



Stefan Feigh (Autor)

**Ein geometrische Diskretisierungs- und
Lösungsverfahren auf der Basis der Finiten-
Integrations-Methode**



<https://cuvillier.de/de/shop/publications/2072>

Copyright:

Cuvillier Verlag, Inhaberin Annette Jentzsch-Cuvillier, Nonnenstieg 8, 37075 Göttingen,
Germany

Telefon: +49 (0)551 54724-0, E-Mail: info@cuvillier.de, Website: <https://cuvillier.de>

Kapitel 1

Einleitung

1.1 Einführung und Motivation

Seit der Entwicklung moderner Rechenmaschinen spielen numerische Simulationen eine immer bedeutendere Rolle in Industrie und Wissenschaft. In vielen Bereichen ergänzen sie experimentelle Untersuchungen oder haben diese bereits komplett verdrängt. Die Vorteile numerischer Simulationen gegenüber experimentellen Untersuchungen sind:

- **Wirtschaftlichkeit.** Sowohl die Entwicklungskosten als auch die Entwicklungszeit verschiedener Produkte können durch die Anwendung numerischer Simulationen verringert werden. Beispiele hierfür sind Sicherheitstests für Autos oder die Entwicklung von Hardwarekomponenten für Computer.
- **Realisierbarkeit.** Viele physikalische Prozesse sind aufgrund ihrer räumlichen und zeitlichen Dimensionen experimentell nicht zu erfassen. So sind zum Beispiel Untersuchungen zur Entstehung von Planeten oder ganzer Galaxien nur durch numerische Simulationen oder theoretische Überlegungen möglich, da sowohl Zeitspanne als auch räumliche Abmessungen eine experimentelle Untersuchung unmöglich macht. Aber auch zu kleine oder sich zu schnell ändernde Prozesse sind experimentell schwer zu untersuchen.
- **Verträglichkeit.** Eine Vielzahl von experimentellen Untersuchungen sind in der Durchführung für Menschen und Umwelt gefährlich. Beispiele hierfür sind die Entwicklung medizinischer Methoden wie die Behandlung von Tumoren mittels Ionenstrahlen, die Ausbreitung von Krankheiten in der Bevölkerung, die Entwicklung von Waffensystemen, die Ausbreitung von Giftstoffen in der Natur usw.

Jeder numerischen Simulation liegt eine *Abstraktion* und *Simplifikation* eines realen Problems zugrunde. Dies geschieht durch die mathematische Beschreibung eines realen Problems wie zum Beispiel den Gesetzen von Newton in der Mechanik oder den Maxwell'schen Gleichungen für elektromagnetische Feldprobleme. Der auf dieser

Abstraktion aufbauende Prozess einer numerischen Simulation wird üblicherweise in drei Stufen eingeteilt:

1. *Diskretisierung*. Abbildung der analytischen Beschreibungen mittels geeigneter Approximationen in numerisch lösbare Modelle.
2. *Lösung*. Rechnergestützte Lösung der spezifischen Problemstellung mit Hilfe numerischer Verfahren.
3. *Auswertung*. Aufbereitung und Interpretation der Lösung. Deutung der Ergebnisse im Rahmen ihrer Gültigkeitsbereiche, die durch die vorangegangenen Approximationen eingeschränkt wurden.

Die wohl wichtigste Kenngröße einer numerischen Simulationsmethode ist der Simulationsaufwand der notwendig ist, um eine Lösung mit der geforderten Genauigkeit zu berechnen. Der Simulationsaufwand hängt unter anderem von der Simulationszeit und der Genauigkeit der Verfahren ab. In einigen Fällen stellt die Lösungszeit den größten Teil der gesamten Simulationszeit dar. Die Genauigkeit hingegen wird von Diskretisierungsverfahren, Lösungsverfahren und auch der zugrunde liegenden mathematischen Beschreibung des Problems beeinflusst.

Im Rahmen dieser Arbeit soll ein Diskretisierungsverfahren und ein Lösungsverfahren für lineare Gleichungssysteme vorgestellt werden. Beide Verfahren bauen auf der Methode der Finiten Integration [30], die 1977 von WEILAND vorgeschlagen wurde, auf und benutzen überwiegend geometrische Prinzipien. Bei der Entwicklung des Diskretisierungsverfahrens stand die Verbesserung der Genauigkeit und bei dem Lösungsverfahren die Reduktion der Rechenzeit im Vordergrund.

