

# Zur Stabilität von Zeitbereichssimulationen mit PML Randbedingung in der Methode der Finiten Integration

vorgelegt von  
M. Sc.

Lilli Friederike Kuen  
ORCID: 0000-0002-3183-4222

an der Fakultät IV - Elektrotechnik und Informatik  
der Technischen Universität Berlin  
zur Erlangung des akademischen Grades

Doktorin der Ingenieurwissenschaften  
– Dr.-Ing. –

genehmigte Dissertation

## **Promotionsausschuss:**

Vorsitzender:	Prof. Dr. habil. Wolfgang Heinrich	TU Berlin
Gutachter:	Prof. Dr.-Ing. Rolf Schuhmann	TU Berlin
	Prof. Dr. rer. nat. habil. Ursula van Rienen	Universität Rostock
	Prof. Dr.-Ing. Herbert de Gersem	TU Darmstadt

Tag der wissenschaftlichen Aussprache: 23.08.2021  
Berlin 2022



# Kurzfassung

Die vorliegende Arbeit behandelt die Stabilität der Perfectly Matched Layer (PML) Randbedingung in Zeitbereichssimulationen elektromagnetischer Feldprobleme. Die Diskretisierung erfolgt mit der Methode der Finiten Integration, wobei hier die Anwendungsbeispiele rotationssymmetrisch sind und  $\rho$ - $z$ -Koordinaten verwendet werden.

Bei der PML handelt es sich um eine absorbierende Randbedingung, die es ermöglicht die Abstrahlung elektromagnetischer Felder von Bauteilen zu simulieren. Dabei kommt es vor, dass Simulationen instabil sind.

Zunächst werden gängige Zeitdiskretisierungsverfahren mit PML vorgestellt und die auftretenden Instabilitäten näher untersucht. Dazu werden die Eigenwerte der Zeitbereichsschemata und die Konvergenz bezüglich des diskreten Zeitschrittes analysiert. Des Weiteren wird das Abklingen der Energie im Rechengebiet betrachtet und ausgewertet.

Anschließend wird ein robusteres Zeitbereichsverfahren vorgestellt, das es ermöglicht räumlich hybrid zwischen einem impliziten und einem expliziten Algorithmus innerhalb eines Rechengebietes zu wählen. Dies ermöglicht es im Bereich der PML implizit und im Rest des Rechengebietes explizit zu rechnen. Daraus ergeben sich zusätzliche Parameter im implizit gerechneten Bereich, die zur Stabilitätskontrolle der PML verwendet werden können.

Der neue *Hybride Implizite-Explizite Zeitbereichsalgorithmus* wird zuerst an Modellproblemen getestet. Abschließend wird der Algorithmus an Hand von Anwendungsbeispielen aus der Optik untersucht.



# Abstract

The present work deals with the stability of the Perfectly Matched Layer (PML) boundary condition in time domain simulations of electromagnetic field problems. The discretization is realized by the finite integration technique, and here the application examples are rotationally symmetric and  $\rho$ - $z$ -coordinates are used. The PML is an absorbing boundary condition which allows to simulate the radiation of electromagnetic fields of devices. It occurs that simulations are unstable. First, common time discretization methods with PML are presented and the occurring instabilities are examined in more detail. For this purpose, the eigenvalues of the time domain schemes and the convergence with respect to the discrete time step are analysed. Furthermore, the decay of the energy in the computational domain is considered and evaluated.

Subsequently, a more robust time-domain method is presented that allows spatially hybrid choices between an implicit and an explicit algorithm within the computational domain. This allows to compute implicitly within the PML region and explicitly in the rest of the computational domain. This results in additional parameters in the implicit algorithm, that can be used to control the stability of the PML.

The new *Hybrid Implicit-Explicit time domain algorithm* is first tested on model problems. Finally, the algorithm is investigated using application examples from optics.



# Danksagung

Ich möchte mich an dieser Stelle bei allen bedanken, die mich in den letzten Jahren direkt oder indirekt unterstützt haben. Dies hat wesentlich zum Entstehen dieser Arbeit beigetragen. Besonderer Dank geht dabei an:

- Prof. Dr.-Ing. Rolf Schuhmann für die Ermöglichung dieser Arbeit, die hervorragende wissenschaftliche Betreuung und Beratung, die vielen Gespräche und die sehr guten Arbeitsmöglichkeiten am Fachgebiet
- Prof. Dr. rer. nat. habil. Ursula van Rienen und Prof. Dr.-Ing. Herbert de Gersem für die Übernahme der Zweit-Gutachten sowie Prof. Dr. habil. Wolfgang Heinrich für den Vorsitz des Promotionsausschusses
- allen ehemaligen und jetzigen Kollegen am Fachgebiet *Theoretische Elektrotechnik* an der TU Berlin – Besonderer Dank gilt Dr.-Ing. Philipp Jorkowski für das hervorragende und freundliche Arbeitsklima und Herrn Prof. Dr.-Ing. Heino Henke für die vielen aufmunternden Gespräche beim Kaffee
- meinem ehemaligen Kollegen Dr.-Ing. Stefan Kirsch für die vielen fachlichen Gespräche und Anregungen, nicht nur bei der Durchsicht des Manuskriptes
- den ehemaligen und jetzigen Kollegen vom Fachgebiet *Elektronische Mess- und Diagnosetechnik* der TU Berlin, für die Bereicherung in den Mittagspausen, die vielen Diskussionen und dem immer offenen Ohr
- Dr.-Ing. Stefan Kirsch, Marc Seimert, Rotraut Seimert und Dr.-Ing. Christian Klauer für die orthographische Korrektur meiner Arbeit
- meiner Familie und meinen Freunden

Mein besonders herzlicher Dank gilt meinem Freund Marc Seimert, der mich in meiner gesamten Promotionszeit begleitet hat, zu jeder Zeit verständnisvoll war und mich stets liebevoll unterstützt hat.



# Inhaltsverzeichnis

<b>1</b>	<b>Einleitung</b>	<b>1</b>
1.1	Einführung . . . . .	1
1.2	Zielsetzung der Arbeit . . . . .	3
1.3	Gliederung der Arbeit . . . . .	4
<b>2</b>	<b>Physikalische Grundlagen</b>	<b>7</b>
2.1	Elektromagnetische Feldtheorie . . . . .	7
2.1.1	Maxwell'sche Gleichungen . . . . .	7
2.1.2	Materialbeziehungen . . . . .	8
2.1.3	Stetigkeitsbedingungen . . . . .	9
2.1.4	Energie . . . . .	10
2.1.5	Die Wellengleichung . . . . .	10
2.1.6	Lösung der Helmholtz-Gleichung – Ebene Wellen . . . . .	12
2.1.7	Reflexion Ebener Wellen . . . . .	13
2.1.8	Wellengleichung in Zylinderkoordinaten . . . . .	15
2.1.9	Felder in rotationssymmetrischen Anordnungen . . . . .	17
2.2	Resonatoren in der Optik . . . . .	18
2.2.1	Grundlegende Konzepte . . . . .	19
2.2.2	Der vertikal emittierende Laser . . . . .	26
2.2.3	Die Microdisc . . . . .	28
<b>3</b>	<b>Methode der Finiten Integration</b>	<b>31</b>
3.1	Grundlagen der Methode der Finiten Integration . . . . .	32
3.1.1	Diskretisierung des Rechengebietes . . . . .	32
3.1.2	Gitter-Maxwell-Gleichungen . . . . .	34
3.1.3	Materialbeziehungen . . . . .	35
3.1.4	Randbedingungen . . . . .	37
3.2	Zeitbereich . . . . .	38
3.2.1	Zeitdiskretisierungsverfahren ohne Leitfähigkeit . . . . .	39
3.2.2	Zeitdiskretisierungsverfahren mit Leitfähigkeit . . . . .	44
3.2.3	Energie und Energiekriterium . . . . .	46

3.2.4	Numerische Dispersion . . . . .	47
3.3	Stabilität zeitdiskreter Systeme . . . . .	49
3.3.1	Eigenwert Kriterium - maximaler Zeitschritt . . . . .	49
3.3.2	Stabilität von Rekursionsverfahren . . . . .	50
3.4	Diskretisierung in zylindersymmetrischen Koordinaten . . . . .	55
3.4.1	Diskretisierung der Maxwellgleichung in $\rho$ - $z$ -Koordinaten . . . . .	57
3.4.2	Zeitbereich und $\rho$ - $z$ -Koordinaten . . . . .	59
<b>4</b>	<b>Perfectly Matched Layer</b>	<b>63</b>
4.1	Funktionsweise verschiedener PML Typen . . . . .	64
4.1.1	Koordinatenstreckung und Materialtensor . . . . .	65
4.1.2	PML für Zylindergitter . . . . .	70
4.2	Diskretisierung mit FIT auf $\rho$ - $z$ - Koordinaten . . . . .	72
4.2.1	Diskretisierung der PML . . . . .	72
4.2.2	Diskretisierung der zusätzlichen PML-Materialien . . . . .	75
4.3	Zeitbereich . . . . .	77
4.3.1	Zeitintegration im PML Material . . . . .	77
4.3.2	Standard Leapfrog-Verfahren . . . . .	78
4.3.3	Exponentielles Zeitbereichsschema . . . . .	81
4.3.4	Hybrider Impliziter-Expliziter Algorithmus . . . . .	82
<b>5</b>	<b>Validierung und Analyse</b>	<b>85</b>
5.1	PML Randbedingung in $z$ -Richtung . . . . .	85
5.1.1	Numerische Beispiele . . . . .	86
5.1.2	Eigenwerte der Rekursionsmatrix . . . . .	86
5.1.3	Energie . . . . .	94
5.1.4	Stabilitätsgraph . . . . .	99
5.2	PML Randbedingung in $\rho$ -Richtung . . . . .	101
5.2.1	Numerische Beispiele . . . . .	102
5.2.2	Eigenwerte . . . . .	103
5.2.3	Energie . . . . .	107
5.2.4	Stabilitätsgraph . . . . .	110
5.2.5	Reflexion . . . . .	111
5.3	Zusammenfassung und Diskussion . . . . .	114
<b>6</b>	<b>Anwendungsbeispiele</b>	<b>117</b>
6.1	VCSEL . . . . .	117
6.1.1	Simulation: Aufbau und Durchführung . . . . .	117

6.1.2	Validierung der Simulation . . . . .	122
6.1.3	Stabilität der Zeitbereichsverfahren mit PML . . . . .	125
6.2	Microdisc . . . . .	130
6.2.1	Simulation: Aufbau und Durchführung . . . . .	130
6.2.2	Validierung der Simulation . . . . .	132
6.2.3	Stabilität der Zeitbereichsverfahren mit PML . . . . .	133
6.3	Zusammenfassung und Diskussion . . . . .	135
<b>7</b>	<b>Zusammenfassung und Ausblick</b>	<b>139</b>
	<b>Symbolverzeichnis</b>	<b>143</b>
	Allgemeine Symbole und Schreibweisen . . . . .	143
	Klassische Feldtheorie . . . . .	144
	Methode der Finiten Integration . . . . .	145
	<b>Abkürzungsverzeichnis</b>	<b>147</b>
	<b>Literaturverzeichnis</b>	<b>149</b>
	Analytische Feldtheorie . . . . .	149
	Optik . . . . .	150
	Numerische Feldsimulation . . . . .	153
	Finite Integrationstechnik . . . . .	154
	Perfectly Matched Layer . . . . .	156
	Software . . . . .	156
	Eigene Veröffentlichungen im Rahmen dieser Arbeit . . . . .	157
	Eigene Vorträge und Posterpräsentationen . . . . .	158
	Betreute Studentische Arbeiten . . . . .	159



# 1 Einleitung

## 1.1 Einführung

Die Untersuchung abstrahlender Bauteile in der Optik, in Form verschiedenster aktiver Lichtquellen sowie passiver Bauteile ist heutzutage ein weit verbreitetes Anwendungsgebiet numerischer Simulationen. Beispielsweise sind das Design und die Entwicklung immer leistungsfähigerer Laser oder auch Quantenpunkt Emittler für die Anwendung in der Kommunikationstechnik, dem stetig wachsenden Bedarf an Bandbreite zuzuschreiben. Auf Grund der Komplexität dieser optischen Bauteile wird deren Entwurf normalerweise zuerst durch die Nutzung moderner Simulationstechnik untersucht, bevor es zum Bau von Prototypen kommt. Bei diesen Lichtquellen handelt es sich um Bauteile mit hohen Güten, die in ihren Abmaßen groß gegenüber der vorherrschenden Wellenlänge sind. Die Abstrahlung in den Freiraum kann auf einem diskreten Rechengitter nicht abgebildet werden, da es dazu unendlich ausgedehnt sein müsste. Deshalb wird eine absorbierende Randbedingung benötigt. Diese kann den Freiraum emulieren, indem die einfallenden Wellen möglichst reflexionsfrei absorbiert werden. Diese drei Eigenschaften (hohe Güte, große geometrische Abmessung gegenüber der Wellenlänge und die Notwendigkeit eines absorbierenden Randes) führen zu unterschiedlichen Herausforderungen in der Simulation.

Die große geometrische Abmessung gegenüber der Wellenlänge führt typischerweise bei volumendiskretisierenden Verfahren zu einer sehr hohen Anzahl an Gitterpunkten und somit zu einer hohen Anzahl an Unbekannten, die berechnet werden müssen. Für viele Bauteile aus dem Anwendungsgebiet der Optik gilt, dass sie zylindrischer Bauform sind und dass die Materialparameter in azimuthaler Richtung konstant sind. Exemplarisch seien hier der Oberflächen Emittler VCSEL (aus dem engl. vertical surface emitting laser), die Microdisc (als einfacher Resonator oder mit aktivem Material als Laser) oder auch diverse Bauformen der Quantenpunkt-Emitter genannt. In diesen Fällen darf der als  $\rho$ - $z$ -Koordinaten oder auch im englischen als „Body of Revolution“ bezeichnete Ansatz verwendet werden. Dieser besagt, dass man eine einzelne  $\rho$ - $z$ -Fläche aus dem Zylinder

ausschneidet und die Felder in azimutale Richtung über eine Fourierreihe entwickelt. Der Vorteil beruht auf der erheblich kleineren Anzahl an notwendigen Gitterpunkten bei der Diskretisierung.

Ein weiterer Punkt ist die Wahl eines geeigneten numerischen Verfahrens. In der vorliegenden Arbeit wird die Methode der Finite Integration im englischen „Finite Integration Technique“ (FIT) [Wei77] verwendet. Das zu untersuchende Gleichungssystem kann im Zeit- oder Frequenzbereich gelöst werden, ebenso ist eine Berechnung der Eigenwerte möglich. Dabei muss im Zeitbereich kein Gleichungssystem gelöst werden, sondern es werden Update Gleichungen für jeden Zeitschritt berechnet, die aus Matrix-Vektor Multiplikationen bestehen. Die Bereiche unterscheiden sich bei der Abbildung von physikalischen Phänomenen. Bei Lasern ist zum einen die sich einstellende Resonanzfrequenz, die dazugehörige Feldverteilung und die Güte von großem Interesse. Diese können mit allen drei Verfahren bestimmt werden. Zum anderen werden Laser in der Kommunikationstechnik oft in einem gepulsten Betrieb verwendet, sodass auch der Einschwingvorgang und das dynamische Verhalten von Interesse sein können. Dieses lässt sich nur mittels Analyse im Zeitbereich bestimmen. Die hohen Gütewerte optischer Kavitäten resultieren jedoch im Zeitbereich in langen Simulationszeiten, da die Energie nur langsam abklingt.

Als absorbierender Rand wird hier die Perfectly Matched Layer [Ber94] (PML) Bedingung verwendet. Dabei wird das zuvor beschränkte Rechenggebiet um mehrere Gitterschichten erweitert, die ein künstliches Material mit magnetischen und elektrischen Leitfähigkeiten enthalten. Das Material innerhalb der PML besitzt tensoriellen Charakter, die elektrische und magnetische Leitfähigkeit kann für die einzelnen Raumrichtungen unterschiedlich gewählt werden. Der Abschluss des Rechenggebietes erfolgt dann mit einem gewöhnlichen geschlossenen Rand. Es handelt sich somit bei der PML um keine klassische Randbedingung, sondern um eine Erweiterung des Rechenggebietes vor dem eigentlichen Rand, der die Wellen in diesem Bereich dämpft und für möglichst gute Reflexionsfreiheit sorgt. In der Literatur wird die PML trotzdem üblicher Weise als PML-Randbedingung bezeichnet. Die tangentialen Komponenten der Leitfähigkeiten sollen die ankommende Welle dämpfen und die normale Komponente der Leitfähigkeiten wird verwendet, um die an Grenzschichten auftretende Reflexion, mittels Impedanzanpassung zu vermeiden. Für den ortskontinuierlichen Fall lässt sich die Reflexion des absorbierenden Randes exakt aufschreiben, sodass die Reflexionsfreiheit direkt daraus hervorgeht. Für die Anwendung im diskreten Fall muss in räumlicher und zeitlicher Dimension eine Diskretisierung durchgeführt werden. Bereits durch die räumliche Diskretisierung geht die Reflexionsfreiheit der PML verlo-

ren. Ein anderes Problem, das durch die Diskretisierung im Zeitbereich zu Tage tritt ist, dass in schwierig vorherzusagenden Fällen das zeitdiskrete System instabil ist. Diese Instabilität verursacht in Zeitbereichssimulationen Probleme. Der Einfluss der instabilen Pole des Systems auf die Lösung im Zeitbereich ist ein exponentiell aufklingendes Verhalten von Feldern und Energie, welches nur anfangs einen zu vernachlässigenden Einfluss auf die Lösung hat. Der Einfluss der Pole ist zu Beginn nicht dominant. Besonders bei der Simulation von Bauteilen mit hohen Güten, wie den Resonatoren in der Optik, ist es wahrscheinlich, dass die notwendige Simulationszeit über den Punkt hinausgeht, an dem der instabile Anteil der Lösung das Ergebnis zunehmend verfälscht. Es ist üblich, die Zeitbereichssimulation bis zu einer Zeit laufen zu lassen ab dem die Gesamtenergie eine festgelegte Schwelle unterschreitet, die als Energiekriterium bezeichnet wird. Auf Grund der hohen Güten ist die Simulationszeit sehr lang, sodass die Pole, die nicht dem Stabilitätskriterium genügen, dominant werden, bevor dieses Energiekriterium erreicht ist.

## 1.2 Zielsetzung der Arbeit

Ziel dieser Arbeit ist es, ein robusteres Verfahren basierend auf der Methode der Finiten Integration im Zeitbereich zu entwickeln, welches mit den durch die Zeitdiskretisierung der PML-Randbedingung verursachten Instabilitäten besser umgehen kann oder diese vermeidet. Ausgangspunkt dafür ist die Untersuchung der auftretenden Instabilität in Zusammenhang mit der zeitlichen Diskretisierung der PML. Dies wird für die verbreiteten Verfahren *Standard Leapfrog* und *Exponentielles-Zeitbereichsschema* an rotationssymmetrischen, zylindrischen Beispielen durchgeführt.

Zunächst wird die Rekursionsmatrix, die einen Zeitschritt des gesamten Systems beschreibt, bezüglich ihrer Eigenwerte analysiert. Dies entspricht einer Spektralanalyse der Eigenwerte. Anschließend wird das Verhalten im Zeitbereich unter Beobachtung der Energie im Rechengebiet über die gesamte Simulationszeit analysiert. Daraus ergibt sich ein besseres Verständnis der Pole des Systems, die nicht das Stabilitätskriterium erfüllen und ihrer Auswirkungen in der Zeitbereichssimulation.

Schließlich wird ein neuer Zeitbereichsalgorithmus vorgestellt, der eine räumliche Hybridisierung des *Standard Leapfrog* und ein implizites Verfahren nach dem *Newmark-beta-Ansatz* vereint. Daraus resultieren zusätzliche Parameter, mit denen die Zeitdiskretisierung im Bereich der PML beeinflusst werden kann. Dies

führt bei entsprechender Wahl der Parameter zu einem robusteren Verfahren gegenüber den genannten instabilen Polen, bei der Verwendung von PML-Randbedingung im Zeitbereich.

Als Motivation dienen hier Bauteile aus dem Bereich der Optik, die häufig in Form von rotationssymmetrischen Strukturen zu finden sind und sich im Fall von Resonatoren durch hohe Güten auszeichnen. Als praktische Anwendungsbeispiele werden am Ende der Arbeit eine VCSEL und eine Microdisc simuliert. Auf Grund ihrer rotationssymmetrischen zylindrischen Bauweise werden hier  $\rho$ - $z$ -Koordinaten verwendet. Die Aussagen, die hier bezüglich der PML getroffen werden, sind allgemein und lassen sich auf den kartesischen Fall übertragen.

### 1.3 Gliederung der Arbeit

Im Anschluss an die Einleitung enthält diese Arbeit sechs weitere Kapitel. Im Folgenden soll kurz auf deren Inhalt eingegangen werden.

Das **Zweite Kapitel** enthält einen kurzen Exkurs in die physikalischen Grundlagen die zum weiteren Verständnis der in der vorliegenden Arbeit verwendeten Theorie und Simulationsbeispielen notwendig sind. Dies beginnt mit den MAXWELL'schen Gleichungen sowie den Materialbeziehungen und den Stetigkeitsbedingungen an Materialgrenzen. Es wird auf die Wellengleichung und deren Lösung im kartesischen und im rotationssymmetrischen Fall eingegangen. Des Weiteren wird die notwendige Theorie für die am Ende dieser Arbeit untersuchten Anwendungsbeispiele erläutert: VCSEL und Microdisc.

Das **dritte Kapitel** widmet sich der *Methode der Finiten Integration*, beginnend bei der Diskretisierung die zu den *Gitter-Maxwell-Gleichungen* führt. Es folgt die Beschreibung des Zeitbereiches und der verschiedenen Schemata der Zeitdiskretisierung mit und ohne Leitfähigkeit. Dabei wird auch auf die Dispersion und die Stabilität der unterschiedlichen Verfahren, sowie das Vorgehen bei einer Stabilitätsanalyse eingegangen. Abschließend werden die Besonderheiten der Diskretisierung auf  $\rho$ - $z$ -Koordinaten angegeben.

Das **vierte Kapitel** handelt von der PML-Randbedingung. Es werden die Funktionsweisen verschiedener PML-Typen, die Diskretisierung der PML auf  $\rho$ - $z$ -Koordinaten und die Diskretisierung bezüglich der Zeit vorgestellt. Anschließend wird das neue *Hybride Implizite-Explizite* Zeitbereichsverfahren mit PML einge-

führt.

Das **fünfte Kapitel** beschäftigt sich mit der Analyse der bereits bekannten Zeitbereichsverfahren mit PML an einfachen Beispielen. Dazu wird zum einen eine Spektralanalyse durchgeführt und zum anderen die Energie im Rechengebiet in Abhängigkeit von der Zeit untersucht. Dies wird für die Randbedingung in  $\rho$ - sowie in  $z$ -Richtung unabhängig voneinander untersucht. Abschließend wird das neue *Hybride Implizite-Explizite* Verfahren validiert und bezüglich seiner einstellbaren Parameter analysiert.

Das **sechste Kapitel** enthält eine Anwendung des neuen hybriden Verfahrens zur Simulation von Bauteilen aus der Optik. Es werden ein VCSEL und eine Microdisc simuliert. Dabei kann das neu vorgestellte *Hybride Implizite-Explizite* Zeitbereichsschema getestet und analysiert werden.

Das **siebte Kapitel** gibt eine Zusammenfassung und Diskussion der vorliegenden Arbeit sowie einen Ausblick für weitere Forschungen auf diesem Gebiet.



# 2 Physikalische Grundlagen

Das Kapitel ist aufgeteilt in zwei Abschnitte. Zunächst werden für diese Arbeit relevante Grundlagen der elektromagnetischen Feldtheorie zusammengefasst. Im Anschluss werden die optischen Kavitäten, die in Kapitel 6 untersucht werden, vorgestellt.

## 2.1 Elektromagnetische Feldtheorie

Die in diesem Abschnitt beschriebenen Grundlagen zur elektromagnetischen Feldtheorie sind ausgewählte, kurze Auszüge der für diese Arbeit relevanten Themenbereiche. Sie dienen im Wesentlichen zur Rekapitulation der bekannten analytischen Theorie, die in der Arbeit zum Verständnis und zur Evaluierung benötigt wird. Für eine ausführliche Beschreibung sei an dieser Stelle auf Standard Werke wie [Hen20; Sim93] verwiesen, die hier auch als Grundlage für den Abschnitt dienen.

### 2.1.1 Maxwell'sche Gleichungen

Die klassische Elektrodynamik wird durch die MAXWELL'schen Gleichungen beschrieben. Diese wurden im Jahre 1837 von James Clerk MAXWELL in „*A treatise on electricity an magnetism*“ [Max73] veröffentlicht. Dieses System von partiellen Differentialgleichungen beschreibt das makroskopische Verhalten elektrodynamischer Vorgänge und ermöglicht eine deduktive Behandlung dieser. Die MAXWELL'schen Gleichungen seien wie in der Literatur [Hen20; Sim93] so üblich, axiomatisch an den Anfang gestellt. Für Flächen  $A$  mit Berandung  $\partial A$  und Volumen  $V$  mit Berandung  $\partial V$  lauten sie für einfach zusammenhängende Flächen und Volumina in integraler Schreibweise:

$$\oint_{\partial A} \vec{E}(\vec{r}, t) \cdot d\vec{s} = -\frac{d}{dt} \int_A \vec{B}(\vec{r}, t) \cdot d\vec{A}, \quad (2.1)$$

$$\oint_{\partial A} \vec{H}(\vec{r}, t) \cdot d\vec{s} = \int_A \left( \frac{\partial \vec{D}(\vec{r}, t)}{\partial t} + \vec{J}(\vec{r}, t) \right) \cdot d\vec{A}, \quad (2.2)$$

$$\oint_{\partial V} \vec{D}(\vec{r}, t) \cdot d\vec{A} = \int_V \varrho(\vec{r}, t) dV, \quad (2.3)$$

$$\oint_{\partial V} \vec{B}(\vec{r}, t) \cdot d\vec{A} = 0 \quad (2.4)$$

mit den wie folgt benannten Vektoren: *elektrische Feldstärke*  $\vec{E}$ , *dielektrische Verschiebung*  $\vec{D}$ , *elektrische Stromdichte*  $\vec{J}$ , *magnetische Feldstärke*  $\vec{H}$ , *magnetische Flussdichte*  $\vec{B}$  und *elektrische Raumladungsdichte*  $\varrho$ . Mit Hilfe des Satz von STOKES und Satz von GAUSS lassen sich die MAXWELL'schen Gleichung auch in Differentialer Form angeben:

$$\nabla \times \vec{E}(\vec{r}, t) = -\frac{\partial}{\partial t} \vec{B}(\vec{r}, t), \quad (2.5)$$

$$\nabla \times \vec{H}(\vec{r}, t) = \frac{\partial}{\partial t} \vec{D}(\vec{r}, t) + \vec{J}(\vec{r}, t), \quad (2.6)$$

$$\nabla \cdot \vec{D}(\vec{r}, t) = \varrho(\vec{r}, t), \quad (2.7)$$

$$\nabla \cdot \vec{B}(\vec{r}, t) = 0. \quad (2.8)$$

Bei der *elektrischen Stromdichte*  $\vec{J}$  sei darauf hingewiesen, dass sie sich aus der *Leitungsstromdichte*  $\vec{J}_l$ , der *eingepprägten Stromdichte*  $\vec{J}_e$  und der *Konvektionsstromdichte*  $\vec{J}_k = \varrho_L(\vec{r}, t)\vec{v}(\vec{r}, t)$  die durch bewegte Ladung  $\varrho_L$  hervorgerufen wird, zusammensetzt:

$$\vec{J}(\vec{r}, t) = \vec{J}_l(\vec{r}, t) + \vec{J}_e(\vec{r}, t) + \vec{J}_k(\vec{r}, t). \quad (2.9)$$

## 2.1.2 Materialbeziehungen

Um die MAXWELL'schen Gleichungen zu vervollständigen, benötigt es noch die Verknüpfung der elektrischen Größen  $\vec{E}$ ,  $\vec{D}$  und  $\vec{J}_l$ , sowie die Verknüpfung der magnetischen Größen  $\vec{H}$  und  $\vec{B}$  untereinander. Für den Fall im Raum ruhender

Materialien können die Materialgleichungen mit Hilfe der Vektoren  $\vec{P}$  und  $\vec{M}$ , die *elektrische Polarisierung* und *Magnetisierung* beschreiben, im allgemeinen Fall angegeben werden als:

$$\vec{D}(\vec{r}, t) = \varepsilon_0 \vec{E}(\vec{r}, t) + \vec{P}(\vec{r}, t), \quad (2.10)$$

$$\vec{B}(\vec{r}, t) = \mu_0 \vec{H}(\vec{r}, t) + \vec{M}(\vec{r}, t), \quad (2.11)$$

$$\vec{J}_l(\vec{r}, t) = \kappa \vec{E}(\vec{r}, t). \quad (2.12)$$

Dabei beschreiben  $\varepsilon_0$  und  $\mu_0$  die Permittivität und Permeabilität des Vakuums. Die elektrische Leitfähigkeit ist angegeben als  $\kappa$ . Für den Fall, dass es sich um lineare, frequenzunabhängigen und nicht dispersive Materialien handelt, erhält man die vereinfachte Form der Materialbeziehungen:

$$\vec{D} = \varepsilon_0 \overline{\overline{\varepsilon_r}} \vec{E}, \quad (2.13)$$

$$\vec{B} = \mu_0 \overline{\overline{\mu_r}} \vec{H}, \quad (2.14)$$

$$\vec{J}_l = \overline{\overline{\kappa}} \vec{E}. \quad (2.15)$$

Die Materialspezifischen Tensoren  $\overline{\overline{\varepsilon_r}}$ ,  $\overline{\overline{\mu_r}}$  und  $\overline{\overline{\kappa}}$  lassen auch anisotrope Materialien zu, indem jeder Raumrichtung ein spezifischer Materialwert über den Tensor zugeordnet werden kann. Ist der Tensor kein Diagonaltensor, kann eine Komponente des elektrischen Feldes (z. Bsp.  $E_z$ ) von einer anderen räumlichen Komponente der dielektrischen Verschiebung (z. Bsp.  $D_x$ ) abhängig sein. Im Falle von isotropen, homogenen und linearen Material können die Diagonaltensoren durch eine skalares  $\varepsilon_r$ ,  $\mu_r$  und  $\kappa$  ersetzt werden.

### 2.1.3 Stetigkeitsbedingungen

An Materialgrenzen, gleich ob sich Permittivität, Permeabilität oder elektrische Leitfähigkeit ändern, müssen Stetigkeitsbedingungen erfüllt werden. Eine Änderung von Permittivität und elektrischer Leitfähigkeit stellen eine Anforderung an die elektrischen Feldkomponenten und eine Änderung der Permeabilität an die magnetischen Feldkomponenten. Die Stetigkeitsbedingungen können direkt aus den MAXWELL'schen Gleichungen (2.1-2.4) unter Verwendung einfacher Beispiele hergeleitet werden [Hen20; Sim93]. Mit der Notation, dass  $\vec{n}$  der Normalenvektor der Fläche an der Materialgrenze  $\Omega$  ist, die die Gebiete 1 und 2 voneinander

trennt, lassen sich die Stetigkeitsbedingungen angeben als:

$$\vec{n} \times (\vec{E}_2 - \vec{E}_1) \Big|_{\Omega} = 0, \quad (2.16)$$

$$\vec{n} \cdot (\vec{D}_2 - \vec{D}_1) \Big|_{\Omega} = \varsigma_q, \quad (2.17)$$

$$\vec{n} \times (\vec{H}_2 - \vec{H}_1) \Big|_{\Omega} = \vec{K}, \quad (2.18)$$

$$\vec{n} \cdot (\vec{B}_2 - \vec{B}_1) \Big|_{\Omega} = 0. \quad (2.19)$$

Die Flächenladungsdichte ist definiert als  $\varsigma_q$  und der Flächenstrom als  $\vec{K}$ . Diese treten nur in Fällen auf, wo mindestens einer der Halbräume eine Leitfähigkeit besitzt oder die Flächenladungsdichte bzw. der Flächenstrom direkt eingepreßt wird. Für  $\varsigma_q = 0$  und  $\vec{K} = 0$  sind dementsprechend die Normalkomponenten von  $\vec{D}$  und  $\vec{B}$  sowie die Tangentialkomponenten von  $\vec{E}$  und  $\vec{H}$  an der Materialgrenze stetig.

## 2.1.4 Energie

Die elektrische und magnetische Energiedichte lassen sich mit den folgenden allgemeingültigen Ausdrücken angeben:

$$w_e = \int \vec{E} \cdot d\vec{D}, \quad w_m = \int \vec{H} \cdot d\vec{B}. \quad (2.20)$$

Die Gesamtenergie in einem Gebiet wird ermittelt, indem man über die entsprechende Energiedichte in dem Volumen integriert:

$$W_e = \int_V w_e \, dV, \quad W_m = \int_V w_m \, dV. \quad (2.21)$$

Im linearen Fall kann die gesamte Energie angegeben werden als

$$W = \int_V \frac{1}{2} (\varepsilon |E(t)|^2 + \mu |H(t)|^2) \, dV. \quad (2.22)$$

## 2.1.5 Die Wellengleichung

Ausgehend von der ersten und zweiten MAXWELL'schen Gleichung in differentieller Form (2.5) und (2.6), sowie der Voraussetzung, dass die Materialien linear und

zeitinvariant sind, kann eine Wellengleichung für das elektrische Feld hergeleitet werden.

### Inhomogene Wellengleichung

Für die Materialbeziehungen gilt hier, dass  $\vec{B} = \mu_0 \mu_r \vec{H} = \mu \vec{H}$ ,  $\vec{D} = \varepsilon_0 \varepsilon_r \vec{E} = \varepsilon \vec{E}$  und  $\vec{J} = \vec{J}_e + \kappa \vec{E}$  sind. Durch Umstellen von Gleichung (2.5) nach der magnetischen Feldstärke und einsetzen dieser in Gleichung (2.6) erhält man die allgemeine inhomogene Wellengleichung für das elektrische Feld:

$$\nabla \times \frac{1}{\mu} \nabla \times \vec{E}(\vec{r}, t) + \kappa \frac{\partial}{\partial t} \vec{E}(\vec{r}, t) + \varepsilon \frac{\partial^2}{\partial t^2} \vec{E}(\vec{r}, t) = -\frac{\partial}{\partial t} \vec{J}_e(\vec{r}, t). \quad (2.23)$$

### Homogene Wellengleichung

Mit der Voraussetzung, dass die Materialien homogen und verlustlos ( $\kappa = 0$ ) sind, keine eingepprägten Ströme ( $\vec{J}_e = 0$ ) und keine Ladungen ( $\rho = 0$ ) vorhanden sind, kann die inhomogene Wellengleichung in die homogene Wellengleichung überführt werden. Der LAPLACE-Operator ist gegeben als

$$\Delta \vec{E} = \nabla (\nabla \times \vec{E}) - \nabla \times \nabla \times \vec{E}. \quad (2.24)$$

Damit ergibt sich für das elektrische Feld unter Berücksichtigung der Ladungsfreiheit:

$$\nabla \times \nabla \times \vec{E}(\vec{r}, t) = \underbrace{\nabla (\nabla \cdot \vec{E}(\vec{r}, t))}_{=\rho=0} - \Delta \vec{E}(\vec{r}, t). \quad (2.25)$$

Mit diesen Voraussetzungen erhält man die homogene Wellengleichung für das elektrische Feld

$$\Delta \vec{E}(\vec{r}, t) - \varepsilon \mu \frac{\partial^2}{\partial t^2} \vec{E}(\vec{r}, t) = 0 \quad (2.26)$$

mit der Ausbreitungsgeschwindigkeit der Welle  $c = 1 / \sqrt{\varepsilon \mu}$ .

