},n}^m)^T$  和  $\mathbf{D}^m = (D_{x_{i,j,k},n}^m, D_{y_{i,j,k},n}^m, D_{z_{i,j,k},n}^m)^T$  是由  $\mathbf{E}^{n+1}$  和  $\mathbf{H}^{n+1}$  的系数组成的列向量, 它们的定义见 (2.18)–(2.23). 不失一般性, 设多项式的次数  $M$  为偶数 ( $M$  为奇数时, 可得到相同的结论). 利用符号  $\mathbf{C}^m$  和  $\mathbf{D}^m$ , 将 (2.18)–(2.23) 改写为

$$\mathbf{C}^{m+1} = \frac{\mathbf{A}}{\varepsilon(m+1)} \mathbf{D}^m, \quad \mathbf{D}^{m+1} = \frac{-\mathbf{A}}{\mu(m+1)} \mathbf{C}^m, \quad (3.1)$$

其中  $m = 0, 1, \dots, M - 1$  表示函数展开式系数的序数 (不是时间层数),  $\mathbf{A}$  是算子矩阵:

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} 0 & -\delta_z & \delta_y \\ \delta_z & 0 & -\delta_x \\ -\delta_y & \delta_x & 0 \end{pmatrix}.$$

利用 (3.1), 可推出如下关系式:

$$\mathbf{C}^{m+1} = \frac{-\mathbf{A}^2}{\mu\epsilon m(m+1)}\mathbf{C}^{m-1}, \quad \mathbf{D}^{m+1} = \frac{-\mathbf{A}^2}{\mu\epsilon m(m+1)}\mathbf{D}^{m-1}. \quad (3.2)$$

利用 (3.1) 和 (3.2), 方程 (2.26) 和 (2.27) 中 3 个电场分量的表达式可统一写为

$$\begin{aligned} \mathbf{E}^{n+1} &= \mathbf{C}^0 + \mathbf{C}^2 \Delta t^2 + \dots + \mathbf{C}^M \Delta t^M + \mathbf{C}^1 \Delta t + \mathbf{C}^3 \Delta t^3 + \dots + \mathbf{C}^{M-1} \Delta t^{M-1} \\ &= \left( \mathbf{I} + \frac{-\mathbf{A}^2 \Delta t^2}{(\sqrt{\mu\epsilon})^2 2!} + \dots + \frac{(-\mathbf{A}^2)^l \Delta t^{2l}}{(\sqrt{\mu\epsilon})^{2l} (2l)!} + \dots + \frac{(-\mathbf{A}^2)^{M/2} \Delta t^M}{(\sqrt{\mu\epsilon})^M M!} \right) \mathbf{C}^0 \\ &\quad + \left( \frac{\mathbf{A} \Delta t}{\sqrt{\mu\epsilon}} + \frac{-\mathbf{A}^3 \Delta t^3}{(\sqrt{\mu\epsilon})^3 3!} + \dots + \frac{(-1)^{l-1} \mathbf{A}^{2l-1} \Delta t^{2l-1}}{(\sqrt{\mu\epsilon})^{2l-1} (2l-1)!} + \dots \right. \\ &\quad \left. + \frac{(-\mathbf{A}^2)^{(M-2)/2} \mathbf{A} \Delta t^{M-1}}{(\sqrt{\mu\epsilon})^{M-1} (M-1)!} \right) \frac{\sqrt{\mu}}{\sqrt{\epsilon}} \mathbf{D}^0, \end{aligned} \quad (3.3)$$

其中  $\mathbf{I}$  是一个单位矩阵, 维数与矩阵  $\mathbf{A}$  相同,  $\mathbf{C}^0 = \mathbf{E}^n$  和  $\mathbf{D}^0 = \mathbf{H}^n$  是每个时间层上的初始迭代值. 为了简化 (3.3), 定义两个多项式:

$$\begin{aligned} f_1(x) &= 1 + \frac{x^2}{2!} + \frac{x^4}{4!} + \frac{x^6}{6!} + \dots + \frac{x^M}{M!}, \\ f_2(x) &= x + \frac{x^3}{3!} + \frac{x^5}{5!} + \frac{x^7}{7!} + \dots + \frac{x^{M-1}}{(M-1)!}, \end{aligned} \quad (3.4)$$

并且记虚单位为  $i_m$  ( $i_m^2 = -1$ ), 那么, 等式 (3.3) 两边同乘以  $\sqrt{\epsilon}$  后, 得到

$$\sqrt{\epsilon} \mathbf{E}^{n+1} = f_1 \left( \frac{i_m \mathbf{A}}{\sqrt{\mu\epsilon}} \Delta t \right) \sqrt{\epsilon} \mathbf{E}^n - i_m f_2 \left( \frac{i_m \mathbf{A}}{\sqrt{\mu\epsilon}} \Delta t \right) \sqrt{\mu} \mathbf{H}^n. \quad (3.5)$$

类似地, 由等式 (2.27) 和 (2.28) 中的磁场分量表示式可推出  $\mathbf{H}^{n+1}$  的向量表达式:

$$\sqrt{\mu} \mathbf{H}^{n+1} = i_m f_2 \left( \frac{i_m \mathbf{A}}{\sqrt{\mu\epsilon}} \Delta t \right) \sqrt{\epsilon} \mathbf{E}^n + f_1 \left( \frac{i_m \mathbf{A}}{\sqrt{\mu\epsilon}} \Delta t \right) \sqrt{\mu} \mathbf{H}^n. \quad (3.6)$$

设  $\mathbf{E}^n$  和  $\mathbf{H}^n$  为 Maxwell 方程的一个调和波解 (或单色波解) 的离散形式:

$$(\mathbf{E}^n, \mathbf{H}^n) = (\tilde{\mathbf{E}}_0, \tilde{\mathbf{H}}_0) \xi^n e^{-i_m(k_x i \Delta x + k_y j \Delta y + k_z k \Delta z)}, \quad (3.7)$$

其中  $\tilde{\mathbf{E}}_0$  和  $\tilde{\mathbf{H}}_0$  为两个列向量, 定义如下:

$$\begin{aligned} \tilde{\mathbf{E}}_0 &= (E_{x0} e^{-\frac{1}{2} i_m k_x \Delta x}, E_{y0} e^{-\frac{1}{2} i_m k_y \Delta y}, E_{z0} e^{-\frac{1}{2} i_m k_z \Delta z})^T, \\ \tilde{\mathbf{H}}_0 &= (H_{x0} e^{-\frac{1}{2} i_m (k_y \Delta y + k_z \Delta z)}, H_{y0} e^{-\frac{1}{2} i_m (k_x \Delta x + k_z \Delta z)}, H_{z0} e^{-\frac{1}{2} i_m (k_x \Delta x + k_y \Delta y)})^T, \end{aligned}$$

$E_{u0}$  和  $H_{u0}$  ( $u = x, y, z$ ) 表示振幅, 是常数值,  $k_x$ 、 $k_y$  和  $k_z$  为波矢量  $\mathbf{k}$  在  $x$ 、 $y$  和  $z$  方向上的分量,  $\xi$  为增长因子或稳定因子. 把 (3.7) 代入 (3.5) 和 (3.6), 消去公因子, 得到一个关于  $E_{u0}$  和  $H_{u0}$  ( $u = x, y, z$ ) 的齐次线性方程组. 该方程组的系数矩阵行列式为零, 求此行列式 (关于  $\xi$  的多项式) 的根, 得到如下结论.

**定理 3.1** (1) HAIT-FDTD 方法的增长因子是

$$\xi_1 = 1 + \bar{\eta}_0 + \frac{(\bar{\eta}_0)^2}{2!} + \frac{(\bar{\eta}_0)^3}{3!} + \dots + \frac{(\bar{\eta}_0)^M}{M!}, \quad (3.8)$$

$$\xi_2 = 1 - \bar{\eta}_0 + \frac{(\bar{\eta}_0)^2}{2!} - \frac{(\bar{\eta}_0)^3}{3!} + \cdots + (-1)^M \frac{(\bar{\eta}_0)^M}{M!}, \quad (3.9)$$

其中  $\bar{\eta}_0 = i_m \eta_0$ ,  $\eta_0$  为正数, 定义为

$$\eta_0 = \frac{\Delta t}{\sqrt{\mu\varepsilon}} \sqrt{\frac{\sin^2(k_x \Delta x/2)}{(\Delta x/2)^2} + \frac{\sin^2(k_y \Delta y/2)}{(\Delta y/2)^2} + \frac{\sin^2(k_z \Delta z/2)}{(\Delta z/2)^2}}.$$

(2) 当增长因子中的  $M$  或未知函数展开式中的项数足够大时, HAIT-FDTD 方法稳定.