Die Methode der Finiten Integration wurde ursprünglich für die Lösung elektromagnetischer Feldprobleme entwickelt. Ihr zugrunde liegt eine konsistente Transformation der Maxwell'schen Gleichungen auf den Raum einer endlichen Anzahl diskreter Feldkomponenten, die bezüglich eines Systems zweier zueinander dualer Rechengitter definiert sind. Auf diese Weise erhält man die so genannten Gitter-Maxwell-Gleichungen, einen Satz von gewöhnlichen Differentialgleichungen, die einer rechnergestützten Bearbeitung zugänglich sind. Aufgrund ihres allgemeinen Ansatzes wurde die Methode der Finiten Integration bereits auf andere Bereiche der Feldsimulation wie z. B. die Thermodynamik oder die Akustik erfolgreich übertragen.

Zur Validierung des hier vorgestellten Lösungs- und Diskretisierungsverfahrens wurden ausschließlich Feldprobleme, die aus den Maxwell'schen Gleichungen hervorgehen, verwendet.

1.2 Überblick

Im Anschluss an diese Einleitung werden im zweiten Kapitel die Grundlagen der Methode der Finiten Integration erläutert. Hier werden zunächst die Maxwell'schen Gleichungen vorgestellt und in ihre diskrete Form, die Gitter-Maxwell-Gleichungen, überführt. Weiterhin werden die diskreten Materialrelationen beschrieben und aus

den Gitter-Maxwell-Gleichungen resultierende Gleichungssysteme bestimmter Feldprobleme, die in den folgenden Kapiteln als Anwendung und Validierung dienen, vorgestellt.

In Kapitel 3 wird ein, auf der Methode der Finiten Integration aufbauendes, geometrisches Multigrid-Verfahren zur Berechnung dreidimensionaler Feldprobleme beschrieben. In dem ersten Teil dieses Kapitels wird das Prinzip der Multigrid-Verfahren erklärt. Anschließend wird der Aufbau des Verfahrens für die Diskretisierung der Finiten-Integrations-Methode vorgestellt und dessen Eigenschaften mit Hilfe einiger Rechenbeispiele untersucht.

Im vierten Kapitel wird zunächst die Genauigkeit existierender Diskretisierungsverfahren zum Aufbau diagonalen Materialmatrizen untersucht. Anschließend wird ein Verfahren vorgestellt, das die existierenden diagonalen Materialmatrizen um nicht diagonale Matrixeinträge erweitert und so die Genauigkeit der diskreten Materialrelationen verbessert. An elektrostatischen Feldproblemen wird dieses Verfahren validiert.

Kapitel 2

Methode der Finiten Integration

2.1 Kontinuierliche Feldbeschreibung

2.1.1 Maxwellsche Gleichungen

Grundlage der klassischen Elektrodynamik bilden die vier Maxwellschen Gleichungen, benannt nach James Clerk Maxwell. Maxwell war der erste, der alle Gleichungen zur Berechnung elektrodynamischer Vorgänge fand und 1864 in [4] unter dem Namen "A Dynamical Theory of Electromagnetic Fields" veröffentlichte. Die Maxwellschen Gleichungen, so wie wir sie heute kennen, wurden erst nach Maxwells Tod von Heaviside und Hertz aus den ursprünglich 20 Gleichungen abgeleitet [3]. In ihnen werden die Vektorfelder der elektrischen Feldstärke \vec{E}^1 , der dielektrischen Verschiebung \vec{D} , der elektrischen Stromdichte \vec{J} , der magnetischen Feldstärke \vec{H} , der magnetischen Flussdichte \vec{B} miteinander und mit der Skalarfunktion der Raumladungsdichte ρ verknüpft und lauten in Integralform

$$\oint_{\partial A} \vec{E}(\vec{r}, t) \cdot d\vec{s} = -\frac{d}{dt} \int_A \vec{B}(\vec{r}, t) \cdot d\vec{A} \quad \forall A \subset \mathbb{R}^3, t \in \mathbb{R}, \quad (2.1.1a)$$