### Zusammenhang Zeit- und Frequenzbereich

Um in der Darstellungsform der Felder zwischen Zeitbereich und Frequenzbereich zu wechseln, kann ein zeitharmonischer Ansatz gewählt werden. Hier exemplarisch für das elektrische Feld mit

$$\vec{E}(\vec{r}, t) = \vec{E}(\vec{r}) \cos(\omega t - kz - \varphi) = \Re \left\{ \vec{E}(\vec{r}) e^{j(\omega t - kz)} \right\} \quad (2.27)$$

angegeben. Bei  $\underline{E}(\vec{r})$  handelt es sich um eine komplexe und zeitunabhängige Amplitude, die auch als Phasor bezeichnet wird. Der Phasenwinkel  $\varphi$  im Zeitbereich ist im Frequenzbereich in der komplexen Amplitude des elektrischen Feldes  $\underline{\vec{E}}(\vec{r}) = \vec{E}e^{j\varphi}$  enthalten. Für den Fall, dass die Felder gedämpft sind, erhält man eine komplexe Kreisfrequenz  $\underline{\omega} = \omega - j\alpha$  mit der Dämpfungskonstanten  $\alpha$ .

### Inhomogene Helmholtz-Gleichung

Wird als Ausgangspunkt zur Herleitung der (homogenen sowie inhomogenen) Wellengleichung die MAXWELL'schen Gleichung im Frequenzbereich verwendet, so kann die inhomogene HELMHOLTZ-Gleichung angegeben werden als

$$\Delta \underline{\vec{E}}(\vec{r}) - j\omega\mu\kappa \underline{\vec{E}}(\vec{r}) + \varepsilon\mu\omega^2 \underline{\vec{E}}(\vec{r}) = 0. \quad (2.28)$$

### Homogene Helmholtz-Gleichung

Die inhomogene Wellengleichung kann für homogene Materialien, Verlustlosigkeit  $\kappa = 0$  und bei Abwesenheit von eingepprägten Strömen ( $\vec{J}_e = 0$ ) in die homogene, vektorielle HELMHOLTZ-Gleichung überführt werden:

$$\Delta \underline{\vec{E}}(\vec{r}) + k^2 \underline{\vec{E}}(\vec{r}) = 0 \text{ mit } k^2 = \left(\frac{\omega}{c}\right)^2. \quad (2.29)$$

Die Materialkoeffizienten werden als  $\varepsilon\mu = 1/c^2$  zusammengefasst.

## 2.1.6 Lösung der Helmholtz-Gleichung – Ebene Wellen

Die HELMHOLTZ-Gleichung besitzt unendlich viele Lösungen. In kartesischen Koordinaten können als einfachste Lösung ebene Wellen angesetzt werden. Mit dem Phasor der elektrischen Feldstärke

$$\underline{\vec{E}}(\vec{r}) = \underline{E}_0 e^{\pm j\vec{k}\cdot\vec{r}} \vec{e}_i \quad \text{und} \quad |\vec{k}|^2 = k^2 \quad (2.30)$$

mit dem Wellenvektor  $\vec{k}$  der senkrecht auf dem elektrischen Feld mit Richtung  $\vec{e}_i$  steht und der Amplitude  $\underline{E}_0$ . Betrachtet man die Phasenfronten, so bilden diese Ebenen im Raum, deshalb die Namensgebung *ebene Welle*. Des Weiteren sind ebene Wellen beliebig superpositionierbar, wodurch auch komplexere Felder durch die Superposition eine Vielzahl ebener Wellen dargestellt werden können. Das

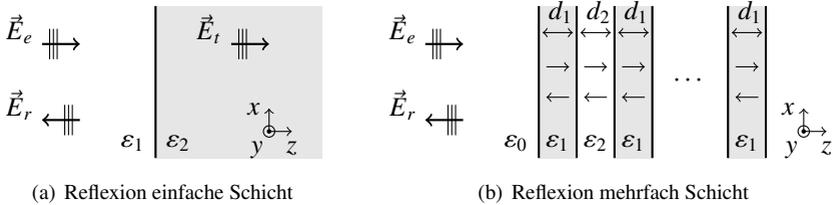


Abbildung 2.1: (a) Reflexion ebener Wellen an einer einfachen Materialschicht und (b) an einer mehrfachen Schicht mit periodischer Anordnung des Materials.

elektrische und magnetische Feld sind über den Wellenwiderstand  $Z$  wie folgt verknüpft:

$$\underline{\vec{E}}(\vec{r}) = Z \left( \underline{\vec{H}}(\vec{r}) \times \vec{e}_k \right) \quad \text{mit} \quad \vec{k} = k \vec{e}_k \quad \text{und} \quad Z = \sqrt{\frac{\mu}{\epsilon}}. \quad (2.31)$$

Es gibt Spezialfälle bei geführten Moden, die als transversal elektrisch (TE) und transversal magnetisch (TM) bezeichnet werden. Diese Lösungen zeichnen sich dadurch aus, dass sie ausschließlich in transversal zur Ausbreitungsrichtung die jeweils genannte Feldkomponente besitzen. Im Fall von TE verschwindet die Komponente der elektrischen Feldstärke in Ausbreitungsrichtung und im Fall von TM verschwindet die Komponente der magnetischen Feldstärke in Ausbreitungsrichtung.

### 2.1.7 Reflexion Ebener Wellen

Die Beschreibung der Reflexion von elektromagnetischen Wellen an Grenzflächen kann in der Regel sehr komplex werden. Sie ist von den Materialien, der Form der Grenzfläche sowie dem Einfallswinkel und Polarisation der einfallenden Welle abhängig. Es gibt Probleme mit einer oder mit mehreren Grenzschichten, die sich auch periodisch wiederholen können. Um die wichtigsten Parameter und das grundlegende Prinzip einzuführen, werden hier einfache Beispiele verwendet. Zunächst wird eine einfallende ebene Welle  $\vec{E}_e$  die in  $x$ -Richtung polarisierte ist, mit Ausbreitung in  $z$ -Richtung betrachtet. Diese trifft auf den Materialsprung von  $\epsilon_1$  und  $\epsilon_2$ , skizziert in Abb. 2.1(a).

Das gesamte elektrische und magnetische Feld im Teilbereich 1 mit  $\varepsilon_1$  setzt sich jeweils aus den einfallenden Wellen  $\underline{\vec{E}}_e, \underline{\vec{H}}_e$  und der reflektierten Wellen  $\underline{\vec{E}}_r, \underline{\vec{H}}_r$  zusammen:

$$\underline{\vec{E}}_1 = \underline{\vec{E}}_e + \underline{\vec{E}}_r = E_0 \left( e^{-jk_1 z} + r e^{+jk_1 z} \right) \vec{e}_x, \quad (2.32)$$

$$\underline{\vec{H}}_1 = \underline{\vec{H}}_e + \underline{\vec{H}}_r = \frac{E_0}{Z_1} \left( e^{-jk_1 z} - r e^{+jk_1 z} \right) \vec{e}_y, \quad (2.33)$$

angegeben mit der Material spezifischen Wellenzahl  $k_1 = \omega \sqrt{\mu_0 \varepsilon_0 \varepsilon_1}$  und der Impedanz  $Z_1 = \sqrt{\mu_0 / (\varepsilon_0 \varepsilon_1)}$ . Dabei werden Wellen die in positive  $z$ -Richtung laufen mit  $-jk_1 z$  und in negative  $z$ -Richtung laufende Wellen mit  $+jk_1 z$  im Exponenten der Exponentialfunktion gekennzeichnet. Die Felder im zweiten Teilbereich mit  $\varepsilon_2$  entsprechen dem transmittierten Feld. Mit der Wellenzahl  $k_2 = \omega \sqrt{\mu_0 \varepsilon_0 \varepsilon_2}$  und der Impedanz  $Z_2 = \sqrt{\mu_0 / (\varepsilon_0 \varepsilon_2)}$  erhält man:

$$\underline{\vec{E}}_2 = \underline{\vec{E}}_t = E_0 t e^{-jk_2 z} \vec{e}_x, \quad (2.34)$$

$$\underline{\vec{H}}_2 = \underline{\vec{H}}_t = \frac{E_0}{Z_2} t e^{-jk_2 z} \vec{e}_y. \quad (2.35)$$

Mit Hilfe der Stetigkeitsbedingungen aus Abschnitt 2.1.3 lassen sich der Faktor für Reflexion  $r$  und Transmission  $t$  in Abhängigkeit der Wellenimpedanzen angeben mit:

$$r = \frac{Z_2 - Z_1}{Z_2 + Z_1} \quad \text{und} \quad t = \frac{2Z_2}{Z_1 + Z_2}. \quad (2.36)$$

Liegt eine Mehrfachsicht vor, bei der sich zwei Materialien periodisch wiederholen, siehe Skizze in Abb. 2.1(b), können Reflexion und Transmission über äquivalente Leitungersatzschaltbilder bestimmt werden, für Näheres siehe [VP19]. Für den Spezialfall, dass es sich um  $\lambda/4$  Schichten handelt und der Einfall orthogonal zur Grenzschicht ist, gelten einfachere Beziehungen, die sich in geschlossener Form angeben lassen. Der BRAGG-Reflektor, der im Bereich der Optik an verschiedenen Stellen Anwendung findet, besteht aus eben solchen  $\lambda/4$  Schichten. Die Schichten seien mit dem Index  $i$  durchnummeriert. Für die Schichtdicke gilt dabei  $d_i = \frac{\pi}{2k_{xi}}$  mit  $k_{xi} = k_0 \sqrt{n_i^2 - n_1^2 \sin^2(\varphi)}$  und der Schichtwiderstand kann angegeben werden als:

$$Z_{ai} = \frac{Z_{iE}^2}{Z_{i+1}} \quad \text{mit} \quad Z_{iE} = \frac{k_0}{k_{xi}} \sqrt{\frac{\mu_0}{\varepsilon_0}}. \quad (2.37)$$

Der Reflexionskoeffizient kann nun mit Hilfe der Wellenimpedanz  $Z_a$  der ersten Schicht, die man durch Transformation aller andere Wellenimpedanzen an den Anfang erhält, angegeben werden als:

$$r_E = \frac{Z_a - Z_{1E}}{Z_a + Z_{1E}}. \quad (2.38)$$

Für Reflexionen, deren Einfall nicht orthogonal zur Materialgrenze ist, muss der Einfallswinkel  $\varphi$  berücksichtigt werden. Des Weiteren muss die Polarisation der einfallenden Welle beachtet werden, so unterscheidet man zwischen dem Fall der parallelen und senkrechten Polarisation. Für mehr Informationen sei der Leser auf [Hen20; Sim93] verwiesen. Dort werden auch Spezialfälle wie totale Reflexion und der BREWSTER-Winkel beschrieben.

### 2.1.8 Wellengleichung in Zylinderkoordinaten

Für den verlustfreien Fall ( $\kappa = 0$ ), ohne Raumladung ( $\rho = 0$ ) und mit konstantem Material ( $\varepsilon$  und  $\mu$ ), erhält man nach Abschnitt 2.1.5 die Wellengleichung in Zylinderkoordinaten:

$$\Delta \vec{E} + \mu \varepsilon \frac{\partial^2 \vec{E}}{\partial t^2} + \mu \frac{\partial \vec{J}}{\partial t} = 0. \quad (2.39)$$

Hier ist der vektoriellen LAPLACE-Operator in Zylinderkoordinaten wie folgt angegeben:

$$\begin{aligned} \Delta \vec{E}(\rho, \varphi, z) = & \left( \frac{\partial^2 E_\rho}{\partial \rho^2} + \frac{1}{\rho} \frac{\partial E_\rho}{\partial \rho} + \frac{1}{\rho^2} \frac{\partial^2 E_\rho}{\partial \varphi^2} + \frac{\partial^2 E_\rho}{\partial z^2} - \frac{2}{\rho^2} \frac{\partial E_\varphi}{\partial \varphi} - \frac{E_\rho}{\rho^2} \right) \vec{e}_\rho \\ & + \left( \frac{\partial^2 E_\varphi}{\partial \rho^2} + \frac{1}{\rho} \frac{\partial E_\varphi}{\partial \rho} + \frac{1}{\rho^2} \frac{\partial^2 E_\varphi}{\partial \varphi^2} + \frac{\partial^2 E_\varphi}{\partial z^2} + \frac{2}{\rho^2} \frac{\partial E_\rho}{\partial \varphi} - \frac{E_\varphi}{\rho^2} \right) \vec{e}_\varphi \\ & + \left( \frac{\partial^2 E_z}{\partial \rho^2} + \frac{1}{\rho} \frac{\partial E_z}{\partial \rho} + \frac{1}{\rho^2} \frac{\partial^2 E_z}{\partial \varphi^2} + \frac{\partial^2 E_z}{\partial z^2} \right) \vec{e}_z \end{aligned} \quad (2.40)$$

Für Spezialfälle kann der vektorielle LAPLACE-Operator vereinfacht werden, zum Beispiel im nachfolgend beschriebenen Zylinderhohlleiter oder auch für den Zylinderresonator.

#### Der Zylinderhohlleiter

Der Zylinderhohlleiter besitzt den Radius  $r$ , die Wände sind aus perfekt elektrisch leitendem Material (PEC) mit  $\kappa \rightarrow \infty$ . Es kann gezeigt werden, dass die Aus-

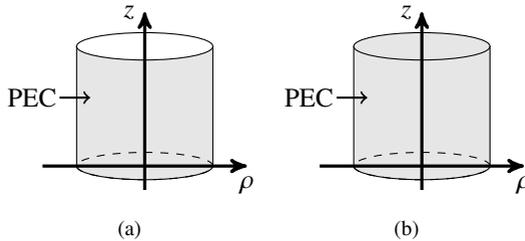


Abbildung 2.2: Skizze eines (a) Zylinderhohlleiters und (b) Zylinderresonators aus perfekt elektrisch leitendem Material (PEC) mit  $\kappa \rightarrow \infty$ .

breitung einer Welle in  $z$ -Richtung durch die skalare Wellengleichung mit dem Potential  $A_z$  zur Lösung angesetzt werden kann als [Hen20]:

$$\Delta(A_z \vec{e}_z) + k^2(A_z \vec{e}_z) = 0. \quad (2.41)$$

Mit dem Ansatz  $\vec{E} = \nabla \times \vec{A}$  können die transversal elektrische (TE) Moden und mit  $\vec{H} = \nabla \times \vec{A}$  die transversal magnetischen (TM) Moden berechnet werden. Da das Vektorpotential  $\vec{A}$  ausschließlich eine  $z$ -Komponente besitzt, kann der vektorielle LAPLACE-Operator für Zylinderkoordinaten aus Gleichung (2.40) vereinfacht werden zu:

$$\Delta A_z = \left( \frac{\partial^2 A_z}{\partial z^2} + \frac{1}{\rho} \frac{\partial A_z}{\partial \rho} + \frac{1}{\rho^2} \frac{\partial^2 A_z}{\partial \varphi^2} + \frac{\partial^2 A_z}{\partial z^2} + k^2 A_z \right) \cdot \vec{e}_z = 0. \quad (2.42)$$

Mit dem Produktansatz nach BERNOULLI und der Trennung der Variablen erhält man die BESSEL'sche Differentialgleichung, mit der Lösung für das Vektorpotential

$$A_z(\rho, \varphi, z) = J_m(K\rho) \begin{cases} \sin(m\varphi) \\ \cos(m\varphi) \end{cases} e^{-jk_z z} \quad (2.43)$$

und damit das elektrische Feld der TE-Mode

$$\vec{E} = \begin{cases} -C \frac{m}{\rho} J_m(K\rho) \sin(m\varphi) e^{-jk_z z} \\ -CK J'_m(K\rho) \cos(m\varphi) e^{-jk_z z} \\ 0 \end{cases}. \quad (2.44)$$

Hier ist  $m$  die Modenordnung in azimuthaler Richtung und  $k_z = \sqrt{k^2 - K^2} = \sqrt{\omega^2 \mu \epsilon - K^2}$  die Dispersionsbeziehung. Nicht nur die azimuthale  $\varphi$ -Komponente

hängt von  $m$  ab, sondern auch die radiale Komponente. Diese ist durch  $K$  mit  $k_z$  und  $m$  (über die Separationsbedingung) verknüpft. Die Phasenfront und die Amplitude des Feldes werden durch die BESSELFunktion verändert. Dies ist bedingt durch die Zylinderkoordinaten, dass unabhängig vom Radius, immer dieselbe Leistung pro Fläche fließt. Die Cutoff Frequenzen für  $TE_{m,n}$  und  $TM_{m,n}$  Moden, mit Ordnung  $m$  für die azimutale und Ordnung  $n$  für die radiale-Richtung, können angegeben als:

$$f_{cut,TE_{m,n}} = \frac{c}{2\pi r} J'_{m,n}, \quad f_{cut,TM_{m,n}} = \frac{c}{2\pi r} J_{m,n} \quad (2.45)$$

mit der Lichtgeschwindigkeit  $c$ , dem Radius des Zylinderhohlleiters  $r$ ,  $J_{m,n}$  der  $n$ 'ten Nullstelle der Besselfunktion mit Ordnung  $m$  und  $J'_{m,n}$  der  $n$ 'ten Nullstelle der 1. Ableitung der Besselfunktion mit Ordnung  $m$ . Die TE und TM Moden mit denselben Indices besitzen unterschiedliche Cutoff-Frequenzen.

### Der Zylinderresonator

Ein Zylinderresonator ergibt sich, indem man den Zylinderhohlleiter in Ausbreitungsrichtung an den Stellen  $z = 0$  und  $z = h$  mit einer Wand aus PEC abschließt. Hier kann eine hin- und eine rücklaufende Welle angesetzt werden. An Deckel und Boden des Zylinderresonators tritt Reflexion auf. Bei den ausbreitungsfähigen Moden handelt es sich um stehende Wellen, die an diesen jeweils einen Feldknoten besitzen. In radialer und azimutaler Richtung ist das Feld identisch mit dem des Rundhohlleiters. Wenn das Feld in der Querschnittebene als  $\vec{E}_{2D}$  angegeben wird, kann das gesamte Feld als

$$\vec{E}(\rho, \varphi, z) = \vec{E}_{2D}(\rho, \varphi) \left( e^{-jk_z z} - e^{+jk_z z} \right) = \vec{E}_{2D}(\rho, \varphi) (-2j) \sin(k_z z) \quad (2.46)$$

angegeben werden. Die Resonanzfrequenz für TE und TM Moden sind wie beim Hohlleiter unterschiedlich:

$$f_{cut,TE_{m,n,p}} = \frac{c_0}{2\pi} \sqrt{\left( \frac{J'_{m,n}}{r} \right)^2 + \left( \frac{p\pi}{h} \right)^2}, \quad f_{cut,TM_{m,n,p}} = \frac{c_0}{2\pi} \sqrt{\left( \frac{J_{m,n}}{r} \right)^2 + \left( \frac{p\pi}{h} \right)^2} \quad (2.47)$$

und  $p$  gibt die Ordnung der Mode in  $z$ -Richtung an.

### 2.1.9 Felder in rotationssymmetrischen Anordnungen

Unter rotationssymmetrischen Anordnungen versteht man Anordnungen in Zylinderkoordinaten, die keine Abhängigkeit von der azimutalen Richtung  $\varphi$  aufweisen. Auf Grund der Separierbarkeit der MAXWELL'schen Gleichungen lässt

sich die allgemeine Lösung als Superposition unendlich vieler Moden darstellen [Wei77; Rie89; Deh93; Fis14; Kir16]. Dieser Abschnitt orientiert sich dabei an der eben genannten Veröffentlichung von WEILAND, sowie den Dissertationen von VAN RIENEN, DEHLER, FISCHER und KIRSCH. Diese Superposition entspricht einer FOURIERreihenentwicklung bezüglich der azimutalen Richtung  $\varphi$ . Hier exemplarisch für das elektrische Feld angeben:

$$\vec{E}(\rho, \varphi, z, t) = \sum_{m=0}^{\infty} \vec{E}_m^{(g)}(\rho, z, t) \cos(m\varphi) + \vec{E}_m^{(u)}(\rho, z, t) \sin(m\varphi) \quad (2.48)$$

Es ist  $\varphi \in [0, 2\pi]$  und  $m$  die azimutale Modenordnung. Die FOURIER-Koeffizienten können angegeben werden als:

$$\vec{E}_k^{(g)}(\rho, z, t) = \frac{1}{v_m} \int_0^{2\pi} \vec{E}(\rho, \varphi, z, t) \cos(m\varphi) d\varphi, \quad (2.49)$$

$$\vec{E}_k^{(u)}(\rho, z, t) = \frac{1}{\pi} \int_0^{2\pi} \vec{E}(\rho, \varphi, z, t) \sin(m\varphi) d\varphi, \quad (2.50)$$

mit den hochgestellten Indices g und u für die gerade und die ungerade Lösung,  $v_m = 2\pi$  für  $m = 0$  und  $v_m = \pi$  für  $m \neq 0$ . Diese Darstellung lässt sich analog auf die anderen Feldgrößen übertragen. Für  $m = 0$  ergibt sich die Monopolmode und für  $m > 0$  ergeben sich Moden höherer Ordnung. Diese werden unterschieden in TE und TM Moden. Als TE-Mode werden Moden mit Feldanteil  $E_\rho, E_\varphi, H_z$  und als TM Moden mit Feldanteil  $H_\rho, H_\varphi, E_z$  bezeichnet. Zusätzlich muss die Polarisation beachtet werden. Für das elektrische Feld in  $\rho$ - $z$ -Koordinaten kann der Arbeit von DEHLER [Deh93] folgende Darstellung entnommen werden:

$$\begin{pmatrix} E_\rho(\rho, \varphi, z, t) \\ E_\varphi(\rho, \varphi, z, t) \\ E_z(\rho, \varphi, z, t) \end{pmatrix} = \sum_{i=1}^2 \sum_{m=0}^{\infty} \begin{pmatrix} E_{\rho,m}^i(\rho, z) \cos(m\varphi - \alpha_i) \\ E_{\varphi,m}^i(\rho, z) \sin(m\varphi - \alpha_i) \\ E_{z,m}^i(\rho, z) \cos(m\varphi - \alpha_i) \end{pmatrix} \quad (2.51)$$

mit  $\alpha_1 = 0$  und  $\alpha_2 = \pi/2$ .

## 2.2 Resonatoren in der Optik

Resonatoren in der Optik werden verwendet um monochromatisches Licht mit hoher Intensität zu erzeugen. Sie können unterschiedlicher Bauformen sein, abhängig von der Anwendung. In Lasern werden die Kavitäten üblicherweise durch

zwei gegenüberliegende Spiegel gebildet. Innerhalb dieser befindet sich das aktive Material und durch die hohen Feldintensitäten kann dort die Schwelle zur stimulierten Emission überschritten werden. Um eine spezifische Wellenlänge zu emittieren, ist der Spiegel in Abstrahlungsrichtung bei dieser teilweise durchlässig. Das kann durch die Verwendung von DBR-Spiegeln (aus dem engl. für Distributed Bragg Reflector) erreicht werden [KL66; YY07; VP19].

Resonatoren, die whispering-gallery Moden (WGM) führen, können beispielsweise als Microdisc, sphärischer Resonator oder auch als Ringresonator realisiert werden. Diese Moden besitzen einen hohen Gütefaktor und eine hohe Finesse. Sie werden als Laserresonatoren, als Filter, zur Bestimmung von Materialparametern und als Sensoren verwendet [HÖY13; VD20].

Für alle Bauformen sind besonders die sich einstellende Resonanzfrequenz, die Güte und die zugehörige Feldverteilung von Interesse. Des Weiteren kann das transiente Verhalten interessant sein.

Dieser Abschnitt beginnt mit der Erläuterung allgemeiner Konzepte, die in verschiedensten Resonatoren in der Optik zum Einsatz kommen: Resonatoren aus perfekten Spiegeln, Gaußstrahl und -moden, DBR-Spiegel, WGM und die Güte von Resonatoren. Im Anschluss werden der VCSEL und die Microdisc eingeführt und die grundlegende Funktionsweise unter Verwendung der zuvor genannten Konzepte zusammengefasst. Die beiden Bauteile dienen in der späteren Auswertung als Anwendungsbeispiele, siehe Kapitel 6.

## 2.2.1 Grundlegende Konzepte

### Resonatoren aus perfekten Spiegeln

Die einfachste Anordnung ist ein FABRY-PEROT-Resonator. Dieser besteht aus zwei im Abstand  $L$  gegenüberliegenden, geraden Spiegeln, skizziert in Abb. 2.3(a). Die folgenden Beschreibungen sind [KL66; KS08] entnommen, dort finden sich auch Lösungen für weitere Anordnungen. Gerade Spiegel sind in der Realität nicht so einfach produzierbar. Kleine Abweichungen können zu einem schnellen Anstieg an Verlusten führen [Kne+20]. Deshalb werden oft konfokale Resonatoren mit Krümmungsradius  $\mathfrak{R}$  verwendet, siehe Abb. 2.3(b) und 2.3(c). Für diese Resonatoren kann der Resonator Parameter  $g_i$  angegeben werden als:

$$g_i = 1 - \frac{L}{\mathfrak{R}_i} \quad \text{mit } i = \{1, 2\}. \quad (2.52)$$

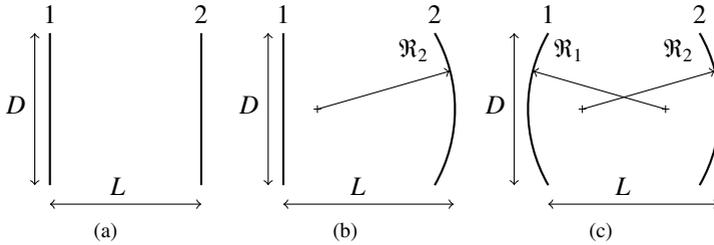


Abbildung 2.3: Resonatoren aus zwei gegenüberliegenden, perfekten Spiegeln mit Abstand  $L$ , Durchmesser  $D$  und unterschiedlicher Form. Mit geraden Spiegeln, auch als FABRY-PEROT-Resonator bekannt in (a), einem geraden und einen gekrümmten Spiegel mit Krümmungsradius  $\mathfrak{R}_2$  in (b) und zwei gekrümmten Spiegeln mit Krümmungsradien  $\mathfrak{R}_1$  und  $\mathfrak{R}_2$  in (c).

Für gerade Spiegel wird der Krümmungsradius mit  $\mathfrak{R} \rightarrow \infty$  angegeben. Diese Resonatoren können durch entsprechende Ersatzanordnung von optischen Linsen dargestellt werden. Üblicherweise werden diese mit Hilfe von Strahlen-Transfer Matrizen beschrieben. Daraus erhält man das Stabilitätskriterium für die aus zwei Spiegeln bestehenden Resonatoren zu:

$$0 < g_1 g_2 < 1. \quad (2.53)$$

Für den FABRY-PEROT-Resonator können die Resonanzfrequenz  $f_{res}$  und die Phasenänderung für den einmaligen Durchlauf des Resonators  $\phi_q$  angegeben werden als:

$$f_{res} = q \frac{v_{ph}}{2L} \quad \text{und} \quad \phi_q = \pi q = \frac{2\pi L}{\lambda_{res}}. \quad (2.54)$$

Hier entspricht  $q$  der longitudinalen Modenordnung,  $v_{ph}$  der Phasengeschwindigkeit und  $\lambda_{res}$  der Resonanzwellenlänge. Die Phasengeschwindigkeit ist definiert als das Verhältnis von Kreisfrequenz  $\omega$  zu Wellenzahl  $k$  als  $v_{ph} = \omega/k$ . Die Resonanzwellenlänge kann mit der Resonanzfrequenz über die Lichtgeschwindigkeit verknüpft werden als  $\lambda_{res} = c/f_{res}$ .

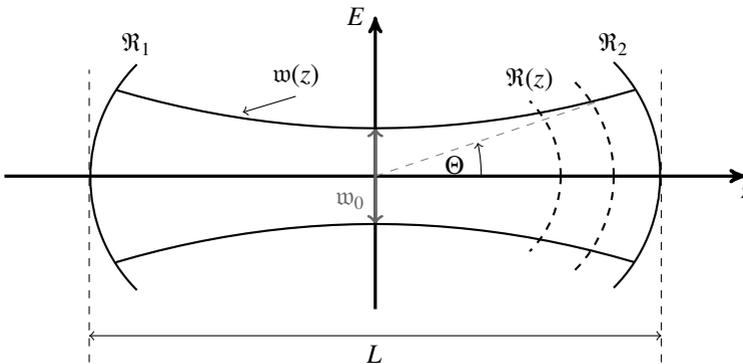


Abbildung 2.4: Schematische Darstellung der Intensität des elektrischen Feldes  $\vec{E}$  für einen Gaußstrahl innerhalb eines Resonators mit perfekten Spiegeln, deren Krümmungsradien an die Krümmung des Gaußstrahls angepasst sind. Mit Abstand der Spiegel  $L$ , dem ortsabhängigen Krümmungsradius  $\mathfrak{R}(z)$  und den Radien der Spiegel  $\mathfrak{R}_1$  und  $\mathfrak{R}_2$ ; sowie der minimalen Strahlweite  $w_0$  und der Ortsabhängigen Strahlweite  $w(z)$ , die den Abfall der maximalen Feldstärke  $E_0$  auf  $E_0/e$  markiert. Der Öffnungswinkel des Gaußstrahls wird mit  $\Theta$  angegeben. Die Abb. ist in Anlehnung an [VP19].

### Gaußstrahl und Gaußmoden

Für die konfokalen Resonatoren aus Abb. 2.3(b) und 2.3(c) müssen die sich einstellenden Feldlösungen näher betrachtet werden, um die Resonanzfrequenz und Feldverteilungen zu ermitteln. In zylindrischen, konfokalen Resonatoren, die in radialer Richtung offen sind, stellen sich Moden mit einem Gaußprofil ein. Das Profil eines solchen Gaußstrahls sei im Längsschnitt in Abb. 2.4 skizziert. Dieser Abschnitt orientiert sich an [KL66; YY07; VP19]. Dort sind auch detailliertere Angaben zur Herleitung gemacht, sowie die Lösung in Zylinderkoordinaten angegeben.

Die Feldverteilung erhält man durch Lösen der HELMHOLTZ-Gleichung

$$\Delta \underline{\vec{E}} + k^2(\vec{r}) \underline{\vec{E}} = 0. \quad (2.55)$$

Für eine lineare Polarisation des elektrischen Feldes, zum Beispiel in  $x$ -Richtung

kann das elektrische Feld mit Hilfe der Ansatzfunktion  $\underline{E}_x = \Psi(x, y, z)e^{-jkz}$  angegeben werden. Die Feldamplitude variiert dabei nur langsam in Bezug auf  $z$ , sodass die Ableitung  $\frac{\partial^2 \Psi}{\partial z^2}$  vernachlässigt werden kann, die Gleichung vereinfacht sich zu:

$$\frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \Psi}{\partial y^2} - 2jk \frac{\partial \Psi}{\partial z} = 0. \quad (2.56)$$

Eine Lösung der Gleichung ist die Funktion

$$\Psi = e^{-j(P(z) + \frac{k}{2q(z)}r^2)} \quad \text{mit} \quad r^2 = x^2 + y^2. \quad (2.57)$$

Es bezeichnet  $P(z)$  die komplexe Phasenverschiebung und  $q(z)$  die Änderung der Feldintensität. Die Grundmode der Resonatoren entspricht einem kohärenten Lichtstrahl mit gaußförmigem Intensitätsprofil und stellt üblicherweise die Lösung von Interesse dar. Es gibt auch Moden höherer Ordnung, die hier nicht weiter von Bedeutung sind. Um die Grundmode beschreiben zu können werden die reellen Strahlparameter  $\Re$  und  $w$  in Abhängigkeit des komplexen Strahlparameters  $q$  eingeführt:

$$\frac{1}{q} = \frac{1}{\Re} - j \frac{\lambda}{\pi w} \quad (2.58)$$

Dabei beschreibt  $\Re(z)$  die Krümmung der Wellenfronten und  $w(z)$  die Strahltaille des elektrischen Feldes in Ausbreitungsrichtung entlang der  $z$ -Achse. Die beiden Parameter sind wie folgt definiert:

$$w^2(z) = w_0^2 \left[ 1 + \left( \frac{\lambda z}{\pi w_0^2} \right)^2 \right], \quad (2.59)$$

$$\Re(z) = z \left[ 1 + \left( \frac{\pi w_0^2}{\lambda z} \right)^2 \right]. \quad (2.60)$$

Hier ist  $w_0$  der minimale Radius der Strahltaille. Der Öffnungswinkel für das Fernfeld kann angegeben als  $\Theta = \frac{\lambda}{\pi w_0}$ . Für die elektrische Feldkomponente in  $x$ -Richtung ergibt sich

$$\underline{E}_x = \frac{w_0}{w(z)} \Psi_0 e^{\left( -jk_0 n \left( z + \frac{z^2}{2\Re(z)} \right) + j \arctan \left( \frac{\lambda z}{\pi w_0^2} \right) - \frac{r^2}{w^2(z)} \right)} \quad (2.61)$$

Für eine linear in  $x$ -Richtung polarisierte Gaußmode kann das Feld in rotations-symmetrischen Koordinaten genau durch die Modenordnung  $m = 1$  dargestellt werden. Dies wird bei näherer Betrachtung der Gleichung (2.51) offensichtlich, denn für  $m = 0$  erhält man ein Feld, dass in radiale Richtung weist. Erst

durch die Verwendung von  $m = 1$  erhält man durch Kombination der  $\rho$ - und  $\varphi$ -Komponenten ein Feld das rein in  $x$ -Richtung polarisiert ist.

Die Resonanzfrequenz für einen Resonator mit konfokalen Spiegeln kann in Zylinderkoordinaten angegeben werden als [KL66]:

$$f_{p,l,q} = \frac{c_0}{2L} \left( q + \frac{(2p + l + 1)}{\pi} \arccos \left( \sqrt{\left(1 - \frac{L}{\mathfrak{R}_1}\right) \left(1 - \frac{L}{\mathfrak{R}_2}\right)} \right) \right) \quad (2.62)$$

mit der azimuthalen und radialen Moden Ordnung  $p$  und  $l$ , sowie der Anzahl halben Wellenlängen in Ausbreitungsrichtung innerhalb des Resonators  $q$ . Für die Grundmode gilt hier  $p = 0$ ,  $l = 0$  und  $q > 0$ . Ist einer der Spiegel eben, so wird der entsprechende Krümmungsradius  $\mathfrak{R} \rightarrow \infty$  gewählt.

### DBR-Spiegel

Der DBR-Spiegel besteht aus sich abwechselnden dünnen Schichten von Material mit unterschiedlicher Brechzahl  $n_1$  und  $n_2$ . In der Regel beträgt die jeweilige Schichtdicke  $\lambda/4$ . Trifft eine ebene Welle auf dieses periodische Material, so findet an jeder Grenzschicht erneut Reflexion und Transmission statt. Dabei erfährt die Welle an der Grenzfläche vom höheren zum niedrigeren Brechungsindex eine Phasendrehung um  $\lambda/2$ . Da beide Schichten je  $\lambda/4$  dick sind, interferiert die reflektierte Welle genau destruktiv mit der Einfallenden. Für von  $\lambda$  abweichende Wellenlängen ist dies nur bei vielfachen von  $\lambda$  der Fall. Eine nähere Beschreibung dazu ist bereits in Abschnitt 2.1.7 zu finden. In [YY07] ist die Funktionsweise des DBR-Spiegels ausführlich beschrieben, die wichtigsten Aspekte daraus sind im Folgenden zusammengefasst. Innerhalb des DBR-Spiegels stellt sich eine sogenannte Bloch-Welle als Lösung ein. Für diese gilt, dass sie für Frequenzen innerhalb der photonischen Bandlücke exponentiell gedämpft wird, was einer evaneszenten Welle entspricht. Frequenzen außerhalb der photonischen Bandlücke können sich ungehindert ausbreiten. Der Reflexionsgrad innerhalb der Bandlücke ist zusätzlich von der Anzahl der Schichten abhängig und nimmt mit steigender Anzahl an Schichten zu. Der Reflexionsfaktor kann nach Gleichung (2.38) bestimmt werden. Das Verhältnis der Mittenfrequenz  $\omega_0$  zu der Breite der photonischen Bandlücke  $\Delta\omega$  ist definiert als:

$$\Delta\omega = \omega_0 \frac{4}{\pi} \sin^{-1} \left( \left| \frac{n_2 - n_1}{n_2 + n_1} \right| \right) \quad (2.63)$$

mit den alternierenden Brechzahlen  $n_1$  und  $n_2$ . Für sehr kleine Unterschiede in den Brechzahlen erhält man eine besonders schmale Bandlücke. Somit ist es möglich

Spiegel zu entwerfen, die nur sehr schmalbandig bei einer Frequenz reflektieren, wobei der Grad der Reflexion und Transmission durch die Wahl der Anzahl an Schichten gesteuert werden kann. Diese Eigenschaft wird in der Optik benutzt: Es lassen sich optische Kavitäten bauen, die eine bestimmte Resonanzfrequenz besitzen, jedoch trotzdem einen kleinen Anteil bei eben dieser Frequenz abstrahlen. Frequenzen, die außerhalb der Bandlücke liegen, sehen keinen Spiegel und werden somit nicht im Resonator angeregt.

