

用CAD技术实现复杂三维粒子模拟建模

周俊, 廖臣, 刘大刚, 吴振华, 张开春

(电子科技大学物理电子学院 成都 610054)

【摘要】将计算机辅助设计技术用于粒子模拟建模,能极大地提高粒子模拟方法的实用性。在对复杂真空电子学微波源、毫米波源和太赫兹源的建模需求分析基础上,采用面向对象和模块化设计方法,实现了三维粒子模拟CAD建模系统。该系统可以对各类复杂器件进行可视化建模,并生成提供给核心计算程序使用的器件参量描述文件。使用该系统分别在圆柱坐标系和直角坐标系下建模,模拟了磁绝缘线振荡器和扩展相互作用振荡器。结果表明,三维粒子模拟CAD建模系统具有很好的实用性。

关键词 计算机辅助设计; 扩展相互作用振荡器; 磁绝缘线振荡器; 粒子模拟

中图分类号 O462.4; TP391.72

文献标识码 A doi:10.3969/j.issn.1001-0548.2012.02.014

Using CAD Technique to Realize the Complex Three-Dimensional Modeling for PIC Simulation

ZHOU Jun, LIAO Chen, LIU Da-gang, WU Zhen-hua, and ZHANG Kai-chun

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

Abstract Expanding application of computer-aided design (CAD) technique to the particle-in-cell (PIC) simulation will greatly make a large space towards the practicability of PIC method. Using object-oriented and modularized design methods, a three-dimensional CAD system for PIC simulation is realized based on the analysis of the requirement of modeling complex vacuum electronic microwave sources, millimeter-wave sources, and terahertz sources. The CAD system can visually model various complex devices and generate the parameter description file for the kernel calculation. Using this system, a magnetically insulated transmission line oscillator (MILO) and an extended interaction oscillator (EIO) are modeled and simulated in cylindrical and Cartesian coordinates respectively. The results show the practicability of the three-dimensional CAD system for PIC simulation.

Key words computer-aided design technology; extended interaction oscillator; magnetically insulated transmission line oscillator; PIC simulation

基于真空电子学的微波源、毫米波源和太赫兹源研究对理论和实际都有重大的意义。但由于这些器件中许多物理问题均为非线性耦合问题,仅仅依靠传统的解析方法和线性分析很难得到准确的结果。特别是对于具有复杂几何结构和工作条件的器件,只能借助于数值方法。

粒子模拟(particle-in-cell, PIC)方法^[1-3]是研究带电粒子与电场和磁场相互作用过程的重要数值模拟方法,在很多方面显示出独特的优越性。尤其是在解决具有复杂结构器件的注-波相互作用问题时,其优点更为突出。由于粒子模拟方法需要将模拟计算在空间上和时间上离散化,并考虑各种不同的初始条件和边界条件,才能进行完整的模拟计算。因此,

粒子模拟计算程序需要器件的参量描述文件,其中必须包括模型的网格离散化、结构组成、初始条件和边界条件等信息。为了达到实用,有时模拟控制、实时诊断和数据后处理等信息也是必不可少的。将以上实用信息生成的工作称为器件的粒子模拟建模。

CAD(computer-aided design)软件技术可以用来完成各种复杂的建模工作,并且可以提供友好的可视化用户界面,大大减少用户的工作量,降低工作的复杂程度并减少错误^[4]。粒子模拟方法和CAD技术的结合是粒子模拟方法走向实用化的一个重要步骤。文献[5]基于面向对象的CAD建模系统设计思路,实现了三维粒子模拟CAD建模系统。该系统可以对各类复杂器件进行可视化建模,并生成提供给

收稿日期: 2010-03-17; 修回日期: 2011-12-02

基金项目: 中央高校基本科研业务费(ZYGX2011J037)