**证明** 从  $\xi_1$  和  $\xi_2$  的表达式 (3.8) 和 (3.9) 可以看出, 当  $M$  趋向于无穷大时,  $\xi_{1,2}$  的模或大小为

$$|\xi_{1,2}| \rightarrow |\exp(\pm \bar{\eta}_0)| = |\cos(\eta_0) \pm i_m \sin(\eta_0)| = 1.$$

从而, 结论 (2) 得证. □

**注 3.1** (展开项个数或多项式次数的选取) 从增长因子的表达式 (3.8) 和 (3.9) 可以得到一个关于剖分网格尺寸  $\Delta t$ 、 $\Delta x$ 、 $\Delta y$ 、 $\Delta z$  和多项式次数  $M$  的不等式:

$$\left| 1 + \eta_* + \frac{\eta_*^2}{2!} + \frac{\eta_*^3}{3!} + \cdots + \frac{\eta_*^l}{l!} + \cdots + \frac{\eta_*^M}{M!} \right| < 1, \quad (3.10)$$

其中  $\eta_*$  (定义如下) 是一个由  $\eta_0$  的最大值得出的虚数, 可看作 CFL 条件数  $C_{\text{cfl}}$  的虚倍数:

$$\eta_* = i_m \frac{2\Delta t}{\sqrt{\mu\varepsilon}} \sqrt{\frac{1}{\Delta x^2} + \frac{1}{\Delta y^2} + \frac{1}{\Delta z^2}} = i_m 2C_{\text{cfl}}.$$

从条件 (3.10) 可以得到确定多项式次数  $M$  的一个方法, 步骤如下:

(i) 设给定空间离散步长  $\Delta x$ 、 $\Delta y$  和  $\Delta z$ , 首先给出时间步长的初始猜测值, 例如,  $\Delta t = T/2$ ,  $T$  是时间区间的长度.

(ii) 在  $M$  的一个范围内, 如  $6 < M < 100$ , 判断  $M$  是否满足条件 (3.10). 如果对于此范围内所有的  $M$  都不满足 (3.10), 把时间步长减半, 即  $\Delta t = \Delta t/2$ .

(iii) 重复过程步骤 (ii), 直到第一对  $\Delta t$  和  $M$  满足不等式 (3.10) 为止. 这样确定的  $\Delta$  和  $M$  可用于 HAIT-FDTD 方法的计算中.

**注 3.2** (ADI-FDTD 和 Yee 格式的稳定性比较) 为了与 ADI-FDTD 方法和 Yee 格式的稳定性进行比较, 下面列出这两种方法的增长因子.

(i) ADI-FDTD 方法的增长因子 (参见文献 [26]) 为

$$\xi_{1,2}^{\text{adi}} = \frac{1}{d_2} (d_1 \pm i_m \sqrt{d_2^2 - d_1^2}), \quad (3.11)$$

其中  $d_1$  和  $d_2$  是两个常数, 定义为

$$\begin{aligned} d_1 &= 1 - \frac{\Delta t^2}{\mu\varepsilon} a_1 - \frac{\Delta t^4}{(\mu\varepsilon)^2} a_2 + \frac{\Delta t^6}{(\mu\varepsilon)^3} a_3, & d_2 &= 1 + \frac{\Delta t^2}{\mu\varepsilon} a_1 + \frac{\Delta t^4}{(\mu\varepsilon)^2} a_2 + \frac{\Delta t^6}{(\mu\varepsilon)^3} a_3, \\ a_1 &= (a_x)^2 + (a_y)^2 + (a_z)^2, & a_2 &= (a_x a_y)^2 + (a_y a_z)^2 + (a_z a_x)^2, & a_3 &= (a_x a_y a_z)^2, \\ a_x &= \frac{1}{\Delta x} \sin\left(\frac{1}{2} k_x \Delta x\right), & a_y &= \frac{1}{\Delta y} \sin\left(\frac{1}{2} k_y \Delta y\right), & a_z &= \frac{1}{\Delta z} \sin\left(\frac{1}{2} k_z \Delta z\right). \end{aligned}$$

(ii) Yee 格式的增长因子是

$$\xi_{1,2}^{\text{Yee}} = 1 - 2 \frac{\Delta t^2}{\mu\varepsilon} a_1 \pm i_m \frac{2\Delta t}{\sqrt{\mu\varepsilon}} \sqrt{a_1 \left(1 - \frac{\Delta t^2}{\mu\varepsilon} a_1\right)}, \quad (3.12)$$

其中  $a_1$  与 (3.11) 中的  $a_1$  相同. 从 (3.11) 看出, 对任意  $\Delta u$  ( $u = x, y, z$ ) 和  $\Delta t$ ,  $\xi_{1,2}^{\text{adi}}$  的模等于 1, 这说明 ADI-FDTD 是无条件稳定的. 由 (3.12) 看出, 当 CFL 条件数小于 1 时, 即

$$C_{\text{cfl}} = \frac{\Delta t}{\sqrt{\mu\varepsilon}} \sqrt{\frac{1}{\Delta x^2} + \frac{1}{\Delta y^2} + \frac{1}{\Delta z^2}} < 1,$$

$\xi_{1,2}^{\text{yee}}$  的绝对值等于 1. 这说明 Yee 格式满足上述 CFL 条件时稳定 (条件稳定).

从定理 3.1 及 (3.11) 和 (3.12) 看出, HAIT-FDTD 的稳定因子与 Yee 格式以及 ADI-FDTD 的稳定因子不同, 稳定性与 CFL 条件无关, 只与多项式的次数  $M$  有关.

### 3.2 增长因子计算

为了更清楚地理解 HAIT-FDTD 的稳定性及其条件, 下面计算增长因子的大小, 展示增长因子大小与  $M$  以及其他因素的关系. 对于波向量  $\mathbf{k} = (k_x, k_y, k_z)$ , 令

$$k = \sqrt{(k_x)^2 + (k_y)^2 + (k_z)^2}, \quad k_x = k \cos \phi \cos \theta, \quad k_y = k \cos \phi \sin \theta, \quad k_z = k \sin \phi,$$

即  $k$ 、 $\phi$  和  $\theta$  是  $\mathbf{k}$  在球面坐标系中的坐标. 在计算中, 取均匀网格剖分  $\Delta x = \Delta y = \Delta z = h$ , 令  $S = c\Delta t/h$  (此时 CFL 条件数为  $C_{\text{cfl}} = \sqrt{3}S$ ),  $c = 1/\sqrt{\mu\varepsilon}$  为波速,  $\lambda$  为波长,  $N_\lambda = \lambda/h$  为一个波长中剖分点的个数. 利用上述参数及其之间的关系, (3.8) 中的  $\bar{\eta}_0$  可写为

$$\begin{aligned} \bar{\eta}_0 &= \bar{\eta}_0(S, \phi, \theta, N_\lambda) \\ &= 2i_m S \sqrt{\sin^2 \left( \frac{2\pi}{N_\lambda} \cos \phi \cos \theta \right) + \sin^2 \left( \frac{2\pi}{N_\lambda} \cos \phi \sin \theta \right) + \sin^2 \left( \frac{2\pi}{N_\lambda} \sin \phi \right)}. \end{aligned} \quad (3.13)$$

由 (3.13)、(3.8) 和 (3.9) 可知,  $\xi_1$  和  $\xi_2$  的大小或模相等, 并且都是  $S$ 、 $\phi$ 、 $\theta$ 、 $N_\lambda$  和  $M$  的函数.

图 1 给出了  $M = 15, 20$  时,  $|\xi_1| - 1$  关于  $\theta$  的变化图形, 其中  $\phi = \pi/3$ ,  $N_\lambda = 10$ ,  $S = 5.2$ . 从这两条曲线可以看出, 稳定因子的大小接近于 1, 并且当  $M$  变大时  $|\xi_1|$  快速趋向于 1. 这说明 HAIT-FDTD 方法稳定, 并且稳定性随  $M$  增大而变得更好.  $S = 5.2$  说明稳定性不受 CFL 条件限制 (此时, CFL 条件数约为 9). 图 2 中给出了  $|\xi_1| - 1$  关于  $\phi$  的变化曲线图, 从中可以看出类似于图 1 中给出的结论.

