

三阶矢量有限元方法精确计算轴对称谐振腔高阶模 *

曹亮^{1,2} 黄文会¹

(清华大学工程物理系 北京 100084)

(清华大学数学科学系 北京 100084)

摘要 为了进一步提高数值求解谐振腔高阶模的精度,本文提出了三阶矢量有限元方法,并针对二阶矢量有限元轴对称谐振腔高阶模计算程序 Cafe 对曲线边界的计算能力较差和计算速度较慢的缺点做了改进。在这些改进的基础上编制了三阶矢量有限元轴对称谐振腔高阶模计算程序 meshmatrix3,得到了很好的结果。

关键词 三阶矢量有限元方法 高阶模 计算精度 曲边三角元

1 引言

近年来,各种超短波长辐射光源和下一代直线对撞机展现出诱人的科研和应用前景,获得了广泛的关注和发展。它们都要求加速器提供高功率、短脉冲、低发射度的电子束流,这对加速结构的设计和加工提出了很高的要求,因此加速结构中电磁场的精确计算对设计加工的指导作用显得越来越重要。同时,计算机性能的快速提高也为高精度、复杂结构的数值计算奠定了坚实的基础。

矢量有限元方法由于能够比较好地处理一般有限元中的伪根问题,在目前的电磁场计算中应用很广。SLAC 在 20 世纪 90 年代开发了基于矢量有限元的 OMEGA2 和 OMEGA3 程序,获得了很好的结果^[1]。但 OMEGA 系列程序要求运行在具有超大内存的并行机上,难以推广使用。国内韦石博士采用二阶矢量有限元法编制了运行在普通 PC 机上的轴对称谐振腔电磁场计算程序 Cafe^[2],为后续工作奠定了良好的基础。在利用该程序的过程中,发现:该程序在对谐振腔的网格划分中采用直线段近似曲线边界,限制了计算精度;在计算过程中,必须计算出所有的模式,不能灵活选择感兴趣的模式范围,浪费了计算时间。另外很多时候,尤其对于较高的模式,计算精度仍然不够。

针对这些问题,探索了一些改进方法:在网格划分中采用曲边三角元拟合曲线边界,提高结构离散精度;使用稀疏矩阵技术和 RCM 算法节省存储空间;采用 Shifted Lanczos 算法求解广义特征值问题,可以自由选择求解的模式范围,节省了计算时间;构造三阶矢量有限元基函数,降低截断误差。基于这些措施,编写了三阶矢量有限元轴对称谐振腔高阶模计算程序 meshmatrix3,获得预期的效果。

本文将首先介绍上述改进的具体实现方法,然后以球型腔为例,给出了二阶矢量有限元程序 meshmatrix 和三阶矢量有限元程序 meshmatrix3 的比较计算结果。

2 基于三阶矢量有限元的轴对称谐振腔求解

2.1 Maxwell 方程及其变分公式

在谐振腔内,电场 E 满足的 Maxwell 方程为

$$\begin{aligned} \nabla \times (\mu^{-1} \nabla \times E) &= \omega^2 \epsilon E \text{ in } \Omega, \\ \nabla \cdot (\epsilon E) &= 0 \text{ in } \Omega, \\ \hat{n} \times E &= 0 \text{ on } \Gamma_{\text{electric(metal)}}, \\ \hat{n} \times (\nabla \times E) &= 0 \text{ on } \Gamma_{\text{magnetic(space)}}, \end{aligned} \quad (1)$$

2004-12-24 收稿

* 国家自然科学基金(10475047)资助

其中 Ω 为谐振腔的内部空间, Γ_{electric} 是电边界, Γ_{magnetic} 是磁边界. 对于轴对称结构, 在柱坐标系中, 根据电场的对称性, 用矢量有限元法求解此问题的泛函如下^[2]:

$$\begin{aligned} F'(E) = & \int_{\tilde{\Omega}} \rho (\nabla_{\perp} \times E_t)^* \cdot (\nabla_{\perp} \times E_t) + \\ & \frac{1}{\rho} (mE_t - \nabla_{\perp} \tilde{E}_{\phi})^* \cdot (mE_t - \nabla_{\perp} \tilde{E}_{\phi}) - \\ & \epsilon \mu \omega^2 \left(\rho E_t^* \cdot E_t + \frac{1}{\rho} \tilde{E}_{\phi}^* \cdot \tilde{E}_{\phi} \right) d\rho dz, \end{aligned} \quad (2)$$

其中 $\tilde{E}_{\phi} = -i\rho E_{\phi}$, $E_t = (E_z, E_{\rho}, 0)$, $\nabla_{\perp} = \left(\frac{\partial}{\partial z}, \frac{\partial}{\partial \rho}, 0 \right)$. 因此, 要从(2)出发求解谐振腔的模式需要使用标量和矢量混合的有限元方法.