作者简介: 周俊(1980-),男,博士,主要从事电磁粒子模拟方法方面的研究。

核心计算程序使用的器件参量描述文件。

本文运用CAD技术分别建模, 模拟了微波波段的磁绝缘线振荡器(MILO)和太赫兹波段的扩展相互作用振荡器(EIO), 验证了三维粒子模拟CAD建模系统的实用性。

1 粒子模拟基本算法

粒子模拟的基本思路是^[6]: 先给定初始条件, 即在一定的电磁场环境中, 有一定数量的带电粒子具有初始位置和速度; 粒子和场从初始条件出发, 按时间顺序推进, 电磁场的更新和粒子的推动交替进行。在每一步迭代中, 根据离散网格上的场值得到连续空间中粒子位置的场, 从而推进粒子运动, 粒子的运动又反过来对场方程中的源项(电荷密度和电流密度)产生影响, 进而更新了场值, 使循环继续下去。在计算过程中, 还需要处理各种不同的场边界条件和粒子边界条件。如果考虑碰撞, 需要引入蒙特卡洛碰撞(Monte Carlo collision)方法。

电磁场的求解基于Maxwell方程组, 则有:

$$\nabla \cdot \mathbf{D} = -\rho \quad (1)$$

$$\nabla \times \mathbf{E} = -\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} \quad (2)$$

$$\nabla \times \mathbf{H} = \frac{\partial \mathbf{D}}{\partial t} + \mathbf{J} \quad (3)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{B} = 0 \quad (4)$$

式中, \mathbf{E} 为电场强度矢量; \mathbf{H} 为磁场强度矢量; $\mathbf{D} = \varepsilon_0 \mathbf{E}$ 为电位移矢量; $\mathbf{B} = \mu_0 \mathbf{H}$ 为磁感应强度矢量; ρ 为空间电荷密度(取绝对值); \mathbf{J} 为电流密度矢量; ε_0 为真空介电常数; μ_0 为真空磁导率。

带电粒子的求解基于以下运动方程:

$$\mathbf{F} = \frac{d\mathbf{p}}{dt} = q(\mathbf{E} + \mathbf{v}\mathbf{B}) \quad (5)$$

$$\mathbf{v} = \frac{d\mathbf{x}}{dt} = \frac{\mathbf{p}}{m\gamma} \quad (6)$$

式中, \mathbf{E} 和 \mathbf{B} 分别为粒子所在位置的电场强度矢量和磁感应强度矢量; \mathbf{F} 为粒子所受的力矢量; \mathbf{p} 为粒子动量矢量; \mathbf{v} 为粒子速度矢量; \mathbf{x} 为粒子位移矢量; m 为粒子质量; γ 为相对论因子。

粒子运动产生的电流密度矢量可定义为:

$$\mathbf{J} = -\rho\mathbf{v} \quad (7)$$

另外, 由于空间电荷既不会凭空产生, 也不会凭空消失, 即空间电荷守恒, 因此需要满足以下电流连续性方程:

$$\nabla \cdot \mathbf{J} = \nabla \cdot (\rho\mathbf{v}) = 0 \quad (8)$$

由以上方程之间的联系可知, 在时域有限差分

(FDTD)方法^[7]基础上, 可以得到以下的基本求解步骤: 在每一个时间步, 根据式(3)更新电场值, 根据式(2)更新磁场值, 根据式(5)计算粒子受力并更新粒子动量, 根据式(6)计算粒子速度并更新粒子位置, 根据式(7)计算粒子运动产生的电流。式(1)、式(4)和式(8)可作为数值计算中的准确性判据和校正处理手段。

2 三维粒子模拟CAD建模系统

三维粒子模拟CAD建模系统分为基本设置、算法设置、结构建模、观测设置、模拟控制和数据处理6个基本功能模块, 用户界面层、数据管理层和计算接口层3个主要系统层次, 各个基本功能模块和主要系统层次都具有各自独特的属性和数据操作, 并且独立性强, 分层明显, 利于今后的软件维护和功能扩展^[5]。目前, 已经实现了三维直角坐标系和圆柱坐标系下的电磁粒子模拟CAD建模功能, 基本上能满足绝大部分复杂器件的建模需要。

用三维粒子模拟CAD建模系统进行器件建模工作的步骤如下:

1) 基本设置和算法选定。

为了给建模和模拟过程作铺垫, 需要先进行一些基本设置, 主要包括: 给出模型的描述信息, 选择坐标系类型和物理单位, 指定模拟区域和空间网格步长, 定义一系列可能会用到的变量和函数, 创建一系列可能会用到的材料和粒子类型。另外, 为了保证模拟准确, 还需要针对不同情况选定合适的算法, 如时域电磁场计算中用到的数值噪声滤波算法等。