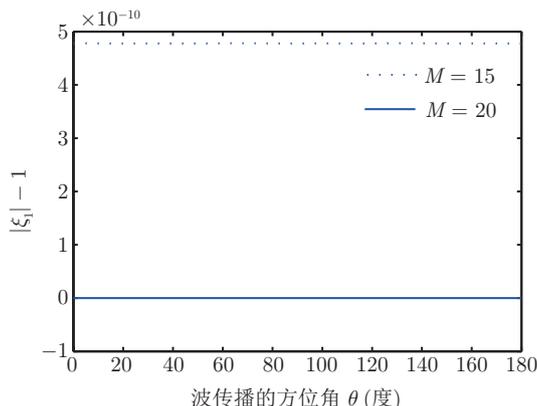


图 1 增长因子大小减去 1 ( $|\xi_1| - 1$ ) 随  $\theta$  的变化规律, 其中  $\phi = \frac{\pi}{3}$ ,  $N_\lambda = 10$ ,  $S = 5.2$ ,  $M = 15, 20$

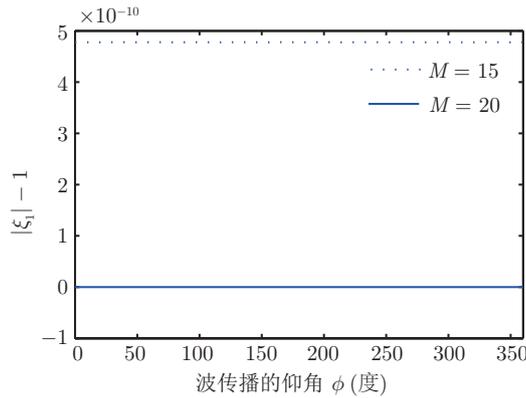


图 2 增长因子大小减去 1 ( $|\xi_1| - 1$ ) 随  $\phi$  的变化规律, 其中  $S = 5.2$ ,  $\theta = \frac{\pi}{3}$ ,  $N_\lambda = 22$ ,  $M = 15, 20$

图 3 展示了当  $M = 10, 20, 25$  时  $|\xi_1| - 1$  随  $N_\lambda$  的变化规律, 其中  $S = 5.2$ ,  $\phi = \theta = \pi/3$ . 从这三条曲线看出, 随着  $N_\lambda$  由 4 逐渐变大,  $|\xi_1| - 1$  逐渐变小. 这就说明随着  $M$  或  $N_\lambda$  的增大, HAIT-FDTD 的稳定性变得越来越好, 并且当  $M$  比较大时, 粗网格下的情形也是稳定的.

图 4 给出了当  $M = 10, 20, 30$  时,  $|\xi_1|$  随  $S$  变化规律. 从图中看出, 当这三种情形中的最大 CFL 条件数分别取为  $4\sqrt{3}$ 、 $10\sqrt{3}$  和  $16\sqrt{3}$  时, 稳定因子的大小仍然接近于 1. 这意味着当  $M$  比较大时,  $S$  的取值可以比较大. 这说明 HAIT-FDTD 的稳定性不受 CFL 条件限制.

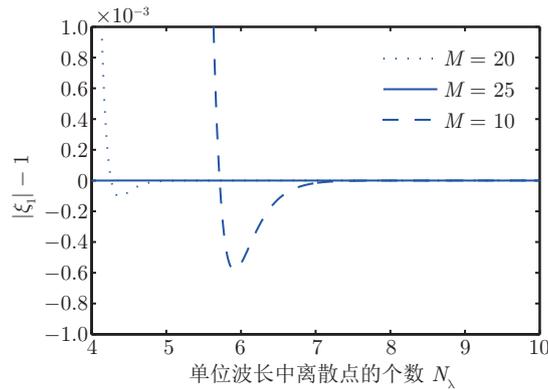


图 3 增长因子大小减去 1 ( $|\xi_1| - 1$ ) 随  $N_\lambda$  的变化规律, 其中  $S = 5.2$ ,  $\phi = \frac{\pi}{3}$ ,  $\theta = \frac{\pi}{3}$ ,  $M = 10, 20, 25$

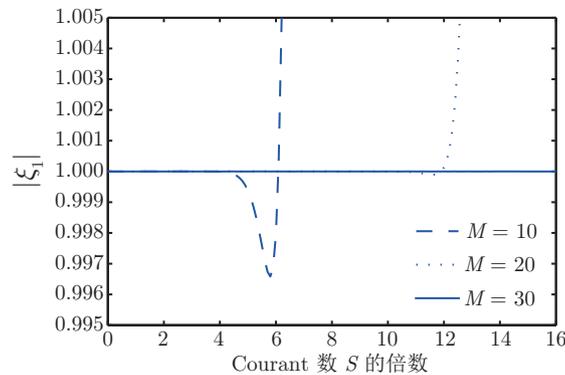


图 4 增长因子大小  $|\xi_1|$  随  $S$  的变化规律, 其中  $\theta = \phi = \frac{\pi}{3}$ ,  $N_\lambda = 10$ ,  $M = 10, 20, 30$

### 4 HAIT-FDTD 的数值弥散分析

为了研究 HAIT-FDTD 的角频率、波速和波数之间的关系 (称为数值弥散关系) 以及数值波速和真实波速之间的误差 (称为数值弥散误差), 下面推导 HAIT-FDTD 的数值弥散关系式, 并与 ADI-FDTD 和 Yee 格式的结论进行比较.

#### 4.1 数值弥散关系式

假设一个离散的调和波为

$$\begin{aligned} \mathbf{E}^n &= \tilde{\mathbf{E}}_0 e^{i_m(\omega n \Delta t - k_x i \Delta x - k_y j \Delta y - k_z k \Delta z)}, \\ \mathbf{H}^n &= \tilde{\mathbf{H}}_0 e^{i_m(\omega n \Delta t - k_x i \Delta x - k_y j \Delta y - k_z k \Delta z)}, \end{aligned}$$

其中向量  $\tilde{\mathbf{E}}_0$ 、 $\tilde{\mathbf{H}}_0$  和  $(k_x, k_y, k_z)$  的定义见 (3.7),  $\omega$  是角频率. 把  $\mathbf{E}^n$  和  $\mathbf{H}^n$  代入 HAIT-FDTD 的等价形式 (3.5) 和 (3.6), 消去公共因子, 得到关于  $E_{u0}$  和  $H_{u0}$  ( $u = x, y, z$ ) 的一个线性方程组. 此方程组有非零解, 计算系数矩阵的行列式, 得到

$$\sin^2(\omega \Delta t) = (c \Delta t)^2 \left( \frac{\sin^2(\frac{1}{2} k_x \Delta x)}{(\frac{1}{2} \Delta x)^2} + \frac{\sin^2(\frac{1}{2} k_y \Delta y)}{(\frac{1}{2} \Delta y)^2} + \frac{\sin^2(\frac{1}{2} k_z \Delta z)}{(\frac{1}{2} \Delta z)^2} \right) (1 + \delta), \tag{4.1}$$

其中  $\delta = T_1 + T_2 + T_3 + T_4$  是一个正数,  $T_i$  ( $i = 1, 2, 3, 4$ ) 的定义为

$$\begin{aligned} T_1 &= \frac{\bar{\eta}_0^2}{3!} + \frac{\bar{\eta}_0^4}{5!} + \dots + \frac{\bar{\eta}_0^{M-2}}{(M-1)!}, \quad T_2 = \frac{\bar{\eta}_0^2}{4!} + \frac{\bar{\eta}_0^4}{6!} + \dots + \frac{\bar{\eta}_0^{M-2}}{M!}, \\ T_3 &= \left( \frac{\bar{\eta}_0}{2!} + \frac{\bar{\eta}_0^3}{4!} + \frac{\bar{\eta}_0^5}{6!} + \dots + \frac{\bar{\eta}_0^{M-1}}{M!} \right)^2, \quad T_4 = \left( \frac{\bar{\eta}_0^2}{3!} + \frac{\bar{\eta}_0^4}{5!} + \frac{\bar{\eta}_0^6}{7!} + \dots + \frac{\bar{\eta}_0^{M-2}}{(M-1)!} \right)^2. \end{aligned}$$

上式中,  $M$  为偶数 (当  $M$  为奇数时,  $T_i$  表达式中的最后一项做相应调整, 将  $M$  改为  $M-1$  或  $M+1$ ), 对于  $m = 1, 2, \dots, M-1$ ,  $\bar{\eta}_0^m = (\bar{\eta}_0)^m$ ,  $\bar{\eta}_0$  的定义见 (3.8). 由 (4.1) 可得到如下结论.

