

Kapitel 1

Einleitung

Einführung und Motivation

Die *Simulation* realer Vorgänge gewinnt in allen Bereichen der Wissenschaft mit zunehmender Verfügbarkeit leistungsfähiger Rechner immer mehr an Bedeutung. Dies liegt in der Komplexität der naturgegebenen Gesetzmäßigkeiten begründet, die zwar häufig theoretisch beschrieben werden können, meist aber nur für vereinfachte Modelle analytische Lösungen zulassen.

Die *Maxwellgleichungen* stellen eine solche theoretische Beschreibung aller makroskopischer Vorgänge der Elektrodynamik dar. Gerade im Zeitalter der Vernetzung stellt die technische Realisierung theoretisch möglicher Zusammenhänge eine sehr große Herausforderung für die Teilgebiete der Elektrotechnik dar. Im Bereich der *Hochfrequenztechnik* ist vor allem bei der Entwicklung und dem Design von Bauteilen oder ganzen Systemen eine wesentliche Steigerung der Effizienz zu erreichen. Mit einer Reihe von Simulationen lassen sich zahlreiche Versuchsaufbauten und Messungen einsparen und gleichzeitig Optimierungen auf bestimmte Parameter vornehmen. Häufig sind hier sehr kleine Details maßgeblich für das Verhalten umfangreicher Strukturen verantwortlich.

Zur Simulation solcher Problemstellungen sind *Finite-Differenzen-Methoden im Zeitbereich* sehr verbreitet. Dabei besteht der Vorteil eines Verfahrens im Zeitbereich darin, dass die Durchführung nur einer Simulation Aussagen über das Verhalten von Bauteilen in einem sehr großen Frequenzbereich zulässt. Hierzu wird ein Rechengebiet mit einer dem Problem angepassten Berandung definiert, in dem alle für die Struktur relevanten Vorgänge auftreten. Innerhalb dieses Volumens wird mit Hilfe eines strukturierten Gitters eine Unterteilung des Raums in Zellen vorgenommen, in denen mittels Differenzenquotienten eine genäherte Lösung der feldbeschreibenden Maxwellgleichungen möglich ist.

Eine verallgemeinerte Formulierung der Finite-Differenzen-Methoden bietet die in [15] von WEILAND vorgestellte *Methode der Finiten Integration*, deren Erweiterung im Rahmen dieser Arbeit vorgenommen wird. Die Verwendung integraler Zustandsgrößen in den Gitterzellen des Rechengebiets führt hier zu einer exakten Beschreibung der Maxwellgleichung im diskreten Raum. Lediglich die Abbildung der Materialbeziehungen auf das Gitter erfordert Approximationen, die zu einem Verfahrensfehler führen, der jedoch mit abnehmender Gitterschrittweite gegen Null konvergiert.

Neben der räumlichen Diskretisierung erfordert ein Simulationsverfahren im Zeitbereich auch eine Diskretisierung der Zeitachse. Hierbei bedient sich die Methode der Finiten

Integration dem von YEE [9] vorgestellten *Leap-Frog Schema* mit zentralen Differenzenquotienten für die Zeitableitung. Es ergibt sich ein Stabilitätskriterium, das einen maximal stabilen Zeitschritt vorgibt, bei dem die höchsten Frequenzen noch ausreichend abgetastet werden.

Ein gemeinsamer Nachteil der Verfahren, die auf der Diskretisierung mit Finiten Differenzen basieren, ist die Forderung eines strukturierten Gitters, in dem die Nachbarschaftsbeziehungen der Gitterzellen fest vorgegeben sind. Dies führt dazu, dass die Abmessungen der Gitterzellen immer an den kleinsten geometrischen Details im Rechengebiet auszurichten sind. Zwar lässt sich mit nicht-äquidistanten Gittern eine Anpassung der Gitterschrittweite an die geometrischen Verhältnisse vornehmen, jedoch ist zu berücksichtigen, dass Gitterlinien immer bis zum Rand des Rechengebiets reichen. Dies führt zu einer unverhältnismäßig hohen Anzahl an Gitterzellen, wenn sehr kleine Abmessungen – bezogen auf das gesamte Rechengebiet – durch das Gitter erfasst werden müssen. Aufgrund des Speicherbedarfs sind jedoch Grenzen für die Anzahl der Gitterzellen in einer Simulation gesetzt, was dazu führen kann, dass komplexe Probleme mit kleinen geometrischen Details nicht zu simulieren sind.