2) 三维器件结构建模。

灵活运用CAD建模系统提供的各种形状和属性, 先构建出由多个实心导体区域和介质区域组成的器件基本结构。然后添加合适的源与边界, 如粒子发射源、电磁场激励源、吸收边界、对称边界等, 这些源与边界和基本结构一起, 保证了整个模拟区域是封闭的。另外, 由于实际器件可能处于某一电磁场环境中, 或者器件内部可能有电离气体或等离子体存在, 需要设置合适的初始场环境和电荷分布环境。

3) 实时观测和数据处理设置。

为了能充分描述所模拟的物理过程, 需要输出多种不同类型的物理量, 以便进行实时观测和后续数据处理。因此, 对观测和数据处理方面的设置也是必不可少的。实时观测包括对等位图、矢量图、

粒子轨迹图和粒子相空间图等图像的观测,以及对时域曲线、频域曲线和空间分布曲线的显示。数据处理包括对上述所有图像和曲线数据的导出。

4) 生成器件的粒子模拟参量描述文件。

当以上3个步骤完成后,就可得到进行粒子模拟所需的信息。根据这些信息,计算接口层会自动生成核心计算程序需要的器件参量描述文件。通过模拟控制模块启动核心计算程序后,核心计算程序会自动读取参量描述文件,开始模拟计算。

3 系统的应用实例及讨论

为了验证三维粒子模拟基本算法的正确性和CAD建模系统的实用性,本文分别对一种磁绝缘线振荡器(MILO)和扩展互作用振荡器(EIO)进行了建模和模拟。前者工作于微波波段,后者工作于太赫兹波段;前者是在圆柱坐标系下建立的模型,后者是在直角坐标系下建立的模型。

3.1 磁绝缘线振荡器(MILO)

磁绝缘线振荡器(MILO)是正交场器件,又称为“M”型器件。本文参考文献[8],在圆柱坐标系下建立器件的三维计算模型,如图1所示。阴极和阳极筒的半径分别为5.75 cm和14.3 cm。慢波结构由7个厚为1.28 cm、间距为3.84 cm的环形叶片组成。前3个叶片是扼流叶片,内半径为7.6 cm。接下来3个叶片是主慢波叶片,内半径为8.6 cm。最后1个叶片是提取叶片,可以认为是输出腔的一部分,它的内半径为9.65 cm,比其他叶片的内半径稍大,以此保证间隙电场和同轴输出结构的良好匹配。负载区由阴极和同轴输出结构的内导体(内外半径分别为8.6 cm和9.65 cm)组成。同轴输出结构的内导体则是通过金属支撑杆连接到阳极筒。

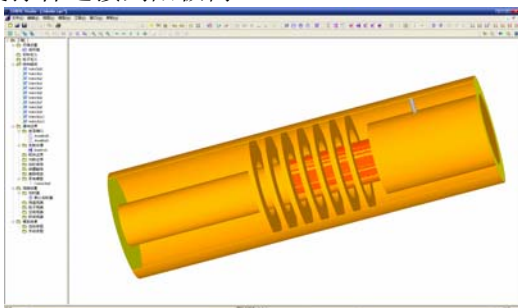


图1 MILO的三维模型图

为了模拟器件的工作过程,需要在左端同轴波导端口处输入一个横电磁(TEM)波,即加载一个直流电压,电压从零值开始增加,经过一段很短时间的上升沿,达到稳定。在电压达到稳定之前,阴极表面的电场已达到发射阈值,从而导致空间电荷限

制流发射。电子发射区域位于第一个叶片之后的阴极区域。

磁绝缘线振荡器中电子的运动表现为3个阶段:

1) 初始电子没有被磁绝缘,此阶段负载电流还不足以在慢波结构(SWS)区产生使电子自磁绝缘的角向磁场,所以电子直接径向轰击阳极叶片流到阳极,它不能激励微波场。

2) 电子被绝缘,但是电磁场还不足以产生好的轮辐。

3) 非线性稳态,电子以轮辐的形式在阴阳极中间漂移,已达到非线性稳定态,在慢波结构后半部的叶片区产生稳定的电子轮辐。这时电子轮辐不是从被调制的初始均匀流产生的,而是由于强电磁场促使从阴极发射的电子形成轮辐。