**定理 4.1** HAIT-FDTD 的数值弥散关系式是 (4.1), 当网格剖分步长  $\Delta t$  和  $\Delta u$  ( $u = x, y, z$ ) 趋于零以及  $M$  趋于无穷大时, 该关系式收敛于连续情形下的弥散关系式:  $\omega^2 = (ck)^2$ .

**证明** 在下面的证明中, 设  $M$  为偶数, 对于  $M$  是奇数的情形, 可类似证明. 由  $\bar{\eta}_0$  的定义 (见 (3.8)) 和极限公式  $\lim_{x \rightarrow 0} \sin(x)/x = 1$  可知, 当  $\Delta t$  和  $\Delta u$  ( $u = x, y, z$ ) 趋于 0 时,

$$\bar{\eta}_0 = i_m \eta_0 = O(\Delta t) \rightarrow 0.$$

下面证明, 当  $\bar{\eta}_0 \rightarrow 0$  和  $M \rightarrow \infty$  时,  $\delta \rightarrow 0$ . 注意到

$$\begin{aligned} T_1 &= -\frac{1}{3!} \eta_0^2 + \frac{1}{5!} \eta_0^4 + \dots + \frac{(-1)^k}{(2k+1)!} \eta_0^{2k} + \dots + (-1)^{\frac{M-2}{2}} \frac{1}{(M-1)!} \eta_0^{M-2} \\ &= \frac{1}{\eta_0} \left( \eta_0 - \frac{1}{3!} \eta_0^3 + \dots + \frac{(-1)^k}{(2k+1)!} \eta_0^{2k+1} + \dots + (-1)^{\frac{M-2}{2}} \frac{1}{(M-1)!} \eta_0^{M-1} - \eta_0 \right) \\ &\rightarrow \frac{1}{\eta_0} (\sin(\eta_0) - \eta_0), \quad M \rightarrow \infty. \end{aligned} \tag{4.2}$$

所以, 当  $\Delta t \rightarrow 0$ ,  $\Delta u$  ( $u = x, y, z$ )  $\rightarrow 0$  和  $M \rightarrow \infty$  时,  $\bar{\eta}_0 \rightarrow 0$ ,  $T_1 \rightarrow 0$ . 类似地,

$$T_2 = -\frac{1}{4!} \eta_0^2 + \frac{1}{6!} \eta_0^4 + \dots + \frac{(-1)^{k-1}}{(2k)!} \eta_0^{2k-2} + \dots + (-1)^{\frac{M}{2}-1} \frac{1}{(M)!} \eta_0^{M-2}$$

$$\begin{aligned}
 &= -\frac{1}{\eta_0^2} \left( 1 - \frac{\eta_0^2}{2!} + \frac{1}{4!} \eta_0^4 + \cdots + \frac{(-1)^k}{(2k)!} \eta_0^{2k} + \cdots + (-1)^{\frac{M}{2}} \frac{1}{M!} \eta_0^M - 1 + \frac{\eta_0^2}{2} \right) \\
 &\rightarrow -\frac{1}{\eta_0^2} \left( \cos(\eta_0) - 1 + \frac{\eta_0^2}{2} \right), \quad M \rightarrow \infty.
 \end{aligned} \tag{4.3}$$

因此, 当  $\Delta t \rightarrow 0$ 、 $\Delta u (u = x, y, z) \rightarrow 0$  和  $M \rightarrow \infty$  时, 由 L'Hospital 法则可知,  $T_2 \rightarrow 0$ . 由  $T_1 \rightarrow 0$  和  $T_4 = (T_1)^2$  推出  $T_4 \rightarrow 0$ . 下面考虑  $T_3$ . 由  $T_2$  的表达式可知,

$$\begin{aligned}
 T_3 &= \left( \frac{\bar{\eta}_0}{2!} + \bar{\eta}_0 \left( \frac{\bar{\eta}_0^2}{4!} + \cdots + \frac{\bar{\eta}_0^{2k-2}}{(2k)!} + \cdots + \frac{\bar{\eta}_0^{M-2}}{(M)!} \right) \right)^2 \\
 &= \left( \frac{\bar{\eta}_0}{2!} + \bar{\eta}_0 T_2 \right)^2 \rightarrow 0, \quad \bar{\eta}_0 \rightarrow 0.
 \end{aligned} \tag{4.4}$$

综上所述, 当  $\Delta t \rightarrow 0$ 、 $\Delta u (u = x, y, z) \rightarrow 0$  和  $M \rightarrow \infty$  时,  $\delta \rightarrow 0$ , 并且数值弥散关系式 (4.1) 收敛于连续弥散关系式:  $\omega^2 = (k_x^2 + k_y^2 + k_z^2)(\mu\varepsilon)$ .  $\square$

**注 4.1** (比较 Yee 格式和 ADI-FDTD 的数值弥散关系式) (i) Yee 格式的数值弥散关系式<sup>[1]</sup> 是

$$\sin^2 \left( \frac{1}{2} \omega \Delta t \right) = (c\Delta t)^2 \left( \frac{\sin^2(\frac{1}{2} k_x \Delta x)}{\Delta x^2} + \frac{\sin^2(\frac{1}{2} k_y \Delta y)}{\Delta y^2} + \frac{\sin^2(\frac{1}{2} k_z \Delta z)}{\Delta z^2} \right). \tag{4.5}$$

(ii) ADI-FDTD 的数值弥散关系式<sup>[26,36]</sup> 是

$$\sin^2 \left( \frac{1}{2} \omega \Delta t \right) (1 + (c\Delta t)^6 a_3) = (c\Delta t)^2 (a_1 + (c\Delta t)^2 a_2) \cos^2 \left( \frac{1}{2} \omega \Delta t \right), \tag{4.6}$$

其中  $a_1$ 、 $a_2$  和  $a_3$  与 (3.11) 中的符号定义相同. 从 (4.1)、(4.5) 和 (4.6) 看出, HAIT-FDTD 的数值弥散关系式与 Yee 格式和 ADI-FDTD 的数值弥散关系式不同, 与  $M$  有关. 数值弥散关系式反映了数值弥散误差, 下面具体计算这种误差.

## 4.2 数值弥散误差的计算

数值弥散误差由波速  $v_p$  和理论光速  $c$  的比值  $v_p/c$  刻画, 其大小可用下列公式 (参见文献 [20]) 求出:

$$\frac{v_p}{c} = \frac{N_\lambda}{2\pi S} \cdot \arctan \frac{\text{Im}(\xi)}{\text{Re}(\xi)},$$

其中  $\xi$  是增长因子,  $S$  和  $N_\lambda$  的定义见 (3.13),  $\text{Im}(\xi)$  和  $\text{Re}(\xi)$  分别为  $\xi$  的虚部和实部. 从增长因子的表达式 (3.8)、(3.11) 和 (3.12) 可以看出, HAIT-FDTD 的数值弥散误差  $v_p/c$  为变量  $S$ 、 $N_\lambda$ 、 $\theta$ 、 $\phi$  和  $M$  的函数, ADI-FDTD 和 Yee 格式 (在以下论述中记为 Yee-FDTD) 的数值弥散误差是  $S$ 、 $N_\lambda$ 、 $\theta$  和  $\phi$  的函数. 下面画出这些误差关于其中一个变量的变化曲线图.

图 5 给出了在  $\phi = \pi/3$ 、 $N_\lambda = 20$ 、 $S = 0.5$  和  $M=20$  情形下, HAIT-FDTD、ADI-FDTD 和 Yee 格式的波速比  $v_p/c$  关于  $\theta$  的变化规律, 其中选取  $S = 0.5$  是为了满足 Yee 格式的稳定性条件. 从图形看出, HAIT-FDTD 的数值弥散误差小于其他两种方法的数值弥散误差.