$$\oint_{\partial A} \vec{H}(\vec{r}, t) \cdot d\vec{s} = \frac{d}{dt} \int_A \vec{D}(\vec{r}, t) \cdot d\vec{A} + \int_A \vec{J}(\vec{r}, t) \cdot d\vec{A} \quad \forall A \subset \mathbb{R}^3, t \in \mathbb{R}, \quad (2.1.1b)$$

$$\oint_{\partial V} \vec{D}(\vec{r}, t) \cdot d\vec{A} = \int_V \rho(\vec{r}, t) dV \quad \forall V \subseteq \mathbb{R}^3, t \in \mathbb{R}, \quad (2.1.1c)$$

$$\oint_{\partial V} \vec{B}(\vec{r}, t) \cdot d\vec{A} = 0 \quad \forall V \subseteq \mathbb{R}^3, t \in \mathbb{R}. \quad (2.1.1d)$$

Gleichung (2.1.1a) wird auch *Induktionsgesetz* oder *Faradaysches Gesetz* und Gleichung (2.1.1b) *Durchflutungsgesetz* bzw. *Ampèresches Gesetz* genannt.

Die Gleichungen haben axiomatischen Charakter und es war bzw. ist immer noch Gegenstand der experimentellen Forschung, sie zu verifizieren oder zu widerlegen.

¹Die in dieser Arbeit verwendeten Formelzeichen und Symbole sind im Anhang aufgelistet.

Aus Gleichung (2.1.1c), der unmittelbar das Coulombsche Gesetz zu Grunde liegt, folgt, dass die Masse m_γ des Photons, dem Überträger der elektrischen Wechselwirkung, masselos sein muss² [5]. Diese Eigenschaft konnte bis zu $m_\gamma < 4 * 10^{-51} kg$ experimentell bestätigt werden [2]. Auch die Nicht-Existenz magnetischer Ladungen, die aus Gleichung (2.1.1d) folgt, konnte bisher nicht widerlegt werden und wird allgemein anerkannt.

Ende des 20. Jahrhunderts wurden dann allerdings auch quantenelektrodynamische Vorgänge, die den klassischen Maxwell'schen Gleichungen widersprechen³, experimentell bestätigt [5]. Seit 1960 wird die klassische Elektrodynamik nach Maxwell als Grenzfall der Quanten-Elektrodynamik betrachtet. In fast allen technischen Anwendungen sind solche quantenmechanischen Aspekte aber zu vernachlässigen. Die Maxwell'schen Gleichungen reichen zur Beschreibung makroskopischer, technisch relevanter Vorgänge vollkommen aus. Im Folgenden seien daher die Maxwell'schen Gleichungen axiomatisch an den Anfang gestellt.

Erwähnenswert ist die Tatsache, dass die Feldgrößen in den Maxwell'schen Gleichungen im Allgemeinen nicht im gleichen Bezugssystem definiert sind. Die in den Gleichungen (2.1.1a) und (2.1.1b) auf der linken Seite auftretenden Größen befinden sich im zur Integrationsfläche mitbewegten System, wohingegen die auf der rechten Seite auftretenden Größen im Ruhesystem der anregenden Felder existieren [5, 32]. Im Folgenden seien die Maxwell'schen Gleichungen auf ruhende Medien und damit sinnvollerweise auf ruhende Integrationsflächen beschränkt. Damit können die Zeitableitungen in (2.1.1a) und (2.1.1b) mit dem Integral vertauscht und in partielle Ableitungen umgewandelt werden

$$\oint_{\partial A} \vec{E}(\vec{r}, t) \cdot d\vec{s} = - \int_A \frac{\partial}{\partial t} \vec{B}(\vec{r}, t) \cdot d\vec{A} \quad (2.1.2)$$

$$\oint_{\partial A} \vec{H}(\vec{r}, t) \cdot d\vec{s} = \int_A \left(\frac{\partial}{\partial t} \vec{D}(\vec{r}, t) + \vec{J} \right) \cdot d\vec{A}. \quad (2.1.3)$$