第一阶段和第三阶段的三维电子分布分别如图2a和图2b所示。在图中,为了充分显示出内部结构和电子分布,忽略了外导体阳极筒的显示。从图2a可以看出,第一阶段负载电流并不足以产生能使电子自磁绝缘的角向磁场,所有的电子都是径直飞向阳极和慢波结构,并没有微波输出。从图2b可以看出,第三阶段由于阴极表面的强电场,微波提取区的阴极部分已发射电子,负载电流产生的角向磁场使慢波结构区的电子自磁绝缘。同时,阴极表面的强电场会使阴极继续发射电子。由于电场和磁场的共同作用,形成了很好的电子轮辐,当电子轮辐漂移到阴阳极间隙,部分电子势能会转化成微波能,从而产生稳定的微波输出。

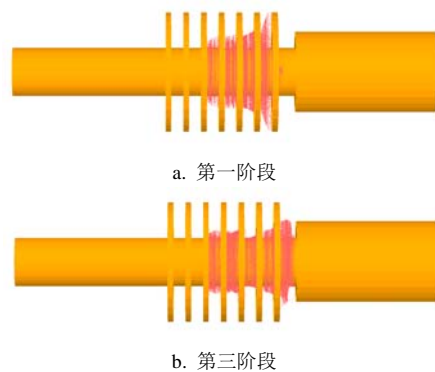


图2 MILO的三维电子分布图

部分模拟结果如图3所示。输入功率随时间变化的曲线如图3a所示,图中也标出了前面所叙述的电子运动的3个阶段的大致起止时刻。在模拟中,输入端口的电压从零时刻的零值经过5 ns的上升沿时间达到1.8 MV,之后维持稳定。相应地,输入功率先是线性增加,直到阴极发射电子,之后阴阳极击穿,导致输入功率突然下降。然后,由于自磁绝缘和连

续稳定的微波输出, 输入功率也维持稳定。稳定后的输入功率约为28 GW。输出功率随时间变化的曲线如图3b所示, 同样也标出了前面叙述的电子运动的3个阶段的大致起止时刻。稳定后的平均输出功率约为3 GW。根据输出功率和输入功率之比, 可知该器件的效率约为10.7%, 该结果与文献[8]的计算结果基本一致。输出电场的频谱如图3c所示。可以看出, 输出微波的主频为1.15 GHz。以上的结果与文献[8]中用TWOQUICK软件模拟的结果基本一致。

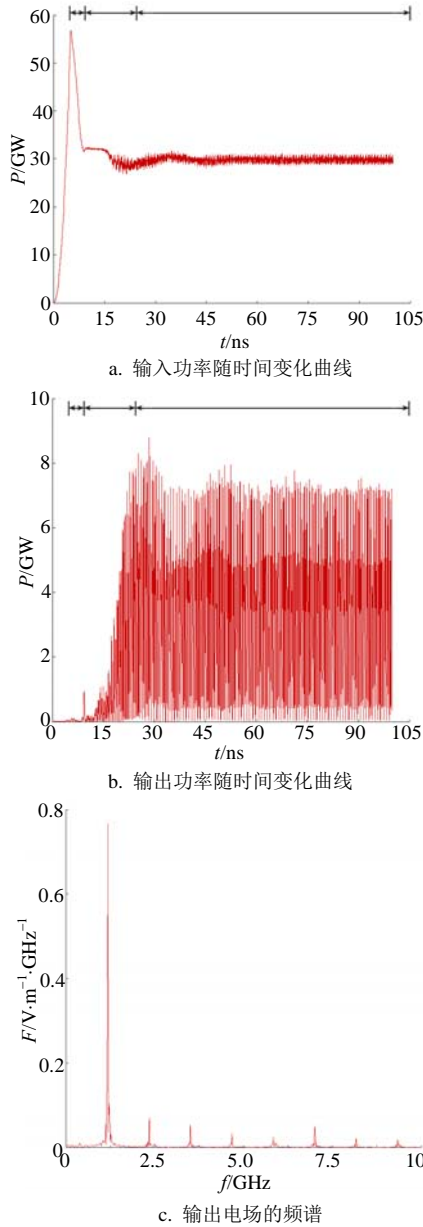


图3 MILO的模拟结果

3.2 扩展相互作用振荡器(EIO)