类似地, 图 6 给出了在  $\theta = \pi/3$ 、 $N_\lambda = 40$ 、 $S = 0.5$  和  $M = 20$  下这三种格式的波速比  $v_p/c$  关于  $\phi$  的变化规律. 图形显示了同样的结果.

图 7 给出了在  $\theta = \phi = \pi/3$ 、 $S = 0.5$  和  $M=20$  情形下  $v_p/c$  关于  $N_\lambda$  的变化规律. 从图形看出, HAIT-FDTD 的数值弥散误差小于 ADI-FDTD 和 Yee 格式的数值弥散误差.

图 8 给出了在  $\theta = \phi = \pi/6$ 、 $N_\lambda = 40$  和  $M = 20$  条件下  $v_p/c$  关于  $S$  的变化规律. 从图形看出, 随着  $S$  的变大, HAIT-FDTD 的数值弥散误差变化稳定, 且都远小于 ADI-FDTD 和 Yee 格式的数值弥散误差.

图 9 展示了 HAIT-FDTD 的比值  $v_p/c$  关于 Taylor 多项式次数  $M$  的变化曲线. 图形显示, 当  $M$  从 2 变到 20 的过程中, 数值弥散误差迅速减小, 然后变大并从  $M = 4$  开始比值趋于稳定. 这符合 HAIT-FDTD 的特点: 当  $M > 4$  时, 截断误差主要取决于空间离散的误差.

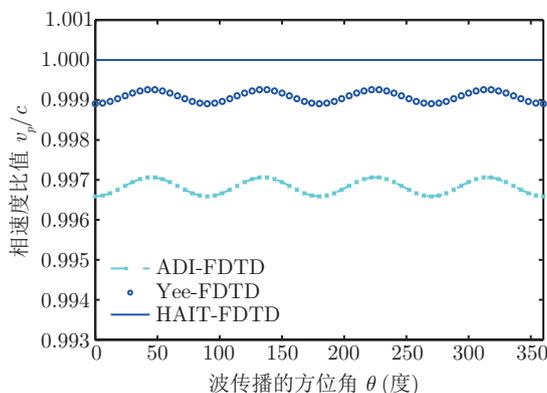


图 5 三种格式的数值弥散误差随  $\theta$  的变化规律, 其中  $\phi = \pi/3$ ,  $N_\lambda = 20$ ,  $S = 0.5$ ,  $M = 20$

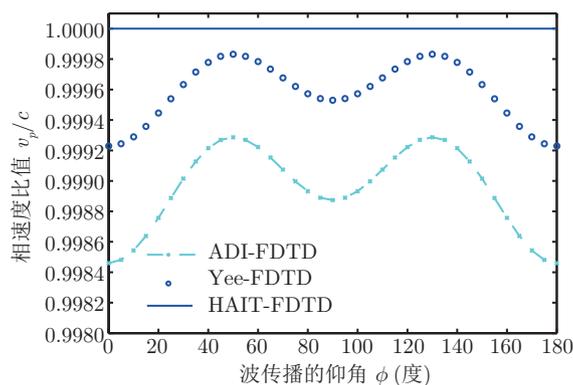


图 6 三种格式的数值弥散误差随  $\phi$  的变化规律, 其中  $\theta = \pi/3$ ,  $N_\lambda = 40$ ,  $S = 0.5$ ,  $M = 20$

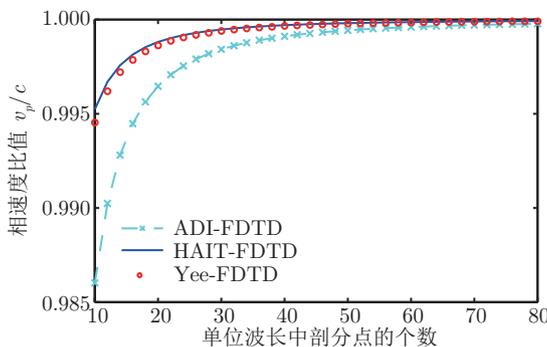
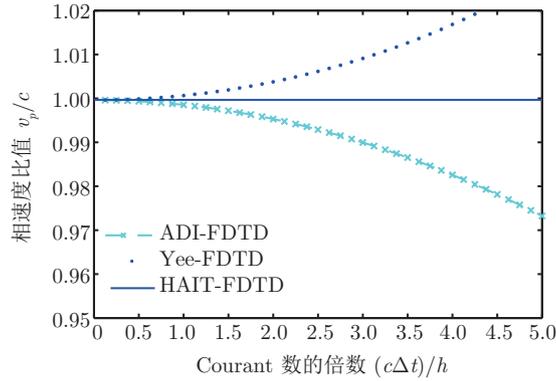
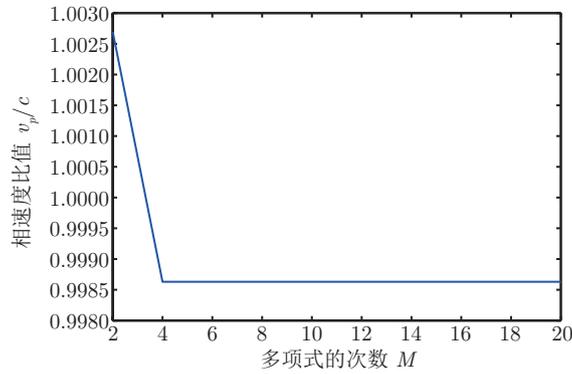


图 7 三种格式的数值弥散误差随  $N_\lambda$  的变化规律, 其中  $S = 0.5$ ,  $\theta = \phi = \pi/6$ ,  $M = 20$


 图 8 三种格式数值弥散误差随  $S$  的变化规律, 其中  $N_\lambda = 40$ ,  $\theta = \phi = \frac{\pi}{6}$ ,  $M = 20$ 

 图 9 HAIT-FDTD 的数值弥散误差随  $M$  的变化规律, 其中  $\theta = \phi = \frac{\pi}{3}$ ,  $S = 5.2$ ,  $N_\lambda = 20$ 

## 5 数值实验

本节求解一个真解已知的波导问题, 验证 HAIT-FDTD 的有效性, 证实关于稳定性和收敛阶的分析, 并检验是否保持波导问题的两个物理性质: 能量守恒性和散度为零, 同时, 给出与 Yee 格式 (Yee-FDTD) 和 ADI-FDTD 的比较.

考虑齐次、均匀和各向同性介质中的方程 (2.1)–(2.3),  $\varepsilon = \mu = 1$ , 区域  $\Omega = [0, 1]^3$ ,  $\Omega$  的边界为理想导体 (PEC), 初始条件由下列真解在  $t = 0$  时给出:

$$\begin{aligned} E_x &= \cos(\sqrt{3}\pi t) \cos(\pi x) \sin(\pi y) \sin(\pi z), \\ E_y &= -2 \cos(\sqrt{3}\pi t) \sin(\pi x) \cos(\pi y) \sin(\pi z), \\ E_z &= \cos(\sqrt{3}\pi t) \sin(\pi x) \sin(\pi y) \cos(\pi z), \\ H_x &= -\sqrt{3} \sin(\sqrt{3}\pi t) \sin(\pi x) \cos(\pi y) \cos(\pi z), \\ H_y &= 0, \\ H_z(t) &= \sqrt{3} \sin(\sqrt{3}\pi t) \cos(\pi x) \cos(\pi y) \sin(\pi z). \end{aligned}$$

令  $t = t^n$  时刻真解在交错网格上的值为  $\mathbf{E}(t^n)$  和  $\mathbf{H}(t^n)$ , 由 HAIT-FDTD 和 ADI-FDTD 求出的近似解为  $\mathbf{E}^n$  和  $\mathbf{H}^n$ , 由 Yee 格式计算出的近似解为  $\mathbf{E}^n$  和  $\mathbf{H}^{n+\frac{1}{2}}$ , 在  $t = t^n$  时, Yee-FDTD 的磁场近

似值  $\mathbf{H}^n$  由  $(\mathbf{H}^{n+1/2} + \mathbf{H}^{n-1/2})/2$  给出. 近似解在离散  $L^2$  范数下的相对误差为

$$\text{Err}(\mathbf{E}^n, \mathbf{H}^n) = \frac{\|(\mathcal{E}^n, \mathcal{H}^n)\|}{\|(\mathbf{E}(t^n), \mathbf{H}(t^n))\|},$$