Durch Anwendung der Integralsätze von Gauß und Stokes erhält man dann die Gleichungen (2.1.1c), (2.1.1d), (2.1.2) und (2.1.3) in differentieller Form

$$\text{rot } \vec{E}(\vec{r}, t) = - \frac{\partial}{\partial t} \vec{B}(\vec{r}, t), \quad (2.1.4a)$$

$$\text{rot } \vec{H}(\vec{r}, t) = \frac{\partial}{\partial t} \vec{D}(\vec{r}, t) + \vec{J}(\vec{r}, t), \quad (2.1.4b)$$

$$\text{div } \vec{D}(\vec{r}, t) = \rho(\vec{r}, t), \quad (2.1.4c)$$

$$\text{div } \vec{B}(\vec{r}, t) = 0. \quad (2.1.4d)$$

Üblicherweise wird die im Durchflutungsgesetz (2.1.1b) auftretende elektrische Stromdichte \vec{J} in die Leitungsstromdichte \vec{J}_L und die eingeprägte Stromdichte \vec{J}_e aufge-

²Bei einer nicht verschwindenden Masse wäre das Coulombsche Potential nicht $V(r) \sim \frac{1}{r}$.

³Z. B. widerspricht die Photon-Photon-Wechselwirkung der linearen Superposition der Maxwell'schen Gleichungen in \vec{E} und \vec{H} .

teilt⁴:

$$\vec{J}(\vec{r}, t) = \vec{J}_L(\vec{r}, t) + \vec{J}_e(\vec{r}, t) \quad (2.1.5)$$

Die Maxwell'schen Gleichungen in differentieller Form (2.1.4) sind partielle, lineare, gekoppelte Differentialgleichungen erster Ordnung. Sie lassen sich als vier homogene und vier inhomogene Differentialgleichungen erster Ordnung ausdrücken. Ohne eine Kopplung von \vec{E} mit \vec{D} und \vec{H} mit \vec{B} lassen sich die inhomogenen Differentialgleichungen nicht lösen [5]. Zur vollständigen Lösung eines Feldproblems sind also darüber hinaus Verknüpfungen zwischen den auftretenden Feldgrößen notwendig.

2.1.2 Materialgleichungen

Die Materialgleichungen, auch konstitutive Relationen genannt, stellen eine Verknüpfung von \vec{D} mit \vec{E} und \vec{H} mit \vec{B} dar⁵ und beschreiben den Einfluss der Materialien auf die Feldgrößen. Im Vakuum ist diese Abhängigkeit einfach mit den skalaren Größen ϵ_0 und μ_0 durch

$$\vec{E}(\vec{r}, t) = \epsilon_0 \vec{D}(\vec{r}, t) \quad \text{und} \quad \vec{B}(\vec{r}, t) = \mu_0 \vec{H}(\vec{r}, t) \quad (2.1.6a)$$

gegeben. Prinzipiell reicht diese Verknüpfung aus, denn ein Material besteht mikroskopisch idealerweise aus leerem Raum und geladenen, punktförmigen, sich bewegenden Teilchen. Praktisch wären so aber nicht einmal die einfachsten Probleme lösbar. Daher werden Materialparameter eingeführt, die gemittelte Feldgrößen ineinander umrechnen. Die Materialparameter geben also den mittleren Einfluss der mikroskopischen Struktur eines Materials auf die Feldgrößen wieder. An dieser Stelle wird üblicherweise von makroskopischen Größen gesprochen und die Deklaration von mittleren Feldgrößen einfach weggelassen. Für inhomogene, anisotrope Materialien lauten die Materialrelationen

$$\vec{D}(\vec{r}, t) = \epsilon_0 \vec{E}(\vec{r}, t) + \vec{P}(\vec{r}, t), \quad (2.1.7)$$

$$\vec{B}(\vec{r}, t) = \mu_0 \left(\vec{H}(\vec{r}, t) + \vec{M}(\vec{r}, t) \right). \quad (2.1.8)$$

Die Polarisation \vec{P} wird durch induzierte oder permanente mikroskopische Dipole und die Magnetisierung \vec{M} durch induzierte oder permanente mikroskopische Kreisströme verursacht⁶. Im linearen Fall lassen sie sich mit den elektrischen und magnetischen Suszeptibilitätstensoren $\vec{\chi}_e, \vec{\chi}_m$ ausdrücken⁷

$$\vec{P}(\vec{r}, t) = \epsilon_0 \cdot \vec{\chi}_e(\vec{r}, t) * \vec{E}(\vec{r}, t) + \vec{P}_r(\vec{r}) \quad (2.1.9)$$

$$\vec{M}(\vec{r}, t) = \vec{\chi}_m(\vec{r}, t) * \vec{H}(\vec{r}, t) + \vec{M}_r(\vec{r}), \quad (2.1.10)$$

⁴In der Beschleunigerphysik wird oft noch ein Konvektionsterm, der die Bewegung freier geladener Teilchen beinhaltet, mit aufgenommen.