Neben der Begrenzung des Speicherbedarfs ist auch der numerische Aufwand einer Simulation von entscheidender Bedeutung. Dieser lässt sich aus der Anzahl notwendiger Rechenoperationen pro Zeitschritt – die in der Standard-Methode ausschließlich von der Anzahl der Gitterzellen abhängen – und dem maximal möglichen Zeitschritt – der von den kleinsten auftretenden Gitterzellen abhängt – abschätzen und drückt sich letztendlich in der Rechenzeit für die Simulation aus. Kleine Details im Rechengebiet haben somit eine zweifache Auswirkung; zunächst durch eine Erhöhung der Anzahl notwendiger Gitterzellen und weiterhin durch eine Reduktion des maximal verwendbaren Zeitschritts.

Der Nachteil der strukturierten Gitter lässt sich prinzipiell durch die Verwendung *lokaler Gitterverfeinerungen* – und damit sogenannter block-strukturierter Gitter [26] – umgehen. In Teilbereichen des Gitters werden zusätzliche Gitterlinien eingefügt, die nicht bis zum Rand des Rechengebiets durchgezogen werden und so eine bessere Auflösung geometrischer Details erlauben. Ein mögliches Ziel ist hierbei die Reduzierung des numerischen Aufwands bei gleicher Genauigkeit des Ergebnisses. Geometrische Details können weiterhin sehr fein aufgelöst werden, während im übrigen Rechengebiet eine erheblich größere räumliche Schrittweite möglich ist, ohne einen wesentlichen Einfluss auf den Fehler der Simulation. Andererseits lässt sich bei gleich bleibendem numerischen Aufwand eine wesentlich höhere Genauigkeit in der Simulation erzielen, da eine verringerte Gitterschrittweite in Bereichen großer lokaler Verfahrensfehler – sei es durch hohe Feldgradienten oder durch Materialsprünge – auch den globalen Fehler reduziert. Unabhängig von der gewählten Zielsetzung müssen bei Verwendung einer lokalen Gitterverfeinerung zusätzliche Effekte des Übergangs zwischen den Raumteilen verschiedener Diskretisierung berücksichtigt werden. Aufgrund der unterschiedlichen numerischen Eigenschaften der Raumteile treten am Übergang numerische Reflexionen auf, die als zusätzliche Verfahrensfehler zu betrachten sind, jedoch für abnehmende Gitterschrittweite gegen Null konvergieren. Außerdem sind am Übergang Interpolationen notwendig, um eine Kopplung zwischen den Teilgebieten zu erreichen.

Im Einklang mit der lokalen Verfeinerung der räumlichen Diskretisierung ist zur Erhaltung der Stabilität des Iterationsschemas auch der Zeitschritt der zeitlichen Diskretisierung zu reduzieren. Wiederum unter dem Aspekt des numerischen Aufwands können lokale Zeitschritte verwendet werden, die lediglich im Bereich der räumlichen Gitterverfeinerung

zusätzliche Iterationen vorsehen, während das übrige Rechenggebiet weiterhin mit dem größeren Zeitschritt des Standard-Verfahrens operiert.

Im Rahmen dieser Arbeit wird in der Methode der Finiten Integration ein Verfahren zur lokalen Verfeinerung des Gitters, das von PODĚBRAD [43] zur Anwendung in der Statik vorgestellt und auf zweidimensionale Berechnungen im Zeitbereich erweitert wurde, für die Anwendung in dreidimensionalen Simulationen im Zeitbereich untersucht. Als bedeutender Vorteil dieses Verfahrens wird die große Flexibilität bei der Verfeinerung des Gitters angesehen, die neben einer Kaskadierung der Untergitter auch beliebige Berandungen der lokal verfeinerten Teilgebiete zulässt. So lassen sich auch geometrische Details, die sich über einen großen Bereich des Rechengebiets erstrecken, selbst aber nur eine sehr geringe Ausdehnung haben, sehr effizient durch ein weiterhin strukturiertes Gitter erfassen. Eine entscheidende Rolle hierbei spielt auch die Möglichkeit einer lokalen Gitterverfeinerung über Materialgrenzen hinweg.