其中  $\mathcal{E}^n = \mathbf{E}(t^n) - \mathbf{E}^n$ ,  $\mathcal{H}^n = \mathbf{H}(t^n) - \mathbf{H}^n$  为误差向量.  $\|\cdot\|$  的定义如下: 对于定义在网格  $\Omega_{E_u}^h$  和  $\Omega_{H_u}^h$  上的函数  $F_u$  和  $G_u$  ( $u = x, y, z$ ), 向量函数  $\mathbf{F} = (F_x, F_y, F_z)$  和  $\mathbf{G} = (G_x, G_y, G_z)$  的  $L^2$  范数为

$$\|(\mathbf{F}, \mathbf{G})\|^2 = \|\mathbf{F}\|^2 + \|\mathbf{G}\|^2,$$

其中

$$\begin{aligned} \|\mathbf{F}\|^2 &= \sum_{i=0}^{I-1} \sum_{j=0}^{J-1} \sum_{k=0}^{K-1} \varepsilon((F_{x_{i,j,k}})^2 + (F_{y_{i,j,k}})^2 + (F_{z_{i,j,k}})^2) \Delta x \Delta y \Delta z, \\ \|\mathbf{G}\|^2 &= \sum_{i=0}^{I-1} \sum_{j=0}^{J-1} \sum_{k=0}^{K-1} \mu((G_{x_{i,j,k}})^2 + (G_{y_{i,j,k}})^2 + (G_{z_{i,j,k}})^2) \Delta x \Delta y \Delta z. \end{aligned}$$

### 5.1 模拟稳定性不受 CFL 条件限制

选取空间步长  $\Delta x = \Delta y = \Delta z = h = 0.02$ , 时间步长为  $\Delta t = \tau = 0.0625$ 、 $\tau/2$  和  $\tau/4$ ,  $M = 47, 60, 90$ , 由 HAIT-FDTD 计算模型问题在  $t = 1$  时刻的解, 近似解的误差如下表所示.

在表 1 中,  $\Delta t = 0.0625$  和  $M = 47$  由准则 (3.10) 自动给出, 其他的  $\Delta t$  和  $M$  的取值是手动选取的. 从表 1 中的数据可以看出, HAIT-FDTD 的稳定性不受制于 CFL 条件. 例如,  $\Delta t = 0.0625, 0.03125$  时, CFL 条件数  $C_{\text{cfl}} \approx 5.4, 2.7$ , 均超出了 CFL 条件:  $C_{\text{cfl}} < 1$ . 从表中的数据还可以看出, 当  $M$  由 47 变为 60 和 90, 或者  $\Delta t$  由 0.0625 变为 0.03125 和 0.015625 时, HAIT-FDTD 的近似解的相对误差几乎不变. 这符合 HAIT-FDTD 方法的截断误差  $O(\Delta t^M + \Delta x^2 + \Delta y^2 + \Delta z^2)$ , 当  $M$  比较大时, 时间离散误差非常小, 截断误差取决于空间离散误差.

### 5.2 收敛阶计算

为了计算 HAIT-FDTD 关于空间的收敛阶, 并且与 ADI-FDTD 和 Yee 格式的收敛阶比较, 我们统一选取空间步长  $h$  为 0.04、0.02 和 0.01, 时间步长的选取与空间步长和格式有关, 即 Yee-FDTD 的时间步长取为  $\Delta t = h/2$ , ADI-FDTD 的时间步长取为  $\Delta t = 1.2h$ , HAIT-FDTD 的时间步长和  $M$  的取值见表 2.

表 3 给出了在  $t = 1$  时, HAIT-FDTD、ADI-FDTD 和 Yee-FDTD 近似解的相对误差和收敛阶. 从表中的数据看出, HAIT-FDTD 与其他两种 FDTD 方法都是二阶收敛, 符合理论分析的结果.

表 1 在时间  $t = 1$  时刻 HAIT-FDTD 近似解的相对误差, 其中  $h = 0.02$

	$\Delta t = 0.062500$	$\Delta t = 0.031250$	$\Delta t = 0.015625$
$M = 47$	8.950299104232E-4	8.950299104232E-4	8.950299104232E-4
$M = 60$	8.950299104232E-4	8.950299104232E-4	8.950299104232E-4
$M = 90$	8.950299104232E-4	8.950299104232E-4	8.950299104232E-4

表 2 HAIT-FDTD 的时间步长  $\Delta t$  和多项式次数  $M$  的取值

$\Delta x = \Delta y = \Delta z = h$	0.04	0.02	0.01
$\Delta t$	0.12500	0.06250	0.03125
$M$	47	47	47

表 3 HAIT-FDTD、ADI-FDTD 和 Yee-FDTD 的相对误差和收敛阶

$h$	HAIT-FDTD	收敛阶	ADI-FDTD	收敛阶	Yee-FDTD	收敛阶
0.04	3.58E-3		6.29E-3		9.41E-4	
0.02	8.95E-4	1.99	1.57E-3	1.99	2.29E-4	2.03
0.01	2.23E-4	1.99	3.96E-4	1.99	5.66E-5	2.01

### 5.3 模拟能量守恒性

根据 Poynting 能量守恒定理, 波导问题的真解  $(\mathbf{E}(t), \mathbf{H}(t))$  满足下列恒等式:

$$\|(\mathbf{E}(t), \mathbf{H}(t))\|^2 := \|\mathbf{E}(t)\|^2 + \|\mathbf{H}(t)\|^2 = \|\mathbf{E}(0)\|^2 + \|\mathbf{H}(0)\|^2, \quad \forall t > 0, \quad (5.1)$$

其中  $\|\cdot\|$  为 Sobolev 空间  $L^2(\Omega)$  的范数. 为了验证 HAIT-FDTD 是否保持这一物理性质, 我们计算在  $t = t^n$  时的电磁场能  $\|(\mathbf{E}^n, \mathbf{H}^n)\|$  (定义见 (5.1)), 然后与  $t = 0$  时刻的能量  $\|(\mathbf{E}^0, \mathbf{H}^0)\|$  比较, 检验是否满足 (5.1) 的离散形式:  $\|(\mathbf{E}^n, \mathbf{H}^n)\| = \|(\mathbf{E}^0, \mathbf{H}^0)\|$ .

表 4 列出了 HAIT-FDTD、ADI-FDTD 和 Yee-FDTD 的解在时刻  $T = 4$  和  $T = 8$  时的能量, 以及与初始能量  $\|(\mathbf{E}^0, \mathbf{H}^0)\|$  的差, 其中空间步长取相同的值,  $\Delta x = \Delta y = \Delta z = 1/50$ , ADI-FDTD 的时间步长为  $\Delta t = 1/50$ , Yee 格式的时间步长为  $\Delta t = 1/100$ , HAIT-FDTD 的时间步长和展开项的个数分别为  $\Delta t = 1/16$  和  $M = 47$ . 从表 4 中的数据可以看出, HAIT-FDTD 近似保持能量守恒性, 并且明显好于 ADI-FDTD 和 Yee-FDTD. 严格地说, ADI-FDTD 和 Yee-FDTD 不是守恒型格式. 例如, ADI-FDTD 的数值能量恒等式 (参见文献 [37]) 含有一些电场和磁场关于空间差商的摄动项, 这些摄动项导致能量差变大. Yee-FDTD 的计算结果差的部分原因是由  $(\mathbf{H}^{l-1/2} + \mathbf{H}^{l+1/2})/2$  近似代替  $\mathbf{H}^l$  引起的.

### 5.4 模拟散度为零的性质

在考虑的模型问题中, 电磁场具有散度为零的性质, 即对于任意  $t \geq 0$ , 有  $\nabla \cdot \mathbf{E}(t) = 0, \nabla \cdot \mathbf{H}(t) = 0$ . 为了观察 HAIT-FDTD 是否具有这一性质, 我们计算近似解  $\mathbf{E}^n$  和  $\mathbf{H}^n$  的下列能量模范数 (称为散度误差):

$$\|\nabla^h \cdot \mathbf{E}^n\| = \|\delta_x E_x^n + \delta_y E_y^n + \delta_z E_z^n\|, \quad \|\nabla^h \cdot \mathbf{H}^n\| = \|\delta_x H_x^n + \delta_y H_y^n + \delta_z H_z^n\|.$$

在 ADI-FDTD、Yee-FDTD 和 HAIT-FDTD 的计算中, 选取相同的空间步长:  $\Delta x = \Delta y = \Delta z = h = 0.04$ , 它们的时间步长分别为  $\Delta t = 1.2h$ 、 $\Delta t = 0.5h$  和  $\Delta t = 0.0625 = 1.5125h$ , 并且令  $M = 47$ . 记录这三种 FDTD 方法在  $T = t^n = n\Delta t = 8$  时刻的散度误差, 计算结果见表 5.