扩展相互作用振荡器(EIO)是一种较重要的真空电子学太赫兹辐射源^[9]。本文模拟了0.1 THz带状注矩形周期加载结构EIO。由于该器件是非常复杂的三维非对称结构, 所以在三维直角坐标系下建立器件

模型, 如图4所示。为了能清晰地显示内部结构, 在该图中使用中间半剖面显示。从图中可以看出, 耦合腔链慢波线主要由8段矩形周期加载结构组成, 并且都在中间开了矩形孔, 以作为带状电子注的通道。带状电子注从慢波线的一端输入, 从另一端输出, 中途运动的过程中, 在经过慢波线间隙时, 与电磁波发生相互作用。而这些慢波线间隙又不是相互独立的, 它们由慢波线两边的两个腔体相互连通, 共同组成耦合腔链。在其中一个腔体外壁上开一个输出窗, 用于向外辐射太赫兹波。该EIO采用带状电子束作为驱动, 与矩形腔体中模式为TM₃₁的电磁波进行相互作用, 在提高工作效率和工作频率上有较好的表现。EIO的整个器件尺寸为2.5 mm×8.6 mm×7.45 mm, 输入的带状电子注长和宽分别为2 mm和0.3 mm, 电流密度为1 A/mm², 电子注电压为17 kV^[10]。

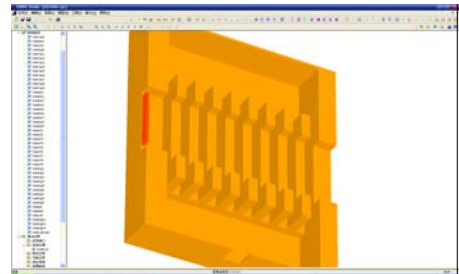


图4 带状注矩形周期加载结构EIO的三维模型图

电子分布如图5所示。电子的二维实空间分布图如图5a所示, 电子注已形成良好的群聚。电子纵向动量沿纵向坐标变化关系的相空间图, 如图5b所示, 其调制深度已较理想。三维电子分布如图5c所示, 与图5a相对应。在图中, 为了能清晰显示电子注的群聚效果, 忽略了所有外导体的显示。

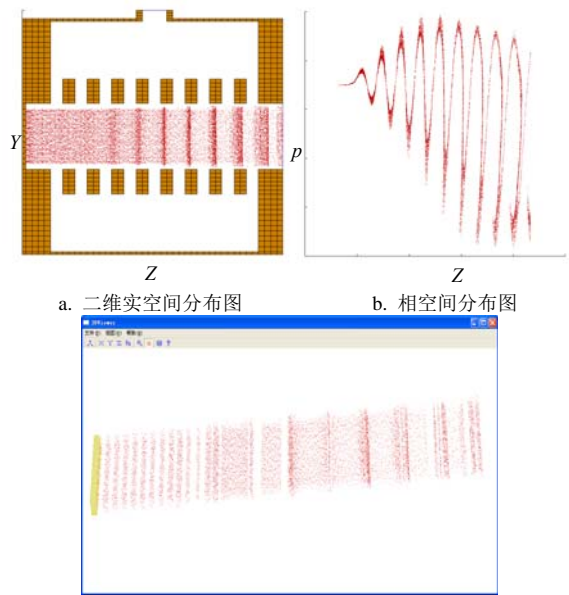
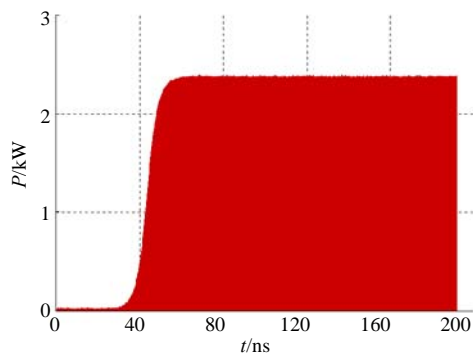
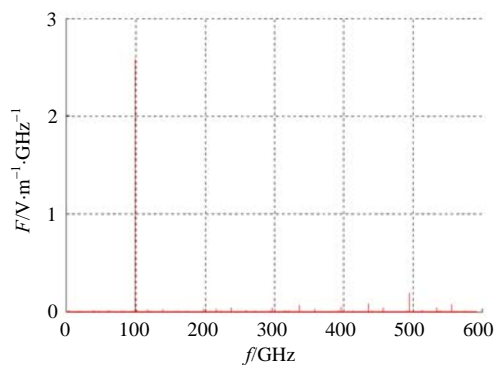