⁵Im Allgemeinen kann \vec{D} auch zusätzlich von \vec{B} bzw. \vec{H} von \vec{E} abhängen. Dieser Fall soll hier nicht berücksichtigt werden.

⁶Der Einfluss der mikroskopischen Dipole bzw. Kreisströme ist nur von Bedeutung, wenn er in einem makroskopischen Mittel nicht verschwindet.

⁷Der Faltungsoperator „*“ drückt die Faltungsvorschrift $f(t) * g(t) = \int_{-\infty}^{\infty} f(\tau)g(t - \tau)d\tau$ aus.

wobei $\vec{P}_r(\vec{r})$ und $\vec{M}_r(\vec{r})$ die permanente Polarisierung bzw. Magnetisierung darstellen. In ähnlicher Weise ergibt sich für die Leitungsstromdichte

$$\vec{J}_L(\vec{r}, t) = \vec{\kappa}(\vec{r}) * \vec{E}(\vec{r}, t), \quad (2.1.11)$$

wobei hier die Bewegung einer großen Zahl geladener Teilchen durch ein Material makroskopisch gemittelt wird.

Für lineare, frequenzunabhängige Materialien ohne permanente Polarisation oder Magnetisierung vereinfachen sich die Gleichungen zu

$$\vec{D}(\vec{r}, t) = \vec{\varepsilon}(\vec{r}) \vec{E}(\vec{r}, t), \quad (2.1.12)$$

$$\vec{B}(\vec{r}, t) = \vec{\mu}(\vec{r}) \vec{H}(\vec{r}, t), \quad (2.1.13)$$

$$\vec{J}_L(\vec{r}, t) = \vec{\kappa}(\vec{r}) \vec{E}(\vec{r}, t), \quad (2.1.14)$$

wobei $\vec{\varepsilon} = \varepsilon_0(1 + \vec{\chi}_e)$ und $\vec{\mu} = \mu_0 + \vec{\chi}_m$ gilt. Im Falle isotroper Medien können die Tensoren durch skalare Größen ersetzt werden. Im Rahmen dieser Arbeit werden nur skalare Materialparameter behandelt. Es sei an dieser Stelle nochmal darauf hingewiesen, dass es sich in (2.1.12)-(2.1.14) um makroskopische Feldgrößen handelt. Der Begriff makroskopisch ist problemabhängig unterschiedlich zu verstehen. Gegenstand der heutigen Forschung sind z. B. linkshändige Materialien, bei denen genau dieser makroskopische Feldbegriff eine Rolle spielt. Hier werden elektrische Bauelemente wie Kondensatoren und Spulen, deren Dimensionen viel kleiner sind als die Wellenlänge einer sie durchlaufenden elektromagnetischen Welle, so angeordnet, dass völlig neue Materialparameter wie z. B. negative Werte für die Dielektrizitätskonstante entstehen. Eine weitere bemerkenswerte Tatsache ist, dass die Maxwell'schen Gleichungen (2.1.1a)-(2.1.1d), wenn auch in einem axiomatischen Sinn, exakt, die Materialgleichungen hingegen, aufgrund der notwendigen Einführung gemittelter Feldgrößen, nur näherungsweise richtig sind.