从表 5 中的数据可以看出, ADI-FDTD、Yee-FDTD 和 HAIT-FDTD 的散度误差都很小, 接近机器误差. 这说明这三种格式较好地保持了散度为零的物理性质.

表 4 HAIT-FDTD、ADI-FDTD 和 Yee-FDTD 给出的能量  $\|(\mathbf{E}^n, \mathbf{H}^n)\|$  以及与初始能量的差

能量 \ 格式	HAIT-FDTD	ADI-FDTD	Yee-FDTD
$\ (\mathbf{E}^n, \mathbf{H}^n)\ _{T=4}$	0.866025	5.101375	0.866022
$\ (\mathbf{E}^n, \mathbf{H}^n)\ _{T=8}$	0.866025	8.780704	0.866015
$\ (\mathbf{E}^n, \mathbf{H}^n)\ _{T=4} - \ (\mathbf{E}^0, \mathbf{H}^0)\ $	1.11E-16	4.24	-3.14E-6
$\ (\mathbf{E}^n, \mathbf{H}^n)\ _{T=8} - \ (\mathbf{E}^0, \mathbf{H}^0)\ $	2.13E-16	7.91	-1.08E-5

表 5 HAIT-FDTD、ADI-FDTD 和 Yee-FDTD 近似解的散度误差

Scheme \ Error	$\ \nabla^h \cdot \mathbf{E}^n\ $	$\ \nabla^h \cdot \mathbf{H}^n\ $
HAIT-FDTD	1.22E-13	1.29E-13
ADI-FDTD	2.02E-13	1.84E-13
Yee-FDTD	5.92E-14	6.17E-14

### 5.5 长时间计算和 CPU 时间

应用 HAIT-FDTD、ADI-FDTD 和 Yee-FDTD 计算从  $t = 0$  到  $t = 8$  不同时刻的相对误差, 记录  $t = 8$  时耗用的 CPU 时间, 其中空间步长相同, 均为  $\Delta x = \Delta y = \Delta z = h = 0.04$ , HAIT-FDTD 的时间步长为  $\Delta t = 1/16 = 0.0625$ ,  $M = 47$ , ADI-FDTD 和 Yee-FDTD 的时间步长分别为  $\Delta t = 0.01$  和  $\Delta t = 0.005$ , 计算结果见图 10 和表 6.

图 10 画出了在时间区间  $[0, 8]$  中, 相对误差关于时间的变化曲线. 从这三条曲线看出, 在长时间计算和选取时间大步长的情形下 (HAIT-FDTD 的时间步长分别等于 ADI-FDTD 和 Yee-FDTD 的时间步长的 6.25 和 12.5 倍, CFL 条件数大于 2.7), HAIT-FDTD 运行良好, 并且计算误差接近于 Yee-FDTD 的误差, 但小于 ADI-FDTD 的误差. 这符合 HAIT-FDTD 时间高精度和无条件稳定的特点, 同时也说明 HAIT-FDTD 适于长时间的计算.

表 6 列出了在  $t = 8$  时刻, HAIT-FDTD、ADI-FDTD 和 Yee 格式所耗用的计算时间 (单位为秒). 从表 6 中数据看出, HAIT-FDTD 所耗用的 CPU 时间接近于 Yee-FDTD 的计算时间, 但远远小于 ADI-FDTD 的计算时间. 在 HAIT-FDTD 的计算中, 尽管每一时间层需要很多次迭代来计算多项式的系数, 但是, 由于迭代方法是显式的, 主要的运算是加法, 所以, 较大的  $M$  值并没有带来过多的工作负担.

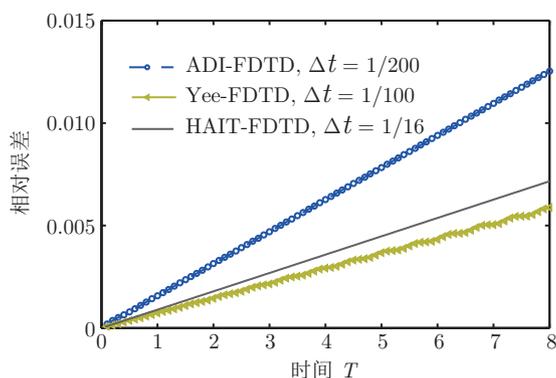


图 10 HAIT-FDTD、ADI-FDTD 和 Yee-FDTD 在不同时刻下的相对误差

表 6 在  $T = 8$  时, HAIT-FDTD、ADI-FDTD 和 Yee-FDTD 耗用的 CPU 时间

格式	$\Delta t$	CPU 时间 (秒)
HAIT-FDTD	$\Delta t = 0.0625, M = 47$	405.9
ADI-FDTD	$\Delta t = 0.0100$	2778.2
Yee-FDTD	$\Delta t = 0.0050$	384.9

表 7 当  $T = 1$ 、 $h = 0.02$  和  $\Delta t = h/2$  时, 不同的  $M$  取值下, HAIT-FDTD 的相对误差

多项式阶数	$M = 2$	$M = 3$	$M = 17$	$M = 37$	$M = 47$
误差	4.7E+7	8.94E-4	8.95E-4	8.95E-4	8.95E-4
CPU 时间	8.20	27.88	66.67	145.12	183.07

注 5.1 (不同  $M$  的取值下的误差和 CPU 时间) 表 7 给出了在小时间步长、 $\Delta t = 0.01$ 、 $h = 0.02$  和手动选取不同  $M$  的情形下, HAIT-FDTD 的相对误差和 CPU 时间. 从表中可以看出, 当  $M$  由 3 逐渐变大时, HAIT-FDTD 的误差变化不大, 这说明  $M$  的大小对误差的影响较小, 同时  $M$  的增大没有对 CPU 时间带来非线性的增长. 另外, 从表 3 和 7 看出, 当时间步长变小时, HAIT-FDTD 的误差与 Yee-FDTD 仍然同阶, 误差系数比 Yee-FDTD 的误差系数大. 但是, 对于耗散问题, 计算发现 HAIT-FDTD 误差比 Yee-FDTD 的小, 详细的讨论在此省略.

## 6 总结和讨论

利用 Taylor 多项式逼近和多项式理论, 本文提出了离散 Maxwell 方程时间变量的一种新方法. 将新方法与时空离散的中心差分方法结合, 我们提出了三维 Maxwell 方程的一种新有限差分方法 (HAIT-FDTD). 该方法显式计算, 关于空间二阶精度, 关于时间可达任意阶精度. 通过 Fourier 方法, 我们研究了稳定性和数值弥散, 证明了当 Taylor 多项式的次数  $M$  或展开式的项数足够大时, HAIT-FDTD 稳定, 并给出了确定  $M$  的一种方法. 数值实验验证了稳定性和数值弥散分析, 并发现 HAIT-FDTD 的数值弥散误差小于 Yee 格式和 ADI-FDTD 的相应误差. 在模拟一个波导问题的实验中, 我们验证了 HAIT-FDTD 的有效性、收敛阶和不受 CFL 条件限制的稳定性, 同时发现 HAIT-FDTD 能够保持波导问题的能量守恒性和电磁场散度为零的物理性质, 适于长时间计算, 兼具 Yee 格式的优点 (显式计算, 易于实现和编程) 和 ADI-FDTD 方法的优点 (无条件稳定).

HAIT-FDTD 是一种新 FDTD 方法, 关于这种方法研究刚刚开始, 有很多工作和问题需要完成与探讨. 例如, 如何把 HAIT-FDTD 方法与吸收边界条件结合, 求解无界问题和散射问题, 如果事先给定  $\Delta t$ , 如何确定一个最优的  $M$ , 使得计算稳定且具有比较小的舍入误差等问题. 同时, 本文的时间离散方法容易与高阶空间离散方法结合, 这些方法也可用于其他发展方程的数值求解问题.