### Whispering-gallery Moden

Der Abschnitt zu WGM orientiert sich an [HÖY13; VD20]. Diese speziellen Felder treten in Folge von totaler Reflexion innerhalb sphärischer oder zylindrischer Geometrien auf, die nach einem vollen Umlauf positiv interferieren. Dabei konzentriert sich das Feld am Rand der Struktur und „kriecht“ an dieser entlang. Dieses Phänomen wurde erstmals von RAYLEIGH für akustische Wellen in [Ray96] veröffentlicht. Dass diese Moden ein hohes Potential für Bauteile in der Optik darstellen, wenn man sie in dielektrischen Strukturen anregt, beschrieb erstmals RICHTMEYER in [Ric39].

Heute werden WGM Resonatoren in der integrierten Optik sowie in der Biosensorik eingesetzt und lassen sich in zwei Gruppen einteilen. Zum einen Mikrokugeln, Mikroblasen und Mikroflaschen, die zum Beispiel durch das Schmelzen von Glas- oder Polymerfasern hergestellt oder mit Flüssigkeiten realisiert werden können. Zum anderen gibt es Mikroscheiben (im Weiteren bezeichnet aus dem engl. als Microdiscs), Toroide oder Mikroringe, die als integrierte Komponenten aus dielektrischen Materialien auf einem Chip hergestellt werden.

In Abb. 2.5 ist in (a) die Totalreflexion am inneren Rand einer runden dielektrischen Struktur skizziert und in (b) ist exemplarisch die Feldverteilung der elektrischen Feldstärke einer WGM dargestellt. Um die genannte Totalreflexion zu erhalten muss die Brechzahl des inneren Mediums größer sein als die des Außenraumes. Damit zudem konstruktive Interferenz nach einem vollen Umlauf der Sphäre auftritt, muss die Resonanzbedingung

$$2\pi r n_{\text{eff}} = m\lambda \quad (2.64)$$

erfüllt werden. Hier bezeichnet  $r$  den Radius,  $n_{\text{eff}}$  den effektiven Brechungsindex,  $m$  die Modenordnung in azimuthaler Richtung und  $\lambda$  die Wellenlänge. Eine Näherungslösung der Felder und relevanter Größe wie Resonanzfrequenz und Güte sind für die unterschiedlichen Bauformen separat zu bestimmen. Alle Bauform zeichnen sich in der Regel durch hohe Güten und ein kleines Modenvolu-

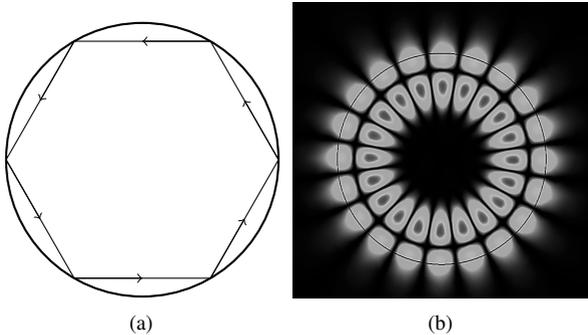


Abbildung 2.5: (a) Schematische Darstellung der totalen Reflexion innerhalb einer runden Struktur in Anlehnung an [VD20] und (b) exemplarisches Feldbild des Absolutwertes der elektrischen Feldstärke, einer whispering-gallery Mode mit azimuthaler Ordnung  $m = 10$  und radialer Ordnung  $p = 2$ .

men aus. Somit sind hohe Feldintensitäten bei kleiner Eingangsleistung möglich. Die Kopplung erfolgt über das evaneszente Feld im Außenraum, wobei dazu beispielsweise Wellenleiter oder Fasern genutzt werden können. Für weitere Informationen sei der Leser an [VD20; HÖY13] verwiesen.

### Güte von Resonatoren

Eine wichtige Größe zur Charakterisierung von Resonatoren ist deren Güte  $Q$  (im engl. quality-factor). Diese beschreibt, wie gut eine angeregte Mode in einem Resonator über lange Zeit schwingt. Üblicherweise werden die resonanten Felder in einer optischen Kavität durch unterschiedlichste Faktoren gedämpft [YY07]:

- Absorption und Streuung im Material
- Verlust durch nicht perfekte Reflexion ( $R < 1$ )
- Beugungsverluste bei endlich ausgedehnten Resonator Spiegeln

Die Güte lässt sich allgemein angeben als:

$$Q = \omega \frac{W_{\text{gespeichert}}}{P_{\text{verbraucht}}}, \quad (2.65)$$

mit der Kreisfrequenz  $\omega$ , der im Feld des Resonators gespeicherten Energie  $W_{\text{gespeichert}}$  und der im Resonator verbrauchten Leistung  $P_{\text{verbraucht}}$ . Beide Größen können aus dem Feld des Resonators ermittelt werden. Für den Fall, dass die komplexe Eigenfrequenz  $\underline{\omega}_{res}$  bekannt ist, wird die Güte wie folgt berechnet:

$$Q = \frac{\Re \{ \underline{\omega}_{res} \}}{2\Im \{ \underline{\omega}_{res} \}}. \quad (2.66)$$

### 2.2.2 Der vertikal emittierende Laser

Der VCSEL (aus dem engl. für vertical cavity surface emitting laser) ist eine Laserdiode, bei der die Abstrahlung senkrecht zum Substrat und der aktiven Zone erfolgt. Dies ist für Laserdioden eine Ausnahme. In der Regel erfolgt die Abstrahlung in horizontaler Richtung über die Kante. Anwendung finden die VCSEL als Lichtquellen in den folgenden Bereichen: integrierte photonisch-elektrische Systeme, moderne Kommunikationsnetze, Sensoren und in der medizinischen Diagnose [Kne+20].

Im Jahr 1960 wurde von MAINMAN der erste Laser vorgestellt [Mai60], kurz darauf gefolgt von der ersten Laserdiode in 1962 von HALL et.al [Hal+62]. In den folgenden Jahren wurde diese erheblich verbessert, zum Beispiel durch die Nutzung von Quantenfilmen unter der Verwendung von GaAs/AlGaAs für das aktive Material in 1974 [DWH74] und die Verwendung von DBR-Spiegeln in 1975 [VI75]. Als Veröffentlichung, die als Motivation diente was heutzutage als VCSEL bekannt ist, wird üblicherweise auf die Arbeit von Soda et al. aus dem Jahr 1979 [Sod+79] verwiesen. Bis heute sind VCSEL Gegenstand der Forschung und es gibt unterschiedlichste Anwendungsgebiete und darauf optimierte Bauformen. Zum Beispiel werden in der Kommunikationstechnik eine hohe Integrationsdichte, eine große Bandbreite und gleichzeitig niedrigen Energiekosten benötigt, die mit VCSEL als Lichtquellen erreicht werden können [Mor+21]. Auch im Bereich der 3D Sensorik wie Lidar sind VCSEL als Quellen vertreten [Xia+21]. Diese Beispiele sind hier exemplarisch genannt für die heute weit verbreitete Lichtquelle.

#### Aufbau und Funktionsweise

Der Aufbau eines VCSEL ist in Abb. 2.6(a) skizziert. Die Beschreibungen orientieren sich an [YY07; Kne+20]. Das Kernstück bildet die Kavität in der Mitte der Struktur die mehrere Quantenfilme aus aktivem Material beherbergt. Diese Kavität ist so ausgelegt, dass in longitudinaler Richtung eine ganze Anzahl an

halben Wellenlängen der von der aktiven Schicht emittierten Wellenlänge passen. Dabei wird üblicher Weise die Kavität so ausgelegt, dass das auftretende Intensitätsmaximum mit der Position der Quantenfilme zusammenfällt. Oben und unten wird die Kavität durch DBR-Spiegel begrenzt. Am direkten Übergang befindet sich noch eine Apertur, die für eine Begrenzung des Lichtstrahls sorgt. Eine analytische Beschreibung der sich ausbreitenden Gaußmode in dieser Kavität und die Berechnung der Resonanzfrequenz für perfekte elektrische Spiegel wurde bereits im Abschnitt 2.2.1 zuvor beschrieben und die Resonanzfrequenz ist in Gleichung (2.62) angegeben.

Die DBR-Spiegel werden mit Hilfe von  $\lambda/4$  Schichten zweierlei Materialien mit unterschiedlichen Brechzahlen  $n_1$  und  $n_2$  als periodische Struktur realisiert. Die Funktionsweise wurde im Abschnitt 2.2.1 näher erläutert. Sie werden hier so ausgelegt, dass ihre Bandlücke sehr schmalbandig bei der Emissionswellenlänge der Gesamtstruktur liegt. Da nur eine Abstrahlung über den oberen Spiegel gewünscht ist, wird der untere Spiegel mit einem  $R > 99.99\%$  ausgelegt und der obere Spiegel besitzt in der Regel eine Reflexion im Bereich von ca.  $99.97\% \leq R \leq 99.99\%$ . Der Reflexionsfaktor kann nach Gleichung (2.38) und der Zusammenhang von Bandbreite und Brechzahl nach Gleichung (2.63) bestimmt werden. Somit kann ein Teil des Lichtes über den oberen DBR-Spiegel emittiert werden. Der Strom, der zur Photonengeneration in der aktiven Zone benötigt wird, fließt üblicherweise direkt über die DBR-Spiegel. Um Verluste gering zu halten werden diese dafür hoch dotiert. Dabei wird in der Regel der untere n- und der obere Spiegel p-dotiert. Unterhalb des unteren DBR-Spiegels befindet sich noch ein Substrat.

Als Grundmode breitet sich wie bereits beschrieben eine Gaußmode aus. Die Intensität ist für einen Querschnitt in Abb. 2.6(b) skizziert. Es ist zu sehen, dass das Maximum mit der Lage der Quantenfilme aus aktivem Material zusammenfällt. Innerhalb der DBR-Spiegel klingt das Feld exponentiell ab. Man spricht von einer evaneszenten Mode. Der untere Spiegel besitzt eine größere Anzahl an Materialschichten und weist somit eine höhere Reflexion auf. Dies macht sich in einer höheren Reflexion im Vergleich zum oberen Spiegel bemerkbar. In der Regel werden die Strukturen in zylindrischer Bauweise realisiert. Detailliertere Beschreibungen können [YY07; Kne+20] oder anderen Standardwerken aus dem Bereich der Optik entnommen werden.

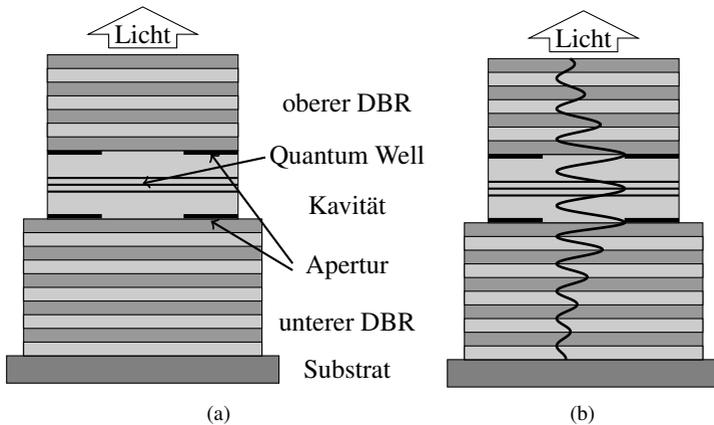


Abbildung 2.6: Schematischer Aufbau eines VCSEL in (a) und der sich einstellenden Feldintensität in (b). Die Abbildungen sind nicht maßstabstreu und in Anlehnung an Abb. 10.1 aus [Kne+20].

### 2.2.3 Die Microdisc

Die Microdisc ist ein Resonator aus dielektrischem Material der whispering-gallery Moden führt. Diese dielektrische Scheibe besteht aus einem Dielektrikum  $\varepsilon_i$  mit Radius  $r$  und dicke  $d$ . Dabei gilt für die Abmessungen bezüglich der Wellenlänge  $\lambda$ , dass  $r > \lambda$  und  $d < \lambda$  ist. Für das Material gilt, dass  $\varepsilon_i > \varepsilon_a$  ist, mit  $\varepsilon_a$  der Permittivität des Außenraumes. Die Feldlösung sowie Resonanzfrequenz und Güte lassen sich bei dieser Anordnung am besten numerisch bestimmen. Unter bestimmten Voraussetzungen ist auch eine analytische Beschreibung möglich.

#### Analytische Beschreibung der Feldlösung

Für den Fall, dass der Unterschied der Brechungsindexe innerhalb und außerhalb der Microdisc groß genug ist, verhält sich das Licht in  $z$ -Richtung wie in einem Schichtwellenleiter. Hier wird nur ein Auszug der Herleitung nach [VD20] angegeben. Die verwendeten Formulierungen gelten für Oberflächenplasmonen. Für den Fall einer quasi-TM polarisierten Welle mit  $E_z, H_\rho, H_\varphi$  kann das elektrische Feld angegeben werden als

$$\vec{E}(\vec{r}) = E_z \vec{e}_z = H(\rho) Z(z) e^{im\varphi} \vec{e}_z. \quad (2.67)$$

mit den Funktionen  $H(\rho)$  und  $Z(z)$  und der azimutalen Modenordnung  $m$ . Setzt man diesen Ansatz in die Wellengleichung in Zylinderkoordinaten aus Gleichung (2.39) ein, erhält man

$$\frac{1}{H(\rho)} \left( \frac{\partial^2}{\partial \rho^2} H(\rho) + \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} H(\rho) \right) + \frac{1}{Z(z)} \frac{\partial^2}{\partial z^2} Z(z) + \left( k^2 - \frac{m^2}{\rho^2} \right) = 0 \quad (2.68)$$

mit der Wellenzahl  $k = \sqrt{\epsilon_r} \omega / c_0$ . Für Lösungen mit  $m > 0$  erhält man Moden die sich im Uhrzeigersinn drehen und für  $m < 0$  Moden, die sich gegen den Uhrzeigersinn drehen. Es gilt für die erste Gattung der Besselfunktion mit ganzzahligen  $m$ :  $J_{-m}(x) = (-1)^m J_m(x) = J_m(-x)$ . Innerhalb der Microdisc kann die Wellenzahl  $k_{\text{eff}}$  definiert werden. Die  $\rho$ - und  $z$ -Abhängigkeit kann entkoppelt werden in zwei separate Gleichungen. Für die Funktionen  $H(\rho)$  und  $Z(z)$  lassen sich für den Bereich innerhalb und außerhalb der Microdisc Lösungsfunktionen ansetzen. Es ergeben sich für die  $z$ -Richtung eine gerade und eine ungerade Lösung  $Z_g$  und  $Z_u$ :

$$Z_g(z) = \begin{cases} C_1 e^{\sqrt{k_{\text{eff}}^2 - k_a^2} z}, & z < -\frac{d}{2} \\ C_2 e^{\sqrt{k_i^2 - k_{\text{eff}}^2}}, & |z| < \frac{d}{2} \\ C_1 e^{-\sqrt{k_{\text{eff}}^2 - k_a^2} z}, & z < \frac{d}{2} \end{cases} \quad Z_u(z) = \begin{cases} C_1 e^{\sqrt{k_{\text{eff}}^2 - k_a^2} z}, & z < -\frac{d}{2} \\ C_2 e^{\sqrt{k_i^2 - k_{\text{eff}}^2}}, & |z| < \frac{d}{2} \\ -C_1 e^{-\sqrt{k_{\text{eff}}^2 - k_a^2} z}, & z < \frac{d}{2} \end{cases} \quad (2.69)$$

mit der vom Material abhängigen Wellenzahl im inneren Bereich  $k_i = \sqrt{\epsilon_i} \omega / c$  und im äußeren Bereich  $k_a = \sqrt{\epsilon_a} \omega / c$ . Die Konstanten  $C_1$  und  $C_2$  können mit Hilfe der Stetigkeitsbedingungen ermittelt werden. Für die Wellenzahlen gilt im geraden Fall

$$\sqrt{k_{\text{eff}}^2 - k_a^2} = \sqrt{k_i^2 k_{\text{eff}}^2} \tan \left( \frac{d}{2} \sqrt{k_i^2 - k_{\text{eff}}^2} \right) \quad (2.70)$$

und im ungeraden Fall die Bedingung

$$\sqrt{k_{\text{eff}}^2 - k_a^2} = -\sqrt{k_i^2 k_{\text{eff}}^2} \cot \left( \frac{d}{2} \sqrt{k_i^2 - k_{\text{eff}}^2} \right). \quad (2.71)$$

Für die  $\rho$  Abhängigkeit lassen sich die folgenden Lösungen für den Bereich innerhalb  $H_i$  und außerhalb  $H_a$  der Microdisc finden

$$H_i(\rho) = \frac{J_m(k_{\text{eff}} \rho)}{J_m(k_{\text{eff}} \frac{d}{2})}, \quad H_a(\rho) = \frac{H_{1,m}(k_a \rho)}{H_{1,m}(k_a \frac{d}{2})} \quad (2.72)$$

mit der Hankelfunktion erster Art  $H_{1,m}$ . Wertet man die Stetigkeitsbedingung der magnetischen Flussdichte am radialen Rand der Microdisc aus, so ergibt sich die

Gleichung

$$k_{\text{eff}} \frac{J'_m(k_{\text{eff}} \frac{d}{2})}{J_m(k_{\text{eff}} \frac{d}{2})} = k_a \frac{H'_{1,m}(k_a \frac{d}{2})}{H_{1,m}(k_a \frac{d}{2})}. \quad (2.73)$$

Die Ableitung der Besselfunktion und der Hankelfunktion werden angegeben als  $J'$  un  $H'$ . Aus dieser Gleichung lassen sich  $\omega$  und  $k_{\text{eff}}$  unter Verwendung der Gleichungen (2.70) und (2.71) numerisch bestimmen. Damit erhält man ebenfalls die analytische Näherungslösung der elektromagnetischen Feldverteilung. Das Vorgehen zur Berechnung von quasi-TE polarisierten Moden ist analog.

# 3 Methode der Finiten Integration

Die MAXWELL'schen Gleichungen (2.1)-(2.4) bilden zusammen mit den Materialbeziehungen aus Gleichung (2.13)-(2.15) ein System räumlich und zeitlich gekoppelter Differenzialgleichungen, die das Verhalten elektromagnetischer Felder beschreiben. Für einfache Anordnungen lassen sich Problemstellungen analytisch lösen. Für komplexere Anordnungen wie dem VCSEL und der Microdisc aus Abschnitt 2.2 ist auch bei starker Vereinfachung in der Regel keine analytische Lösung der elektromagnetischen Feldverteilung möglich. Seitdem die Rechenkapazitäten zur Verfügung stehen, ist es üblich, Probleme dieser Art mit Hilfe einer geeigneten numerischen Methode zu approximieren, sodass die Näherung mit Hilfe eines Rechners bestimmt werden kann. Seit etwa der zweiten Hälfte des 20. Jahrhunderts sind solche numerischen Methoden Gegenstand der Forschung und auch im Einsatz. Hier seien exemplarisch einige Verfahren genannt, wie die Methode der Finite Integration (FIT), die Methode der Finiten Differenzen (FD), die Methode der Finiten Elemente (FEM) und die Randelemente Methode (BEM).

Im Rahmen dieser Arbeit wird die Methode der Finiten Integration verwendet, die auch als Finite Integrations Technik oder FI-Methode bekannt ist. Sie wurde 1977 von Thomas Weiland eingeführt [Wei77] und bis heute weiterentwickelt. Der Erfolg lässt sich zum Beispiel durch die kommerzielle Nutzung in der Software *CST Studio Suite*<sup>®</sup> [3DS19] belegen. Grundlage der FIT sind diskrete *Gitter-Maxwell-Gleichungen*, die in Matrix-Vektor Formulierung vorliegen. Aus diesen lassen sich alle problemspezifischen Differenzialgleichungen direkt herleiten. Die Vorgehensweise ist dabei analog zum kontinuierlichen Fall. Dies ist ein wesentlicher Unterschied zu den anderen genannten Methoden, bei denen üblicher Weise die problemspezifische Differenzialgleichung diskretisiert wird.

In diesem Kapitel wird zunächst in Abschnitt 3.1 auf die Diskretisierung der MAXWELL'schen Gleichungen, die Materialbeziehungen und die Randbedingungen eingegangen. Im Anschluss werden in 3.2 unterschiedliche Verfahren der Zeitdiskretisierung mit und ohne Leitfähigkeit vorgestellt. In Abschnitt 3.3 wird in die Stabilitätsanalyse zeitdiskreter Systeme eingeführt und die zuvor vorgestellten

numerischen Zeitbereichsverfahren werden bezüglich ihrer Stabilität untersucht. Zum Schluss wird in 3.4 die Diskretisierung für zylindersymmetrische Koordinaten erläutert.

## 3.1 Grundlagen der Methode der Finiten Integration

Die diskreten *Gitter-Maxwell-Gleichungen* sind der Ausgangspunkt der Methode der Finiten Integration. Die Diskretisierung des Rechengebietes mit einem dual orthogonalen Gitter ist in Abschnitt 3.1.1 näher erläutert. Danach werden die *Gitter-Maxwell-Gleichungen* angegeben und alle Größen definiert. Die Gleichungen werden vervollständigt durch die Angabe der Materialmatrizen in Abschnitt 3.1.3, die für jede Kanten-Flächen Beziehung im Gitter bestimmt werden. Für Problemstellungen, die auf einem endlichen Gitter diskretisiert werden, ist die Behandlung der Ränder von erheblichem Interesse, denn die Wahl der Randbedingung kann wesentlich die Simulation beeinflussen. Ein Überblick über verschiedene Typen von Randbedingung ist in Abschnitt 3.1.4 zu finden. Der Abschnitt orientiert sich an den Arbeiten von SCHUHMANN [Sch99], FISCHER [Fis14] und KIRSCH [Kir16].

### 3.1.1 Diskretisierung des Rechengebietes

Das Rechengebiet wird bezüglich seiner räumlichen Ausdehnung auf einen Bereich begrenzt, in dem es mit Hilfe eines primären Gitters  $\mathcal{G}$  und eines dualen, orthogonalen Gitters  $\tilde{\mathcal{G}}$  in kleine Volumina unterteilt wird. Üblicherweise finden kartesische Gitter Anwendung, wie zum Beispiel in der Software *CST Studio Suite*<sup>®</sup> [3DS19].

Aber auch andere Gitterformen, wie Zylindergitter [Deh93; Fis14; Kir16], Dreiecksgitter [Rie89] oder nicht-orthogonale Gitter [Sch99] sind möglich. Dies ist insbesondere dann vorteilhaft, wenn die Struktur und seine Materialverteilung durch das verwendete Gitter besonders gut abgebildet werden, wie es unter Verwendung eines kartesischen Gitters nicht möglich wäre.

Sowohl das primäre als auch das duale Gitter bestehen aus Volumen  $V_n, \tilde{V}_n$ , Flächen  $A_n, \tilde{A}_n$  und Kanten  $L_n, \tilde{L}_n$  wobei die dualen Größen jeweils durch eine Tilde gekennzeichnet sind. Alle Kanten und Flächen besitzen eine feste Orientierung. Das Gitter hat die Gitterschrittweiten  $\Delta u, \Delta v, \Delta w$  und die zugehörigen Metrifaktoren  $h_u, h_v, h_w$ . In Abb. 3.1 sind das primäre und duale Rechengitter für

ein quaderförmiges Rechengebiet und exemplarisch eine primäre Zelle skizziert. Die dualen Punkte  $\tilde{P}(i, j, k)$  erhält man, indem die Punkte des primären Gitters  $P(i, j, k)$  jeweils um eine halbe Gitterschrittweite ( $\frac{h_u \Delta u_i}{2}, \frac{h_v \Delta v_j}{2}, \frac{h_w \Delta w_k}{2}$ ) pro Raumrichtung verschoben werden, die Ränder benötigen eine Spezialbehandlung. Die Nummerierung der Punkte, Kanten, Flächen und Volumen richtet sich nach dem kanonischen Indizierungsschema. Die Anzahl der Punkte je Raumrichtung werden in  $N_u, N_v$  und  $N_w$  definiert und die Gesamtpunktzahl als  $N_p = N_u N_v N_w$  angegeben. Der kanonische Index  $n$  berechnet sich aus dem Tripel  $(i, j, k)$ , die jeweils angeben, an welcher Position in  $(u, v, w)$  Richtung sich der zu beschreibende Punkt im Gitter befindet.

$$n = 1 + (i - 1)M_u + (j - 1)M_v + (k - 1)M_w \quad (3.1)$$

Hier geben  $M_u, M_v$  und  $M_w$  die Anzahl an Schritten des kanonischen Indexes an, die für eine Verschiebung des Punktes um einen Schritt in  $u, v$  oder  $w$  Richtung benötigt werden, mit  $M_u = 1, M_v = N_u$  und  $M_w = N_u N_v$ .

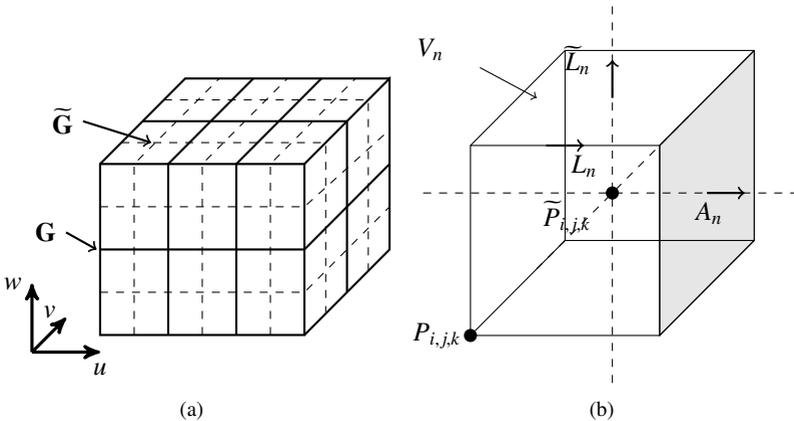


Abbildung 3.1: (a) Rechengebiet mit primärem und dualen Gitter und (b) Primäre Gitterzelle mit beliebigen Punkten  $P$  und  $\tilde{P}$ . Die Kanten  $L_n, \tilde{L}_n$ , Fläche  $A_n$  und Volumen  $V_n$  sind exemplarisch eingezeichnet.

### 3.1.2 Gitter-Maxwell-Gleichungen

Wie im kontinuierlichen Fall der MAXWELL'schen Gleichungen seien die diskreten *Gitter-Maxwell-Gleichungen* axiomatisch an den Anfang gestellt. Für eine detaillierte Herleitung der Gleichungen sei der Leser an [Wei77] oder auch die Arbeiten von VAN RIENEN, DOHLUS, THOMA oder SCHUHMAN [Rie89; Doh92; Tho97; Sch99] verwiesen.

$$\mathbf{C}\hat{\mathbf{e}} = -\frac{d}{dt}\hat{\mathbf{b}} \quad (\text{diskretes Induktionsgesetz}) \quad (3.2)$$

$$\tilde{\mathbf{C}}\hat{\mathbf{h}} = \frac{d}{dt}\hat{\mathbf{d}} + \hat{\mathbf{j}} \quad (\text{diskreter Durchflutungssatz}) \quad (3.3)$$

$$\tilde{\mathbf{S}}\hat{\mathbf{d}} = \mathbf{q} \quad (\text{diskreter Gauß'scher Satz}) \quad (3.4)$$

$$\mathbf{S}\hat{\mathbf{b}} = 0 \quad (\text{diskrete 4. Maxwell'sche Gleichung}) \quad (3.5)$$

Dabei repräsentieren Größen, die mit einem oder zwei Bögen gekennzeichnet sind, die Vektoren der elektrischen Gitterspannung  $\hat{\mathbf{e}}$  in [V], der magnetischen Gitterspannung  $\hat{\mathbf{h}}$  in [A], den elektrischen Gitterfluss  $\hat{\mathbf{d}}$  in [As], den magnetischen Gitterfluss  $\hat{\mathbf{b}}$  in [Vs], den Gitterstrom  $\hat{\mathbf{j}}$  in [A] und den Vektor der Ladung  $\mathbf{q}$  in [As]. Die Matrizen  $\mathbf{C}, \tilde{\mathbf{C}}$  werden als diskreter Rotationsoperator und  $\mathbf{S}, \tilde{\mathbf{S}}$  als diskreter Divergenzoperator bezeichnet. Für beide sind die Größen des dualen Gitters stets mit einer Tilde gekennzeichnet. Die Spannungen werden den Kanten, die Flüsse den Flächen und die Ladung den dualen Volumen im diskreten Gitter aus dem vorherigen Abschnitt 3.1.1 zugeordnet. Die Vektoren der Gitterspannungen besitzen die Dimension  $[1 \times N_L]$  mit  $N_L$  Anzahl der Kanten, die der Gitterflüsse sowie des Gitterstroms besitzen die Dimension  $[1 \times N_A]$  mit  $N_A$  Anzahl der Flächen und der Vektor der Ladung besitzt die Dimension  $[1 \times N_p]$  mit  $N_p$  Anzahl der Gitterpunkte. Die einzelnen Komponenten sind wie folgt auf dem Gitter definiert:

$$\hat{e}_n := \int_{L_n} \vec{E} \cdot d\vec{s}, \quad \hat{h}_n := \int_{L_n} \vec{H} \cdot d\vec{s}, \quad (3.6)$$

$$\hat{d}_n := \iint_{\bar{A}_n} \vec{D} \cdot d\vec{A}, \quad \hat{b}_n := \iint_{A_n} \vec{B} \cdot d\vec{A}, \quad (3.7)$$

$$\hat{j}_n := \iint_{\bar{A}_n} \vec{J} \cdot d\vec{A}, \quad q_n := \iiint_{\bar{V}_n} \varrho dV. \quad (3.8)$$

Die diskreten Operatoren der Rotation und der Divergenz können mit Hilfe der dünn besetzten, diagonalen Blockmatrizen  $\mathbf{P}_u, \mathbf{P}_v$  und  $\mathbf{P}_w$  angegeben werden. Dabei besitzen die Matrizen  $\mathbf{C}$  und  $\tilde{\mathbf{C}}$  die Dimension  $[3N_p \times 3N_p]$  und die Matrizen

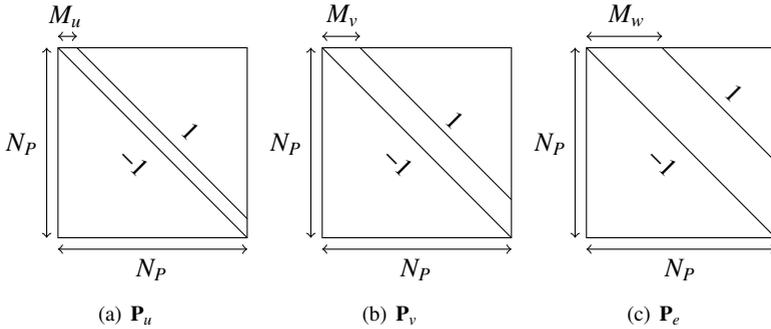


Abbildung 3.2: Skizze der Diagonalmatrizen  $\mathbf{P}_u$ ,  $\mathbf{P}_v$  und  $\mathbf{P}_w$  für kartesische Koordinaten mit Informationen über die partiellen Ableitungen in  $u$ -,  $v$ - und  $w$ -Richtung.

$\mathbf{S}$  und  $\widetilde{\mathbf{S}}$  die Dimension  $[N_P \times 3N_P]$ . Die  $\mathbf{P}$  Matrizen bilden jeweils die Ableitung in der im Index vermerkten Raumrichtung ab. Dabei ist die Hauptdiagonale mit einer minus eins und die Nebendiagonale im oberen Bereich im Abstand  $M_u$ ,  $M_v$  und  $M_w$  mit einer plus eins besetzt, siehe Skizze in Abb. 3.2.

$$\mathbf{C} = \begin{bmatrix} \mathbf{0} & -\mathbf{P}_w & \mathbf{P}_v \\ \mathbf{P}_w & \mathbf{0} & -\mathbf{P}_u \\ -\mathbf{P}_v & \mathbf{P}_u & \mathbf{0} \end{bmatrix}, \quad \widetilde{\mathbf{C}} = \mathbf{C}^T, \quad (3.9)$$

$$\mathbf{S} = [\mathbf{P}_u \mathbf{P}_v \mathbf{P}_w], \quad \widetilde{\mathbf{S}} = [-\mathbf{P}_u^T - \mathbf{P}_v^T - \mathbf{P}_w^T]. \quad (3.10)$$

Des Weiteren gilt, dass die Eigenschaft der kontinuierlichen Vektoralgebra  $\text{div rot} = 0$  auch für die diskreten Operatoren des primären und dualen Gitters erfüllt sind [Wei77]:

$$\mathbf{S}\mathbf{C} = 0 \quad \text{und} \quad \widetilde{\mathbf{S}}\widetilde{\mathbf{C}} = 0. \quad (3.11)$$

### 3.1.3 Materialbeziehungen

Die in Abschnitt 3.1.2 eingeführten Gitterspannungen  $\widehat{\mathbf{e}}$  und  $\widehat{\mathbf{h}}$ , die Gitterflüsse  $\widehat{\mathbf{d}}$  und  $\widehat{\mathbf{b}}$  sowie der Gitterstrom  $\widehat{\mathbf{j}}$  können für den Fall linearer, frequenzunabhängiger Materialien analog zum kontinuierlichen Fall aus Gleichung (2.13) - (2.15) über

die Materialbeziehungen miteinander verknüpft werden:

$$\widehat{\mathbf{d}} = \mathbf{M}_\varepsilon \widehat{\mathbf{e}}, \quad (3.12)$$

$$\widehat{\mathbf{b}} = \mathbf{M}_\mu \widehat{\mathbf{h}}, \quad (3.13)$$

$$\widehat{\mathbf{j}}_l = \mathbf{M}_\kappa \widehat{\mathbf{e}} \quad (3.14)$$

Der gesamte Gitterstrom  $\widehat{\mathbf{j}}$  setzt sich aus dem Leistungsstrom  $\widehat{\mathbf{j}}_l = \mathbf{M}_\kappa \widehat{\mathbf{e}}$  und dem eingepprägten Strom  $\widehat{\mathbf{j}}_e$  zusammen als

$$\widehat{\mathbf{j}} = \widehat{\mathbf{j}}_l + \widehat{\mathbf{j}}_e. \quad (3.15)$$

In der Regel sind diese Materialmatrizen ( $\mathbf{M}_\varepsilon, \mathbf{M}_\mu, \mathbf{M}_\kappa$ ) Diagonalmatrizen, bei denen nur die Hauptdiagonale besetzt ist. Die Einträge der Materialmatrizen werden wie folgt bestimmt:

$$\mathbf{M}_\varepsilon = \widetilde{\mathbf{D}}_A \mathbf{D}_\varepsilon \mathbf{D}_L^{-1}, \quad (3.16)$$

$$\mathbf{M}_\mu = \mathbf{D}_A \mathbf{D}_\mu \widetilde{\mathbf{D}}_L^{-1}, \quad (3.17)$$

$$\mathbf{M}_\kappa = \widetilde{\mathbf{D}}_A \mathbf{D}_\kappa \mathbf{D}_L^{-1}. \quad (3.18)$$

Die Diagonalmatrizen  $\mathbf{D}_L, \widetilde{\mathbf{D}}_L$  enthalten die Längen der primären und dualen Kante und  $\mathbf{D}_A, \widetilde{\mathbf{D}}_A$  die Größe der primären und dualen Flächen. In  $\mathbf{D}_\varepsilon, \mathbf{D}_\mu$  und  $\mathbf{D}_\kappa$  sind die gemittelten Werte der Materialien  $\varepsilon, \mu$  und  $\kappa$  für jede einzelne Kanten-Flächen Beziehung enthalten. Dabei gibt es unterschiedliche Verfahren zur Behandlung der Materialmittelung für  $\mathbf{D}_\varepsilon, \mathbf{D}_\mu$  und  $\mathbf{D}_\kappa$ , im Falle von Materialsprüngen.

