

---

# Inhaltsverzeichnis

<b>1 Einleitung und Überblick .....</b>	1
1.1 Einleitung .....	1
1.1.1 Lösungsideen und algorithmische Motivation .....	2
1.1.1.1 Lösungsideen zu den Maxwellgleichungen .....	2
1.1.1.2 Lösungsideen zu den gekoppelten Modellen .....	2
1.1.1.3 Splitting- und Zerlegungsverfahren .....	3
1.1.1.4 Kopplung im Bereich der hierarchischen Modelle .....	4
1.1.1.5 Anforderungen der Löser .....	5
1.1.1.6 Paradigmenwechsel: Linear zu Nichtlinear .....	6
1.1.1.7 Teilmodell versus Gesamtmodell .....	8
1.1.2 Einteilung des Buchs .....	11
Literatur .....	20
<b>2 Motivation und Grundlagen .....</b>	23
2.1 Einleitung zu Computational Engineering .....	23
2.1.1 Paradigmenwechsel im Denken und Wahrnehmen von Problemstellungen .....	25
2.1.2 Spezialisierung in einzelnen Fachwissenschaften .....	27
2.2 Einleitung zu Elektrodynamik .....	27
2.2.1 Grundgleichungen zur klassischen Elektrodynamik .....	28
2.2.2 Motivation: Überblick berechnende Elektrodynamik .....	30
2.2.3 Überblick der Methoden für das Computational Elektrodynamics .....	32
2.2.4 Anwendungsbeispiele .....	33
2.2.4.1 Antennenmodellierung .....	34
2.2.4.2 Partikeltransport (Abweichung im E-Feld) .....	35
2.2.4.3 Partikeltransport (1D PIC, Phasenraum) .....	35
2.2.4.4 E-Felder von Quellen mit Perfectly Matched Layers (PML) .....	37

XIII

2.3	Einführung in die Elektrodynamik .....	38
2.4	Einführung: Berechnende Elektrodynamik .....	39
2.5	Modellgleichungen in der Elektrodynamik .....	40
2.5.1	Elektrostatik .....	41
2.5.1.1	Anwendung der Elektrostatik beim elektrischen Dipol .....	42
2.5.1.2	Zusammenhang von Potential und elektrischem Feld .....	43
2.5.2	Grundgleichungen der Elektrostatik .....	44
2.6	Magnetostatik .....	44
2.6.1	Strom und Ladungserhaltung .....	45
2.6.2	Ampere'sches Gesetz .....	46
2.6.3	Zusammenhang von Potential und magnetischem Feld .....	47
2.6.4	Grundgleichungen der Magnetostatik .....	48
2.7	Elektrodynamik .....	49
2.7.1	Maxwellgleichungen für die Elektrodynamik .....	49
2.7.2	Erweiterung der Wirbelfreiheit von $E$ : Induktionsgesetz .....	49
2.7.3	Erweiterung durch nicht stationäre Ströme: Selbstinduktion .....	50
2.7.4	Maxwellgleichungen im Vakuum .....	51
2.7.5	Elektromagnetische Felder im Vakuum .....	51
2.7.5.1	Homogene Wellengleichung .....	51
2.7.5.2	Inhomogene Wellengleichung .....	52
2.8	Wirtschaftlichkeit und Modelldiskussion .....	52
2.8.1	Erste Lösungsverfahren: analytisch versus numerisch .....	52
2.8.2	Wirtschaftlichkeit .....	54
2.8.3	Software-Pakete .....	55
2.9	Fragen zum Verständnis des Kapitels .....	56
	Literatur .....	56
<b>3</b>	<b>Numerische Verfahren: Diskretisierungs- und Lösungsverfahren .....</b>	<b>61</b>
3.1	Klassifizierung von Differentialgleichungen .....	62
3.2	Grundtypen der linearen partiellen Differentialgleichungen .....	63
3.3	Grundtypen der linearen partiellen Differentialgleichungen erster Ordnung .....	65
3.3.1	Grundtyp 1: elliptische PDGL .....	67
3.3.2	Grundtyp 2: parabolische PDGL .....	69
3.3.3	Grundtyp 3: hyperbolische PDGL .....	71
3.4	Überblick zu den Lösungsverfahren für elektrodynamische Anwendungen .....	74