致谢 审稿人给本文提出了许多好的意见和建议, 为文章的修改和完善做出了很多工作, 在此表示衷心感谢.

## 参考文献

- 1 Taflov A, Hagness S C. Computational Electrodynamics: The Finite-Difference Time-Domain Method, 2nd ed. Boston: Artech House, 2000
- 2 Monk P. Finite Element Methods for Maxwell's Equations. New York: Oxford University Press, 2003
- 3 Li J, Huang Y. Time-Domain Finite Element Methods for Maxwell's Equations in Metamaterials. Berlin-Heidelberg: Springer, 2013

- 4 王长清. 现代计算电磁学基础. 北京: 北京大学出版社, 2004
- 5 吕英华. 计算电磁学的数值方法. 北京: 清华大学出版社, 2006
- 6 Yee K. Numerical solution of initial boundary value problems involving Maxwell's equations in isotropic media. *IEEE Trans Antennas and Propagation*, 1966, 14: 302–307
- 7 Engquist B, Majda A. Absorbing boundary conditions for the numerical simulation of waves. *Math Comp*, 1977, 31: 629–651
- 8 Mur G. Absorbing boundary conditions for the finite-difference approximation of the time-domain electromagnetic-field equations. *IEEE Trans Electromagnet Compat*, 1981, 23: 377–382
- 9 Berenger J. A perfectly matched layer for the absorption of electromagnetic waves. *J Comput Phys*, 1994, 114: 185–200
- 10 Ziolkowski R. W. Maxwellian material based absorbing boundary conditions. *Comput Methods Appl Mech Engrg*, 1999, 169: 237–262
- 11 Petropoulos P G, Zhao L, Cangellaris A C. A reflectionless sponge layer absorbing boundary condition for the solution of Maxwell's equations with high-order staggered finite difference schemes. *J Comput Phys*, 1998, 139: 184–208
- 12 Chew W C, Weedon W H. A 3D perfectly matched medium from modified Maxwell's equations with stretched coordinates. *Microw Opt Tech Lett*, 1994, 7: 599–604
- 13 Taflove A, Brodwin M E. Numerical solution of steady-state electromagnetic scattering problems using the time-dependent Maxwell's equations. *IEEE Trans Microwave Theory Tech*, 1975, 23: 623–630
- 14 Monk P, Süli E. A convergence analysis of Yee's scheme on nonuniform grids. *SIAM J Numer Anal*, 1994, 31: 393–412
- 15 Gao L P, Zhang B. Stability and superconvergence analysis of the FDTD scheme for the 2D Maxwell equations in a lossy medium. *Sci China Math*, 2011, 54: 2693–2712
- 16 Li J, Shields S. Superconvergence analysis of Yee scheme for metamaterial Maxwell's equations on non-uniform rectangular meshes. *Numer Math*, 2016, 134: 741–781
- 17 Fang J. Time domain finite difference computation for Maxwell's equations. PhD Thesis. Berkeley: University of California, 1989
- 18 Young J L, Gaitonde D, Shang J S. Toward the construction of a fourth-order difference scheme for transient EM wave simulation: Staggered grid approach. *IEEE Trans Antennas and Propagation*, 1997, 45: 1573–1580
- 19 Yefet A, Turkel E. Fourth order compact implicit method for the Maxwell equations with discontinuous coefficients. *Appl Numer Math*, 2000, 33: 125–134
- 20 Xie Z, Chan C H, Zhang B. An explicit fourth-order staggered finite-difference time-domain method for Maxwell's equations. *J Comput Appl Math*, 2002, 147: 75–98
- 21 Xie Z, Chan C H, Zhang B. An explicit fourth-order orthogonal curvilinear staggered-grid FDTD method for Maxwell's equations. *J Comput Phys*, 2002, 175: 739–763
- 22 Zheng F, Chen Z, Zhang J. Toward the development of a three-dimensional unconditionally stable finite-difference time-domain method. *IEEE Trans Microwave Theory Tech*, 2000, 48: 1550–1558
- 23 Namiki T. 3-D ADI-FDTD method-unconditionally stable time-domain algorithm for solving full vector Maxwell's equations. *IEEE Trans Microwave Theory Tech*, 2000, 48: 1743–1748
- 24 Chung Y S, Sarkar T K, Jung B H, et al. An unconditionally stable scheme for the finite-difference time-domain method. *IEEE Trans Microwave Theory Tech*, 2003, 51: 697–704
- 25 Wei X K, Shao W, Ou H, et al. An efficient higher-order PML in WLP-FDTD method for time reversed wave simulation. *J Comput Phys*, 2016, 321: 1206–1216
- 26 Gao L, Zhang B, Liang D. The splitting finite-difference time-domain methods for Maxwell's equations in two dimensions. *J Comput Appl Math*, 2007, 205: 207–230
- 27 Chen W, Li X, Liang D. Symmetric energy-conserved splitting FDTD scheme for the Maxwell's equations. *Commun Comput Phys*, 2009, 6: 804–825
- 28 Chen W, Li X, Liang D. Energy-conserved splitting finite-difference time-domain methods for Maxwell's equations in three dimensions. *SIAM J Numer Anal*, 2010, 48: 1530–1554
- 29 Liang D, Yuan Q. The spatial fourth-order energy-conserved S-FDTD scheme for Maxwell's equations. *J Comput Phys*, 2013, 243: 344–364
- 30 Kong L, Hong J, Zhang J. Splitting multisymplectic integrators for Maxwell's equations. *J Comput Phys*, 2010, 229: 4259–4278
- 31 Sun Y, Tse P S P. Symplectic and multisymplectic numerical methods for Maxwell's equations. *J Comput Phys*, 2011, 230: 2076–2094
- 32 Cai J, Hong J, Wang Y, et al. Two energy-conserved splitting methods for three-dimensional time-domain Maxwell's equations and the convergence analysis. *SIAM J Numer Anal*, 2015, 53: 1918–1940
- 33 Su H, Li S. Energy/dissipation-preserving Birkhoffian multi-symplectic methods for Maxwell's equations with dissipa-

- tion terms. *J Comput Phys*, 2016, 311: 213–240
- 34 Douglas J, Rachford H H. On the numerical solution of heat conduction problems in two and three space variables. *Trans Amer Math Soc*, 1956, 82: 421–439
- 35 Peaceman D W, Rachford H H Jr. The numerical solution of parabolic and elliptic differential equations. *J Soc Ind Appl Math*, 1955, 3: 28–41
- 36 Zheng F, Chen Z. Numerical dispersion analysis of the unconditionally stable 3-D ADI-FDTD method. *IEEE Trans Microwave Theory Tech*, 2001, 49: 1006–1009
- 37 Gao L P, Zhang B. Optimal error estimates and modified energy conservation identities of the ADI-FDTD scheme on staggered grids for 3D Maxwell's equations. *Sci China Math*, 2013, 56: 1705–1726

## An explicit finite difference time domain method with high order accuracy in time for Maxwell's equations

Ren'gang Shi & Liping Gao

**Abstract** Time discretization is an important research topic, concerning with stability, convergence, accuracy and computational complexity. In this paper, a new explicit time marching method with any high accuracy and ease of combining with spatial discretization methods is proposed. By this method and central difference methods an explicit finite difference time domain method (called HAIT-FDTD) for three dimensional Maxwell's equations is proposed and shown to be second order accurate in space and  $M$ -th order in time, where  $M$  is polynomial degree and can be chosen to be any integer greater than three. By Fourier method it is proved that HAIT-FDTD is stable, and independent of the CFL number when  $M$  is large enough, and that the numerical dispersion relation of HAIT-FDTD converges to the one in theory. Numerical experiments to compute amplification factors and numerical dispersion error, and to solve a wave guide problem are carried out. Experimental results confirm the analysis in theory and show that HAIT-FDTD has the following advantages: (i) numerical dispersion error is less than that of Yee scheme and ADI-FDTD; (ii) it is approximately energy conserving and divergence free; (iii) it has the merits of Yee scheme and ADI-FDTD such as easy implementation and taking relatively large step size; (iv) it is efficient in a long time computation and it saves much CPU time than ADI-FDTD.

**Keywords** Maxwell's equations, finite difference time domain, stability, numerical dispersion, high accuracy, Taylor polynomial

**MSC(2010)** 65M06, 65M12, 65Z05

**doi:** 10.1360/SCM-2017-0342