Die einfachste Methode wird als *Staircase Approximation* bezeichnet. Dabei wird jeder primären Zelle der Materialwert zugeordnet, den die Zelle an ihrem Mittelpunkt besitzt. Das Resultat ist eine treppenstufenartige (engl. *staircase*) Nachbildung der Materialgrenze. Der Modellierungsfehler ist somit abhängig von der Auflösung des verwendeten Gitters.

An den Kanten und Flächen, wo sich Materialgrenzen befinden, wird der Materialeintrag an der dem kanonischen Index entsprechenden Stelle in  $\mathbf{D}_\varepsilon, \mathbf{D}_\mu$  oder  $\mathbf{D}_\kappa$  gemittelt. Diese Mittelung kann nach verschiedenen Prinzipien erfolgen, z. B. Kanten- oder Flächenmittelung [Kir16]. Auch komplexere Ansätze sind möglich. So gibt es bei reinen PEC Körpern die Möglichkeit teilgefüllter Zellen (im engl. „*perfect boundary approximation*“ (PBA)) [Kri+98] oder bei Materialsprüngen mit beliebigem Schnittwinkel bezüglich des Gitters [KKS16; Kir16] eine winkelabhängige Materialmittelung zu verwenden.

### 3.1.4 Randbedingungen

Durch die Diskretisierung mit einem Gitter, wird das Gebiet auf dem die MAXWELL'schen Gleichungen gelöst werden künstlich begrenzt. Somit ist es notwendig das Rechengebiet mit einer für die Anwendung passenden Randbedingung abzuschließen. Dabei wird zwischen *geschlossenen* und *offenen* Randbedingungen unterschieden. *Geschlossene* Randbedingungen ermöglichen keine Abgabe der Energie an den Außenraum, *offene* Randbedingung hingegen haben dies als Hauptaufgabe. An den Rändern des Rechengebietes ist zu beachten, dass auf dem dualen Gitter  $\tilde{\mathbf{G}}$  unvollständige Gitterumläufe vorliegen.

#### Geschlossene Randbedingungen

Bei geschlossenen Randbedingungen wird im Wesentlichen zwischen *elektrischem* und *magnetischem* Rand unterschieden [Jac07].

Der *elektrische* Rand, im Weiteren auch als PEC (aus dem engl. „Perfect Electric Conductor“) bezeichnet entspricht demnach einem perfekt elektrischen Leiter mit Leitfähigkeit  $\kappa \rightarrow \infty$ . Die tangentialen Komponenten des elektrischen Feldes und die normale Komponente des magnetischen Feldes verschwinden in diesem Fall. PEC kann implementiert werden, indem die primären Kanten zu Null gesetzt werden. Dies entspricht der Bedingung, dass für die tangentialen Komponenten des elektrischen Feldes  $\vec{E}_t = 0$  gilt. Dies führt zu Einträgen auf der Hauptdiagonalen der Materialmatrizen die ebenfalls null sind, sodass im Falle deren Inversen eine Pseudoinverse berechnet werden muss.

Der *magnetische* Rand, auch als PMC (aus dem engl. „Perfect Magnetic Conductor“) bekannt entspricht einem perfekten magnetischen Leiter mit  $\mathfrak{J}\{\mu\} \rightarrow \infty$ . Die tangentialen Komponenten des Magnetfeldes und die normale Komponente des elektrischen Feldes verschwinden. Dies kann implementiert werden, indem die nicht vollständigen Umläufe des magnetischen Feldes durch gekürzte duale Kanten am Rechengebietsrand berücksichtigt werden.

#### Offene Randbedingungen

In dem Fall, dass am Rand des Rechengebietes eine Wechselwirkung mit dem Außenraum stattfindet, erhält man durch die Verwendung geschlossener Randbedingungen einen nicht vernachlässigbaren Fehler. Dieser kann durch die Verwendung *offener* Randbedingungen verringert werden. Durch die Randbedingung

wird das Feld am Rand gedämpft, während die Reflexion möglichst gegen Null geht. Somit ist es möglich, auch die Abstrahlcharakteristik und Güte von Anordnungen zu bestimmen oder unendlich ausgedehnte Strukturen zu simulieren. Dabei unterscheiden sich die Art der *offenen* Randbedingungen, je nach Problemstellung und Frequenzbereich.

In der Elektrostatik findet der Ansatz Verwendung, dass das Potential auf dem Rand so gewählt wird als wäre das Potential in unendlicher Entfernung gegen Null [Kra90].

Für den Zeitbereich und somit Frequenzen größer als null, gibt es teilweise Randbedingungen für spezielle Anwendungen. Zudem kann zwischen Operatorbasierten und Materialbasierten Rändern unterschieden werden.

Zu den speziellen offenen Rändern gehören zum Beispiel der *Wellenleiterrand* für den Abschluss von Hohlleitern [Doh92] und für räumlich periodische Anordnungen die *periodischen Randbedingungen* [Wei86].

Die *Operatorbasierten* Randoperatoren wie Mur [Mur81] oder auch Higdon [Hig86] sind *offene* Randbedingungen, die auf bestimmte Frequenzen oder auch Einfallswinkel angepasst sind. Der Operator wird direkt auf dem Rand in das Rechengebiet eingearbeitet. Es sind keine weiteren Gitterzellen notwendig.

Zu den *materialbasierten* Randbedingungen gehört die PML (für engl. Perfectly Matched Layer) Randbedingung [Ber94]. Diese besteht aus zusätzlichen Materialschichten mit künstlicher Leitfähigkeit, die die herauslaufenden Wellen absorbieren. Die Randbedingung ist unabhängig von Frequenzen und Einfallswinkeln. Sie wird detailliert in Kapitel 4 beschrieben.

## 3.2 Zeitbereich

Im vorherigen Abschnitt 3.1 wurde die räumliche Diskretisierung der MAXWELL Gleichungen unter Verwendung der Methode der Finiten Integration beschrieben. Um mit den diskreten *Gitter-Maxwell-Gleichungen* transiente Simulationen der elektromagnetischen Felder durchzuführen, braucht es eine Diskretisierung der Zeitachse. Mit solchen *Zeitbereichsverfahren* können transiente Prozesse wie Einschwingvorgänge, Impulsantworten aber auch das Übertragungsverhalten

von Mehrtores analysiert werden. Dabei existieren unterschiedliche Verfahren der Zeitdiskretisierung, wobei hier nur eine Auswahl, die in späteren Kapiteln auch Anwendung findet, vorgestellt wird. Ein Vorteil des *Zeitbereichs* ist, dass das System in der Regel breitbandig angeregt wird, sodass auch die Auswertung der Übertragung in einem breiten Frequenzspektrum mit nur einer Simulation möglich ist. Dies findet vor allem im Bereich der Hochfrequenztechnik und der Optik Anwendung. Es wird hier auf die Simulation von Materialien mit und ohne Leitfähigkeit eingegangen, zu finden in Abschnitt 3.2.1 und 3.2.2. Begonnen wird mit dem *Leapfrog-Verfahren*, das zuerst von YEE unter dem Namen Finite-Differenzen Methode im Zeitbereich (FDTD aus dem engl. für: Finite Difference Time Domain) [Yee66] veröffentlicht wurde und weit verbreitet ist. Danach folgen die Verfahren mittels Vorwärts- und Rückwärtsdifferenzenquotienten. Diese Methoden gehören alle zu den expliziten Methoden. So wird im Anschluss eine Variante des impliziten Zeit-Updates, das *Newmark-beta-Verfahren* eingeführt. Im zweiten Teilabschnitt wird die Behandlung von leitfähigem Material an Hand verschiedener Verfahren wie *verschobene Allokation*, *arithmetische Mittelung* und *Exponentieller Zeitschritt* erläutert. Der Abschnitt 3.2.4 behandelt die *Eigenlösung*, *Dispersion* und *Stabilität* der Zeitdiskretisierung. Dabei wird ausführlich die Stabilität der einzelnen Verfahren diskutiert. Die Erläuterungen zum Zeitbereich orientieren sich an den Arbeiten von DOHLUS [Doh92] und ТНОМА [Tho97].

### 3.2.1 Zeitdiskretisierungsverfahren ohne Leitfähigkeit

Alle *Zeitbereichsverfahren* haben gemeinsam, dass die Zeit  $t$  zu diskreten Zeitpunkten  $t_n$  abgetastet wird. Somit erhält man mit Zeitschritten  $\Delta t_n$  auch für die Zeit ein Gitter  $T$  definiert als

$$T := \{t_n \in \mathcal{R}^+ | t_0 \leq t_n \leq t_N, t_n := t_{n-1} + \Delta t_n\}. \quad (3.19)$$

Die Zeitdiskretisierung muss nun in die ersten beiden diskreten *Gitter-Maxwell-Gleichungen*

$$\frac{d}{dt} \hat{\mathbf{h}}(t) = -\mathbf{M}_\mu^{-1} \mathbf{C} \hat{\mathbf{e}}(t), \quad (3.20)$$

$$\frac{d}{dt} \hat{\mathbf{e}}(t) = \mathbf{M}_\varepsilon^{-1} (\mathbf{C}^T \hat{\mathbf{h}}(t) - \hat{\mathbf{j}}(t)), \quad (3.21)$$

eingearbeitet werden. Dies wird durch die Diskretisierung der Zeitableitungen  $\frac{d}{dt}$  erreicht. Die verschiedenen Ansätze werden in den folgenden Unterpunkten

vorgestellt.

### Leapfrog-Verfahren - Zentraler Differenzenquotient

Das häufig verwendete *Leapfrog-Verfahren* entspricht der in 1966 von YEE in [Yee66] vorgestellten FDTD-Methode. Dabei werden die zeitlichen Ableitungen aus (3.20) und (3.21) durch einen zentralen Differenzenquotienten

$$\left. \frac{d}{dt} f(t) \right|_{t_0} = \frac{f\left(t_0 + \frac{\Delta t}{2}\right) - f\left(t_0 - \frac{\Delta t}{2}\right)}{\Delta t} + O(\Delta t^2) \quad (3.22)$$

beschrieben. Durch die Wahl eines festen Zeitschrittes  $\Delta t$  wird die Zeitachse äquidistant abgetastet. Das Verfahren ist zweiter Ordnung. Das kann leicht über die Reihenentwicklung gezeigt werden. Damit folgt für die zeitliche Ableitung für die magnetische und die elektrische Gitterspannung

$$\frac{d}{dt} \widehat{\mathbf{h}}^{(n)} = \frac{\widehat{\mathbf{h}}^{(n+\frac{1}{2})} - \widehat{\mathbf{h}}^{(n-\frac{1}{2})}}{\Delta t}, \quad \frac{d}{dt} \widehat{\mathbf{e}}^{(n+\frac{1}{2})} = \frac{\widehat{\mathbf{e}}^{(n+1)} - \widehat{\mathbf{e}}^{(n)}}{\Delta t}. \quad (3.23)$$

Setzt man diese Formulierung für die zeitliche Ableitung von  $\widehat{\mathbf{h}}$  und  $\widehat{\mathbf{e}}$  in (3.20) und (3.21) ein, so erhält man nach Umstellen die folgenden expliziten Zeitupdate Gleichungen für die Gitterspannungen:

$$\widehat{\mathbf{h}}^{(n+\frac{1}{2})} = \widehat{\mathbf{h}}^{(n-\frac{1}{2})} - \Delta t \mathbf{M}_\mu^{-1} \mathbf{C} \widehat{\mathbf{e}}^{(n)}, \quad (3.24)$$

$$\widehat{\mathbf{e}}^{(n+1)} = \widehat{\mathbf{e}}^{(n)} + \Delta t \mathbf{M}_\epsilon^{-1} \left( \mathbf{C}^T \widehat{\mathbf{h}}^{(n+\frac{1}{2})} - \widehat{\mathbf{j}}^{(n+\frac{1}{2})} \right). \quad (3.25)$$

Hier zeigt sich, warum  $\widehat{\mathbf{e}}$  auf ganzen und  $\widehat{\mathbf{h}}$  auf halben Zeitschritten angegeben werden. Nach Einsetzen in die ersten beiden *Gitter-Maxwell-Gleichungen* erhält man ein Gleichungssystem, auf dem immer dieselben Gitterspannungen den ganzen bzw. halben Schritten zugeordnet sind. Des Weiteren ist zu sehen, dass auf diese Weise immer alle benötigten Größen bereits bekannt sind. In Abb. 3.3 ist exemplarisch ein Update von magnetischer und elektrischer Gitterspannung bezüglich der Zeitachse  $t$  skizziert, der dies veranschaulicht. Der Aufwand des Verfahrens für einen Zeitschritt  $\Delta t$  beträgt zwei Matrix-Vektor-Multiplikationen je Gleichung.

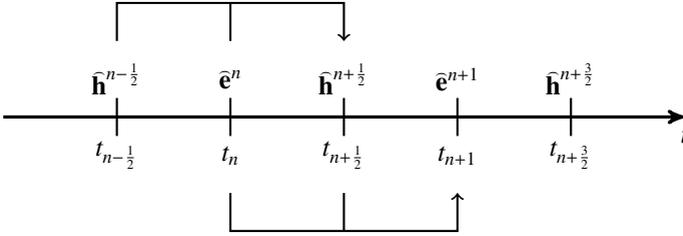


Abbildung 3.3: Zeitachse  $t$  mit diskreten Zeitschritten und den dazu gehörigen elektrischen und magnetischen Gitterspannungen. Je ein Update von  $\hat{\mathbf{h}}$  und  $\hat{\mathbf{e}}$  sind exemplarisch eingezeichnet.

### Vorwärtsdifferenzenquotient

Die zeitliche Ableitung kann ebenfalls durch ein *Vorwärtsdifferenzenquotient* approximiert werden. Dieser ist definiert als

$$\left. \frac{d}{dt} f(t) \right|_{t_0} = \frac{f(t_0 + \Delta t) - f(t_0)}{\Delta t}. \quad (3.26)$$

Für die zeitliche Ableitung von magnetischer und elektrischer Gitterspannung ergeben sich hier

$$\frac{d}{dt} \hat{\mathbf{h}}^{(n)} = \frac{\hat{\mathbf{h}}^{(n+1)} - \hat{\mathbf{h}}^{(n)}}{\Delta t}, \quad \frac{d}{dt} \hat{\mathbf{e}}^{(n)} = \frac{\hat{\mathbf{e}}^{(n+1)} - \hat{\mathbf{e}}^{(n)}}{\Delta t}. \quad (3.27)$$

Durch Einsetzen dieser in die Gleichungen (3.20) und (3.21) erhält man das folgende Zeitbereichsschema:

$$\hat{\mathbf{h}}^{(n+1)} = \hat{\mathbf{h}}^{(n)} - \Delta t \mathbf{M}_\mu^{-1} \mathbf{C} \hat{\mathbf{e}}^{(n)}, \quad (3.28)$$

$$\hat{\mathbf{e}}^{(n+1)} = \hat{\mathbf{e}}^{(n)} + \Delta t \mathbf{M}_\varepsilon^{-1} \left( \mathbf{C}^T \hat{\mathbf{h}}^{(n)} - \hat{\mathbf{j}}^{(n)} \right). \quad (3.29)$$

Wie später gezeigt wird, ist das Verfahren mittels *Vorwärtsdifferenzenquotient* immer instabil.

### Rückwärtsdifferenzenquotient

Im Gegensatz zum *Vorwärtsdifferenzenquotient* kann auch ein *Rückwärtsdifferenzenquotient* verwendet werden. Dieser wird angegeben als

$$\left. \frac{d}{dt} f(t) \right|_{t_0} = \frac{f(t_0) - f(t_0 - \Delta t)}{\Delta t}. \quad (3.30)$$

Wendet man diesen auf die Ableitung der magnetischen und der elektrischen Gitterspannung an, so erhält man für diese

$$\frac{d}{dt} \hat{\mathbf{h}}^{(n)} = \frac{\hat{\mathbf{h}}^{(n)} - \hat{\mathbf{h}}^{(n-1)}}{\Delta t}, \quad \frac{d}{dt} \hat{\mathbf{e}}^{(n)} = \frac{\hat{\mathbf{e}}^{(n)} - \hat{\mathbf{e}}^{(n-1)}}{\Delta t}. \quad (3.31)$$

Durch Einsetzen in die Gleichungen (3.20) und (3.21) resultiert das Zeitbereichs-schema

$$\begin{aligned} \hat{\mathbf{h}}^{(n)} = & \left( \mathbf{I} + \Delta t^2 \mathbf{M}_\mu^{-1} \mathbf{C} \mathbf{M}_\varepsilon^{-1} \mathbf{C}^T \right)^{-1} \left( \hat{\mathbf{h}}^{(n-1)} \right. \\ & \left. - \Delta t \mathbf{M}_\mu^{-1} \mathbf{C} \hat{\mathbf{e}}^{(n-1)} - \Delta t^2 \mathbf{M}_\mu^{-1} \mathbf{C} \mathbf{M}_\varepsilon^{-1} \hat{\mathbf{j}}^{(n)} \right), \end{aligned} \quad (3.32)$$

$$\hat{\mathbf{e}}^{(n)} = \hat{\mathbf{e}}^{(n-1)} + \Delta t \mathbf{M}_\varepsilon^{-1} \left( \mathbf{C}^T \hat{\mathbf{h}}^{(n)} - \hat{\mathbf{j}}^{(n)} \right). \quad (3.33)$$

Dabei muss beachtet werden, dass hier beide Gitterspannungen immer zu einem vollen Zeitschritt  $t_n$  bestimmt werden. Somit enthält die Gitterspannung, die zuerst berechnet wird, immer die andere Gitterspannung, die zu dem Zeitpunkt noch nicht bestimmt ist und deshalb durch das jeweilige explizite Update ausgedrückt werden muss. Dies resultiert in einem Ausdruck für die magnetische Gitterspannung in Gleichung (3.32), der länger ist als beim *Leapfrog-Verfahren*. Nach Zusammenfassen von Termen, die jeden Zeitschritt konstant sind, erhält man im Vergleich zum *Leapfrog-Verfahren* zwei zusätzliche Matrix Vektor Multiplikationen sowie die Berechnung einer Inversen. Das resultierende Verfahren ist implizit.

### Newmark-beta-Verfahren – Impliziter Zeitupdate

Als implizites Verfahren soll hier das in 1959 von NEWMARK vorgestellte *Newmark-beta-Verfahren* [New59] vorgestellt werden. Ursprünglich wurde dieses zur numerischen Integration von Differenzialgleichungen in der Strukturdynamik entwickelt. Heute ist es ein weit verbreitetes implizites Lösungsverfahren zur Integration von Differenzialgleichungen. Es werden zwei neue Parameter  $\beta$  und  $\gamma$  eingeführt, mit denen sich die Stabilität und die Genauigkeit des Verfahrens steuern

lassen. Dabei bleibt die Energieerhaltung bestehen [KK73]. Üblicherweise wird das Verfahren so realisiert, dass nur zu vollen Zeitschritten Größen berechnet werden müssen. Es resultiert dann eine Update-Gleichung, z. B. für die elektrische Gitterspannung, die den Zeitupdate für die magnetische Gitterspannung mit enthält oder anders herum. Es ist aber auch möglich, wie bei dem *Leapfrog-Verfahren* zu ganzen und halben Zeitschritten abzutasten. Also hier Abtastung von magnetischer und elektrischer Gitterspannung zu halben und vollen Zeitschritten. Da im Verlauf der Arbeit ein implizites Verfahren für die PML Randbedingung hergeleitet werden soll und dort beide Gitterspannungen adressiert werden müssen, wird hier das Ganze als Zweischritt Verfahren hergeleitet.

Nach NEWMARK [New59] wird die elektrische Gitterspannung ausgehend von der Wellengleichung für diese und der Beschreibung der zeitlichen Ableitung mittels Differenzenquotient zum Zeitpunkt  $t_n$  wie folgt ersetzt:

$$\widehat{\mathbf{e}}^{(n)} \equiv \beta \widehat{\mathbf{e}}^{(n+1)} + \left( \frac{1}{2} - 2\beta + \gamma \right) \widehat{\mathbf{e}}^{(n)} + \left( \frac{1}{2} + \beta - \gamma \right) \widehat{\mathbf{e}}^{(n-1)} \quad (3.34)$$

mit  $\beta \in [0, 1]$  und  $\gamma \in [0, 1]$ . Der Parameter  $\beta$  gewichtet jeweils die drei Zeitpunkte  $t_{(n+1)}$ ,  $t_{(n)}$  und  $t_{(n-1)}$  und der Parameter  $\gamma$  steuert die Gewichtung zwischen Vorwärts- ( $\gamma = 0$ ) und Rückwärtsdifferenzenquotienten ( $\gamma = 1$ ). Die Formulierung für die elektrische Gitterspannung aus (3.34) wird in (3.20) eingesetzt. Die Update Gleichung für die magnetische Gitterspannung  $\widehat{\mathbf{h}}^{(n+\frac{1}{2})}$  enthält demnach auch eine elektrische Gitterspannung  $\widehat{\mathbf{e}}^{(n+1)}$ , die zu diesem Zeitpunkt noch nicht vorhanden ist. Dies wird gelöst, indem für die entsprechende Gleichung die zukünftige Update-Gleichung für  $\widehat{\mathbf{e}}^{(n+1)}$  eingesetzt und die Update-Gleichung erneut nach  $\widehat{\mathbf{h}}^{(n+\frac{1}{2})}$  umgestellt wird. An dieser Stelle wird das Verfahren auch implizit, da die Invertierung der Matrix  $\mathbf{A}$  notwendig wird. Die Berechnung der elektrischen Gitterspannung bleibt unverändert. Das Zeitbereichsschema kann angegeben als:

$$\begin{aligned} \widehat{\mathbf{h}}^{(n+\frac{1}{2})} = & \mathbf{A}^{-1} \left( \widehat{\mathbf{h}}^{(n-\frac{1}{2})} - \Delta t \mathbf{M}_\mu^{-1} \mathbf{C} \left( \left( \frac{1}{2} - \beta + \gamma \right) \widehat{\mathbf{e}}^{(n)} \right. \right. \\ & \left. \left. + \left( \frac{1}{2} + \beta - \gamma \right) \widehat{\mathbf{e}}^{(n-1)} + \Delta t \beta \mathbf{M}_\varepsilon^{-1} \widehat{\mathbf{j}}^{(n+\frac{1}{2})} \right) \right), \end{aligned} \quad (3.35)$$

$$\widehat{\mathbf{e}}^{(n+1)} = \widehat{\mathbf{e}}^{(n)} + \Delta t \mathbf{M}_\varepsilon^{-1} \left( \mathbf{C}^T \widehat{\mathbf{h}}^{(n+\frac{1}{2})} - \widehat{\mathbf{j}}^{(n+\frac{1}{2})} \right), \quad (3.36)$$

$$\mathbf{A} = \left( \mathbf{I} + \Delta t^2 \mathbf{M}_\mu^{-1} \mathbf{C} \beta \mathbf{M}_\varepsilon^{-1} \mathbf{C}^T \right). \quad (3.37)$$

Aus diesem impliziten Verfahren lassen sich für bestimmte Wertepaare  $\beta, \gamma$  die zuvor vorgestellten Zeitdiskretisierungsverfahren herleiten. So kann durch Ein-

setzen leicht gezeigt werden, dass man das *Leapfrog-Verfahren* für  $\beta = 0$  und  $\gamma = 0.5$ , den Vorwärtsdifferenzenquotient für  $\beta = 0$  und  $\gamma = 0$  sowie den Rückwärtsdifferenzenquotient für  $\beta = 0$  und  $\gamma = 1$  erhält.

Die zu invertierenden Matrix  $\mathbf{A}$  ist über die Simulation im Zeitbereich konstant, da sie allein vom zuvor bestimmten Zeitschritt  $\Delta t$ , den Materialmatrizen  $\mathbf{M}_\varepsilon^{-1}$  und  $\mathbf{M}_\mu^{-1}$ , dem für  $\beta$  gewählten Wert und dem Rotationsoperatoren  $\mathbf{C}$  und  $\widetilde{\mathbf{C}}$  abhängt. Diese ändern sich während der Zeitbereichssimulation nicht, somit ist es ausreichend, die Matrix zu Beginn der Simulation einmal zu invertieren. Die Materialmatrizen sind Diagonalmatrizen und die Rotationsmatrix besitzt eine Bandstruktur und ist dünn besetzt. Dann handelt es sich auch bei  $\mathbf{A}$  um eine Bandmatrix, die ebenfalls dünn besetzt ist. Da es sich um eine dünn besetzte, im Englischen auch als „sparse“ bezeichnete Matrix handelt, kann hier eine performante LU-Zerlegung verwendet werden, Näheres siehe z. B. [Saa03].

Des Weiteren ist es möglich das Verfahren nach [RB00] zu hybridisieren. Dazu werden  $\beta$  und  $\gamma$  in Diagonalmatrizen  $\mathbf{D}_\beta$  und  $\mathbf{D}_\gamma$  überführt, wobei jeder Gitterkante ein spezifischer Wert für  $\beta$  und  $\gamma$  zugeordnet werden kann. Diese Hybridisierung kann unterschiedliche Anwendung finden. Zum Beispiel zum Beheben des schlechten CFL Kriteriums bei FIT auf Zylindergittern [KS13]. In dieser Arbeit wird ein hybrides Zeitbereichsverfahren, das eine zeitgleiche Verwendung von implizitem und explizitem Algorithmus erlaubt, für Simulationen mit PML in Kapitel 4 vorgestellt. Mit diesem lässt sich ein robusteres Zeitbereichsverfahren mit PML Randbedingung im Zeitbereich realisieren.

### 3.2.2 Zeitdiskretisierungsverfahren mit Leitfähigkeit

Es werden nun auch die Leitfähigkeiten in den MAXWELL'schen Gleichungen berücksichtigt. Im Folgenden wird um die elektrische Leitfähigkeit  $\kappa$  erweitert. Für die Update Gleichung der magnetischen Gitterspannung wird weiterhin (3.20) verwendet. Für die elektrische Gitterspannung führt dies auf:

$$\frac{d}{dt} \mathbf{e}^{(n+\frac{1}{2})} = -\mathbf{M}_\varepsilon^{-1} \mathbf{M}_\kappa \mathbf{e}^{(n+\frac{1}{2})} + \mathbf{M}_\varepsilon^{-1} \left( \mathbf{C}^T \widehat{\mathbf{h}}^{(n+\frac{1}{2})} - \widehat{\mathbf{j}}^{(n+\frac{1}{2})} \right). \quad (3.38)$$

Mit dem im klassischen *Leapfrog-Verfahren* verwendeten Differenzenquotienten zur Approximation der zeitlichen Ableitung erhält man den Ausdruck für das

Update der elektrischen Gitterspannung:

$$\widehat{\mathbf{e}}^{(n+1)} = \widehat{\mathbf{e}}^{(n)} - \Delta t \mathbf{M}_\varepsilon^{-1} \mathbf{M}_\kappa \widehat{\mathbf{e}}^{(n+\frac{1}{2})} + \Delta t \mathbf{M}_\varepsilon^{-1} \left( \mathbf{C}^T \widehat{\mathbf{h}}^{(n+\frac{1}{2})} - \widehat{\mathbf{j}}^{(n+\frac{1}{2})} \right). \quad (3.39)$$

Es ist festzustellen, dass sich dadurch eine zeitlich „falsch“ allokierte elektrische Gitterspannung  $\widehat{\mathbf{e}}^{(n+\frac{1}{2})}$  ergibt. Theoretisch existiert zu jedem Zeitpunkt  $t$  eine wohldefinierte elektrische Gitterspannung. Jedoch wurde zu Beginn der Diskretisierung der Zeitableitungen festgelegt, dass die elektrischen und magnetischen Gitterspannungen immer auf den ganzen bzw. halben Zeitschritten liegen. Wird davon abgewichen, wird dies hier als „Verschobene“ Allokation bezeichnet, da die entsprechende Größe zu dem Zeitpunkt durch keine Gleichung des Zeitbereichsschemas direkt angegeben wird. Für eben dieses Problem werden im Folgenden Lösungsansätze vorgestellt. Für die magnetische Gitterspannung ergibt sich analog dieselbe Problematik, wenn eine magnetische Leitfähigkeit  $\sigma$  berücksichtigt wird.

### Verschobene Allokation

Unter der „*Verschobenen*“ Allokation versteht man den Versatz der „falsch“ allokierten Größe auf den nächsten Zeitpunkt an dem sie bekannt ist. In diesem Fall ist dies um  $\frac{1}{2}\Delta t$  früher:

$$\widehat{\mathbf{e}}^{(n+\frac{1}{2})} \approx \widehat{\mathbf{e}}^{(n)}. \quad (3.40)$$

Das Update der elektrischen Gitterspannung ist somit:

$$\widehat{\mathbf{e}}^{(n+1)} = \widehat{\mathbf{e}}^{(n)} - \Delta t \mathbf{M}_\varepsilon^{-1} \mathbf{M}_\kappa \widehat{\mathbf{e}}^{(n)} + \Delta t \mathbf{M}_\varepsilon^{-1} \left( \mathbf{C}^T \widehat{\mathbf{h}}^{(n+\frac{1}{2})} - \widehat{\mathbf{j}}^{(n+\frac{1}{2})} \right). \quad (3.41)$$

### Arithmetische Mittelung

Bei der *arithmetischen Mittelung* wird die „falsch“ allokierte Größe aus den beiden am nächsten liegenden Zeitpunkten gemittelt [TH+95]:

$$\widehat{\mathbf{e}}^{(n+\frac{1}{2})} \approx \frac{1}{2} \left( \widehat{\mathbf{e}}^{(n)} + \widehat{\mathbf{e}}^{(n+1)} \right). \quad (3.42)$$

Für das Zeit Update der elektrischen Gitterspannung erhält man den Ausdruck:

$$\mathbf{e}^{(n+1)} = \left(1 + \frac{\Delta t}{2} \mathbf{M}_\varepsilon^{-1} \mathbf{M}_\kappa\right)^{-1} \left( \left(1 - \frac{\Delta t}{2} \mathbf{M}_\varepsilon^{-1} \mathbf{M}_\kappa\right) \mathbf{e}^{(n)} \right. \quad (3.43)$$

$$\left. + \Delta t \mathbf{M}_\varepsilon^{-1} \left( \mathbf{C}^T \widehat{\mathbf{h}}^{(n+\frac{1}{2})} - \widehat{\mathbf{j}}^{(n+\frac{1}{2})} \right) \right). \quad (3.44)$$

### Exponentielles Zeitbereichsschema

Löst man in der Gleichung (3.38) die Zeitintegration exakt, so erhält man den als *Exponentielles Zeitbereichsschema* bezeichneten Algorithmus [Hol94]. Hier wird nun die elektrische Gitterspannung über einen ganzen Zeitschritt  $\Delta t$  integriert:

$$\widehat{\mathbf{e}}^{(n+\frac{1}{2})} = \int_{t_{n+\frac{1}{2}}}^{t_{n+\frac{1}{2}+\Delta t}} \dots dt \quad (3.45)$$

Als Update für die elektrische Gitterspannung ergibt sich:

$$\mathbf{e}^{(n+1)} = \mathbf{D}_\zeta \widehat{\mathbf{e}}^{(n)} + \mathbf{M}_\kappa^{-1} (\mathbf{I} - \mathbf{D}_\zeta) \left( \mathbf{C}^T \widehat{\mathbf{h}}^{(n+\frac{1}{2})} - \widehat{\mathbf{j}}^{(n+\frac{1}{2})} \right), \quad (3.46)$$

mit  $\mathbf{D}_\zeta = \exp(-\Delta t \mathbf{M}_\kappa)$ .

### 3.2.3 Energie und Energiekriterium

Als Abbruchkriterium für Zeitbereichssimulationen wird üblicher Weise die Energie im Rechengebiet verwendet. Zu Beginn einer Simulation wird durch die Anregung Energie eingepreßt und im Fall von Verlusten klingt diese in Abhängigkeit der Güte wieder ab. Dabei können Verluste auf Grund von Material oder offenen Randbedingungen sein. Der Verlauf der Energie wird zur Bewertung in dB, bezogen auf das Maximum, umgerechnet und ein weit verbreitetes Abbruchkriterium ist ein Abfall auf  $-60$  dB oder auch  $-80$  dB. Die Energie wird dabei zu jedem Zeitpunkt nach [ESW04] bestimmt als

$$w^{(n+\frac{1}{2})} = \frac{1}{2} \left( \widehat{\mathbf{e}}^{(n)T} \mathbf{M}_\varepsilon \widehat{\mathbf{e}}^{(n+1)} + \widehat{\mathbf{h}}^{(n+\frac{1}{2})T} \mathbf{M}_\mu \widehat{\mathbf{h}}^{(n+\frac{1}{2})} \right). \quad (3.47)$$

Des Weiteren besagt [SW01], dass die angegebene Gleichung zur Berechnung der Feldenergie in engem Zusammenhang mit der im kontinuierlichen als

$$W = \int_V \frac{1}{2} (\varepsilon |E(t)|^2 + \mu |H(t)|^2) dV \quad (3.48)$$

definierten physikalischen Energie steht.

### 3.2.4 Numerische Dispersion

Die Diskretisierung in Raum und Zeit der zu lösenden MAXWELL'schen Gleichungen führt zu einem numerischen Fehler. Ziel ist es, diesen zu beschreiben und eine Schranke zu finden, sodass bei entsprechender Wahl der räumlichen und zeitlichen Diskretisierung der numerische Fehler unterhalb dieser Schranke liegt. Dazu wird von der Wellengleichung für das elektrische Feld im Zeitbereich ausgegangen. Mit Hilfe von ebenen Wellen, die eine Lösung der Wellengleichung darstellen, kann die Dispersionsgleichung im Zeitbereich für den diskreten Fall angegeben werden. Aus dieser lässt sich die COURANT-FRIEDRICHS-LEWY Bedingung herleiten. Diese stellt die Schranke für die Verknüpfung von räumlichem und zeitlichem Fehler dar.

#### Diskrete Wellengleichung

Es wird von einem homogenen, verlustfreien Material ( $\kappa = 0$ ) ohne Anregung ( $\vec{J}_e = 0$ ) ausgegangen. Unter Verwendung der Update Gleichungen des *Leapfrog-Verfahrens* aus Gleichung (3.24) und (3.25) erhält man durch Eliminieren der magnetischen Gitterspannung die diskrete Formulierung der Wellengleichung für die elektrische Gitterspannung im Zeitbereich:

$$\hat{\mathbf{e}}^{(n+1)} + (\Delta t^2 \mathbf{M}_\varepsilon^{-1} \mathbf{C}^T \mathbf{M}_\mu^{-1} \mathbf{C} - 2\mathbf{I}) \hat{\mathbf{e}}^{(n)} + \hat{\mathbf{e}}^{(n-1)} = 0. \quad (3.49)$$

Diese Schreibweise enthält bereits die Zeitdiskretisierung, da die elektrische Gitterspannung für unterschiedliche Zeitpunkte  $t_{(n+1)}$ ,  $t_{(n)}$  und  $t_{(n-1)}$  angegeben ist. Etwas üblicher ist die folgende Schreibweise, hergeleitet aus der diskreten ersten und zweiten *Gitter-Maxwell-Gleichung* im Zeitbereich unter Berücksichtigung der Materialbeziehungen, analog zum kontinuierlichen Fall

$$\underbrace{\mathbf{M}_\varepsilon^{-1} \mathbf{C}^T \mathbf{M}_\mu^{-1} \mathbf{C}}_{\mathbf{A}_{cc}} \hat{\mathbf{e}} + \frac{d^2}{dt^2} \hat{\mathbf{e}} = 0, \quad (3.50)$$

mit der Systemmatrix  $\mathbf{A}_{cc}$ . Die diskrete Wellengleichung koppelt die zweifache zeitliche mit der zweifachen räumlichen Ableitung.