2.1.3 Stetigkeitsbedingungen an Grenzflächen

Durch lokale Betrachtung der Maxwell'schen Gleichungen an Grenzflächen können Stetigkeitsbedingungen der Feldgrößen hergeleitet werden [2]. Sie verknüpfen Feldgrößen infinitesimal vor und hinter der Grenzfläche zweier Materialien miteinander. Sie lauten mit der Oberflächenladungsdichte σ_F und der Oberflächenstromdichte

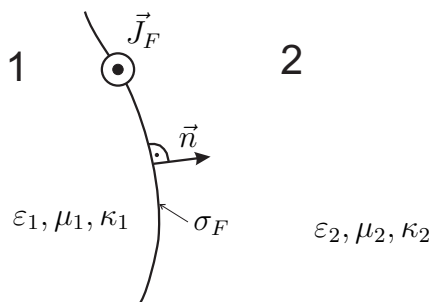


Abbildung 2.1: Oberflächenstromdichte \vec{J}_F , Oberflächenladungsdichte σ_F und Normalenvektor \vec{n} an der Grenzfläche zweier Materialien

\vec{J}_F auf einer Grenzfläche

$$\begin{aligned} \vec{n} \times (\vec{E}_2 - \vec{E}_1) &= 0 & \vec{n} \times (\vec{H}_2 - \vec{H}_1) &= \vec{J}_F \\ \vec{n} \cdot (\vec{D}_2 - \vec{D}_1) &= \sigma_F & \vec{n} \cdot (\vec{B}_2 - \vec{B}_1) &= 0, \end{aligned} \quad (2.1.15)$$

wobei die mit 1 indizierten Feldgrößen in Raumteil 1, die mit 2 indizierten Feldgrößen in Raumteil 2 und \vec{n} der Einheitsvektor senkrecht zur Materialgrenze ist (vgl. Abbildung 2.1). Für verschwindende Oberflächenladungsdichten und Oberflächenstromdichten verhalten sich also die normalen Feldkomponenten der dielektrischen Verschiebung und des magnetischen Flusses und die tangentialen Feldkomponenten des elektrischen und magnetischen Feldes stetig an den Materialgrenzen.

2.2 Diskrete Feldbeschreibung

Mit bestimmten Anforderungen an die Materialgleichungen stellen die Maxwell'schen Gleichungen, zusammen mit den Materialgleichungen, ein kausales Gesetz zur Berechnung elektromagnetischer Felder dar [6]. Prinzipiell kann damit bei bekanntem Anfangszustand der Zustand des Systems zu jedem anderen Zeitpunkt eindeutig bestimmt werden. Für die meisten praxisrelevanten Probleme ist die analytische Lösung des Problems nicht berechenbar. Numerische Verfahren bieten in diesen Fällen die Möglichkeit, die Lösung des Feldproblems approximativ zu bestimmen. In dieser Arbeit wird ausschließlich das numerische Verfahren der Finiten-Integrations-Methode (engl.: *Finite Integration Technique*, FIT) nach Weiland [30, 31] verwendet⁸. Es ist ein konsistentes Verfahren mit dem sich viele wichtigen physikalischen Gesetze auch in den diskreten Raum übertragen lassen. Im Folgenden werden die Grundlagen der Methode der Finiten Integration beschrieben. Für eine ausführlichere Darstellung sei auf [33, 34, 35, 36] verwiesen.

2.2.1 Diskretisierung des Raumes

Ausgangspunkt der numerischen Feldberechnung nach der Methode der Finiten Integration ist die Definition eines endlichen räumlichen Gitters G . Das Gitter teilt das Rechengebiet lückenlos und überschneidungsfrei in Gitterzellen ein und definiert deren Elementarfiguren (Gittervolumen V , Gitterflächen A , Gitterkanten L und Gitterpunkte P). Durch die Definition des Gitters wird eine endliche Zahl von Stützstellen für die einzelnen Feldkomponenten definiert. Die prinzipielle Vorgehensweise dazu orientiert sich an dem Diskretisierungsschema von Yee [19].

Die so gewonnene Reduktion der Komplexität von einem kontinuierlichen Feld auf eine endliche Anzahl von Feldkomponenten ermöglicht die numerische Lösung mit Hilfe von Rechenmaschinen. Die Einführung eines endlichen Gitters führt aber auch direkt zu zwei Problemen. Zum einen müssen geeignete Randbedingungen gefunden werden, da die Abmessungen des Gitters endlich sind, zum anderen müssen die Geometrien der Strukturen im Rechengebiet von dem Gitter aufgelöst werden.

⁸Die Bezeichnung „Methode der Finiten Integration“ wird synonym gebraucht.