3.5	Wellengleichung .....	76
3.5.1	Herleitung einer einfachen Wellengleichung .....	77
3.5.2	Überblick: Diskretisierungsverfahren für Wellengleichungen .....	78
3.5.3	Wellengleichung in der Elektrodynamik .....	80
3.5.4	Kurze Einführung in finite Differenzen .....	81
3.5.5	Diskretisierung der Wellengleichung .....	83
3.5.5.1	Explizite Diskretisierung .....	84
3.6	Stabilität des expliziten Differenzenverfahren der Wellengleichung .....	87
3.7	Implizite Diskretisierung .....	89
3.7.1	Unbeschränkte Stabilität des Implizite-Differenzen-Verfahrens der Wellengleichung .....	93
3.7.1.1	Energieerhaltendes Verfahren .....	94
3.7.2	Explizite versus implizite Zeitdiskretisierungen .....	97
3.8	Maxwellgleichung .....	98
3.8.1	Überblick: Diskretisierungsverfahren für Maxwellgleichungen .....	99
3.8.2	Diskretisierung: FDTD (Yee's Algorithmus) .....	100
3.8.3	Yee'scher Algorithmus .....	100
3.8.4	Stabilität des FDTD-Verfahrens bei der 1D-Maxwellgleichung .....	105
3.8.4.1	Energieerhaltung der 1D-Maxwellgleichung .....	107
3.8.4.2	Diskrete Energieerhaltung der 1D-Maxwellgleichung mit dem FDTD-Verfahren .....	108
3.8.5	Dispersion einer Wellengleichung .....	110
3.8.6	Numerische Dispersion bei der FDTD-Diskretisierung für die eindimensionale Maxwellgleichung .....	111
3.8.7	FDTD-Verfahren für höhere Raumdimensionen .....	114
3.8.7.1	2D-FDTD-Verfahren (2d Finite-Difference-Time-Domain Method) .....	114
3.8.7.2	3D-FDTD-Verfahren (3d Finite-Difference-Time-Domain Method) .....	117
3.8.8	Diskussionen zum FDTD-Verfahren .....	120
3.9	Spezialthema I: Nicht reflektierende Randbedingungen .....	122
3.9.1	Allgemein: Absorbierende Randbedingung (Absorbing Boundary Conditions) .....	123
3.9.1.1	Anwendung 1: Einfache ABC-Randbedingungen bei elektromagnetischen Wellen im Vakuum .....	124

3.9.1.2	Anwendung 2: Einfache ABC-Randbedingungen bei einer 1D-Wellengleichung .....	125
3.9.2	PML-Randbedingung bei elektromagnetischen Wellen in verschiedenen Medien .....	128
3.9.2.1	Einbinden der PML in eine 1D-Wellengleichung .....	130
3.9.3	Anwendung: PML bei der 1D-Wellengleichung .....	131
3.9.4	Darstellung der PML mit verschiedenen Medien .....	135
3.9.5	Anwendung der PML-Randbedingung für 2D-Gebiete .....	136
3.9.6	Vor- und Nachteile der ABC- und PML-Randbedingungen .....	139
3.10	Spezialthema II: Nah-zu-Fernfeld-Transformation .....	139
3.10.1	Einleitung .....	140
3.10.2	Umsetzung der Transformation .....	141
3.10.3	Rechnerische Transformation des Nah- zum Fernfelds mittels Äquivalenztransformation .....	142
3.10.3.1	Schnelle Transformation: DFT-Transformation .....	142
3.10.4	Beispiel: Berechnung von Nah- und Fernfeld einer Dipolantenne .....	144
3.11	Löser für die diskretisierten Gleichungen .....	150
3.11.1	Löser für lineare Gleichungssysteme .....	151
3.11.2	Löser für die diskretisierten Gleichungen .....	151
3.11.3	Klassifizierung der indirekten Methoden .....	151
3.11.4	Lineare iterative Methoden .....	152
3.11.4.1	Zerlegungsmöglichkeiten für die Matrix A in der linearen Iteration .....	154
3.11.5	Jacobi-Verfahren .....	154
3.11.6	Gauß-Seidel-Methode .....	156
3.11.7	Numerische Methoden für nichtlineare Gleichungen .....	157
3.11.7.1	Fixpunktiteration .....	157
3.11.7.2	Newton'sches Verfahren .....	158
3.12	Software-Pakete: Akademische Entwicklung .....	159
3.13	Fragen zu dem Kapitel .....	159
	Literatur .....	160
<b>4</b>	<b>Ergänzende numerische Verfahren .....</b>	<b>165</b>
4.1	Überblick über die Zerlegungsverfahren .....	166
4.1.1	Motivation .....	166
4.2	Operator-Splitting-Verfahren .....	168
4.2.1	Anwendungen der Operator-Splitting-Verfahren .....	170
4.2.2	Operator-Splitting-Verfahren .....	170
4.2.2.1	Exponentielle Operator-Splitting-Verfahren .....	171