### Gitterdispersionsgleichung im Zeitbereich

Die Herleitung der Gitterdispersionsbeziehung basiert auf dem Erkenntnis von FOURIER. Diese besagt, dass sich jede Welle als Summe von Elementarwellen darstellen lässt. Für den kartesischen Fall im Frequenzbereich sind dies die ebenen Wellen. Ausgehend von der diskreten Wellengleichung (3.50) für das elektrische Feld und unter den Annahmen, dass das Gitter kartesisch, unendlich ausgedehnt und äquidistant (mit  $\Delta x$ ,  $\Delta y$ ,  $\Delta z$ ), das Material Vakuum (mit  $\epsilon_0$ ,  $\mu_0$  und  $\kappa = 0$ ) und die Ausbreitungsgeschwindigkeit  $c = 1/\sqrt{\epsilon\mu}$  ist, kann die diskrete *Gitterdispersionsgleichung* für den Zeitbereich angegeben werden als:

$$\left(\frac{\sin\left(\frac{k_x\Delta x}{2}\right)}{\frac{\Delta x}{2}}\right)^2 + \left(\frac{\sin\left(\frac{k_y\Delta y}{2}\right)}{\frac{\Delta y}{2}}\right)^2 + \left(\frac{\sin\left(\frac{k_z\Delta z}{2}\right)}{\frac{\Delta z}{2}}\right)^2 = \frac{1}{c^2} \left(\frac{\sin\left(\frac{\omega\Delta t}{2}\right)}{\frac{\Delta t}{2}}\right)^2. \quad (3.51)$$

Diese beschreibt die Ausbreitung der Wellen auf dem diskreten Gitter, in Abhängigkeit der Zeit. Des Weiteren gilt, dass die Gitterdispersionsgleichung für die Grenzwertbildung  $\Delta x$ ,  $\Delta y$ ,  $\Delta z$ ,  $\Delta t \rightarrow 0$  in die analytische Dispersionsgleichung

$$k_x^2 + k_y^2 + k_z^2 = \frac{\omega^2}{c^2} \quad (3.52)$$

übergeht. Somit kann die Konvergenz der Methode an dieser Stelle nochmals bestätigt werden. Es kann gezeigt werden, dass der Dispersionsfehler für unterschiedliche Einfallswinkel einer Welle unterschiedlich stark ist. Zudem sei darauf hingewiesen, dass bei Anregungen im Zeitbereich durch breitbandige Pulse die langen Wellenlängen räumlich immer besser abgetastet sind als die kurzen Wellenlängen. Um den Fehler unterhalb von 1 % zu halten, muss die kürzeste Wellenlänge mindestens mit 10 Gitterlinien pro  $\lambda$  abgetastet werden [TH+95].

### Courant-Friedrichs-Lewy Bedingung

Aus der zuvor angegebenen Gitterdispersionsgleichung (3.51) kann ein Stabilitätskriterium für den maximal stabilen Zeitschritt  $\Delta t_{max}$  abgeleitet werden. Für ein unendlich ausgedehntes, äquidistantes Gitter in kartesischen Koordinaten und Vakuum erhält man die COURANT-FRIEDRICHS-LEWY Bedingung, auch bekannt als CFL-Bedingung [CFL28]:

$$\Delta t \leq \Delta t_{CFL} = \frac{1}{c \sqrt{\frac{1}{\Delta x^2} + \frac{1}{\Delta y^2} + \frac{1}{\Delta z^2}}}. \quad (3.53)$$

In der Praxis, wenn das Rechengebiet abgeschlossen, das Gitter nicht äquidistant und das Material nicht homogen ist, muss das CFL Kriterium abgeschätzt werden. Die Stabilitätsbedingung muss für alle Zellen  $i$  des Rechengebietes erzwungen werden mit

$$\Delta t \leq \min_i \left( \frac{1}{\sqrt{\varepsilon_i \mu_i}} \frac{1}{\sqrt{\frac{1}{\Delta x_i^2} + \frac{1}{\Delta y_i^2} + \frac{1}{\Delta z_i^2}}} \right). \quad (3.54)$$

Die kleinste Gitterkante des Rechengebietes bestimmt somit den maximal stabilen Zeitschritt.

Für das *Newmark-beta-Verfahren* kann das CFL Kriterium für  $\gamma = 0.5$  nach [Kir16] angegeben werden als

$$\Delta t \leq \Delta t_{CFL} = \frac{1}{c \sqrt{1 - 4\beta} \sqrt{\frac{1}{\Delta x^2} + \frac{1}{\Delta y^2} + \frac{1}{\Delta z^2}}}. \quad (3.55)$$

### 3.3 Stabilität zeitdiskreter Systeme

Bei zeitdiskreten Systemen spielt die Stabilität des Verfahrens eine wichtige Rolle. Denn Stabilität bedeutet grob vereinfacht, dass das zeitdiskrete System auf einen begrenzten Eingang auch mit einem begrenzten Ausgang reagiert [LR56]. Dies bedeutet in einer Zeitbereichssimulation, dass die berechneten Felder im instabilen Fall unphysikalisch ansteigen, was es im Voraus durch entsprechende Wahl der Parameter zu verhindern gilt.

Dieser Abschnitt beginnt mit dem Eigenwertkriterium für den maximalen Zeitschritt in Abhängigkeit des größten Eigenwertes. Anschließend wird auf die Stabilität von Rekursionsverfahren im Zeitbereich eingegangen, die in den Abschnitten 3.2.1 und 3.2.2 bereits vorgestellt wurden.

#### 3.3.1 Eigenwert Kriterium - maximaler Zeitschritt

Der maximal stabile Zeitschritt eines Zeitintegrationsverfahren kann auch mit Hilfe des maximalen Eigenwertes der Systemmatrix abgeschätzt werden. Dies ist in der Arbeit von DOHLUS [Doh92] ausführlich beschrieben. Die zu untersuchende Systemmatrix entspricht der Matrix  $A_{cc}$  aus der Gleichung (3.50), die in der FIT üblicher Weise als „Curl-Curl“ oder „doppelte Rotationsmatrix“ bezeichnet wird.

Über den größten Eigenwert  $\omega_{\max}$  lässt sich nach [Doh92] der maximal stabile Zeitschritt als

$$\Delta t_{\max} \leq \frac{2}{\omega_{\max}} \quad (3.56)$$

abschätzen.

### 3.3.2 Stabilität von Rekursionsverfahren

Die in den Abschnitten 3.2.1 und 3.2.2 erläuterten Zeitdiskretisierungsverfahren, mit Ausnahme des *Newmark-beta-Verfahrens*, sind lineare Einschritt Verfahren. Um für diese Verfahren Konvergenz zu zeigen, wird üblicherweise das *Äquivalenztheorem* von LAX und RICHTMYER verwendet [LR56]. Dieses sagt zunächst allgemein, dass für ein korrekt gestelltes, lineares Anfangswertproblem die Methode dann konvergent ist, wenn sie konsistent und stabil ist. Das Problem ist dann korrekt gestellt, wenn hier für jeden Zeitpunkt  $t$  eine Lösung existiert, diese Lösung eindeutig ist und die Lösung stetig von der Eingangsgröße abhängig ist. Die Methode ist genau dann konsistent, wenn die jeweiligen approximierten Gleichungen der Lösung (z. B. die *Leapfrog Zeitbereichs Gleichungen*) für eine Gitterschrittweite  $\Delta \rightarrow 0$  exakt werden. Dies folgt hier direkt aus den *Gitter-Maxwell-Gleichungen* und denen in der Diskretisierung für den Zeitschritt enthaltenen Taylorentwicklung. Die numerische Stabilität wird im folgenden Abschnitt näher untersucht. Die Rekursionsverfahren können (ohne Berücksichtigung der Quellterme) in die Formulierung

$$\mathbf{y}^{(\text{neu})} = \mathbf{G}(\Delta t)\mathbf{y}^{(\text{alt})} \quad (3.57)$$

überführt werden mit dem Vektor der zum Zeitpunkt ( $t = \text{neu}$ ) gesuchten Größen  $\mathbf{y}^{(\text{neu})}$ , der zum Zeitpunkt ( $t = \text{alt}$ ) bekannten Größen  $\mathbf{y}^{(\text{alt})}$  und der vom Zeitschritt  $\Delta t$  abhängigen Rekursionsmatrix  $\mathbf{G}(\Delta t)$ . Das Rekursionsverfahren ist dann stabil, wenn für alle Zeitschritte  $n \cdot \Delta t$  innerhalb einer Gesamtzeit  $T$ , einer Variablen  $K$  und  $\Delta t_0 > 0$  gilt:

$$\|\mathbf{G}(\Delta t)^n\| \leq K \quad \forall n\Delta t \leq T \text{ und } \Delta t < \Delta t_0. \quad (3.58)$$

Die hinreichende Bedingung für die Stabilität nach dem VON NEUMANN Stabilitätsbedingung, lautet [LR56; Ged11]:

$$\|\mathbf{G}(\Delta t)\| \leq 1 \quad (\forall \Delta t). \quad (3.59)$$

Dies kann in die Bedingung

$$\|\lambda_G\| \leq 1 \quad (3.60)$$

für die Eigenwerte  $\lambda_G$  der Rekursionsmatrix  $\mathbf{G}(\Delta t)$  überführt werden, siehe [LR56; Ged11]. Die resultierenden Eigenwerte sind komplex-konjugierte Eigenwertpaare. Das Rekursionsverfahren ist immer genau dann stabil, wenn die Eigenwerte von  $\mathbf{G}(\Delta t)$  in der komplexen Ebene innerhalb oder auf dem Einheitskreis liegen. Überführt man die erste und zweite diskrete *Gitter-Maxwell-Gleichung* (3.2) und (3.3) in die Form von Gleichung (3.57), so erhält man in Matrix-Vektor Schreibweise:

$$\mathbf{y} = \begin{pmatrix} \tilde{\mathbf{h}} \\ \tilde{\mathbf{e}} \end{pmatrix}, \quad \mathbf{A} = \begin{pmatrix} \mathbf{0} & -\mathbf{M}_\mu^{-1} \mathbf{C} \\ \mathbf{M}_\varepsilon^{-1} \mathbf{C}^T & -\mathbf{M}_\varepsilon^{-1} \mathbf{M}_\kappa \end{pmatrix}, \quad \mathbf{q} = \begin{pmatrix} \mathbf{0} \\ -\mathbf{M}_\varepsilon^{-1} \tilde{\mathbf{j}} \end{pmatrix}. \quad (3.61)$$

Die Eigenwerte  $\lambda$  der Matrix  $\mathbf{A}$  sind komplex und liegen in der linken Hälfte der komplexen Ebene [Doh92]. Im Folgenden werden die Rekursionsmatrizen für die Zeitdiskretisierungsverfahren aus Abschnitt 3.2.1, ohne Leitfähigkeit angegeben. Der Abschnitt orientiert sich an [Doh92].

### Leapfrog-Verfahren - Zentraler Differenzenquotient

Es wird das *Leapfrog-Verfahren* aus den Gleichungen (3.24) und (3.25) verwendet, hier ohne Leitfähigkeit ( $\mathbf{M}_\kappa = \mathbf{0}$ ) und ohne eingeprägte Ströme ( $\tilde{\mathbf{j}}_e = \mathbf{0}$ ). Für die Vektoren und Matrizen aus Gleichung (3.57) erhält man

$$\mathbf{y}^{(\text{neu})} = \begin{pmatrix} \tilde{\mathbf{h}}^{(n+\frac{1}{2})} \\ \tilde{\mathbf{e}}^{(n+1)} \end{pmatrix}, \quad \mathbf{G}(\Delta t) = \begin{pmatrix} \mathbf{I} & -\Delta t \mathbf{A}_{12} \\ \Delta t \mathbf{A}_{21} & \mathbf{I} - \Delta t^2 \mathbf{A}_{21} \mathbf{A}_{12} \end{pmatrix}, \quad \mathbf{y}^{(\text{alt})} = \begin{pmatrix} \tilde{\mathbf{h}}^{(n-\frac{1}{2})} \\ \tilde{\mathbf{e}}^{(n)} \end{pmatrix} \quad (3.62)$$

mit den zusammengefassten Matrizen  $\mathbf{A}_{12} = -\mathbf{M}_\mu^{-1} \mathbf{C}$  und  $\mathbf{A}_{21} = \mathbf{M}_\varepsilon^{-1} \mathbf{C}^T$ . Die Eigenwerte der Rekursionsmatrix können nach kurzer Rechnung angegeben werden als

$$\lambda_{G,i} = \frac{2 + (\Delta t \lambda_{A,i})^2}{2} \pm \sqrt{\left( \frac{2 + (\Delta t \lambda_{A,i})^2}{2} \right)^2 - 1} \quad (3.63)$$

mit den Eigenwerten  $\lambda_{A,i}$  der Systemmatrix  $\mathbf{A}$ . Für einen stabilen Zeitschritt  $\Delta t$  liegen die Eigenwerte des verlustfreien Systems direkt auf dem Einheitskreis. Es handelt sich um komplex konjugierte Eigenwertpaare. Die Eigenwerte mit  $\Delta t \omega = 0$  liegen immer auf dem Punkt  $(1, 0)$  und entsprechen sogenannten *statischen Moden*. Hier ist damit gemeint, dass sie einer Lösung aus der Elektrostatik

entsprechen. Für den Fall, dass der Zeitschritt größer als  $\Delta t_{CFL}$  ist, liegen die Eigenwerte des instabilen Systems auf der negativen reellen Achse. Alle drei Fälle sind in Abb. 3.4 skizziert.

#### Vorwärtsdifferenzenquotient

Für ein Rechengebiet ohne Verluste und ohne eingeprägte Ströme besitzt das Verfahren des Vorwärtsdifferenzenquotient die Rekursionsmatrix:

$$\mathbf{G}(\Delta t) = \Delta t \mathbf{A} + \mathbf{I}. \quad (3.64)$$

Die Eigenwerte dieser lassen sich angeben als:

$$\lambda_{G,i} = \Delta t \lambda_{A,i} + 1 = \Delta t j \omega_i + 1. \quad (3.65)$$

Die Eigenwerte sind paarweise komplex konjugiert und liegen auf einer Geraden mit Realteil eins auf einer Parallelen zur imaginären Achse, siehe Abb. 3.4. Das Verfahren ist somit immer instabil.

#### Rückwärtsdifferenzenquotient

Ein Zeitupdate um  $\Delta t$  des Rückwärtsdifferenzenquotienten für verlustfreies Gebiet und ohne eingeprägte Ströme kann durch die Rekursionsmatrix

$$\mathbf{G}(\Delta t) = (-\Delta t \mathbf{A} + \mathbf{I})^{-1} \quad (3.66)$$

beschrieben werden. Die Eigenwerte  $\lambda_{G,i}$  der Rekursionsmatrix können mit Hilfe der Eigenwerte  $\lambda_{A,i}$  der Systemmatrix  $\mathbf{A}$  angegeben werden als:

$$\lambda_{G,i} = \frac{1}{-\Delta t \lambda_{A,i} + 1}. \quad (3.67)$$

Wenn die Eigenwerte von  $\mathbf{A}$  einen Realteil kleiner oder gleich null besitzen  $\Re\{\lambda_{A,i}\} \leq 0$ , dann folgt daraus für die Eigenwerte von  $\mathbf{G}(\Delta t)$ , dass  $\lambda_{G,i} \leq 1$  und das Verfahren stabil ist. Die Ortskurve dieser Eigenwerte entspricht einem Kreis, der einen Radius kleiner als eins besitzt und immer den Punkt (1,0) schneidet, siehe Skizze in Abb. 3.4. Dieses Verhalten kann wie eine Dämpfung, wie sie durch verlustbehaftete Materialien erzeugt wird, interpretiert werden. Das Verfahren ist immer stabil, bleibt aber von der Schrittweite  $\Delta t$  abhängig, die weiterhin die Genauigkeit beeinflusst.

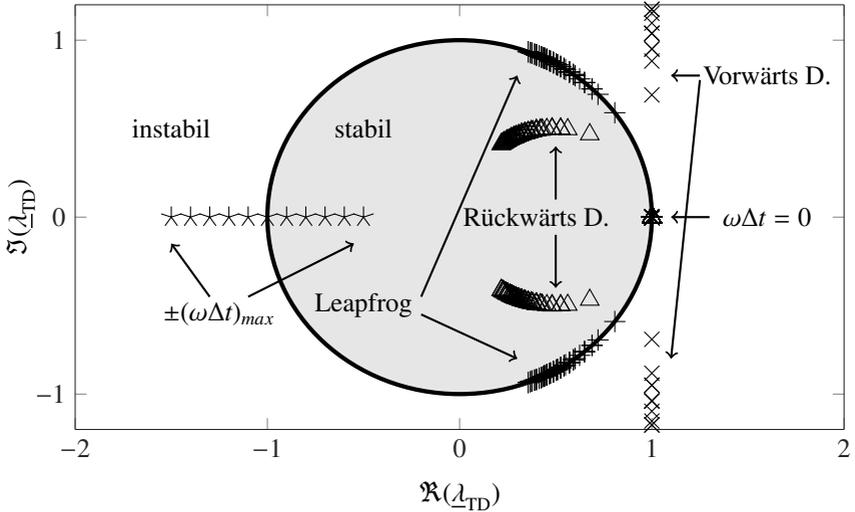


Abbildung 3.4: Schematische Darstellung der Eigenwerte des *Leapfrog-Verfahrens* und der Zeitbereichsverfahren mit *Vorwärts-* und mit *Rückwärts-Differenzenquotienten* in der komplexen Ebene. Der Einheitskreis, der den stabilen Bereich markiert ist grau hinterlegt. Die Eigenwerte auf dem Punkt  $(1,0)$  entsprechen mit  $\omega\Delta t = 0$  den statischen Lösungen. Eigenwerte, die auf Grund eines zu groß gewählten Zeitschritts instabil werden, sind rein reell und liegen auf der reellen Achse, markiert mit  $\pm(\omega\Delta t)_{max}$ . Abbildung erstellt in Anlehnung an [Doh92; WS12].

### Newmark-Beta-Verfahren – Impliziter Zeitupdate

Das implizite *Newmark-beta-Verfahren* ist ein Zweischrittverfahren (es benötigt die Felder aus dem vorherigen und dem  $2\Delta t$  entfernten Zeitschritt). Somit gehört das Verfahren allgemein zur Klasse der *Mehrschrittverfahren*. Die Berechnung der Eigenwerte wird dadurch deutlich komplexer. Zunächst wird das Zweischrittverfahren in ein Einschrittverfahren überführt. Dies kann nach folgendem Schema durchgeführt werden:

$$\tilde{\mathbf{e}}^{(n+1)} = \mathbf{G}_1 \tilde{\mathbf{e}}^{(n)} + \mathbf{G}_2 \tilde{\mathbf{e}}^{(n-1)} + \mathbf{c} \Rightarrow \begin{pmatrix} \tilde{\mathbf{e}}^{(n+1)} \\ \tilde{\mathbf{e}}^{(n)} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbf{G}_1 & \mathbf{G}_2 \\ \mathbf{I} & \mathbf{0} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \tilde{\mathbf{e}}^{(n)} \\ \tilde{\mathbf{e}}^{(n-1)} \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} \mathbf{c} \\ \mathbf{0} \end{pmatrix}. \quad (3.68)$$

Für  $\gamma = 0.5$  erhält man für die Matrizen  $\mathbf{G}_1$  und  $\mathbf{G}_2$

$$\mathbf{G}_1 = \left( \mathbf{I} + \Delta t^2 \beta \mathbf{A}_{cc} \right)^{-1} \left( 2\mathbf{I} - \Delta t^2 (1 - 2\beta) \mathbf{A}_{cc} \right), \quad (3.69)$$

$$\mathbf{G}_2 = - \left( \mathbf{I} + \Delta t^2 \beta \mathbf{A}_{cc} \right)^{-1} \left( \mathbf{I} + \Delta t^2 \beta \mathbf{A}_{cc} \right), \quad (3.70)$$

mit der Systemmatrix  $\mathbf{A}_{cc} = \mathbf{M}_\varepsilon^{-1} \mathbf{C}^T \mathbf{M}_\mu^{-1} \mathbf{C}$  aus Gleichung (3.50). Nun können wir zuvor die Eigenwerte der Rekursionsmatrix analysiert werden. Dies ist hier nicht mehr so leicht in Abhängigkeit der Eigenwerte von  $\mathbf{A}$  durchzuführen. Die Formulierungen werden deutlich länger und sehr komplex. Das Ergebnis lässt sich nicht mehr in eine Darstellungsform bringen, die eine einfache Interpretation wie bei den drei zuvor besprochenen Verfahren erlaubt.

Es ist jedoch möglich für ein konkretes diskretes Beispiel die Rekursionsmatrix zu bestimmen. Dies ist für das *Leapfrog-Verfahren* in Algorithmus 1 angegeben. Dazu benötigt man alle diskreten Materialmatrizen  $\mathbf{M}_\varepsilon^{-1}$  und  $\mathbf{M}_\mu^{-1}$ , den Zeitschritt  $\Delta t$  und den diskreten Rotationsoperator  $\mathbf{C}$  der Anordnung. Dann kann eine Schleife über einen vollständigen Zeitschritt gemacht werden, bei der in jedem neuen Durchlauf alle Startvektoren zu Null gesetzt werden und der Reihe nach genau eine eins eingetragen wird. Die Startvektoren entsprechen genau dem Vektor  $\mathbf{y}^{(\text{alt})}$ . Am Ende des Durchlaufes hat man demnach  $\mathbf{y}^{(\text{neu})}$  und auf Grund der verwendeten eins auch indirekt die entsprechende Zeile der Rekursionsmatrix  $\mathbf{G}(\Delta t)$  bestimmt. In Abschnitt 3.2.1 wurden im Unterpunkt zum *Newmark-beta-Verfahren* bereits die Parameter  $\beta$  und  $\gamma$  und ihr Einfluss diskutiert. Es beeinflusst  $\beta$  die Gewichtung der unterschiedlichen Zeitpunkte  $t_{(n+1)}$ ,  $t_{(n)}$  und  $t_{(n-1)}$  und verursacht eine Verschiebung der Eigenwerte auf dem Einheitskreis in Richtung Punkt (1,0) für  $\beta = 1$  und eine entgegengesetzte Verschiebung in Richtung des Punktes (-1,0) für  $\beta = 0$ . Für  $\gamma = 0$  erhält man den Vorwärtsdifferenzenquotienten, für  $\gamma = 0.5$  und

---

**Algorithmus 1** Numerische Berechnung der Rekursionsmatrix für ein diskretisiertes Beispiel an Hand des *Leapfrog-Zeitbereichsschemas*.

---

```

G = zeros(6Np, 6Np)
y = zeros(6Np, 1)
for i=1 : length(y) do
    y(i) = 1
    h̃ = y(1 : 3Np)
    ẽ = y(3Np + 1 : 6Np)
    h̃ = h̃ - Δt · Mμ-1 · C · ẽ
    ẽ = ẽ + Δt · Mε-1 · (CT · h̃ - j̃)
    G(i, :) = [h̃; ẽ]
    y = zeros(6 · Np, 1)
end for

```

---

$\beta = 0$  den zentralen Differenzenquotienten und für  $\gamma = 1$  den Rückwärtsdifferenzenquotienten. Für die drei Spezialfälle entsprechen die Eigenwerte genau denen, die zuvor beschrieben worden sind. Für Wertepaare dazwischen kann experimentell gezeigt werden, dass die Eigenwerte genau zwischen diesen Spezialfällen liegen, skizziert in Abb. 3.5.

## 3.4 Diskretisierung in zylindersymmetrischen Koordinaten

Im Rahmen dieser Arbeit werden ausschließlich zylindrische Strukturen, deren Materialverteilung in azimuthaler Richtung konstant ist, behandelt. In diesem Fall können  $\rho$ -z-Koordinaten, im Englischen als „*Body of Revolution*“ bezeichnet, verwendet werden. Diese sind ein Spezialfall des Zylindergitters mit der Hauptannahme, dass das Material in  $\varphi$ -Richtung konstant bleibt und somit eine einzelne  $\rho$ -z-Ebene aus dem Zylindergitter ausgeschnitten werden darf, siehe Abb. 3.6. Das Ergebnis ist ein 2D Gitter mit Feldkomponenten für alle drei Raumrichtungen, aus denen wieder eine 3D Darstellung des Feldes mittels Fourierreihenentwicklung bestimmt werden kann. Für mehr Informationen zu  $\rho$ -z-Koordinaten in der Finiten Integrationstechnik sei auf [Wei77; Mül+82; Wei83; Rie89; Fus90; Deh93; Fis14; Kir16] verwiesen. Zunächst wird in Abschnitt 3.4.1 die Diskretisierung in  $\rho$ -z-Koordinaten behandelt und anschließend werden in 3.4.2 die Eigenschaften

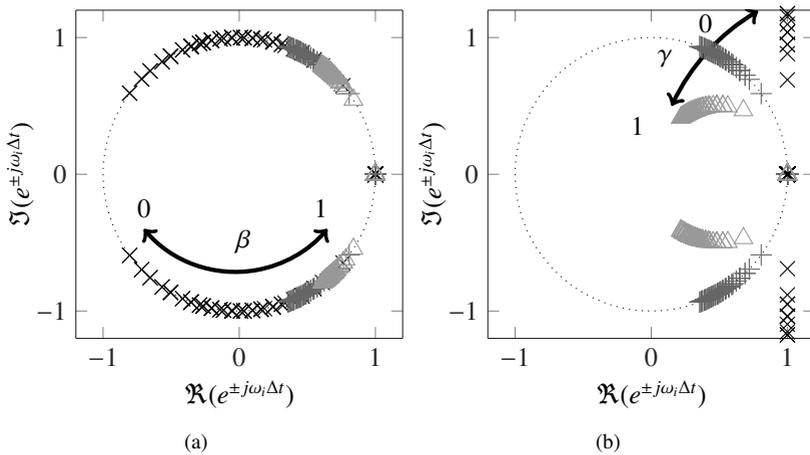


Abbildung 3.5: Schematische Darstellung der Eigenwerte für das *Newmark-beta-Verfahren* für Variationen von  $\beta$  und  $\gamma$  mit eingezeichnetem Einheitskreis. Auf Grund der Komplexität des Verfahrens werden die Eigenwerte des Systems mit Hilfe des Algorithmus 1 numerisch bestimmt. Gleiche Marker gehören je zu einem Wertepaar  $\beta, \gamma$ . Mit den wie folgt gewählten Bereichen der Parameter (a)  $0 \leq \beta \leq 1$  und  $\gamma = 0.5$  (b)  $\beta = 0$  und  $0 \leq \gamma \leq 1$ .

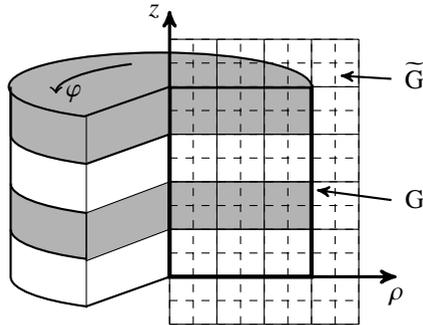


Abbildung 3.6: Zylindergitter mit Schnitt in der  $\rho$ - $z$ -Ebene auf der ein 2D Gitter definiert wird. Die Abbildung ist [Fis14] entnommen.

im Zeitbereich erläutert. Der erste Abschnitt und die darin verwendete Notation orientieren sich an der Arbeit von KIRSCH [Kir10]. Der zweite Abschnitt und die darin verwendete Notation orientieren sich an den Arbeiten von DOHLUS [Doh92] und THOMA [Tho97].

### 3.4.1 Diskretisierung der Maxwellgleichung in $\rho$ - $z$ -Koordinaten

#### Das $\rho$ - $z$ -Gitter

Wendet man die Methode der Finiten Integration auf Zylindergitter an, so wird aus dem Tripel  $\{u, v, w\} \rightarrow \{\rho, \varphi, z\}$  mit den Metrikfaktoren  $h_\rho = 1$ ,  $h_\varphi = \rho$  und  $h_z = 1$ . Für mehr Informationen zu FIT auf Zylindergittern sei der Leser an dieser Stelle auf die Arbeiten [Wei77; Mü1+82; Wei83; Rie89; Fus90; Deh93; Fis14; Kir16] verwiesen. Ist die Materialverteilung in azimutaler Richtung konstant, so kann eine einzelne  $\rho$ - $z$ -Ebene aus dem Zylindergitter ausgeschnitten werden und die  $\varphi$ -Richtung durch eine Fourierreihenentwicklung dargestellt werden, siehe Abb. 3.6. Man erhält also ein 2D Gitter  $(\rho, z)$ , das exakt eine Feldkomponente in  $\varphi$ -Richtung mit normierter Kantenlänge  $\Delta\varphi = 1$  besitzt. Somit existieren alle 3 Feldkomponenten. Die azimutale Richtung muss für jede Ordnung  $m$  einzeln berechnet werden. Es ist erlaubt, weil die kontinuierlichen MAXWELL Gleichungen bezüglich ihrer  $\varphi$ -Richtung separierbar (Linearität) sind. Das ist auf die diskreten *Gitter-Maxwell-Gleichungen* übertragbar.

Die Kantenlängen in  $\rho$ - und  $z$ -Richtung werden für primäres und duales Gitter analog wie im Kartesischen Fall bestimmt. Bei den Kanten in  $\varphi$ -Richtung muss der Metrikfaktor  $h_\varphi$  berücksichtigt werden. Es ergibt sich für das primäre Gitter  $l_\varphi = \rho \cdot \Delta\varphi$  mit  $\Delta\varphi = 1$  und dem Radius  $\rho$  der entsprechenden Position im zylindrischen Gitter. Für die dualen Kanten in  $\varphi$ -Richtung ist die Vorgehensweise analog. Es ist zu beachten, dass im Ursprung  $\rho = 0$  die primäre Kante in  $\varphi$ -Richtung verschwindet. Die Flächen des primären und dualen  $\rho$ - $z$ -Gitters lassen sich mit den Kanten, hier exemplarisch für das primäre Gitter angeben als:

$$A_\rho = \rho \Delta\varphi \cdot \Delta z, \quad A_\varphi = \Delta\rho \cdot \Delta z \quad \text{und} \quad A_z = \Delta\rho \cdot \rho \Delta\varphi \quad (3.71)$$

mit den Kantenlängen  $\Delta\rho$ ,  $\Delta\varphi = 1$  und  $\Delta z$ .

### Darstellung der Felder und der Maxwell'schen Gleichungen

In Abschnitt 2.1.9 wurde bereits beschrieben, wie Felder in rotationssymmetrischen Anordnungen als Summe über unendlich viele Moden  $m$  mit Hilfe der Fourierreihenentwicklung dargestellt werden können. Für  $m = 0$  ergibt sich die Monopolmode und für  $m > 0$  Dipolmoden entsprechender höherer Ordnung. Allgemein wird unterschieden in TE und TM Moden. Als TE-Mode werden Moden mit Feldanteil  $E_\rho$ ,  $E_\varphi$ ,  $H_z$  und als TM Moden mit Feldanteil  $H_\rho$ ,  $H_\varphi$ ,  $E_z$  bezeichnet. Zusätzlich muss die Polarisation beachtet werden, die nur für  $m = 0$  entkoppelt. Die elektrischen und magnetischen Gitterspannungen können wie folgt für  $\rho$ - $z$ -Koordinaten angegeben werden [Deh93]:

$$\begin{pmatrix} \hat{\mathbf{e}}_\rho(\rho, \varphi, z) \\ \hat{\mathbf{e}}_\varphi(\rho, \varphi, z) \\ \hat{\mathbf{e}}_z(\rho, \varphi, z) \end{pmatrix} = \sum_{m=0}^{\infty} \begin{pmatrix} \hat{\mathbf{e}}_{\rho,m}(\rho, z) \cos(m\varphi) \\ \hat{\mathbf{e}}_{\varphi,m}(\rho, z) \sin(m\varphi) \\ \hat{\mathbf{e}}_{z,m}(\rho, z) \cos(m\varphi) \end{pmatrix}, \quad (3.72)$$

$$\begin{pmatrix} \hat{\mathbf{h}}_\rho(\rho, \varphi, z) \\ \hat{\mathbf{h}}_\varphi(\rho, \varphi, z) \\ \hat{\mathbf{h}}_z(\rho, \varphi, z) \end{pmatrix} = \sum_{m=0}^{\infty} \begin{pmatrix} \hat{\mathbf{h}}_{\rho,m}(\rho, z) \sin(m\varphi) \\ \hat{\mathbf{h}}_{\varphi,m}(\rho, z) \cos(m\varphi) \\ \hat{\mathbf{h}}_{z,m}(\rho, z) \sin(m\varphi) \end{pmatrix}. \quad (3.73)$$

Mit den genannten Änderungen, behalten die *Gitter-Maxwell-Gleichungen* auch für  $\rho$ - $z$ -Koordinaten dieselbe Form, wie sie bereits in Abschnitt 3.1.1 angegeben sind. Auch für die Operatoren muss eine Änderung vorgenommen werden. Die Matrizen  $\mathbf{P}_u$ ,  $\mathbf{P}_v$  und  $\mathbf{P}_w$  entsprechen nun  $\mathbf{P}_\rho$ ,  $\mathbf{P}_\varphi$  und  $\mathbf{P}_z$ . Dabei ist darauf hinzuweisen, dass die Matrix  $\mathbf{P}_\varphi = -m\mathbf{I}$  entspricht, mit der Identitätsmatrix  $\mathbf{I}$ . Die sich

ergebende Diagonalmatrix ist somit abhängig von der gewählten azimutalen Ordnung  $m$  und es wird offensichtlich, dass jede Ordnung einzeln berechnet werden muss. Die Operator Matrizen sind definiert als:

$$\mathbf{C} = \begin{bmatrix} \mathbf{0} & -\mathbf{P}_z & \mathbf{P}_\varphi \\ \mathbf{P}_z & \mathbf{0} & -\mathbf{P}_\rho \\ -\mathbf{P}_\varphi & \mathbf{P}_\rho & \mathbf{0} \end{bmatrix}, \quad \tilde{\mathbf{C}} = \mathbf{C}^T, \quad (3.74)$$

$$\mathbf{S} = [\mathbf{P}_\rho \quad \mathbf{P}_\varphi \quad \mathbf{P}_z], \quad \tilde{\mathbf{S}} = [-\mathbf{P}_\rho^T \quad -\mathbf{P}_\varphi^T \quad -\mathbf{P}_z^T]. \quad (3.75)$$

Es gilt weiterhin, dass die Eigenschaft der kontinuierlichen Vektoralgebra  $\text{div rot} = 0$  auch für die diskreten Operatoren der  $\rho$ - $z$ -Koordinaten auf dem primären und dualen Gitter erfüllt sind, siehe Gleichung (3.11) nach [Wei77].

### 3.4.2 Zeitbereich und $\rho$ - $z$ -Koordinaten

Für Simulationen im Zeitbereich, die unter der Verwendung von  $\rho$ - $z$ -Koordinaten durchgeführt werden, dürfen dieselben Diskretisierungsverfahren inklusive der bereits vorgestellten Update Schemata aus Abschnitt 3.2 verwendet werden. Es brauchen nur die Operator Matrizen aus Gleichung (3.74) und (3.75) verwendet und die Materialmatrizen entsprechend der zylindrischen Geometrie berechnet werden. Betrachtet man die Eigenlösungen des Systems, sowie die daraus abzuleitende Dispersion und Stabilität, ergeben sich komplexere Zusammenhänge. Sie können nicht immer in einer einfachen geschlossenen Form angegeben werden.

#### Wellengleichung in $\rho$ - $z$ -Koordinaten

Die Wellengleichung für Problemstellungen in  $\rho$ - $z$ -Koordinaten entspricht der Formulierung, die bereits in Gleichung (3.50) angegeben wurde:

$$\mathbf{M}_\varepsilon^{-1} \mathbf{C}^T \mathbf{M}_\mu^{-1} \mathbf{C} \bar{\mathbf{e}} + \frac{d^2}{dt^2} \bar{\mathbf{e}} = 0 \quad (3.76)$$

mit dem Rotationsoperator  $\mathbf{C}$  für  $\rho$ - $z$ -Koordinaten, entsprechend Gleichung (3.74).