2.2 三阶矢量有限元法基函数的构造

为方便, 把 $z\phi$ 坐标系下的三角元 Ω_e 变换到 rs 坐标系下的标准三角元 $\hat{\Omega}$ 上, $\hat{\Omega}$ 由 $r=0, s=0, r+s=1$ 围成, 如图 1 所示. 令 $t=1-r-s$, 将在标准三角元 $\hat{\Omega}$ 上构建三阶标量和矢量基函数, 如图 2 所示.

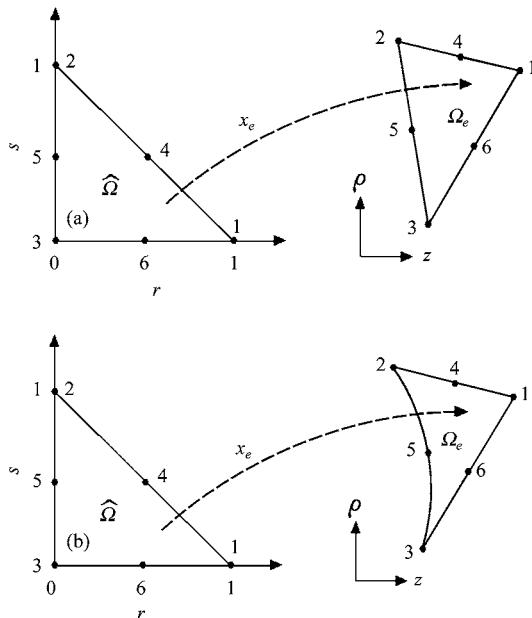


图 1 三角元坐标变换

(a) 直边三角元到标准三角元;
(b) 曲边三角元到标准三角元.

标量基函数为 Lagrange 型基函数, 它们是二元三次多项式空间的一组基, 共 10 个, 分别是

$$\begin{aligned} N_1 &= \frac{r(3r-2)(3r-1)}{2}, N_2 = \frac{s(3s-2)(3s-1)}{2}, \\ N_3 &= \frac{t(3t-2)(3t-1)}{2}, N_4 = \frac{9rs(3r-1)}{2}, \\ N_5 &= \frac{9rs(3s-1)}{2}, N_6 = \frac{9st(3s-1)}{2}, \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} N_7 &= \frac{9st(3t-1)}{2}, N_8 = \frac{9rt(3t-1)}{2}, \\ N_9 &= \frac{9rt(3r-1)}{2}, N_{10} = 27rst, \end{aligned} \quad (3)$$

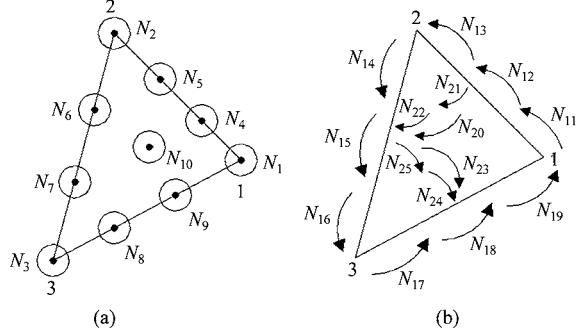


图 2 三阶基函数

(a) 标量基函数; (b) 矢量基函数

高阶矢量基函数是基于一阶矢量基函数构造出来的. 一阶矢量基函数^[3]为

$$L_1 = rR_3 - sR_2, L_2 = sR_1 - tR_3, L_3 = tR_2 - rR_1, \quad (4)$$

$$\begin{aligned} \text{其中, } R_1 &= \left(\frac{\partial t}{\partial z}, \frac{\partial t}{\partial \rho}, 0 \right), R_2 = \left(\frac{\partial r}{\partial z}, \frac{\partial r}{\partial \rho}, 0 \right), \\ R_3 &= \left(\frac{\partial s}{\partial z}, \frac{\partial s}{\partial \rho}, 0 \right), \end{aligned} \quad (5)$$

三阶矢量基函数是 L_1, L_2, L_3 与二次因子 $r^2, s^2, t^2, rs, st, rt$ 分别相乘得到的 18 个函数中线性无关的部分, 共 15 个, 它们是

$$\begin{aligned} N_{11} &= r^2 L_1, N_{12} = 4rsL_1, N_{13} = s^2 L_1, N_{14} = s^2 L_2, \\ N_{15} &= 4stL_2, N_{16} = t^2 L_2, N_{17} = t^2 L_3, N_{18} = 4rtL_3, \\ N_{19} &= r^2 L_3, N_{20} = -4s^2 L_3, N_{21} = -4rsL_3, N_{22} = -4stL_3, \\ N_{23} &= -4t^2 L_1, N_{24} = -4rtL_1, N_{25} = -4stL_1. \end{aligned} \quad (6)$$