图5 EIO的电子分布图

部分模拟结果如图6所示。输出功率随时间变化如图6a所示,其输出平均功率在1 kW以上,与输入的电子注参数作比较,可知其效率达到了13.9%。输出电场频谱如图6b所示,频率基本符合所设计的0.1 THz。以上的结果与国外商业软件MAGIC^[11]模拟的结果基本一致。



a. 输出功率随时间变化曲线



b. 输出电场的频谱

图6 EIO的模拟结果

4 结 论

运用CAD技术完成复杂器件的三维粒子模拟建模工作是粒子模拟方法走向实用的一个重要的步骤。本文基于对复杂真空电子学微波源、毫米波源和太赫兹源的建模需求,采用面向对象方法实现了三维粒子模拟CAD建模系统。该系统可以对各类复杂器件进行可视化建模,并生成提供给核心计算程序使用的器件参量描述文件。该工作可望将国内目前的粒子模拟方法的实用化水平提高到一个新的阶段。

参 考 文 献

- [1] HOCKNEY R W, EASTWOOD J W. Computer simulation using particles[M]. Bristol and Philadelphia: Adam Hilger, 1988.
- [2] BIRDSALL C K, LANGDON A B. Plasma physics via Computer simulation[M]. New York: McGraw-Hill, 1991.
- [3] MATSUMOTO H, OMURA Y. Computer space plasma physics: Simulation techniques and software[M]. Tokyo: Terra Scientific Publishing Company, 1993.
- [4] 李明之, 刘友健, 王长清, 等. 用CAD技术实现复杂目标FDTD方法几何-电磁建模[J]. 电子学报, 1999, 27(3): 131-133.
LI Ming-zhi, LIU You-jian, WANG Chang-qing, et al. Using CAD technique to realize the geometric-electromagnetic modeling of the FDTD calculation of complex objects[J]. Acta Electronica Sinica, 1999, 27(3): 131-133.
- [5] 周俊, 刘大刚, 刘盛纲. 面向对象的粒子模拟CAD建模系统[J]. 电子学报, 2008, 36(3): 556-561.
ZHOU Jun, LIU Da-gang, LIU Sheng-gang. Object-oriented design of CAD system for PIC simulation[J]. Acta Electronica Sinica, 2008, 36(3): 556-561.
- [6] VERBONCOEUR J P. Particle simulation of plasmas: review and advances[J]. Plasma Physics and Controlled Fusion, 2005, 47(4): A231-A260.
- [7] YEE K S. Numerical solution of initial boundary value problems involving Maxwell's equations in isotropic media [J]. IEEE Transactions on Antennas Propagation, 1966, 14(3): 302-307.
- [8] LEMKE R W, CALICO S E, CLARK M C. Investigation of a load-limited, magnetically insulated transmission line oscillator (MILO)[J]. IEEE Transactions on Plasma Science, 1997, 25(2): 364-374.
- [9] CHEN L M, GUO H Z, CHEN H Y, et al. An extended interaction oscillator based on a complex resonator structure [J]. IEEE Transactions on Plasma Science, 2000, 28(3): 626-632.
- [10] WU Z H, ZHANG K C, LIU S G. Sheet-beam 0.1THz extended interaction oscillator[C]//Technical Digest of the International Symposium on Photoelectronic Detection and Imaging. [S.l.]: SPIE, 2009.
- [11] GOPLEN B, LUDEKING L, SMITHE D, et al. User-configurable MAGIC for electromagnetic PIC calculations [J]. Computer Physics Communications, 1995, 87(1): 54-86.

编辑 黄 莘