#### Dispersion in $\rho$ - $z$ Koordinaten

Im Fall von  $\rho$ - $z$ -Koordinaten ist es nicht mehr so einfach eine geschlossene Form für die diskrete Dispersionsgleichung anzugeben, wie dies für kartesische Koordinaten möglich ist, vergleiche Gleichung (3.51). Der Ausgangspunkt ist hier

ebenfalls die Wellengleichung, z. B. für die elektrische Gitterspannung, nach Gleichung (3.76). Als Lösungsansatz wird nun ein allgemeiner Ansatz benötigt, der die Ausbreitung in  $\rho$ - und  $z$ -Richtung beschreibt. Das Verhalten in  $\varphi$ -Richtung ist bereits in der Annahme der  $\rho$ - $z$ -Koordinaten durch die FOURIER-Reihenentwicklung beschrieben. Im Fall eines in  $\rho$ - und  $z$ -Richtung unendlich ausgedehnten Gitters, mit äquidistantem  $\Delta\rho$  und  $\Delta z$  gefüllt mit Vakuum und ohne Leitfähigkeit ( $\varepsilon = \varepsilon_0$ ,  $\mu = \mu_0$  und  $\kappa = 0$ ), entspricht dies einer Überlagerung von Zylinderwellen mit Ausbreitung in  $\rho$ - und  $z$ -Richtung. Auch für den diskreten Fall führt dies zu sehr komplizierten Ausdrücken, die sich mit gängigen Computeralgebrasystemen, wie z. B. *Mathematica*<sup>®</sup> [Wol18] nicht ohne Weiteres lösen lassen. Deshalb werden hier beide Fälle getrennt voneinander betrachtet. Zunächst wird eine Welle mit Ausbreitung in  $z$ -Richtung betrachtet, die durch

$$\vec{E} = \vec{E}_\perp \cdot e^{-j(\omega t - k_z z)} \quad (3.77)$$

mit dem Phasor  $\vec{E}_\perp$  des tangentialen elektrischen Feldes beschrieben werden kann. Ausgangspunkt für die weitere Betrachtung ist die lokale Wellengleichung, die mit einem Dach gekennzeichnet wird:

$$\mathbf{M}_\varepsilon^{-1} \mathbf{C}^T \mathbf{M}_\mu^{-1} \mathbf{C} \hat{\mathbf{e}} = \omega^2 \hat{\mathbf{e}}. \quad (3.78)$$

Die Ausbreitung innerhalb des Rechengitters in  $z$ -Richtung wird beschrieben durch  $\underline{T}_z = e^{-jk_z z}$ . Durch einsetzen in die algebraische Eigenwertgleichung aus (3.78) resultieren drei Eigenwerte  $\lambda = \omega^2$ . Man erhält einen Eigenwert  $\lambda_1 = 0$  und einen doppelten Eigenwert

$$\lambda_{2,3} = c^2 \left( \frac{\sin(\frac{k_z \Delta z}{2})}{\frac{\Delta z}{2}} \right)^2. \quad (3.79)$$

Die Dispersion in  $z$ -Richtung kann somit beschrieben werden als:

$$\left( \frac{\sin(\frac{k_z \Delta z}{2})}{\frac{\Delta z}{2}} \right)^2 = \left( \frac{\omega}{c} \right)^2. \quad (3.80)$$

Die Gitterdispersion für eine TEM-Welle die sich in  $\rho$ -Richtung ausbreitet ist in [Pet00] beschrieben. Die angesetzte analytische Beschreibung des elektrischen Feldes in  $z$ -Richtung lautet

$$E_z = H_0^{(2)}(k\rho) e^{jm\Delta\varphi - j\omega\Delta t} \quad (3.81)$$

mit der zweiten HANKEL-Funktion nullter Ordnung  $H_0^{(2)}(x) = J_0(x) - jY_0(x)$  mit  $J_0$  der BESSEL- und  $Y_0$  der NEUMANN-Funktion nullter Ordnung. Für diesen Fall wird die Gitterdispersionsgleichung angegeben als:

$$\frac{2}{\Delta\rho^2} - \frac{1}{\Delta\rho^2} \frac{H_0^{(2)}(k_\rho(\rho_0 + \Delta\rho)) + H_0^{(2)}(k_\rho(\rho_0 - \Delta\rho))}{H_0^{(2)}(k_\rho\rho_0)} - \frac{1}{2\rho_0\Delta\rho} \frac{H_0^{(2)}(k_\rho(\rho_0 + \Delta\rho)) + H_0^{(2)}(k_\rho(\rho_0 - \Delta\rho))}{H_0^{(2)}(k_\rho\rho_0)} = \frac{1}{c^2} \left( \frac{\sin(\frac{\omega\Delta t}{2})}{\frac{\Delta t}{2}} \right)^2. \quad (3.82)$$

In der Arbeit von KIRSCH [Kir10] wird gezeigt, dass die Gitterdispersionsgleichung für die Grenzwertbildung  $\Delta\rho \rightarrow 0$  und  $\Delta t \rightarrow 0$  in Anlehnung an die Gitterdispersionsgleichung in kartesischen Koordinaten aus Gleichung (3.51) durch den folgenden Ausdruck approximiert werden kann:

$$\left( \frac{\sin(\frac{k_\rho\Delta\rho}{2})}{\frac{\Delta\rho}{2}} \right)^2 = \frac{1}{c^2} \left( \frac{\sin(\frac{\omega\Delta t}{2})}{\frac{\Delta t}{2}} \right)^2. \quad (3.83)$$

An dieser Stelle wird deutlich, dass eine allgemeine gültige diskrete Dispersionsgleichung für Zylinderkoordinaten nicht mehr analytisch hergeleitet werden kann. Wie hier im Abschnitt nach [Pet00] gezeigt wurde, kann für Spezialfälle eine diskrete Dispersionsbeziehung angegeben werden.

### Courant-Friedrichs-Lewy Bedingung in $\rho$ - $z$ -Koordinaten

Wie bereits in Abschnitt 3.2.4 für kartesische Koordinaten kann ebenfalls für  $\rho$ - $z$ -Koordinaten ein Stabilitätskriterium für einen maximalen Zeitschritt  $\Delta t$  angegeben werden. Dabei bietet die Herleitung über die *Energiemethode* [KC03; ESW04] die wohl eleganteste Lösung. Denn wie im Abschnitt zuvor diskutiert wurde, kann nicht mehr so einfach eine geschlossene Formulierung für die Dispersionsgleichung im Zeitbereich unter der Verwendung von  $\rho$ - $z$ -Koordinaten gefunden werden. Das angepasste CFL-Kriterium lautet nach [Deh93; CW07; Kir16]:

$$\Delta t \leq \Delta t_{CFL} = \frac{1}{c \sqrt{\frac{1}{\Delta\rho^2} + \frac{m_{\max}^2}{\Delta\rho^2} + \frac{1}{\Delta z^2}}}. \quad (3.84)$$

Hier entspricht  $m_{\max}$  der höchsten azimutalen Modenordnung die simuliert wird, für den Fall das unterschiedliche  $m$  zusammen berechnet werden. Das Stabilitätskriterium für den maximalen Zeitschritt ist für  $\rho$ - $z$ -Koordinaten nicht nur von

der Gitterauflösung  $\Delta\rho$ ,  $\Delta z$  sondern auch von der azimuthalen Modenordnung  $m$  abhängig.

## 4 Perfectly Matched Layer

Die in Kapitel 3 vorgestellte Methode der Finite Integration wird immer auf einem räumlich begrenzten Rechengebiet angewendet. Bei vielen Problemstellungen werden abstrahlende Strukturen wie z. B. Laser, Antennen oder auch die Streuung von Wellen an einem Objekt untersucht, die im Freiraum simuliert werden müssen. Diese Simulationen benötigen eine absorbierende Randbedingung um das Feld im Randbereich nicht zu verfälschen und die Energie reflexionsfrei aus dem Rechengebiet entweichen zu lassen. Für Strukturen wie offene Resonatoren in der Optik oder Antennen in der Hochfrequenztechnik ist auch erst mit einer offenen Randbedingung die Berechnung der Güte möglich. In dieser Arbeit wird als absorbierender Rand die *Perfectly Matched Layer* Randbedingung (PML) [Ber94] verwendet. An dieser Stelle sei angemerkt, dass die PML nicht einer *klassischen Randbedingung* entspricht. Es handelt sich vielmehr um eine Erweiterung des Rechengebietes mit einem künstlichen Material, das für eine Absorption der einfallenden Wellen bei gleichzeitiger Reflexionsfreiheit sorgt, bei beliebigen Einfallswinkeln und Frequenzen [Ber94; TH+95]. Der Rand des erweiterten Rechengebietes wird mit einer klassischen geschlossenen Randbedingung wie PEC oder PMC abgeschlossen.

Die PML-Randbedingung wurde 1994 von Jean-Pierre BERENGER eingeführt [Ber94]. Diese erste Formulierung wird auch als *split-field* PML bezeichnet, da innerhalb der PML-Region eine künstliche Aufteilung der Felder vorgenommen wird, die zusätzliche Feldkomponenten zur Folge hat. Diese führt zu einer Erhöhung der Anzahl an Gleichungen im Zeitbereichsschema.

In den folgenden Jahren wurden verschiedenste Formen der PML publiziert, die zu den sogenannten *unsplit-field* PML gehören. Diese vermeidet die künstlichen zusätzlichen Feldgrößen durch Einführung eines komplexen Materialtensors. So wurde praktisch zeitgleich, aber unabhängig voneinander, im Jahre 1995/96 von SACKS et al. [Sac+95] und GEDNEY [Ged96] die verallgemeinerte Form der PML, die U-PML (unsplit-PML) veröffentlicht. Ausgangspunkt hier sind isotropen Materialtensoren  $\bar{\bar{\epsilon}}$  und  $\bar{\bar{\mu}}$ . Ähnlich ist auch die M-PML (zeitliche Ableitung Lor-

ENTZ-Materialmodell PML) von ZIOLKOWSKI [Zis97] aus dem Jahr 1997, bei der die Materialtensoren durch das LORENTZ-Materialmodell beschrieben werden.

Im Jahr 1996 wurde die GT-PML (generalized theory of PML) von ZHAO und CANGELLARIS [ZC96] und die CFS-PML (complex frequency shifted PML) von KUZUOGLU und MITTRA [KM96] veröffentlicht. Diese beruhen auf dem Prinzip der Koordinaten-Streckung. Dabei wird das Problem auf eine komplexe Kontur projiziert und gelöst. Diese komplexe Kontur ist gerade so gewählt, dass nach der Rücktransformation auf die reelle Kontur ein exponentiell gedämpftes Feld resultiert.

Alle aufgeführten Varianten der PML-Randbedingung sind zunächst nur für kartesische Koordinaten formuliert. Die GT-PML wurde von TEIXEIRA und CHEW im Jahr 1997 auf Zylinder- und Kugelkoordinaten erweitert [TC97a; TC97b] und im Jahr 2000 von ZHAO für allgemeine krummlinige Koordinaten beschrieben [Zha00]. Des Weiteren gibt es die Quasi-PML, die eine Weiterentwicklung der BERENGER-PML für die Anwendung auf Zylinderkoordinaten darstellt und 1998 von LIU und HE in [LH98] vorgestellt wurde.

In diesem Kapitel wird im ersten Abschnitt 4.1 die Funktionsweise der PML-Randbedingung mit Hilfe des Ansatzes der Streckung der Koordinaten und dem komplexen Materialtensor beschrieben. Es werden die zylindrische GT-PML und die Quasi-PML Variante vorgestellt. Der nachfolgende Abschnitt 4.2 beschreibt die Vorgehensweise bei der Diskretisierung des komplexen Materialtensors innerhalb der PML auf dem Rechengitter in  $\rho$ - $z$ -Koordinaten. Der dritte und letzte Abschnitt 4.3 beschreibt die Zeitdiskretisierung der PML. Es werden mehrere Verfahren zur Herleitung unterschiedlicher Zeitbereichsschemata hergeleitet. Hier werden das *Leapfrog-Verfahren* mit arithmetischer Mittelung und verschobener Allokation, das *Exponentielle Zeitbereichsschema* und ein *Hybrides Implizites-Explizites Verfahren*, das eine räumliche Mischung von implizitem und explizitem Zeitupdate darstellt, mit PML hergeleitet. Bei dem expliziten Verfahren handelt es sich um das *Leapfrog Schema* und bei dem impliziten Algorithmus um das *Newmark-beta-Verfahren* [New59], vergl. Abschnitt 3.2.1.

### 4.1 Funktionsweise verschiedener PML Typen

Dieser Abschnitt behandelt PML-Typen, die auf Zylinderkoordinaten Verwendung finden, weil es sich im Anwendungskapitel 6 ausschließlich um zylindrische Bauteile mit Rotationssymmetrie handelt. Zunächst wird das Prinzip der Koordi-

natenstreckung und des komplexen Materialtensors erläutert. Anschließend werden die zylindrische GT-PML [TC97a; TC97b] und die Quasi-PML [LH98] näher betrachtet. Auf die weiteren PML Typen, die in der Einleitung des Kapitels genannt wurden, soll an dieser Stelle nicht eingegangen werden, da sie üblicherweise nicht auf Zylindergritter angewendet werden.

### 4.1.1 Koordinatenstreckung und Materialtensor

Der Ansatz der *Koordinatenstreckung* wurde erstmals von CHEW und WEEDON 1994 in [CW94] veröffentlicht. Der folgende Abschnitt orientiert sich bei der Koordinatenstreckung an [Joh08] und für die Materialtensoren an den Veröffentlichungen [CW94; TC97b].

Zunächst sei an dieser Stelle angemerkt, dass bei der Koordinatenstreckung die Lösung der Wellengleichung in reellen Koordinaten auf ein Gebiet mit komplexen Koordinaten abgebildet wird. Diese allgemeine Lösung in komplexen Koordinaten beinhaltet die Lösung der Wellengleichung auf reellen Koordinaten. Warum mit dieser Abbildung auf die komplexen Koordinaten im Bereich der PML eine Dämpfung der Wellen möglich ist, wird hier für ein vereinfachtes Problem mit Streckung in einer Raumrichtung exemplarisch behandelt. Diese Darstellungsweise und die detaillierten Schritte der Herleitung sind [Joh08] entnommen.

#### Koordinatenstreckung - Modellproblem

Die Idee des Ansatzes ist, dass eine Welle  $\vec{f}(\vec{r}, t)$ , mit  $\vec{r} = (u\vec{e}_u, v\vec{e}_v, w\vec{e}_w)$  im Bereich des PML Mediums exponentiell gedämpft wird, ohne Reflexion zu erzeugen. Dazu wird die reelle Koordinate  $u$  auf eine komplexe Kontur  $\tilde{u}$  abgebildet. Dann wird das Problem auf der komplexen Kontur gelöst und zurück auf reelle Koordinaten transformiert. So erhält man ein exponentiell gedämpftes Feld und Material mit komplexwertiger Permeabilität und Permittivität. Nimmt man zum Beispiel eine Welle mit Ausbreitung in  $u$ -Richtung an, dann soll die Welle in dieser Richtung reflexionsfrei gedämpft werden. Dazu wird im Bereich der PML mit  $u > u_0$  die reelle Kontur von  $u$  aus Abb. 4.1(a) auf eine komplexe Kontur  $\tilde{u}$  entsprechend Abb. 4.1(c) transformiert. Die komplexe Kontur ist gegeben durch:

$$\tilde{u}(u) = u + jg(u) \tag{4.1}$$

mit einer Funktion  $g(u)$  mit  $g(u) \neq 0$  für  $u > u_0$ , die den Verlauf der Kontur im Bereich der PML beschreibt. Als weitere Voraussetzung gilt, dass das Material im Bereich vor der PML homogen und der Bereich im Rechenggebiet, linear

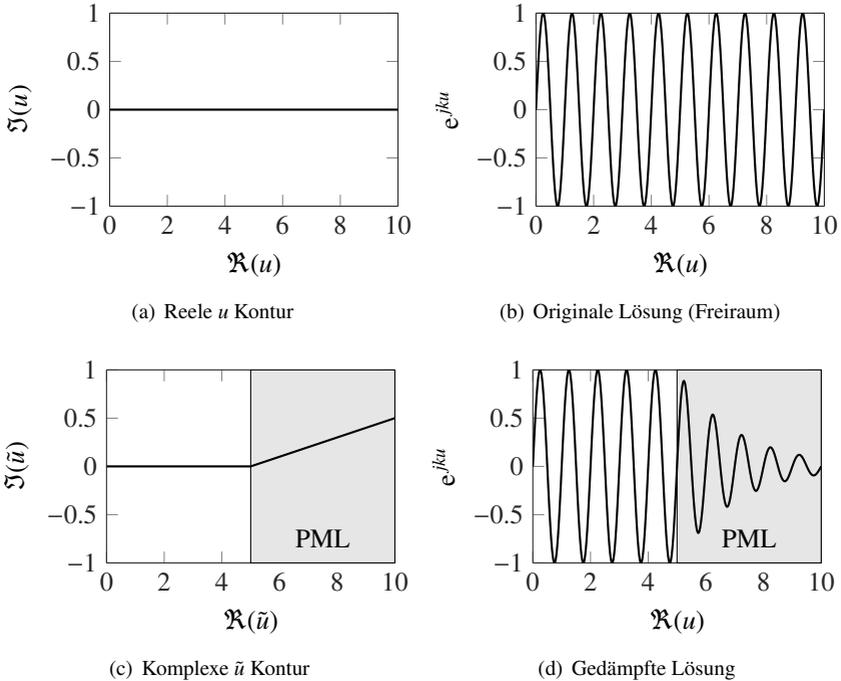


Abbildung 4.1: Schema zur Veranschaulichung der Koordinatenstreckung. Mit der reellen Koordinate  $u$  in (a) und der komplexen Kontur  $\tilde{u}$  in (c). Die kontinuierliche Schwingung im Freiraum ist in (b) skizziert. Die Lösung auf einem diskreten Raum mit PML ab  $u > u_0 = 5$  ausgewertet auf der komplexen Kontur aus (c) und rücktransformiert auf die reelle Koordinate ist in der Grafik (d) skizziert. Alle Abbildungen sind Abb. 2 in [Joh08] entnommen.

und zeitinvariant ist. Die Lösung der Wellengleichung  $\vec{f}(\vec{u}, t)$  kann im unendlich ausgedehnten Raum angegeben werden als Superposition ebener Wellen:

$$\vec{f}(\vec{r}, t) = \sum_{\vec{k}, \omega} \vec{F}_{\vec{k}, \omega} e^{-j(\omega t - \vec{k} \cdot \vec{r})} \quad (4.2)$$

mit konstanten Amplituden  $\vec{F}_{\vec{k}, \omega}$ , der Wellenzahl  $k = \omega/c$ , wobei  $\omega$  die Kreisfrequenz und  $c$  die Ausbreitungsgeschwindigkeit ist. Die abstrahlenden Felder, die hier von Interesse sind, können in der folgenden Form angegeben werden:

$$\vec{F}(u, v, w, t) = \vec{F}(v, w) e^{-j(\omega t - ku)}. \quad (4.3)$$

Für den Bereich innerhalb der PML, wo die Kontur  $\tilde{u}$  komplexe Werte annimmt, ergibt sich für die abstrahlenden Felder:

$$\vec{F}(\tilde{u}, v, w, t) = \vec{F}(v, w) e^{jk\Re(\tilde{u})} e^{-k\Im(\tilde{u})} e^{-j\omega t}. \quad (4.4)$$

Es ist offensichtlich, dass der Imaginärteil von  $\tilde{u}$  zu einer exponentiellen Dämpfung des Feldes im Bereich der PML führt und das im restlichen Rechengebiet, wo  $\tilde{u} = u$  gilt, die Lösung unverändert bleibt. In Abb. 4.1(b) ist eine oszillierende Lösung im Freiraum zu sehen und in Abb. 4.1(d) die Lösung derselben Funktion ausgewertet auf der komplexen Kontur  $\tilde{u}$ . Die Dämpfung der Amplitude im PML Bereich ist deutlich sichtbar. Nun wird noch die Funktion  $g(u)$  bestimmt. Dazu wird die Rücktransformation zum reellen  $u$  betrachtet und die Leitfähigkeit  $\sigma_u(u)$  in  $u$ -Richtung mit einem Profil, abhängig vom Ort  $u$ , eingeführt. Mit Hilfe der Substitution

$$\partial \tilde{u} = \left(1 + j \frac{df}{du}\right) \partial u \quad \text{mit} \quad \frac{df}{du} = \frac{\sigma_u(u)}{\omega}, \quad \sigma_u = \begin{cases} \sigma_u = 0 & \text{für } u < u_0 \\ \sigma_u > 0 & \text{für } u > u_0 \end{cases} \quad (4.5)$$

kann das Verhalten der Differentialgleichung innerhalb der PML durch die folgende Transformation beschrieben werden:

$$\frac{\partial}{\partial u} \rightarrow \frac{1}{1 + j \frac{\sigma_u(u)}{\omega}} \frac{\partial}{\partial u}. \quad (4.6)$$

Für den Bereich innerhalb der PML mit  $u > u_0$  erhält man also ein exponentiell gedämpftes Feld. Nach Einsetzen der komplexen Kontur  $\tilde{u}$  und der Rücktransformation in reelle Koordinaten erhält man für das Feld innerhalb der PML Region:

$$\vec{F}(u, v, w, t) = \vec{F}(v, w) e^{jku} e^{-\frac{k}{\omega} \int^{u'} \sigma_u(u') du'} \quad (4.7)$$

mit  $\frac{k}{\omega} = \frac{1}{c_u}$ , wobei  $c_u$  die Phasengeschwindigkeit in  $u$ -Richtung ist. Somit werden durch Berücksichtigung des Faktors  $\frac{1}{\omega}$  alle Frequenzen gleichmäßig gedämpft. Außerdem wird ersichtlich, dass man durch obige Transformation ein komplexes Material innerhalb der PML Region erhält. Nun wird die Welle in der PML gedämpft, ohne dass es zu Reflexion kommt. Ist die Ausdehnung der PML groß genug, so kann als Abschluss der PML eine beliebige Randbedingung verwendet werden, ohne dass es zu Reflexion in das eigentliche Rechenggebiet kommt.

### Materialtensor

Um die Koordinatenstreckung nun in die MAXWELL'schen Gleichungen einzubauen können wird ein Streckungsfaktor für die Felder  $\Gamma$  und anisotropes Material mit  $\bar{\varepsilon}$  und  $\bar{\mu}$  verwendet werden. Diese anisotropen Materialtensoren setzen sich aus den Materialwerten  $\varepsilon$  und  $\mu$  sowie einem anisotropen Tensor  $\bar{\Lambda}$  zusammen:

$$\bar{\varepsilon} = \varepsilon \bar{\Lambda}, \quad \bar{\mu} = \mu \bar{\Lambda}. \quad (4.8)$$

Für das Beispiel in allgemeinen Koordinaten  $(u, v, w)$  mit Streckung in  $u$ -Richtung wird der Tensor mit dem Streckungsfaktoren  $s_u$  nach [TC97a] definiert als:

$$\bar{\Lambda} = \hat{u}\hat{u} \left( \frac{1}{s_u} \right) + (\hat{v}\hat{v} + \hat{w}\hat{w}) s_u \quad (4.9)$$

mit dem nach Gleichung (4.5) motivierten Streckungsfaktor

$$s_u(u) = \begin{cases} 1, & u < u_0 \\ 1 + \frac{\sigma(u)}{j\omega} & u > u_0 \end{cases}. \quad (4.10)$$

Der Streckungsfaktor  $\Gamma$  für die Felder und der komplexe Tensor  $\bar{\Lambda}$  für das Material können in Matrixschreibweise ebenfalls nach [Kir10] angegeben werden als:

$$\Gamma = \begin{bmatrix} s_u & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}, \quad \bar{\Lambda} = \begin{bmatrix} \frac{1}{s_u} & 0 & 0 \\ 0 & s_u & 0 \\ 0 & 0 & s_u \end{bmatrix}. \quad (4.11)$$

Durch Einsetzen dieser in die erste und zweite MAXWELL'sche Gleichung im Frequenzbereich ergibt sich:

$$\text{rot} \Gamma \vec{E}^c = j\omega \mu \bar{\Lambda} \Gamma \vec{H}^c, \quad (4.12)$$

$$\text{rot} \Gamma \vec{H}^c = -j\omega \varepsilon \bar{\Lambda} \Gamma \vec{E}^c + \Gamma \vec{J}^c. \quad (4.13)$$

Hier sind die komplexen Felder mit einem hochgestellten  $c$  markiert. Sie erfüllen die angegebenen Gleichungen, jedoch nicht mehr die kontinuierlichen MAXWELL-Gleichungen, wie sie in Gleichung (2.5) und (2.6) angegeben sind. Der Zusammenhang zwischen den Komponenten der Felder kann mit Hilfe des Streckungsfaktors angegeben werden als [TC97a]:

$$E_u^{\text{Maxwell}} = s_u E_u^c, \quad H_u^{\text{Maxwell}} = s_u H_u^c, \quad J_u^{\text{Maxwell}} = s_u J_u^c. \quad (4.14)$$

Aus der Arbeit von BERENGER [Ber94] ist für die Materialtensoren bekannt, dass der eine Tensor beliebig gewählt werden kann und der andere identisch sein muss, um Reflexionsfreiheit zu erhalten. Somit gilt für die Materialtensoren:

$$\overline{\overline{\Lambda}} = \overline{\overline{\Lambda}}_\varepsilon = \overline{\overline{\Lambda}}_\mu. \quad (4.15)$$

Im Folgenden wird immer der Materialtensor  $\overline{\overline{\Lambda}}$  verwendet. Es ist bei der Diskretisierung darauf zu achten, ob der Materialtensor vor der elektrischen oder magnetischen Feldstärke steht. Entsprechend handelt es sich dann um  $\overline{\overline{\Lambda}}_\varepsilon$  oder  $\overline{\overline{\Lambda}}_\mu$  und somit um eine zusätzliche elektrische ( $\kappa$ ) oder magnetische ( $\sigma$ ) Leitfähigkeit.

Die im Kontinuierlichen formulierte Reflexionsfreiheit bezieht sich auf eine unendlich ausgedehnte PML. Für den diskreten Fall besitzt sie eine begrenzte Ausdehnung  $\delta$ , weshalb hier nicht mehr die Reflexionsfreiheit gilt. Die Reflexion einer PML Schicht mit Ausdehnung  $\delta$  kann nach [Ber96] angegeben werden als:

$$R(\Theta) = e^{-2\sigma_{\max}\delta \cos(\Theta)/(n+1)\varepsilon_0 c}. \quad (4.16)$$

Der Reflexionsfaktor ist abhängig vom Einfallswinkel der Welle  $\Theta$ , der Ausdehnung der PML  $\delta$ , vom Material und der Anzahl diskreter PML Lagen  $n$ . Aus dieser Formulierung ergibt sich später der Wert der Reflexion  $\mathcal{R}$ , der für die PML fest eingestellt wird.

### PML für alle drei Raumrichtungen

Die PML wurde zunächst nur für die  $u$ -Richtung beschrieben. Natürlich können auch mehrere Raumrichtungen mit einer PML abgeschlossen werden. Für eine PML in  $u$ -,  $v$ - und  $w$ -Richtung erhält man nach [TC97b] für den Tensor  $\overline{\overline{\Lambda}}$  zum Berechnen der anisotropen Materialtensoren und den Tensor  $\Gamma$  für die Streckung der Felder, innerhalb der PML:

$$\overline{\overline{\Lambda}} = \hat{u}\hat{u} \left( \frac{s_v s_w}{s_u} \right) + \hat{v}\hat{v} \left( \frac{s_u s_w}{s_v} \right) + \hat{w}\hat{w} \left( \frac{s_u s_v}{s_w} \right), \quad (4.17)$$

$$\Gamma = s_u \hat{u} \hat{u} + s_v \hat{v} \hat{v} + s_w \hat{w} \hat{w}. \quad (4.18)$$

Im Bereich des Rechengebietes, wo die Kontur der Koordinaten rein reell ist, gilt:

$$\overline{\Lambda} = \Gamma = \hat{u} \hat{u} + \hat{v} \hat{v} + \hat{w} \hat{w}. \quad (4.19)$$

Die Streckungsfaktoren für die einzelnen Raumrichtungen sind entsprechend dem Ansatz der Koordinatenstreckung nach [Joh08; TC97b] definiert als

$$\begin{aligned} \tilde{u} &= u_0 + \int_{u_0}^u s_u(u') \, du', & \tilde{v} &= v_0 + \int_{v_0}^v s_v(v') \, dv' \\ \text{und} & & \tilde{w} &= w_0 + \int_{w_0}^w s_w(w') \, dw'. \end{aligned} \quad (4.20)$$

Hier beginnt die PML in der entsprechenden Richtung an der Stelle  $u_0$ ,  $v_0$  bzw.  $w_0$ . Nach der Arbeit von KIRSCH [Kir10] könne die Streckungsfaktoren in der folgenden Schreibweise angegeben werden als:

$$s_u = \begin{cases} 1 & u < u_0 \\ 1 + \frac{\sigma(u)}{j\omega} & u > u_0 \end{cases}, \quad (4.21)$$

$$s_v = \begin{cases} 1 & v < v_0 \\ 1 + \frac{\sigma(v)}{j\omega} & v > v_0 \end{cases}, \quad (4.22)$$

$$s_w = \begin{cases} 1 & w < w_0 \\ 1 + \frac{\sigma(w)}{j\omega} & w > w_0 \end{cases}. \quad (4.23)$$

### 4.1.2 PML für Zylindergitter

Die PML Randbedingung wurde bereits für beliebige Koordinaten  $(u, v, w)$  mit Hilfe der Koordinatenstreckung aus [TC97b] und unter Verwendung eines anisotropen Materialensors eingeführt. Die Streckungsfaktoren  $s_u$ ,  $s_v$  und  $s_w$  wurden in einer geeigneten Notation nach [Kir10] dargestellt. Nun können die Koordinaten  $(u, v, w)$  in ein beliebiges Gitter überführt werden. Für Zylindergitter wird folglich die Transformation  $(u, v, w) \rightarrow (\rho, \varphi, z)$  verwendet. Eine Besonderheit der Zylinderkoordinaten ist, dass nicht alle Metrikfaktoren eins sind. Die  $\varphi$ -Richtung verfügt über  $h_\varphi = \rho$ . Dies kann entweder vernachlässigt werden, wie es bei der Quasi-PML der Fall ist oder miteinbezogen werden, was im Fall der GT-PML zu einer komplizierteren Darstellungsform führt. Die folgende Darstellung der GT-PML und der Quasi-PML sind der Veröffentlichung von CHEN et. al [Che+13] entnommen.

### GT-PML für Zylindergitter

Für die  $\rho$ - und  $z$ -Richtung können die Streckungsfaktoren  $s_u$  und  $s_w$  aus den Gleichungen (4.21) und (4.23) verwendet werden, indem die Koordinaten entsprechend ersetzt werden. Für die  $\varphi$ -Richtung muss der Metrikfaktor  $h_\varphi = \rho$  berücksichtigt werden, dies erfolgt durch die Wahl des Streckungsfaktors nach [Che+13] zu:

$$s_\varphi = \frac{\tilde{\rho}}{\rho} \quad (4.24)$$

mit

$$\tilde{\rho} = \int_0^\rho s_\rho(\rho') d\rho' = \int_0^\rho \left(1 + \frac{\sigma(\rho')}{j\omega}\right) d\rho' = \left(1 + \frac{\sigma_{\text{Int}}^\rho}{j\omega}\right). \quad (4.25)$$

Hier enthält  $\sigma_{\text{Int}}^\rho$  die über  $\rho'$  integrierten Werte. Nach [TC97b] erhält man die für den PML Bereich notwendigen Tensoren:

$$\overline{\overline{\Lambda}} = \hat{\rho}\hat{\rho} \left(\frac{\tilde{\rho}}{\rho}\right) \frac{s_z}{s_\rho} + \hat{\varphi}\hat{\varphi} \left(\frac{\rho}{\tilde{\rho}}\right) s_\rho s_z + \hat{z}\hat{z} \left(\frac{\tilde{\rho}}{\rho}\right) \frac{s_\rho}{s_z}, \quad (4.26)$$

$$\Gamma = s_\rho \hat{\rho}\hat{\rho} + \left(\frac{\tilde{\rho}}{\rho}\right) \hat{\varphi}\hat{\varphi} + s_z \hat{z}\hat{z}. \quad (4.27)$$

Der Bereich im Rechengebiet bleibt weiterhin unverändert.

### Quasi-PML für Zylindergitter

Bei diesem Ansatz wird als Vereinfachung der Metrikfaktor  $h_\varphi = \rho$  der Zylinderkoordinaten vernachlässigt. Dies kann realisiert werden, indem  $\tilde{\rho} = \rho$  gewählt wird, man erhält entsprechend  $s_\varphi = 1$ . Die Quasi-PML ist somit implizit in der GT-PML enthalten, da man nur die entsprechende Größe  $s_\varphi = 1$  einzusetzen braucht.

Durch das nicht Berücksichtigen des Metrik Faktors geht schon an dieser Stelle der Herleitung die Reflexionsfreiheit der Formulierung verloren. Üblicherweise ist das erst bei der Diskretisierung der PML durch eine endliche Ausdehnung der Fall. Doch in manchen Fällen lohnt sich die Verwendung trotzdem. Denn ihre Implementierung ist einfacher im Vergleich zur GT-PML. In [HL99] und [Kir10] wurde bereits gezeigt, dass sich mit der Quasi-PML ebenfalls gute Ergebnisse erzielen lassen.

## 4.2 Diskretisierung mit FIT auf $\rho$ - $z$ - Koordinaten

Nachdem in Abschnitt 4.1 die PML-Randbedingung analytisch beschrieben wurde, wird in diesem Abschnitt auf die räumliche Diskretisierung eingegangen. Da in dieser Arbeit ausschließlich zylindersymmetrische Strukturen untersucht werden, wird sich hier darauf beschränkt die Diskretisierung für  $\rho$ - $z$ -Koordinaten zu erläutern. Dabei wird auch ausführlich auf die zusätzlichen Leitfähigkeiten im PML-Material eingegangen.

### 4.2.1 Diskretisierung der PML

Die analytische Formulierung der ersten und zweiten MAXWELL'schen Gleichung mit GT-PML aus Gleichung (4.12) und (4.13) wird jetzt unter Verwendung der Methode der Finiten Integration auf  $\rho$ - $z$ -Koordinaten diskretisiert. Die Diskretisierung folgt dabei dem Vorgehen aus Kapitel 3. Dort ist die Diskretisierung der MAXWELL'schen Gleichungen in Abschnitt 3.1 und die Besonderheiten der Diskretisierung auf  $\rho$ - $z$ -Koordinaten in Abschnitt 3.4 beschrieben. Die Vorgehensweise zur Diskretisierung der PML in der für die FIT üblichen Schreibweise wurde aus der Arbeit von KIRSCH [Kir10] übernommen. Die Diskretisierung von Gleichung (4.12) und (4.13) liefert mit den Diagonalmatrizen  $\Gamma_D$  und  $\Lambda_D$ , die den kontinuierlichen Tensoren  $\Gamma$  und  $\overline{\Lambda}$  entsprechen:

$$\mathbf{C}\Gamma_D\hat{\mathbf{e}} = j\omega\mathbf{M}_\mu\Lambda_D\Gamma_D\hat{\mathbf{h}}, \quad (4.28)$$

$$\mathbf{C}^T\Gamma_D\hat{\mathbf{h}} = -j\omega\mathbf{M}_\varepsilon\Lambda_D\Gamma_D\hat{\mathbf{e}} + \Gamma_D\hat{\mathbf{j}}. \quad (4.29)$$

In  $\rho$ - $z$ -Koordinaten gibt es drei verschiedene PML Regionen, siehe Abb. 4.2. Mit  $\text{PML}_{z+}$  und  $\text{PML}_{z-}$  sind die PML Bereiche in positiver und negativer  $z$ -Richtung gekennzeichnet. Die PML in radialer Richtung wird mit  $\text{PML}_\rho$  bezeichnet und die Überlappungsgebiete dieser mit den Gebieten der  $z+$  und  $z-$  PML ergeben die Ecken-PML mit  $\text{PML}_{\rho+}$  und  $\text{PML}_{\rho-}$ . Für den Fall der Ecken PML müssen nun der Streckungsfaktor für die Felder  $\Gamma_D$  und der komplexe Tensor  $\Lambda_D$  näher betrachtet werden. Für die GT-PML sind beide Matrizen in Gleichung (4.26) und (4.27) angegeben. Da die Quasi-PML immer aus der Formulierung der GT-PML abgeleitet werden kann, erfolgt hier im Weiteren ausschließlich die Herleitung für die GT-PML. Unter Berücksichtigung der Streckungsfaktoren aus Gleichung (4.21),

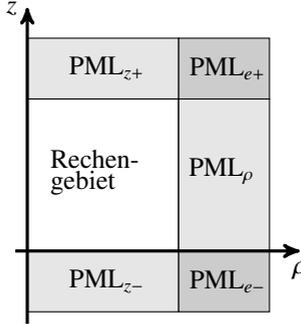


Abbildung 4.2: Schematische Darstellung und Bezeichnung der verschiedenen PML Regionen für ein Rechengebiet in  $\rho$ - $z$ -Koordinaten.