2.3 曲边三角元

对于具有曲线边界的谐振腔, 曲边三角元比直边三角元离散结构的精度更高, 所以计算精度也将得到提高. 采用的曲边三角元由一条曲边和两条直边构成, 如图 1 所示, 其中 $x_e: \tilde{\Omega} \rightarrow \Omega_e$ 为 $\tilde{\Omega}$ 到 Ω_e 的同胚变换. 若曲边用二次多项式拟合, 则 x_e 用公式表示如下^[3]

$$\begin{aligned} x_e(r, s) = & (z_1, \rho_1)r(2r-1) + (z_2, \rho_2)s(2s-1) + \\ & (z_3, \rho_3)t(2t-1) + (z_4, \rho_4)4rs + \\ & (z_5, \rho_5)4st + (z_6, \rho_6)4rt, \end{aligned} \quad (7)$$

即 $z = z_1r(2r-1) + z_2s(2s-1) +$

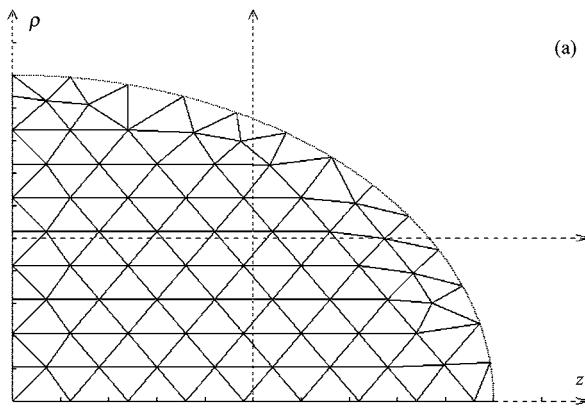
$$z_3t(2t-1) + z_44rs + z_54st + z_64rt, \quad (8)$$

$$\begin{aligned} \rho = & \rho_1r(2r-1) + \rho_2s(2s-1) + \rho_3t(2t-1) + \\ & \rho_44rs + \rho_54st + \rho_64rt. \end{aligned} \quad (9)$$

2.4 稀疏矩阵和 RCM 算法

谐振腔模式求解问题最终将化成广义特征值问题 $Au = \lambda Bu$ 进行求解^[2], 其中 A 和 B 都是大型稀疏对称矩阵. 如果 A 和 B 的非零元素能够集中在对角线附近, 那么用变带宽的方法按行存储其下三角部分就存储了 A 和 B 的全部数据, 这样就节省了大量的存储空间. 但一般的网格划分程序并不针对矢量有限元方法优化自由度编码, 从而造成非零元素的分布并不是最佳的. 因此要针对所有自由度重编码, 尽量减小 A 和 B 的带宽. 综合考虑算法的效果和实现的难易程度来看, 我们选择了 RCM(Reverse Cuthill-McKee)算法^[4], 该算法依赖于网格图和对称矩阵间的联系, 以一个边界点为起始, 进行分层编码.

RCM 算法的效果比较明显. 例如对于一个 pill-box 腔, 剖分为 509 个三角元, 在重编码前后 A 和 B 的半带宽分别为 3582 和 313.



2.5 Shifted Lanczos 算法

Shifted Lanczos 算法^[5]用于求解广义特征值问题 $Au = \lambda Bu$, 可以计算出任意初值 σ 附近的任意多个特征值及其特征向量. matlab 的 eigs 函数可以求解大型稀疏矩阵的广义特征值问题, 其算法正是 Shifted Lanczos. 直接调用 eigs 函数就可以很容易的实现求解程序的编制.

3 程序的检验

球形谐振腔的模式具有解析解, 因此可以利用球形腔比较标量有限元, 二阶和三阶矢量有限元的计算精度和收敛速度, 同时检验程序对曲线边界的计算能力. 取球形腔的半径为 1m, 根据对称性, 只需对 $\frac{1}{4}$ 的腔体进行计算就可以了, 网格剖分如图 3(a)所示.

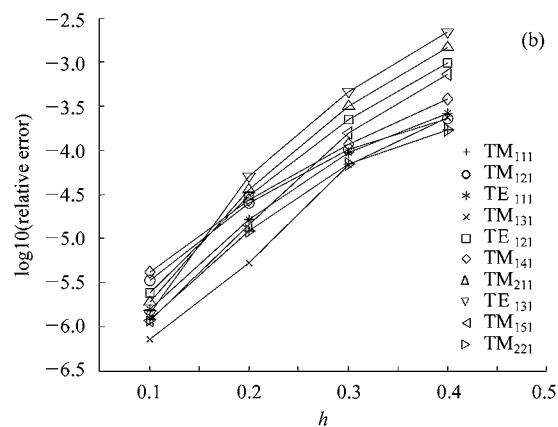


图 3 球形腔双极子模计算
(a)网格划分; (b)不同模式的精度曲线

分别用 meshmatrix(二阶)和 meshmatrix3(三阶)对球形腔的 10 个双极子模进行计算. 其中, meshmatrix

和 meshmatrix3 分别使用了 300 个三角元和 138 个三角元, 自由度数均在 2000 左右. 结果如表 1.