4.2.2.2	Fehlerberechnung für exponentielle Operator-Splitting-Verfahren .....	172
4.2.2.3	Additives und multiplikatives Splitting-Verfahren .....	175
4.2.2.4	AOS-Splitting-Verfahren.....	177
4.2.2.5	MOS-Splitting-Verfahren .....	177
4.2.2.6	AB-Splitting versus AOS- oder MOS-Methode .....	178
4.2.2.7	Paralleles Operator-Splitting-Verfahren (additives Splitting-Verfahren) .....	178
4.2.2.8	Iterative Operator-Splitting-Verfahren .....	181
4.2.2.9	Fehlerberechnung des iterativen Operator-Splitting-Verfahrens .....	183
4.2.2.10	Iteratives Splitting-Verfahren für Maxwellgleichungen .....	187
4.3	Raumzerlegungsverfahren.....	190
4.3.1	Gebietszerlegung mit nicht iterativen Ansätzen .....	191
4.3.2	Iterative Verfahren: Schwarz-Waveform-Relaxation-Methode .....	194
4.3.3	Umsetzung der Schwarz-Waveform-Relaxationsmethode .....	196
4.3.4	Fehlerbetrachtung beim Schwarz-Waveform-Relaxationsverfahren.....	197
4.3.5	Umsetzung eines klassischen SWR-Verfahrens an einer 1D-Poisson-Gleichung mit Iterationszyklen.....	200
4.3.6	Umsetzung eines klassischen SWR-Verfahrens an einer 1D-Diffusionsgleichung mit MATLAB-Programm .....	201
4.3.7	Diskussion: Nicht iterative oder iterative Gebietszerlegungsverfahren .....	207
4.3.8	Gebietszerlegungsverfahren: Overlapping und Nonoverlapping .....	207
4.4	Spezialthema I: Parareal-Algorithmus (Zeitparallelisierung). ....	209
4.4.1	Idee des Parareal-Algorithmus .....	212
4.4.1.1	Stabilität und Konvergenz des Parareal-Algorithmus .....	215
4.4.1.2	Grafische Veranschaulichung des Parareal Algorithmus .....	216
4.4.2	Anwendung bei einer Reaktionsgleichung.....	217
4.5	Spezialthema II: synchrone und asynchrone Methoden .....	221
4.5.1	Grundidee der Parallelisierung: Zeitersparnis .....	222
4.5.2	Einteilung der Algorithmen .....	222
4.5.2.1	Synchronisation und Asynchronisation .....	223
4.5.2.2	Parallelisierung von Jacobi-Lösern.....	223

4.5.2.3	Synchrone und asynchrone Kommunikation unter den Prozessoren .....	228
4.5.3	Praktische Umsetzung: Erweiterung der synchronen Algorithmen zu asynchronen Algorithmen .....	228
4.6	Zusammenfassung und Software-Pakete .....	231
4.6.1	Zusammenfassung .....	231
4.6.2	Software-Pakete: Akademische oder kommerzielle Entwicklungen .....	231
4.6.3	Vorteil und Nachteil von akademischen oder kommerzielle Entwicklungen .....	232
4.6.4	Fragen zu dem Kapitel .....	232
	Literatur .....	233
<b>5</b>	<b>Anwendungen in der Elektrodynamik.....</b>	<b>237</b>
5.1	Anwendungen im Bereich der Dipolantenne .....	237
5.1.1	Analytisches Verfahren für Dipolantennen .....	240
5.1.2	Berechnung der elektromagnetischen Felder von Dipolantennen mit analytischem Verfahren .....	243
5.1.3	Numerisches Verfahren zur Lösung der Dipolantenne .....	245
5.1.4	Diskretisierung: FDTD (Dipolantenne) .....	246
5.1.5	Splitting-Verfahren für der Zerlegung der Maxwellgleichung in gewöhnliche und partielle Differentialgleichungen.....	249
5.2	Spezialthema: Antennenmodellierung .....	250
5.2.1	Einbettung von diskreten Elementen .....	251
5.2.2	Einbettung der diskreten Elemente in das FDTD-Verfahren .....	252
5.2.3	Lineare und nichtlineare diskrete Elemente im Schaltkreis .....	253
5.2.3.1	Kondensator im Schaltkreis .....	254
5.2.3.2	Diode im Schaltkreis .....	255
5.3	Fragen zum Verständnis des Kapitels .....	257
	Literatur .....	258
<b>6</b>	<b>Weitere Anwendungen im Bereich des Partikel-Transports und Umsetzung von Modellen bis zum Programm-Code .....</b>	<b>259</b>
6.1	Anwendungen im Bereich der Partikeltransport-Probleme .....	259
6.1.1	Motivation Partikelverfahren .....	260
6.1.2	Motivation PIC (Particle in Cell) .....	261
6.1.3	Mikro- und Makrolöser bei einem hybriden Verfahren .....	263
6.1.4	Hybride Methoden zur Lösung von Fokker-Planck-Gleichungen .....	264
6.2	Von der Modellierung zum Programm .....	267
6.2.1	Wissenschaftliche Vorbereitungen .....	267

6.2.2	Von der Fragestellung bis zum Software-Code .....	268
6.2.3	Auswahl einiger kommerzielle Software-Pakete .....	269
6.3	Fragen zum Verständnis des vorliegenden Kapitels.....	272
	Literatur.....	272
	<b>Zusammenfassung</b> .....	275
	<b>Appendix</b> .....	277
	<b>Literatur</b> .....	279
	<b>Stichwortverzeichnis</b> .....	281