(4.23) und (4.24) erhält man nach Umstellen die Gleichungen:

$$\mathbf{C}\hat{\mathbf{e}} + \mathbf{C}\mathbf{M}_{\kappa_n} \frac{1}{j\omega} \hat{\mathbf{e}} = -j\omega \mathbf{M}_\mu \hat{\mathbf{h}} - \mathbf{M}_\mu \mathbf{M}_{\sigma_{t1}} \hat{\mathbf{h}} - \mathbf{M}_\mu \mathbf{M}_{\sigma_{t2}} \frac{1}{j\omega} \hat{\mathbf{h}}, \quad (4.30)$$

$$\mathbf{C}^T \hat{\mathbf{h}} + \mathbf{C}^T \mathbf{M}_{\sigma_n} \frac{1}{j\omega} \hat{\mathbf{h}} = j\omega \mathbf{M}_\varepsilon \hat{\mathbf{e}} + \mathbf{M}_\varepsilon \mathbf{M}_{\kappa_{t1}} \hat{\mathbf{e}} + \mathbf{M}_\varepsilon \mathbf{M}_{\kappa_{t2}} \frac{1}{j\omega} \hat{\mathbf{e}} + \hat{\mathbf{j}}. \quad (4.31)$$

Die Matrizen werden wie folgt bezeichnet: die Normalkomponente der Leitfähigkeit als  $\mathbf{M}_{\kappa_n}$  und  $\mathbf{M}_{\sigma_n}$  und die Matrizen für die Tangentialkomponenten der Leitfähigkeiten als  $\mathbf{M}_{\kappa_{t1}}$ ,  $\mathbf{M}_{\kappa_{t2}}$ ,  $\mathbf{M}_{\sigma_{t1}}$  und  $\mathbf{M}_{\sigma_{t2}}$ . Diese weisen ausschließlich im Bereich der PML Matrixeinträge ungleich Null auf. Hier sind die Materialmatrizen nach der Frequenzabhängigkeit sortiert, da später eine Implementierung im Zeitbereich erfolgt. Die Schreibweise der Materialmatrizen, die durch die Diskretisierung der PML hinzukommen, entsprechen der Notation der Arbeiten von KIRSCH [Kir10] und FISCHER [Fis14].

### Normalkomponenten der Leitfähigkeiten

Die Matrizen  $\mathbf{M}_{\kappa_n}$  und  $\mathbf{M}_{\sigma_n}$  enthalten die normalen Komponenten der elektrischen und magnetischen Leitfähigkeiten innerhalb der PML Region. In der Re-

gion  $\text{PML}_{z+}$  und  $\text{PML}_{z-}$  sind das die  $z$ -Komponenten und in der Region  $\text{PML}_{\rho}$  die  $\rho$ -Komponenten. Innerhalb der Ecken  $\text{PML}_{e+}$  und  $\text{PML}_{e-}$  sind es die  $\rho$ - und  $z$ -Komponenten. Die  $\varphi$ -Richtung enthält die Metrik-Information innerhalb der jeweiligen PML Region. Die Matrizen lassen sich in der folgenden Form angeben:

$$\mathbf{M}_{\kappa_n} = \begin{bmatrix} \kappa(\rho) & 0 & 0 \\ 0 & \kappa_{\text{Int}}^{\rho}(\rho, \kappa) & 0 \\ 0 & 0 & \kappa(z) \end{bmatrix} \text{ und } \mathbf{M}_{\sigma_n} = \begin{bmatrix} \sigma(\rho) & 0 & 0 \\ 0 & \sigma_{\text{Int}}^{\rho}(\rho, \sigma) & 0 \\ 0 & 0 & \sigma(z) \end{bmatrix} \quad (4.32)$$

mit den ortsabhängigen Werten  $\kappa(z)$  und  $\sigma(z)$ , deren genaues Profil und die notwendige Abtastung dessen, wie in Abschnitt 4.2.2 näher erläutert wird. Die Matrizen  $\kappa_{\text{Int}}^{\rho}(\rho, \kappa)$ ,  $\sigma_{\text{Int}}^{\rho}(\rho, \sigma)$  enthalten die in Abhängigkeit der  $\rho$ -Position integrierten Größen von  $\kappa$  und  $\sigma$ .

### Tangentialkomponenten der Leitfähigkeiten

Die Matrizen  $\mathbf{M}_{\kappa_{t1}}$  und  $\mathbf{M}_{\sigma_{t1}}$  enthalten die tangentialen Komponenten der elektrischen und magnetischen Leitfähigkeiten innerhalb der PML Region. Im Bereich der  $\text{PML}_{z+}$  und der  $\text{PML}_{z-}$  sind das die  $\rho$ - und  $\varphi$ -Komponenten und in der Region  $\text{PML}_{\rho}$  die  $\varphi$ - und  $z$ -Komponenten. Innerhalb der Ecken  $\text{PML}_{e+}$  und  $\text{PML}_{e-}$  werden die Tangentialkomponenten, enthalten in der  $\text{PML}_{z+}$  und  $\text{PML}_{z-}$ , mit denen aus dem  $\rho$  Bereich addiert. Die Matrizen  $\mathbf{M}_{\kappa_{t2}}$  und  $\mathbf{M}_{\sigma_{t2}}$  enthalten nur innerhalb der Ecken  $\text{PML}_{e+}$  und  $\text{PML}_{e-}$  einen Eintrag. Dort werden jeweils dieselben Einträge miteinander multipliziert, die zuvor in  $\mathbf{M}_{\kappa_{t1}}$  und  $\mathbf{M}_{\sigma_{t1}}$  addiert wurden. Somit sind  $\mathbf{M}_{\kappa_{t2}}$  und  $\mathbf{M}_{\sigma_{t2}}$  nur dann nicht Null, wenn eine Ecken PML vorhanden ist. Die Matrizen der tangentialen Komponenten der Leitfähigkeit lassen sich angeben als:

$$\mathbf{M}_{\kappa_{t1}} = \begin{bmatrix} \kappa_{\text{Int}}^{\rho}(\rho, \kappa) + \kappa(z) & 0 & 0 \\ 0 & \kappa(\rho) + \kappa(z) & 0 \\ 0 & 0 & \kappa(\rho) + \kappa_{\text{Int}}^{\rho}(\rho, \kappa) \end{bmatrix}, \quad (4.33)$$

$$\mathbf{M}_{\sigma_{t1}} = \begin{bmatrix} \sigma_{\text{Int}}^{\rho}(\rho, \sigma) + \sigma(z) & 0 & 0 \\ 0 & \sigma(\rho) + \sigma(z) & 0 \\ 0 & 0 & \sigma(\rho) + \sigma_{\text{Int}}^{\rho}(\rho, \sigma) \end{bmatrix}, \quad (4.34)$$

$$\mathbf{M}_{\kappa_{t2}} = \begin{bmatrix} \kappa_{\text{Int}}^{\rho}(\rho, \kappa)\kappa(z) & 0 & 0 \\ 0 & \kappa(\rho)\kappa(z) & 0 \\ 0 & 0 & \kappa(\rho)\kappa_{\text{Int}}^{\rho}(\rho, \kappa) \end{bmatrix}, \quad (4.35)$$

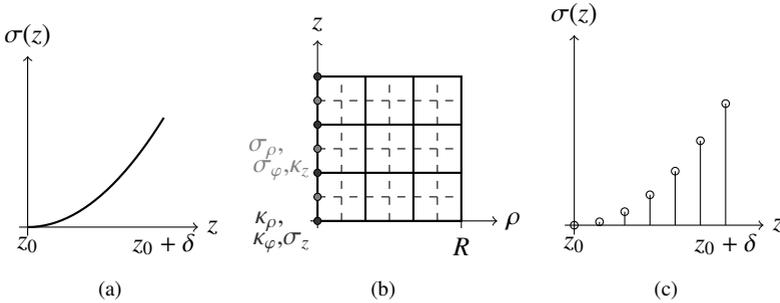


Abbildung 4.3: (a) kontinuierliches Profil der Materialkonstante, in Abhängigkeit von  $z$  (b) lokale Abtastpunkte für  $\kappa(z)$  und  $\sigma(z)$  im FIT 2.5D Gitter (c) in (a) abgetastete diskrete Werte  $\sigma(z)$ . Alle Abbildungen sind [Kir10] entnommen.

$$\mathbf{M}_{\sigma_{r2}} = \begin{bmatrix} \sigma_{\text{Int}}^\rho(\rho, \sigma)\sigma(z) & 0 & 0 \\ 0 & \sigma(\rho)\sigma(z) & 0 \\ 0 & 0 & \sigma(\rho)\sigma_{\text{Int}}^\rho(\rho, \sigma) \end{bmatrix}. \quad (4.36)$$

## 4.2.2 Diskretisierung der zusätzlichen PML-Materialien

Die elektrischen und magnetischen Leitfähigkeiten in den Materialmatrizen für den Bereich der PML sind künstliche Materialien die zum einen den Zweck der Absorption (Tangentialkomponenten) und zum anderen den der Impedanzanpassung (Normalkomponenten) erfüllen sollen. Die Werte für  $\kappa$  und  $\sigma$  folgen in der Regel einem Profil, dessen Steigung und Maximalwert von einer zuvor festgelegten analytischen Reflexion  $\mathcal{R}$  der PML abhängt. Da auch die PML auf einem Gitter diskretisiert wird, müssen die  $\kappa$  und  $\sigma$  Werte auf dem Profil abgetastet werden. Auf Grund der Bedingung aus Gleichung (4.15) für die Materialtensoren innerhalb der PML wird im weiteren Verlauf nur exemplarisch die magnetische Leitfähigkeit  $\sigma(z)$  beschrieben. Die anderen Richtungen und die elektrische Leitfähigkeit lassen sich in analoger Weise herleiten. Die hier vorgestellte Berechnung der Leitfähigkeit innerhalb der PML richtet sich nach der Methode von BERENGER, vorgestellt in [Ber96]. Die Leitfähigkeit in  $z$ -Richtung bei einer Schichtdicke  $\delta$ ,

der gesamten PML, wird durch das Materialprofil

$$\sigma(z) = \sigma_m \left( \frac{z}{\delta} \right)^n \quad (4.37)$$

beschrieben, mit  $\sigma(z = z_0) = 0$  und  $\sigma(z = \delta) = \sigma_m$ , wobei die Stelle  $z_0$  dem Übergang zwischen Rechengebiet und PML-Region entspricht. Die Ordnung des Profils wird durch  $n$  beschrieben. Üblicherweise finden lineare  $n = 1$  und quadratische  $n = 2$  Profile Anwendung. Der Verlauf von  $\sigma(z)$  ist exemplarisch für ein quadratisches Profil in Abb. 4.3(a) skizziert. Betrachtet man das primäre und das duale Gitter in der PML Region, siehe Abb. 4.3(b), so fällt auf, dass man an Punkten in  $z$ -Richtung des primären Gitters am günstigsten  $\kappa_\rho$ ,  $\kappa_\varphi$  und  $\sigma_z$  und an den dualen Punkten  $\sigma_\rho$ ,  $\sigma_\varphi$  und  $\kappa_z$  abtastet. Allgemein werden an primären Punkten die Tangentialkomponenten von  $\kappa$  und die Normalkomponenten von  $\sigma$  und an den dualen Punkten die Normalkomponenten von  $\kappa$  und die Tangentialkomponenten von  $\sigma$  abgetastet. Die diskreten Werte der (im Wechsel für die Koordinate der primären und dualen Gitterpunkte abgetastet) sind in Abb. 4.3(c) angegeben. Das Materialprofil wird im Abstand von  $\Delta z/2$  abgetastet. Die diskreten Werte können mit der folgenden Vorschrift aus [Ber96] berechnet werden:

$$\sigma_n(0) = \frac{\sigma_m}{(n+1)2^{n+1}N^n} = -\frac{c \ln(\mathcal{R})}{2^{n+2}\Delta z N^{n+1}}, \quad (4.38)$$

$$\sigma_n(L > 0) = \sigma_n(0) \left( (2L+1)^{n+1} - (2L-1)^{n+1} \right). \quad (4.39)$$

Hier bezeichnet  $n$  die Ordnung des Materialprofils,  $\mathcal{R}$  die festgelegte Reflexion am Übergang von Rechengebiet zu PML,  $\Delta z$  die Gitterschrittweite in  $z$ -Richtung und  $L$  die Anzahl an diskreten PML-Schichten. Wie schon in den Abschnitten zuvor erwähnt, ist die PML nach der Diskretisierung auf dem Gitter nicht mehr reflexionsfrei. Der Wert der Reflexion, der am Übergang zur PML auftreten soll, wird hier mit  $\mathcal{R}$  bereits in der Berechnung des Materialprofils berücksichtigt. Allgemein gilt, dass je größer der Sprung der Leitfähigkeit von einer PML-Schicht zur nächsten ist, desto höher ist auch die Reflexion von einer zur nächsten Schicht. Der Anstieg sollte deshalb möglichst flach verlaufen. Dies kann zum einen durch die Anzahl der PML-Schichten, um die das Rechengebiet erweitert wird, sowie die Wahl des Wertes für  $\mathcal{R}$  berücksichtigt werden. Üblicherweise werden für  $\mathcal{R}$  Werte im Bereich  $10^{-1}$  bis  $10^{-4}$  gewählt. Für die Gesamtdicke der PML wird meistens  $\lambda_{\min}/2$  angegeben [TH+95; Ged11]. Mit der Gitterschrittweite lässt sich daraus die Anzahl benötigter PML-Schichten berechnen.

Das Integral über  $s_\rho(\rho')$  aus Gleichung (4.25), das in diskreter Form in  $\mathbf{I}(\rho, \sigma)$  enthalten ist, kann unter Verwendung von

$$\sigma_{\text{Int}}^\rho(\rho, \sigma) = \sigma_{\text{max}} \frac{(\rho - \rho_0)^{n+1}}{\rho^{(n+1)} \cdot (L\Delta\rho)^n} \quad (4.40)$$

abgetastet werden. Dabei entspricht  $\rho_0$  der Koordinaten in  $\rho$ -Richtung, an der die  $\rho$  PML beginnt und  $L\Delta\rho$  entspricht der Dicke der  $\rho$  PML. Für magnetische Leitfähigkeiten wird  $\rho$  auf dem dualen und für elektrische Leitfähigkeiten auf dem primären Gitter abgetastet.

## 4.3 Zeitbereich

Die PML-Randbedingung wurde eingeführt und die Diskretisierung für  $\rho$ - $z$ -Koordinaten vorgestellt. Um Zeitbereichssimulationen durchführen zu können, muss vom Frequenz- in den Zeitbereich transformiert und die Zeitachse  $T$  diskretisiert werden. Dies wird im ersten Teil des Abschnittes beschrieben. Durch die Randbedingung sind im Rechengebiet immer Leitfähigkeiten vorhanden. Deshalb sei bei der Zeitintegration auf Abschnitt 3.2.2 verwiesen. Dort wurden bereits Verfahren zur Zeitintegration mit Leitfähigkeit vorgestellt, die hier ebenfalls angewendet werden können und in den Unterpunkten 4.3.2 - 4.3.4 beschrieben werden.

### 4.3.1 Zeitintegration im PML Material

Der Ausgangspunkt für die Herleitung der Zeitintegration im PML Material ist die Frequenzbereichsformulierung der ersten und zweiten MAXWELL'schen Gleichung mit PML aus den Gleichungen (4.30) und (4.31). Die Transformation von Frequenz- in den Zeitbereich entspricht einer LAPLACE-Transformation. Die zwei folgenden Transformationspaare sind bekannt und können in den Standardwerken der Mathematik, wie z. B. [Zei12] nachgeschlagen werden:

$$\widetilde{X}(s) = \frac{1}{s} X(s) \bullet \circ \tilde{x}(t) = \int_0^t x(\tau) d\tau, \quad (4.41)$$

$$\widetilde{X}(s) = s \cdot X(s) \bullet \circ \tilde{x}(t) = \frac{d}{dt} x(t). \quad (4.42)$$

Im Weiteren werden die zeitabhängigen Gitterspannungen  $\widehat{\mathbf{e}}(t)$  und  $\widehat{\mathbf{h}}(t)$  sowie der Flächenstrom  $\widehat{\mathbf{j}}(t)$  zu Gunsten der Lesbarkeit in der Form  $\widehat{\mathbf{e}}$ ,  $\widehat{\mathbf{h}}$  und  $\widehat{\mathbf{j}}$  notiert.

Wendet man die beschriebene Transformation von Frequenz- in den Zeitbereich auf die Gleichungen (4.30) und (4.31) an, so folgt daraus

$$\mathbf{C}\hat{\mathbf{e}} + \mathbf{C}\mathbf{M}_{\kappa_n} \int_0^t \hat{\mathbf{e}} dt = - \frac{d}{dt} \mathbf{M}_\mu \hat{\mathbf{h}} - \mathbf{M}_\mu \mathbf{M}_{\sigma_{r1}} \hat{\mathbf{h}} - \mathbf{M}_\mu \mathbf{M}_{\sigma_{r2}} \int_0^t \hat{\mathbf{h}} dt, \quad (4.43)$$

$$\widetilde{\mathbf{C}}\hat{\mathbf{h}} + \widetilde{\mathbf{C}}\mathbf{M}_{\sigma_n} \int_0^t \hat{\mathbf{h}} dt = \frac{d}{dt} \mathbf{M}_\varepsilon \hat{\mathbf{e}} + \mathbf{M}_\varepsilon \mathbf{M}_{\kappa t1} \hat{\mathbf{e}} + \mathbf{M}_\varepsilon \mathbf{M}_{\kappa t2} \int_0^t \hat{\mathbf{e}} dt + \hat{\mathbf{j}}. \quad (4.44)$$

Die Integrale der elektrischen und magnetischen Gitterspannungen über die Zeit werden durch die zusätzlichen Größen  $\Phi(t)$  und  $\Psi(t)$  ausgedrückt. Sie sind definiert als:

$$\Phi(t) := \int_0^t \hat{\mathbf{e}} dt, \quad \Psi(t) := \int_0^t \hat{\mathbf{h}} dt. \quad (4.45)$$

Mit Hilfe dieser zusätzlichen Größen erhält man die erste und zweite diskrete *Gitter-Maxwell-Gleichung* in  $\rho$ - $z$ -Koordinaten mit PML Randbedingung in  $\rho$ - und in  $z$ -Richtung für den Zeitbereich:

$$\mathbf{C}\hat{\mathbf{e}} + \mathbf{C}\mathbf{M}_{\kappa_n} \Phi = - \frac{d}{dt} \mathbf{M}_\mu \hat{\mathbf{h}} - \mathbf{M}_\mu \mathbf{M}_{\sigma_{r1}} \hat{\mathbf{h}} - \mathbf{M}_\mu \mathbf{M}_{\sigma_{r2}} \Psi, \quad (4.46)$$

$$\widetilde{\mathbf{C}}\hat{\mathbf{h}} + \widetilde{\mathbf{C}}\mathbf{M}_{\sigma_n} \Psi = \frac{d}{dt} \mathbf{M}_\varepsilon \hat{\mathbf{e}} + \mathbf{M}_\varepsilon \mathbf{M}_{\kappa t1} \hat{\mathbf{e}} + \mathbf{M}_\varepsilon \mathbf{M}_{\kappa t2} \Phi + \hat{\mathbf{j}}. \quad (4.47)$$

Wie bei den Gitterspannungen, wird auch bei den integralen Größen der Gitterspannung - der Lesbarkeit wegen - die Notation  $\Phi$  und  $\Psi$  für die zeitabhängigen Größen  $\Phi(t)$  und  $\Psi(t)$  verwendet. Die diskreten ersten beiden *Gitter-Maxwell-Gleichungen* im Zeitbereich mit PML Randbedingung bilden den Ausgangspunkt für die Herleitung verschiedener Zeitbereichsverfahren. Dazu gehören das *Leapfrog-Verfahren*, das *Exponentielle Zeitbereichsverfahren* und das *Hybride Implizite-Explizite Zeitbereichsverfahren*. Diese werden in den folgenden Unterpunkten eingeführt und erläutert.

### 4.3.2 Standard Leapfrog-Verfahren

In [KJS17b] wurde von der Autorin bereits eine einfachere Formulierung für eine reine  $z$ -PML veröffentlicht. Diese erhält man aus dem hier vorgestellten Zeitbe-

reichsschema unter der Berücksichtigung, dass  $\mathbf{M}_{kt2} = \mathbf{M}_{\sigma_{t2}} = \mathbf{0}$ . Um ein Zeitbereichsschema zu erhalten, werden die bezüglich des Raumes diskreten Gleichungen (4.46) und (4.47) um die Diskretisierung der Zeit erweitert. Das Vorgehen der Zeitdiskretisierung wurde für Verfahren mit und ohne Leitfähigkeit (jedoch ohne PML-Randbedingung) bereits im Kapitel 3 in den Abschnitten 3.2.1 und 3.2.2 beschrieben. Im Fall des *Leapfrog-Verfahrens* werden die Zeitableitungen in (4.46) und (4.47) mit dem Differenzenquotienten approximiert. Zudem müssen auch für  $\Phi$  und  $\Psi$  Update Gleichungen gefunden werden. Diese setzen sich zusammen aus der Aufsummierung der zeitlich vorangegangenen  $\Phi$  und  $\Psi$ , sowie der Integration der jeweiligen Gitterspannung im letzten Zeitschritt  $\Delta t$ . Die Integrale werden durch die Rechteckregel approximiert. Hier werden die Feldgrößen  $\hat{\mathbf{h}}$ ,  $\Psi$  und  $\hat{\mathbf{j}}$  auf halben Zeitschritten und die Feldgrößen  $\hat{\mathbf{e}}$  und  $\Phi$  auf ganzen Zeitschritten allokiert. Die zeitlichen Ableitungen von elektrischer und magnetischer Gitterspannung werden wie in Abschnitt 3.2.1 durch den zentralen Differenzenquotienten aus Gleichung (3.22) approximiert. Das führt auf das folgende Zeitbereichsschema:

$$\hat{\mathbf{h}}^{(n+\frac{1}{2})} = \hat{\mathbf{h}}^{(n-\frac{1}{2})} - \Delta t \mathbf{M}_{\sigma_{t1}} \hat{\mathbf{h}}^{(n)} - \Delta t \mathbf{M}_{\sigma_{t2}} \Psi^{(n)} - \Delta t \mathbf{M}_{\mu}^{-1} (\mathbf{C}\hat{\mathbf{e}}^{(n)} + \mathbf{C}\mathbf{M}_{k_n} \Phi^{(n)}), \quad (4.48)$$

$$\Psi^{(n+\frac{1}{2})} = \Psi^{(n-\frac{1}{2})} + \Delta t \hat{\mathbf{h}}^{(n+\frac{1}{2})}, \quad (4.49)$$

$$\hat{\mathbf{e}}^{(n+1)} = \hat{\mathbf{e}}^{(n)} - \Delta t \mathbf{M}_{kt1} \hat{\mathbf{e}}^{(n+\frac{1}{2})} - \Delta t \mathbf{M}_{kt2} \Phi^{(n+\frac{1}{2})} + \Delta t \mathbf{M}_{\varepsilon}^{-1} (\tilde{\mathbf{C}}\hat{\mathbf{h}}^{(n+\frac{1}{2})} + \tilde{\mathbf{C}}\mathbf{M}_{\sigma_n} \Psi^{(n+\frac{1}{2})} - \hat{\mathbf{j}}^{(n+\frac{1}{2})}), \quad (4.50)$$

$$\Phi^{(n+1)} = \Phi^{(n)} + \Delta t \hat{\mathbf{e}}^{(n+1)}. \quad (4.51)$$

Dabei ist zu beachten, dass die in der Gleichung (4.48) die markierten Größen  $\hat{\mathbf{h}}^{(n)}$  und  $\Psi^{(n)}$  und in der Gleichung (4.50) die markierten Größen  $\hat{\mathbf{e}}^{(n+\frac{1}{2})}$  und  $\Phi^{(n+\frac{1}{2})}$  zeitlich „falsch“ allokiert sind. Diese verschobene Allokation ergibt sich durch die berücksichtigten Leitfähigkeiten innerhalb der PML. Dies entspricht derselben Problematik wie der Berücksichtigung von leitfähigem Material in Abschnitt 3.2.2. Auch hier sei darauf hingewiesen, dass die Größen im Zeitkontinuierlichen zu jedem Zeitpunkt  $t$  existieren. Die Bezeichnung „falsch“ allokiert bedeutet in diesem Zusammenhang nur, dass die zeitdiskreten Größen um einen halben Zeitschritt verschoben zum eigentlichen Abtastzeitpunkt auftreten und damit eine besondere Behandlung notwendig wird. Somit kann auch in diesem Fall mit denselben

ben Ansätzen Abhilfe geschaffen werden: *Verschobene Allokation*, *Arithmetische Mittelung*, *Exponentielles Zeitbereichsschema* und *Hybrides Implizites-Explizites Verfahren*. Im *Leapfrog-Verfahren* in den Gleichungen (4.48)-(4.51) treten für  $\tilde{\mathbf{h}}$  und  $\tilde{\mathbf{e}}$  jeweils zwei „falsch“ allokierte Größen auf. Diese können mit der arithmetischen Mittelung oder der Vershobenen Allokation, vorgestellt in Abschnitt 3.2.2, behandelt werden. Um hier beide Verfahren in einem Schema beschreiben zu können, werden die Variablen  $a$  und  $b$  eingeführt. Für  $a = b = 0.5$  ergibt sich die arithmetische Mittelung und für  $a = 1$  und  $b = 0$  die verschobene Allokation. Die falsch allokierten Größen aus Gleichung (4.48) und (4.50) werden beschrieben als:

$$\tilde{\mathbf{h}}^{(n)} = a\tilde{\mathbf{h}}^{(n-\frac{1}{2})} + b\tilde{\mathbf{h}}^{(n+\frac{1}{2})}, \quad (4.52)$$

$$\tilde{\mathbf{e}}^{(n+\frac{1}{2})} = a\tilde{\mathbf{e}}^{(n)} + b\tilde{\mathbf{e}}^{(n+1)}, \quad (4.53)$$

$$\Psi^{(n)} = a\Psi^{(n-\frac{1}{2})} + b\Psi^{(n+\frac{1}{2})} = \Psi^{(n-\frac{1}{2})} + \Delta t b \tilde{\mathbf{h}}^{(n+\frac{1}{2})}, \quad (4.54)$$

$$\Phi^{(n+\frac{1}{2})} = a\Phi^{(n)} + b\Phi^{(n+1)} = \Phi^{(n)} + \Delta t b \tilde{\mathbf{e}}^{(n+1)}. \quad (4.55)$$

Die noch unbekanntenen Größen  $\Psi^{(n+\frac{1}{2})}$  und  $\Phi^{(n+1)}$  können durch eigene Update Gleichungen beschrieben werden. Mit dieser Behandlung der „falsch“ allokierten Größen erhält man das Zeitbereichsschema für ein Rechengebiet mit PML in  $\rho$ - und  $z$ -Richtung:

$$\tilde{\mathbf{h}}^{(n+\frac{1}{2})} = \mathbf{D}_{h1} \left[ \mathbf{D}_{h2} \tilde{\mathbf{h}}^{(n-\frac{1}{2})} - \Delta t \mathbf{M}_{\sigma_{t2}} \Psi^{(n-\frac{1}{2})} - \Delta t \mathbf{M}_{\mu}^{-1} (\mathbf{C} \tilde{\mathbf{e}}^{(n)} + \mathbf{C} \mathbf{M}_{\kappa_n} \Phi^{(n)}) \right], \quad (4.56)$$

$$\Psi^{(n+\frac{1}{2})} = \Psi^{(n-\frac{1}{2})} + \Delta t \tilde{\mathbf{h}}^{(n+\frac{1}{2})}, \quad (4.57)$$

$$\tilde{\mathbf{e}}^{(n+1)} = \mathbf{D}_{e1} \left[ \mathbf{D}_{e2} \tilde{\mathbf{e}}^{(n)} - \Delta t \mathbf{M}_{\kappa_{t2}} \Phi^{(n)} + \Delta t \mathbf{M}_{\epsilon}^{-1} (\mathbf{C}^T \tilde{\mathbf{h}}^{(n+\frac{1}{2})}), \quad (4.58)$$

$$+ \mathbf{C}^T \mathbf{M}_{\sigma_n} \Psi^{(n+\frac{1}{2})} - \hat{\mathbf{j}}^{(n+\frac{1}{2})} \right], \quad (4.59)$$

$$\Phi^{(n+1)} = \Phi^{(n)} + \Delta t \tilde{\mathbf{e}}^{(n+1)} \quad (4.60)$$

mit den zusammengefassten Matrizen

$$\mathbf{D}_{h1} = (\mathbf{I} + \Delta t b \mathbf{M}_{\sigma_{t1}} + \Delta t^2 b \mathbf{M}_{\sigma_{t2}})^{-1}, \quad \mathbf{D}_{h2} = (\mathbf{I} - \Delta t a \mathbf{M}_{\sigma_{t1}}), \quad (4.61)$$

$$\mathbf{D}_{e1} = (\mathbf{I} + \Delta t b \mathbf{M}_{\kappa_{t1}} + \Delta t^2 b \mathbf{M}_{\kappa_{t2}})^{-1}, \quad \mathbf{D}_{e2} = (\mathbf{I} - \Delta t a \mathbf{M}_{\kappa_{t1}}). \quad (4.62)$$

Für den Fall der verschobenen Allokation mit  $b = 0$  vereinfacht sich das Zeitbereichsschema erheblich, da die Matrizen  $\mathbf{D}_{h1}$  und  $\mathbf{D}_{e1}$  entfallen. Eine graphische Darstellung des Zeitbereichsschemas ist in Abb. 4.4 skizziert.

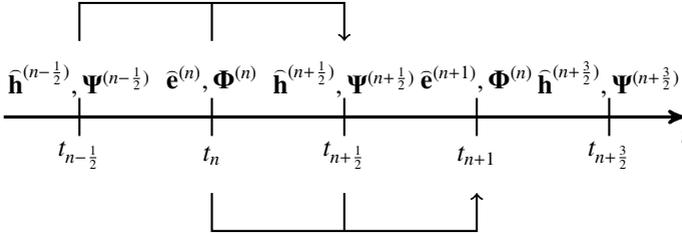


Abbildung 4.4: Zeitstrahl  $t$  mit diskreten Zeitschritten und den entsprechenden elektrischen und magnetischen Gitterspannungen sowie deren integrale Größen  $\Phi$  und  $\Psi$ . Je ein Update von  $\widehat{\mathbf{h}}$ ,  $\widehat{\mathbf{e}}$ ,  $\Psi$  und  $\Phi$  ist exemplarisch eingezeichnet.

### 4.3.3 Exponentielles Zeitbereichsschema

Um die Zeitableitung exakt darzustellen, kann das Problem mittels Integration eines Zeitschrittes  $\Delta t$  exakt gelöst werden. Die Methode des *Exponentiellen Zeitbereichsschemas* wurde bereits in Abschnitt 4.3.3 beschrieben. Ausgangspunkt für das Verfahren sind die Gleichungen (4.46) und (4.47) mit den zugehörigen Definitionen der integrierten Gitterspannungen. Eine Variante für eine reine  $z$ -PML wurde bereits von der Autorin in [KJS17b] veröffentlicht. Sie kann aus der hier vorliegenden Formulierung unter Berücksichtigung, dass für eine reine  $z$ -PML  $\mathbf{M}_{\kappa t2} = \mathbf{M}_{\sigma t2} = \mathbf{0}$  ist, gewonnen werden. Damit ergibt sich das Zeitbereichsschema zu:

$$\begin{aligned} \widehat{\mathbf{h}}^{(n+1/2)} &= \mathbf{D}_\alpha \widehat{\mathbf{h}}^{(n-1/2)} - (\mathbf{I}_h - \mathbf{D}_\alpha) (\mathbf{M}_\mu \mathbf{M}_{\sigma t1})^{-1} \left[ \mathbf{C} \widehat{\mathbf{e}}^{(n)} \right. \\ &\quad \left. + \mathbf{C} \mathbf{M}_{\kappa t} \Phi^{(n)} - \mathbf{M}_\mu \mathbf{M}_{\sigma t2} \Psi^{(n-1/2)} \right], \end{aligned} \quad (4.63)$$

$$\Psi^{(n+1/2)} = \Psi^{(n-1/2)} + \Delta t \widehat{\mathbf{h}}^{(n+1/2)}, \quad (4.64)$$

$$\begin{aligned} \widehat{\mathbf{e}}^{(n+1)} &= \mathbf{D}_t \widehat{\mathbf{e}}^{(n)} + (\mathbf{I}_e - \mathbf{D}_t) (\mathbf{M}_\varepsilon \mathbf{M}_{\kappa t1})^{-1} \left[ \mathbf{C}^T \widehat{\mathbf{h}}^{(n+1/2)} \right. \\ &\quad \left. + \mathbf{C}^T \mathbf{M}_{\sigma n} \Psi^{(n+1/2)} - \mathbf{M}_\varepsilon \mathbf{M}_{\kappa t2} \Phi^{(n)} - \widehat{\mathbf{j}}^{(n+1/2)} \right], \end{aligned} \quad (4.65)$$

$$\Phi^{(n+1)} = \Phi^{(n)} + \Delta t \widehat{\mathbf{e}}^{(n+1)} \quad (4.66)$$

mit den Diagonalmatrizen

$$\mathbf{D}_\alpha = \exp\left(-\Delta t \left(\mathbf{M}_{\sigma_{r1}} + \frac{\Delta t}{2} \mathbf{M}_{\sigma_{r2}}\right)\right), \quad \mathbf{D}_l = \exp\left(-\Delta t \left(\mathbf{M}_{kr1} + \frac{\Delta t}{2} \mathbf{M}_{kr2}\right)\right) \quad (4.67)$$

die nur im Bereich der PML Einträge enthalten. Es ist bei der Implementierung darauf zu achten, dass im Bereich des Rechengebietes das Standard *Leapfrog-Verfahren* resultiert. Dies erreicht man durch geschickte Besetzung der Diagonalmatrizen  $\mathbf{I}_e$  und  $\mathbf{I}_h$ . Einträge auf der Hauptdiagonalen, die auf Indizes innerhalb des Rechengebietes zugreifen haben den Wert  $\Delta t$  und Einträge, die auf das PML-Gebiet zugreifen, besitzen den Wert 1.