表 1 meshmatrix, meshmatrix3 对球形腔双极子模的计算结果与解析解的比较

模式	k_{analytic}^2	meshmatrix		meshmatrix3	
		k^2	相对误差	k^2	相对误差
TM ₁₁₁	7.5279296	7.5279901	8×10^{-6}	7.5279471	2×10^{-6}
TM ₁₂₁	14.978747	14.978880	9×10^{-6}	14.978836	6×10^{-6}
TE ₁₁₁	20.190729	20.191124	2×10^{-5}	20.190790	3×10^{-6}
TM ₁₃₁	24.734910	24.735139	9×10^{-6}	24.734893	7×10^{-7}
TE ₁₂₁	33.217462	33.220139	8×10^{-5}	33.217617	5×10^{-6}
TM ₁₄₁	36.747230	36.747908	2×10^{-5}	36.747490	7×10^{-6}
TM ₂₁₁	37.414805	37.418506	1×10^{-4}	37.414953	4×10^{-6}
TE ₁₃₁	48.831194	48.837781	1×10^{-4}	48.831373	4×10^{-6}
TM ₁₅₁	50.982847	50.984193	3×10^{-5}	50.982795	1×10^{-6}
TM ₂₂₁	55.399545	55.404444	9×10^{-5}	55.399883	6×10^{-6}

表1中, $k^2 = \epsilon\mu\omega^2$, k_{analytic}^2 是解析解. 可以看到, meshmatrix 和 meshmatrix3 对曲线边界都有很好的计算能力; 在自由度数相当的情况下, 三阶矢量有限元法的精度高于二阶矢量有限元法, 特别是对于频率较高的模式, 精度提高得更多. 而且, 由于使用了 Shifted Lanczos 算法, 求解的速度很快, 在 P4 2.0G 256M 内存的 PC 机上, 求解这 10 个模式实际所用的时间为 6s, 比 Cafe 程序有了非常大的提高.

图 3(b) 给出了相对误差与计算时所取的相邻

网格点的最大间距 h 的关系, 经拟合得到三阶矢量有限元法的收敛阶是 6, 即其误差为 $O(h^6)$.

4 结论

三阶矢量有限元法的计算精度比二阶矢量有限元法有很大提高, 且其收敛速度更快; 针对 Cafe 缺点的几点改进也都取得了很好的效果. 下一步将开展三维结构的谐振腔模式求解的研究.

参考文献(References)

- 1 ZHAN Xiao-Wei. Transverse Wakefield Analysis for the NLC&JLC Detuned Structures on a Parallel Computer. In: National Accelerator Facility ed. Computational Accelerator Physics. Virginia: Williamsburg Press, 1997
- 2 WEI Shi, LIN Yu-Zheng. HEP&NP, 2001, **25**(10): 1017—1021 (in Chinese)
(韦石, 林郁正. 高能物理与核物理, 2001, **25**(10): 1017—1021)

- 3 Eric Michael Nelson. High Accuracy Electromagnetic Field Solvers for Cylindrical Waveguides and Axisymmetric Structures Using the Finite Element Method: SLAC-R-431. Stanford University, 1993
- 4 YANG Shao-Qi. Sparse Matrices Algorithm and Programming. Beijing: Higher Education Press, 1985 (in Chinese)
(杨绍祺. 稀疏矩阵算法及程序实现. 北京: 高等教育出版社, 1985)
- 5 Roger G Grimes, John G Lewis, Horst D Simon. Siam J. Matrix Anal. Appl., 1994, **15**(1): 1—45

Accurate Computation on High Order Modes of Axial-Symmetric Cavity with the Third Order Vector Finite-Element Method *

CAO Liang^{1,2} HUANG Wen-Hui¹

¹(Department of Engineering Physics, Tsinghua University, Beijing 100084, China)

²(Department of Mathematical Sciences, Tsinghua University, Beijing 100084, China)

Abstract In this paper, the third order vector finite-element method is presented which achieves remarkable improvement on the precision of numerical computation for high order modes of RF cavities. Compared with Cafe, which is a numerical computing program for high order modes of axial-symmetric cavities employing the second order vector finite-element method, our method is quicker and more precise in computing curve boundaries. Thus the program meshmatrix3 is coded for computing high order modes of axial-symmetric cavities with the third order vector finite-element method. It is shown that our meshmatrix3 works satisfactorily.

Key words the third order vector finite-element method, high order mode, numerical precision, curve-edged triangle element

Received 24 December 2004

* Supported by NSFC(10475047)