Das Verfahren wird konsistent innerhalb der Methode der Finiten Integration entwickelt, so dass in der diskreten Formulierung weiterhin wichtige analytische Eigenschaften der kontinuierlichen Maxwellgleichung erhalten bleiben. Weitere Erkenntnisse der zugrundeliegenden Methode können übernommen werden, wie etwa die beweisbare Stabilität des Iterationsverfahrens im Zeitbereich, die Materialapproximation mit Hilfe teilgefüllter Gitterzellen und die Verwendung lokaler Zeitschritte, wie sie bereits von THOMA [22] im Zusammenhang mit einer lokalen Gitterverfeinerung vorgeschlagen wurde. Während in dieser Arbeit eine Konzentration auf die Verwendung des Verfahrens in kartesischen Gittern stattfindet, ist die Anwendung ohne Weiteres auf allgemeine orthogonale Gitter erweiterbar, wie in [43] gezeigt.

Übersicht

Im Anschluss an diese Einleitung wird im zweiten Kapitel ein Überblick vermittelt, wie die Methode der Finiten Integration sich aus der räumlichen Diskretisierung der kontinuierlichen Maxwellgleichungen gewinnen lässt. Nach der Betrachtung einiger wesentlicher Eigenschaften der räumlichen Operatoren wird das verwendete Zeitbereichsverfahren dargestellt und wichtige Aspekte der Simulationen im Zeitbereich erläutert.

Das dritte Kapitel stellt den theoretischen Schwerpunkt dieser Arbeit dar. Die Betrachtung einer Auswahl bereits bestehender Verfahren zur lokalen Gitterverfeinerung in Finite-Differenzen-Methoden wird als Motivation verstanden, ein in der Methode der Finiten Integration konsistentes Verfahren allgemein für dreidimensionale Berechnungen im Zeitbereich einzusetzen. Es folgt die Darstellung der Interpolationsvorschriften, die bei der räumlichen Diskretisierung in der Übergangsregion zwischen den Gittern benötigt werden. Randbedingungen werden einbezogen, was zu Modifikationen der Interpolationsvorschriften führt, ebenso wie die Behandlung von idealleitenden Materialien in der Übergangsregion. Schließlich werden die räumlichen Interpolationsvorschriften – zunächst mit einem einheitlichen Zeitschritt – in das bestehende Iterationsschema des Zeitbereichsverfahrens eingebunden, so dass wieder eine geschlossene Matrix-Vektor-Formulierung entsteht. Eine Abschätzung des numerischen Aufwands leitet über zur Verwendung lokaler Zeitschritte, deren modellhafte Beschreibung das Kapitel abschließt.

Im vierten Kapitel werden die theoretisch betrachteten Zusammenhänge quantitativ ausgewertet, nachdem zunächst die numerische Stabilität beispielhaft validiert wird. Eine eingehende Untersuchung der am Gitterübergang entstehenden numerischen Reflexionen

für verschiedene Gitterformen und -größen und für verschachtelte Untergitter wird gefolgt von Konvergenzuntersuchungen. In einem weiteren Abschnitt wird untersucht, wie stark der Einfluss lokaler Zeitschritte auf die Zielgrößen bzw. das Konvergenzverhalten des Verfahrens ist.

Das fünfte Kapitel zeigt einige Anwendungen, in denen der Einsatz von Untergittern sehr nützlich ist, entweder zur Erhöhung der Genauigkeit oder zur Reduzierung des numerischen Aufwands. Im Anschluss an zwei Komponenten der Hochfrequenztechnik wird der Einsatz des Verfahrens beispielhaft zur Simulation sehr dünner Schlitze in idealleitenden Materialien genutzt. Diese verursachen häufig (unerwünschte) Nebeneffekte in sehr komplexen Strukturen. Deren Auflösung in einer Simulation führt jedoch zu extrem feinen Gittern oder ist aufgrund der benötigten Punktzahlen gar nicht möglich.

Eine Zusammenfassung der wichtigsten Ergebnisse und ein Ausblick bilden den Abschluss dieser Arbeit.