
Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung und Überblick	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
2	Motivation und Grundlagen	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 Electrodynamics	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

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
3	Numerische Verfahren: Diskretisierungs- und Lösungsverfahren	61
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
4	Ergänzende numerische Verfahren	165
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
5	Anwendungen in der Elektrodynamik	237
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
6	Weitere Anwendungen im Bereich des Partikel-Transports und Umsetzung von Modellen bis zum Programm-Code	259
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
Zusammenfassung	275
Appendix	277
Literatur	279
Stichwortverzeichnis	281