### 4.3.4 Hybrider Impliziter-Expliziter Algorithmus

In Abschnitt 3.2.1 wurde im Absatz zu *Newmark-beta-Verfahren – Impliziter Zeitupdate* bereits die allgemeine Vorgehensweise erläutert, wie man aus den *Standard Leapfrog* Gleichungen und dem *Newmark-beta Ansatz* ein implizites Verfahren herleiten kann. Auch die Hybridisierung durch Diagonalmatrizen  $\mathbf{D}_\beta$  und  $\mathbf{D}_\gamma$  wurde erläutert. Es wird im Folgenden analog wie in besagtem Abschnitt vorgegangen, um einen *Hybriden Impliziten-Expliziten Zeitupdate* mit PML Randbedingung herzuleiten. Ein *Hybrider Impliziter-Expliziter* Zeitbereichsalgorithmus wurde bereits für den Fall einer reinen  $z$ -PML von der Autorin in [KS20] und für eine reine  $\rho$ -PML in [KS] veröffentlicht. Der Zeitbereichsalgorithmus der reinen  $z$ -PML lässt sich unter der Voraussetzung, dass es keine PML in  $\rho$ -Richtung und keine Ecken-PML gibt aus der hier allgemeinen Variante ableiten. Ebenso kann der Zeitupdate für die reine  $\rho$ -PML unter der Voraussetzung, dass es keine  $z$ - und keine Ecken PML gibt aus der hier allgemeinen Formulierung ableiten. Es wird hier von den *Standard Leapfrog Gleichungen* mit PML aus (4.56) und (4.59) ausgegangen. Für  $\Psi$  und  $\Phi$  bleiben die Zeitupdates unverändert. Der Ausgangspunkt ist wie beschrieben der *Newmark-beta Ansatz*

$$\tilde{\mathbf{e}}^{(n)} \equiv \mathbf{D}_\beta \tilde{\mathbf{e}}^{(n+1)} + \left(\frac{1}{2} \mathbf{I} - 2\mathbf{D}_\beta + \mathbf{D}_\gamma\right) \tilde{\mathbf{e}}^{(n)} + \left(\frac{1}{2} + \mathbf{D}_\beta - \mathbf{D}_\gamma\right) \tilde{\mathbf{e}}^{(n-1)}. \quad (4.68)$$

Mit den Diagonalmatrizen  $\mathbf{D}_\beta$  und  $\mathbf{D}_\gamma$  ist es möglich jeder einzelnen Gitterkante einen speziellen Wert für  $\beta = [0, 1]$  und  $\gamma = [0, 1]$  zuzuweisen. Dadurch ist es möglich im Bereich der PML implizit und im restlichen Rechengebiet explizit zu rechnen, denn für den Fall, dass  $\beta = 0$  und  $\gamma = 0.5$  ist, erhält man wieder das ursprüngliche *Leapfrog-Verfahren*. Setzt man nun den *Newmark-beta Ansatz* für

die elektrische Gitterspannung für  $\tilde{\mathbf{e}}^{(n)}$  aus Gleichung (4.68) in (4.56) ein, so erhält man ein Update für  $\tilde{\mathbf{h}}^{(n+\frac{1}{2})}$  der von den Größen  $\tilde{\mathbf{h}}^{(n-\frac{1}{2})}$ ,  $\tilde{\mathbf{e}}^{(n-1)}$ ,  $\tilde{\mathbf{e}}^{(n)}$ ,  $\tilde{\mathbf{e}}^{(n+1)}$ ,  $\Phi^{(n-\frac{1}{2})}$  und  $\Phi^{(n)}$  abhängig ist. Da die elektrische Gitterspannung  $\tilde{\mathbf{e}}^{(n+1)}$  zu diesem Zeitpunkt noch nicht bekannt ist, muss diese durch das Update aus Gleichung (4.59) ersetzt werden. Nun kann die resultierende Formulierung nach  $\tilde{\mathbf{h}}^{(n+\frac{1}{2})}$  umgestellt werden. Der *Hybride Implizite-Explizite Algorithmus* mit PML ist wie folgt definiert:

$$\begin{aligned} \tilde{\mathbf{h}}^{(n+\frac{1}{2})} = & \mathbf{A}^{-1} \left( \mathbf{D}_{h1} \left[ \mathbf{D}_{h2} \tilde{\mathbf{h}}^{(n-\frac{1}{2})} - \Delta t \mathbf{M}_{\mu}^{-1} \mathbf{C} (\mathbf{D}_{\beta} \mathbf{D}_{e1} \mathbf{D}_{e2} + \mathbf{D}_{\eta}) \tilde{\mathbf{e}}^{(n)} - \Delta t \mathbf{M}_{\mu}^{-1} \mathbf{C} \mathbf{D}_{\varepsilon} \tilde{\mathbf{e}}^{(n-1)} \right. \right. \\ & - \left. \left. \left( \frac{\Delta t}{2} \mathbf{M}_{\sigma_{t2}} + \Delta t^2 \mathbf{M}_{\mu}^{-1} \mathbf{C} \mathbf{D}_{\beta} \mathbf{D}_{e1} \mathbf{M}_{\varepsilon}^{-1} \tilde{\mathbf{C}} \mathbf{M}_{\sigma_n} \right) \Psi^{(n-\frac{1}{2})} \right] \right. \\ & + \left. \left( \frac{\Delta t}{4} \mathbf{M}_{\mu}^{-1} \mathbf{C} \mathbf{D}_{\beta} \mathbf{D}_{e1} \mathbf{M}_{kt2} - \Delta t \mathbf{M}_{\mu}^{-1} \mathbf{C} \mathbf{M}_{\kappa_n} \right) \Phi^{(n)} \right. \end{aligned} \quad (4.69)$$

$$\left. + \Delta t^2 \mathbf{M}_{\mu}^{-1} \mathbf{C} \mathbf{D}_{\beta} \mathbf{D}_{e1} \mathbf{M}_{\varepsilon}^{-1} \tilde{\mathbf{j}}^{(n+\frac{1}{2})} \right] \quad (4.70)$$

$$\Psi^{(n+\frac{1}{2})} = \Psi^{(n-\frac{1}{2})} + \Delta t \tilde{\mathbf{h}}^{(n+\frac{1}{2})} \quad (4.71)$$

$$\tilde{\mathbf{e}}^{(n+1)} = \mathbf{D}_{e1} \left[ \mathbf{D}_{e2} \tilde{\mathbf{e}}^{(n)} + \Delta t \mathbf{M}_{\varepsilon}^{-1} \left( \tilde{\mathbf{C}} \tilde{\mathbf{h}}^{(n+\frac{1}{2})} + \tilde{\mathbf{C}} \mathbf{M}_{\sigma_n} \Psi^{(n+\frac{1}{2})} - \tilde{\mathbf{j}}^{(n+\frac{1}{2})} \right) \right] \quad (4.72)$$

$$\left. - \frac{\Delta t}{2} \mathbf{M}_{kt2} \Phi^{(n)} \right] \quad (4.73)$$

$$\Phi^{(n+1)} = \Phi^{(n)} + \Delta t \tilde{\mathbf{e}}^{(n+1)} \quad (4.74)$$

mit den verwendeten Abkürzungen

$$\mathbf{A} = \mathbf{I} + \Delta t^2 \mathbf{D}_{h1} \mathbf{M}_{\mu}^{-1} \mathbf{C} \mathbf{D}_{\beta} \mathbf{D}_{e1} \mathbf{M}_{\varepsilon}^{-1} \tilde{\mathbf{C}} + \Delta t^3 \mathbf{D}_{h1} \mathbf{M}_{\mu}^{-1} \mathbf{C} \mathbf{D}_{\beta} \mathbf{D}_{e1} \mathbf{M}_{\varepsilon}^{-1} \tilde{\mathbf{C}} \mathbf{M}_{\sigma_n}, \quad (4.75)$$

$$\mathbf{D}_{\eta} = \frac{1}{2} \mathbf{I} - 2\mathbf{D}_{\beta} + \mathbf{D}_{\gamma}, \quad \mathbf{D}_{\varepsilon} = \frac{1}{2} \mathbf{I} + \mathbf{D}_{\beta} - \mathbf{D}_{\gamma}. \quad (4.76)$$

Die Matrizen  $\mathbf{D}_{e1}$ ,  $\mathbf{D}_{e2}$ ,  $\mathbf{D}_{h1}$  und  $\mathbf{D}_{h2}$  sind bereits in den Gleichungen (4.61) und (4.62) definiert. Die zu invertierende Matrix  $\mathbf{A}$  enthält während der gesamten Simulation ausschließlich konstante Werte und besitzt eine Bandstruktur. Insgesamt gilt also, dass die Matrix nur einmal zu Beginn invertiert werden muss und in den meisten Fällen eine performante LR-Zerlegung (sparse LU) [Saa03] verwendet werden kann. Werden konstante Terme bei der Implementierung zusammengefasst, so sind insgesamt 13 Additionen und 13 Matrix-Vektor Multiplikationen für

einen Zeitschritt  $\Delta t$  notwendig. Vergleicht man dies mit dem *Leapfrog-Verfahren* mit PML, so werden dort nur 9 Additionen und 8 Multiplikationen benötigt. Es ist aber festzuhalten, dass viele der zusätzlichen Operatoren mit den Matrizen  $\mathbf{D}_\eta$  und  $\mathbf{D}_\xi$  sind und diese nur im Bereich der PML Einträge aufweisen und somit sehr dünn besetzt sind.

# 5 Validierung und Analyse

Die Zeitbereichsverfahren mit PML aus dem vorangegangenen Kapitel 4, das Standard *Leapfrog-Verfahren*, das *Exponentielle Zeitbereichsschema* und das *Hybride Implizite-Explizite Zeitbereichsschema* sollen nun bezüglich ihres Verhaltens und ihrer numerischen Stabilität näher untersucht werden. Dies geschieht an einfachen akademischen Beispielen und umfasst die PML in  $z$ -Richtung mit Hilfe eines Zylinderhohlleiters. Weiterhin wird die PML in  $\rho$ -Richtung mit einem Zylinderresonator und einer in  $\rho$ -Richtung offenen Anordnung betrachtet, die in  $z$ -Richtung durch PEC begrenzt ist.

Bei der Analyse kommt die spektrale Untersuchung der Eigenwerte der Rekursionsmatrix zur Anwendung. Aber auch das Verhalten im Zeitbereich wird mit Hilfe der aufgezeichneten Energie im Rechengebiet näher untersucht. Dabei ist das Kapitel in zwei Hauptbereiche aufgeteilt. Es beginnt mit den Untersuchungen der PML in  $z$ -Richtung, dann folgt die Betrachtung der PML in  $\rho$ -Richtung. Abschließend wird im dritten Teil eine kurze Zusammenfassung und Diskussion der in diesem Kapitel gewonnenen Erkenntnisse bezüglich der Zeitdiskretisierung mit PML Randbedingung angegeben.

## 5.1 PML Randbedingung in $z$ -Richtung

Zuerst wird nur die PML in  $z$ -Richtung für die im Kapitel 4 genannten Zeitbereichsverfahren auf  $\rho$ - $z$ -Koordinaten untersucht. Für eine Aussage bezüglich der Stabilität werden zunächst an einem sehr einfachen Beispiel in Form eines Zylinderhohlleiters die Eigenwerte der Rekursionsmatrix  $\mathbf{G}(\Delta t)$  analysiert. Die spektralen Eigenschaften dieser können dabei helfen, Probleme wie die Instabilität zu verstehen [JKS17]. Da das analytische Vorgehen zur Bestimmung der Eigenwerte bei den Zeitbereichsschemata mit PML nicht mehr ohne weiteres möglich ist, im Gegensatz zu den einfacheren Beispielen in Abschnitt 3.2.4, werden hier die Eigenwerte der Rekursionsmatrix für ein konkretes Beispiel numerisch bestimmt. Das Vorgehen dazu wurde bereits in Abschnitt 3.3.2 im Punkt zu *Newmark-beta-Verfahren* beschrieben, siehe Algorithmus 1. Da alle Eigenwerte der Rekursions-

matrix berechnet werden müssen, führt dies zu einer Limitierung der Größe des zu lösenden Eigenwertproblems. Deshalb werden hier zunächst akademische Beispiele verwendet, die hinreichend klein sind. Danach wird auch der Energieverlauf für dieselben Anordnungen untersucht. Anschließend wird ein weiterer Hohlleiter, dessen Anzahl an Gitterpunkten einem realistischen Verhältnis von Gitterpunkten zu Wellenlänge entspricht, analysiert. Die Stabilität wird dabei anhand der Energie im Rechengebiet über der Simulationszeit bewertet. Es ist noch zu vermerken, dass bei der  $z$ -PML die Quasi-PML der GT-PML entspricht. Deshalb muss in den folgenden Beispielen zur PML in  $z$ -Richtung keine Unterscheidung bezüglich der beiden PML-Typen angegeben werden.

### 5.1.1 Numerische Beispiele

Als Testbeispiel für die verschiedenen Zeitbereichsverfahren der PML Randbedingung aus Abschnitt 4.3 in  $z$ -Richtung dienen hier zwei unterschiedliche zylindrische Hohlleiter. Einer der beiden ist mit einem Materialeinsatz  $\varepsilon_r$  gefüllt, siehe Abb. 5.1(a). Der andere ist ausschließlich mit Vakuum gefüllt, vergleiche dazu die Skizze in Abb. 5.1(b). Beide Hohlleiter haben den Radius  $r$  und die Höhe  $h$ . Der Materialeinsatz in Abb. 5.1(a) besitzt die Höhe  $h_r$  und die Permeabilität  $\varepsilon = \varepsilon_r \varepsilon_0$ . In  $\rho$ -Richtung ist der Abschluss eine PEC und in negativer  $z$ -Richtung ein PMC Rand. In positiver  $z$ -Richtung befindet sich eine PML Randbedingung, die mit einem PEC Rand abgeschlossen wird. Zur Lösung des Problems wird die Methode der Finite Integration auf  $\rho$ - $z$ -Koordinaten mit azimuthaler Ordnung  $m = 1$  angewendet.

Der Materialsprung im Hohlleiter entspricht dem Verhalten eines durchlässigen Resonators. Wenn die Frequenz der Mode oberhalb von Cutoff des offenen Hohlleiters liegt, bilden sich innerhalb des Bereichs mit erhöhter Permittivität  $\varepsilon = \varepsilon_0 \varepsilon_r$  Resonanzen, die nur über den offenen, ausschließlich mit Vakuum gefüllten, Hohlleiter mit anschließender PML abstrahlen. In diesem Fall wird das Feld am Ende in der PML absorbiert.

### 5.1.2 Eigenwerte der Rekursionsmatrix

Für das *Leapfrog-Verfahren* sowie das *Exponentielle Zeitbereichsschema* werden die Eigenwerte der Rekursionsmatrix berechnet und analysiert. Um die Dimension der Rekursionsmatrix  $\mathbf{G}(\Delta t)$  und den damit verbundenen Aufwand der Berechnung aller Eigenwerte  $\lambda_{TD}$  von  $\mathbf{G}(\Delta t)$  möglichst gering zu halten, werden die

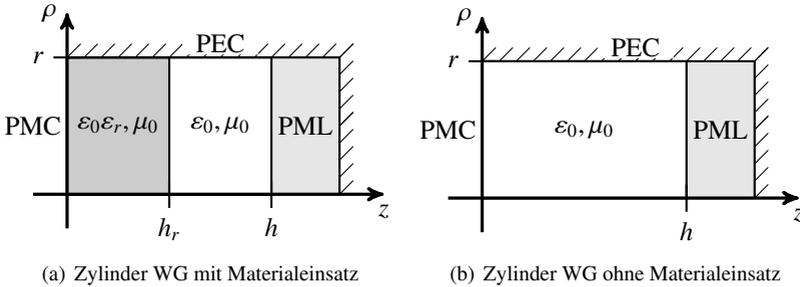


Abbildung 5.1: Simulationsanordnung zum Test der PML-Randbedingung in  $z$ -Richtung. Es handelt sich um einen zylindrischen Hohlleiter aus PEC mit der Höhe  $h$  und dem Radius  $r$ , der in positiver  $z$ -Richtung mit einer PML und in negativer  $z$ -Richtung mit einem PMC Rand abgeschlossen ist. Das Modell in (a) enthält einen Materialeinsatz mit  $\varepsilon_r$  und der Höhe  $h_r$ . Das Modell in (b) ist ausschließlich mit Vakuum gefüllt. Die Anregung im Zeitbereich erfolgt durch einprägen eines Stromes direkt auf dem PMC Rand.

Hohlleiter mit  $N_\rho = 3, N_z = 9, 3$  Lagen PML in positiver  $z$ -Richtung, einer vorgegebenen Reflexion der PML von  $\mathcal{R} = 10^{-3}$  und einem quadratischem Materialprofil diskretisiert. Die Zeitschrittweite  $\Delta t$  ist unterhalb der CFL-Schranke, wie es in einer Zeitbereichssimulation gefordert ist. Die Ergebnisse für das *Leapfrog-Verfahren* mit arithmetischer Mittelung und für das *Exponentielle Zeitbereichsschema* sind für die Anordnung mit Materialeinsatz bereits in [KJS17b] und die Methodik der Überprüfung der Stabilität in [JKS17] von der Autorin veröffentlicht worden. Die Ergebnisse der Eigenwertanalyse für den offenen Hohlleiter mit Materialeinsatz sind in Abb. 5.2 und die Eigenwerte für den offenen Hohlleiter ohne Einsatz in Abb. 5.4 angegeben.

Der Zusammenhang der kontinuierlichen Eigenfrequenzen und der diskreten Werte ist in Tabelle 5.1 angegeben. Es werden nachfolgend zwei Darstellungsformen für die Eigenwerte verwendet. Zum einen die der Eigenwerte  $\underline{\lambda}_{TD}$ , die als Lösung der Rekursionsmatrix  $\mathbf{G}$  hervorgehen. Sie werden hier in der komplexen Ebene zusammen mit dem Einheitskreis dargestellt. Für ein stabiles System gilt, dass alle Eigenwerten innerhalb oder auf dem Einheitskreis liegen müssen, dies entspricht der Bedingung  $|\underline{\lambda}_{TD}| \leq 1$ . Zum anderen werden zur Darstellung die komplexen

$\omega$	Eigenfrequenz	zeitkontinuierlich
$\hat{\omega} = \ln(\underline{\lambda}_{TD})/(j\Delta t)$	Eigenfrequenz	zeitdiskret
$\underline{\lambda}_{TD} = e^{\pm j\hat{\omega}\Delta t}$	Eigenwert von $\mathbf{G}(\Delta t)$	zeitdiskret

Tabelle 5.1: Zusammenhang kontinuierlicher und diskreter Eigenfrequenzen, sowie Eigenwerten der Rekursionsmatrix  $\mathbf{G}(\Delta t)$ .

Eigenfrequenzen  $\hat{\omega}$  verwendet, die nach Tab. 5.1 aus den Eigenwerten berechnet werden. Hier gilt dann als Stabilitätsbedingung  $\hat{\omega} \geq 0$ . Diese Darstellungsform ist bei sehr kleinen  $\Delta t$  übersichtlicher und wird deshalb für die Darstellung der Konvergenz bezüglich  $\Delta t$  verwendet.

Die zusätzlichen Materialsichten der PML haben weitere Unbekannte in der Simulation zur Folge. Daraus resultieren auch zusätzliche Eigenwerte mit Eigenlösungen, die im Bereich der PML Feldanteile besitzen.

### Eigenwerte für den Zylinderhohlleiter mit Materialeinsatz

Die paarweise komplexen Eigenwerte sind in der komplexen Ebene zusammen mit dem Einheitskreis in Abb. 5.2 dargestellt. Nach den Erläuterungen aus Abschnitt 3.2.4 ist das Zeitbereichsverfahren genau dann stabil, wenn für alle Eigenwerte gilt, dass  $|\underline{\lambda}_{TD}| \leq 1$ . Für beide untersuchten Zeitbereichsverfahren gibt es zwei Eigenwertpaare, die außerhalb des Einheitskreises liegen; gekennzeichnet mit einem grauen Fünfeck. Die restlichen Eigenwerte liegen innerhalb oder auf dem Einheitskreis. Für diese lassen sich unterschiedliche „Gruppen“ von dazugehörigen Eigenmoden finden:

1. *Ungedämpfte Moden*: Die Eigenwerte liegen direkt auf dem Einheitskreis, wie beim Standard *Leapfrog-Verfahren* ohne Verluste.
2. *Leicht gedämpfte Moden*: Die Eigenwerte liegen nah aber innerhalb des Einheitskreises und die Eigenvektoren entsprechen den ausbreitungsfähigen Moden. In der Regel lassen sich einzelne Moden mit derselben tangentialen Feldverteilung und unterschiedlichem  $k_z$  entlang einer virtuellen Linie im inneren des Einheitskreises verfolgen.
3. *Sehr stark gedämpfte Moden*: Die Eigenwerte liegen weit innerhalb des Einheitskreises und die Eigenvektoren weisen ausschließlich innerhalb des

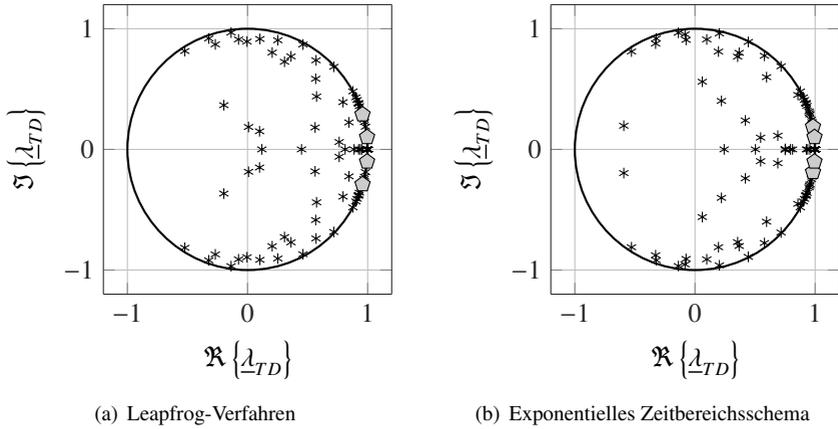


Abbildung 5.2: Komplexe Eigenwerte der Rekursionsmatrix  $\mathbf{G}(\Delta t)$  für den Zylinderhohlleiter mit Materialeinsatz  $\varepsilon_r = 16$  für das *Leapfrog-Verfahren* in (a) und das *Exponentielle Zeitbereichsschema* in (b). Mit den wie folgt gewählten Parametern:  $m = 1$ ,  $N_p = 3$ ,  $N_z = 9$ , 3 Lagen PML in positiver  $z$ -Richtung mit  $\mathcal{R} = 10^{-3}$  und einem quadratischem Materialprofil. Die grauen Fünfecke markieren die Pole, die nicht das Stabilitätskriterium erfüllen. Weitere Diskussion siehe in Abb. 5.3

PML Gebietes ein Feld auf. Diese sind durch das jeweilige Diskretisierungsverfahren bedingt und haben in der Regel keine physikalische Bedeutung.

4. *Statische Moden*: Eigenwerte mit  $\omega = 0$  gehören zu den bereits bekannten statischen Lösung der Wellengleichung.

Alle vier Typen der auftretenden Eigenwerten, sowie die ersten Cutoff Frequenzen für den mit Vakuum gefüllten Hohlleiter, sind noch einmal für die Eigenlösung des Zylinderhohlleiters mit Materialeinsatz für das *Leapfrog-Verfahren* in Abb. 5.3 skizziert. Nach Einzeichnen der Cutoff Frequenz der ersten ausbreitungsfähigen Mode ( $TE_{11}$ ), fällt auf, dass die instabilen Pole in der Nähe dieser Frequenz liegen. Dieses Phänomen, dass die Frequenzen in der Nähe der „Cutoff“-Frequenzen liegen und der dazugehörige Eigenvektor zu der entsprechenden Mode passt, lässt an dieser Stelle vermuten, dass es sich um eine Problematik mit Frequenzen knapp unterhalb der „Cutoff“-Frequenz handeln könnte. Bei dichten Spektren, wie dies gerade im Bereich der Optik häufig auftritt, könnte dies somit ein möglicher Auslöser der Instabilität des zeitdiskreten Systems sein.

### Eigenwerte für den Zylinderhohlleiter ohne Materialeinsatz

Die Eigenwertanalyse des ausschließlich mit Vakuum gefüllten Hohlleiters ergibt für beide Zeitbereichsverfahren, dass es keine Eigenwerte gibt, die das Stabilitätskriterium verletzen. Für alle Eigenwerte gilt  $|\lambda_{TD}| \leq 1$ . Die Lage der Eigenwerte ähnelt dem Beispiel mit Materialeinsatz im Hohlleiter, bis auf die nicht mehr vorhandenen Eigenwertpaare außerhalb des Einheitskreises. Dies lässt vermuten, dass der Materialsprung, der im Prinzip ein Streukörper ist, einen größeren Abstand zur PML Randbedingung fordert. In der Regel werden bei PML Randbedingungen immer angegeben, dass diese mit ausreichend Abstand vom Streukörper angeordnet sein müssen, so zum Beispiel angegeben in [Ber94; TC97a]. Die Aussage kann jedoch nicht durch eine allgemein gültige Formel für den optimalen Abstand konkretisiert werden, sondern ist bei jedem Problem individuell zu betrachten und zu lösen. In kommerzieller Software, wie zum Beispiel *CST Studio Suite*<sup>®</sup> [3DS19], gibt es bei der Verwendung der PML die Option „*open add space*“, die vor der PML zusätzlichen homogenen Freiraum generiert, um Probleme dieser Art vorzubeugen. Da auch andere Ursachen, wie zum Beispiel der im Abschnitt zuvor genannte „Cutoff“-Bereich der Frequenzen ein Problem darstellen können, muss eine Abstandsänderung nicht immer das Problem beheben. Zudem wird im folgenden Abschnitt gezeigt, dass die hier im ersten Beispiel

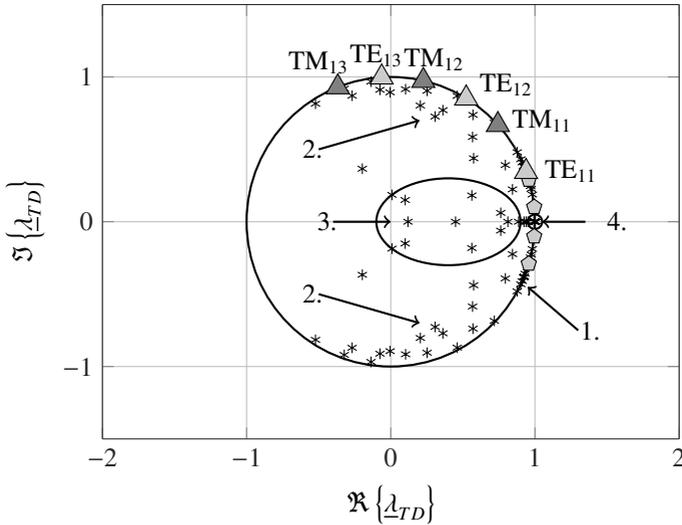


Abbildung 5.3: Eigenwerte aus Abb. 5.2(a) für den Zylinderhohlleiter mit Materialeinsatz und *Leapfrog-Verfahren*. Die grauen Fünfecke markieren die Pole, die nicht das Stabilitätskriterium erfüllen. Mit eingezeichneten Cutoff Frequenzen für TE und TM Moden (helle und dunkle Dreiecke) und Kennzeichnung der Modengruppen mit: 1. *Ungedämpfte Moden*, 2. *Leicht gedämpfte Moden*, 3. *Sehr stark gedämpfte Moden* und 4. *Statische Moden*.

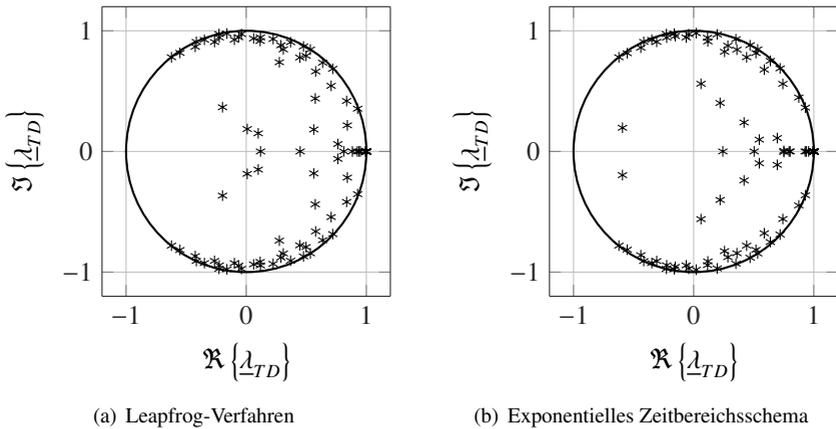


Abbildung 5.4: Komplexe Eigenwerte der Rekursionsmatrix  $\mathbf{G}(\Delta t)$  für den Zylinderhohlleiter ohne Materialeinsatz für das *Leapfrog-Verfahren* in (a) und das *Exponentielle Zeitbereichsschema* in (b). Mit den wie folgt gewählten Parametern:  $m = 1$ ,  $N_p = 3$ ,  $N_z = 9$ , 3 Lagen PML in positiver  $z$ -Richtung mit  $\mathcal{R} = 10^{-3}$  und einem quadratischem Materialprofil.

auftauchenden instabilen Pole trotzdem eine Berechnung bis zu einem Energiekriterium von  $-40$  dB zulassen.

### Konvergenz der Eigenwerte

Nicht nur die Eigenwerte an sich, sondern auch ihr Konvergenzverhalten bezüglich  $\Delta t \rightarrow 0$ , sind von Interesse. Für einen Zeitschritt, der gegen Null geht, müssen alle Verfahren gegen dieselben Eigenwerte konvergieren. Dies gilt ebenso für die Eigenwerte von einer Problemstellung, die mit unterschiedlichen Zeitdiskretisierungsverfahren gelöst werden. Für den Zylinderhohlleiter mit Materialeinsatz, der für einen Zeitschritt nahe dem CFL Kriterium Eigenwerte außerhalb des Einheitskreises besitzt, soll hier die Konvergenz der Eigenwerte untersucht werden. Das Ergebnis der Konvergenzanalyse ist in Abb. 5.5(a) zu sehen. Da die Eigenwerte für kleine  $\Delta t$  gegen den Punkt  $(1,0)$  streben, wird hier die Darstellung der diskreten komplexen Eigenfrequenzen  $\hat{\omega}$  verwendet. Beide Zeitbereichsverfahren streben für  $\Delta t \rightarrow 0$  gegen denselben Wert. Löst man zusätzlich das nichtlineare Eigenwertproblem im Frequenzbereich, wie in [JKS17]<sup>1</sup>, so kann gezeigt werden, dass beide Verfahren gegen den des Eigenwertproblems konvergieren.

Für Problemstellungen im Frequenzbereich lässt sich das nichtlineare Eigenwertproblem aus den ersten beiden MAXWELL'schen Gleichungen mit PML Randbedingung, angegeben in den Gleichungen (4.30) und (4.31), herleiten. Dazu werden beide Gleichungen mit  $j\omega$  multipliziert und in Matrixschreibweise überführt. Es resultiert das nichtlineare Eigenwertproblem [JKS17]:

$$\begin{pmatrix} (s\mathbf{I} + \mathbf{M}_{\sigma_n})\mathbf{C} & (s^2\mathbf{I} + s\mathbf{M}_{\sigma_{r1}} + \mathbf{M}_{\sigma_{r2}})\mathbf{M}_\mu \\ -(s^2\mathbf{I} + s\mathbf{M}_{kt1} + \mathbf{M}_{kt2})\mathbf{M}_\epsilon & (s\mathbf{I} + \mathbf{M}_{k_n})\mathbf{C}^T \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \hat{\mathbf{e}} \\ \hat{\mathbf{h}} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbf{0} \\ \mathbf{0} \end{pmatrix} \quad (5.1)$$

mit den Eigenwerten  $s = j\omega$ . Im Vergleich zu einer Formulierung ohne PML kommen hier zu den quadratischen Termen  $s^2$  noch Terme mit  $s$  hinzu. Die PML ist demzufolge für die Nichtlinearität des Eigenwertproblems verantwortlich.

Das Ergebnis des nichtlinearen Eigenwertproblems sind komplexe Eigenfrequenzen  $\hat{\omega}$ , die den konvergierten Werten der Zeitbereichs Schemata entsprechen. Des Weiteren ist in Abb. 5.5(a) zu sehen, dass das Verhalten der Konvergenz

<sup>1</sup>Eigene Veröffentlichung zusammen mit Philipp Jorkowski und Rolf Schuhmann. Das nichtlineare Eigenwertproblem wurde hier mit dem Löser von Philipp Jorkowski für die selben Matrizen wie im Zeitbereich, gelöst.

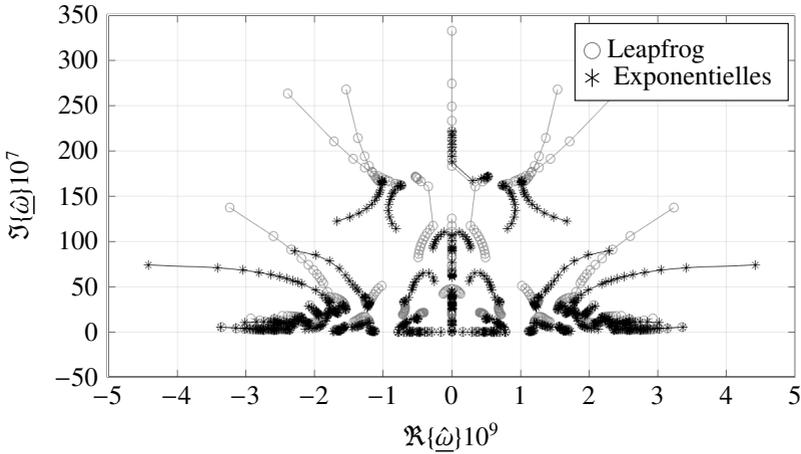
eines jeden Eigenwertes anders verläuft. Insgesamt kann aber zusammengefasst werden, dass die Werte des *Exponentiellen Zeitbereichsverfahrens* in den meisten Fällen sehr viel näher am konvergierten Wert starten.

Da die Eigenwerte sehr dicht beieinanderliegen, ist in Abb. 5.5(b) noch einmal für beide Zeitbereichsverfahren die konvergierte Eigenfrequenz  $\hat{\omega}$  und in Abb. 5.6 ein vergrößerter Ausschnitt auf einen instabilen Pol angegeben. Es ist deutlich zu sehen, dass die Eigenwerte beider Verfahren gegen denselben Wert konvergiert sind. Zudem liegen alle Eigenwerte im stabilen Bereich, der für die komplexen Eigenwerte als  $\Im\{\hat{\omega}\} \geq 0$  definiert ist. Somit ist eine Simulation für genügend kleine  $\Delta t$  immer stabil, auch wenn es nicht unbedingt sinnvoll ist bezüglich der erforderlichen Rechenleistung den Zeitschritt sehr viel kleiner als das CFL-Kriterium zu wählen. Insgesamt kann man zusammenfassen, dass die Eigenwerte, die nicht das Stabilitätskriterium erfüllen, nicht durch die Verletzung des CFL-Kriteriums auftreten. Das CFL-Kriterium wurde zunächst nur für homogene, nicht leitfähige und lineare Medien in Abschnitt 3.2.4 eingeführt. Dass es auch für verlustbehaftete Materialien und für das *Exponentielle Zeitbereichsschema* gilt, wurde in [ESW04] für die FIT gezeigt. Die Verletzung der CFL-Schranke äußert sich nach Abschnitt 3.2.4 in Eigenwerten, die auf der reellen Achse links und rechts vom Punkt  $(-1,0)$  liegen.

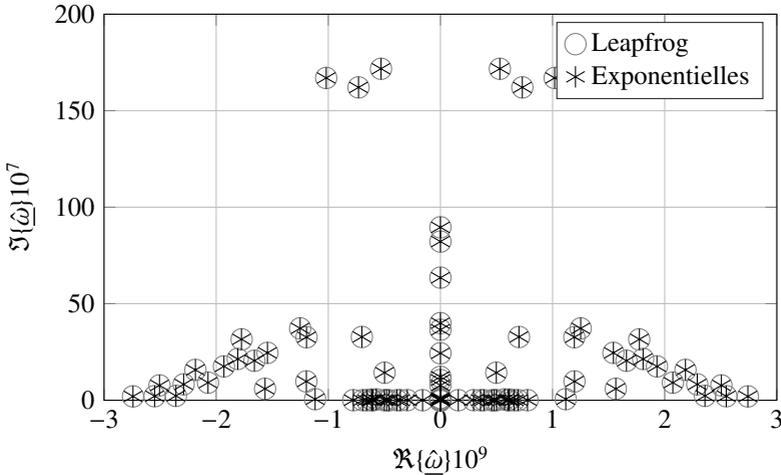
Hier sind die instabilen Eigenwerte in der Nähe der „Cutoff“ Frequenzen, jedoch leicht außerhalb des Einheitskreises. Durch die Konvergenzstudie kann gezeigt werden, dass die Zeitdiskretisierung selbst einen zentralen Einfluss auf die Stabilität des Verfahrens hat, da die Verfahren für  $\Delta t \rightarrow 0$  ausschließlich stabile Eigenwerte aufweisen. Daraus lässt sich schließen, dass die räumlichen Eigenschaften der PML das System noch nicht instabil machen, da in der Frequenzbereichsanalyse und der Konvergenzstudie für den Zeitschritt  $\Delta t \rightarrow 0$  gezeigt werden kann, dass das System ohne die zeitliche Diskretisierung stabil ist. Diese Erkenntnis stellt eine Neuerung für die PML in Zylinderkoordinaten dar.

### 5.1.3 Energie

Für die Zylinderhohlleiter aus dem vorherigen Abschnitt werden mit derselben Konfiguration Zeitbereichssimulation durchgeführt. Jetzt wird der zeitliche Energieverlauf innerhalb des Rechengebietes untersucht. Die Energie wird für jeden Zeitschritt  $t$  entsprechend der Gleichung (3.47) ausschließlich innerhalb des Rechengebietes und somit ohne PML berechnet. Es wird eine maximale Anzahl an Zeitschritten von  $n_{t,\max} = 2 \cdot 10^6$  gewählt. Die Anregung ist ein mit einem Si-



(a) Konvergenz der Eigenwerte



(b) Konvergierte Eigenwerte

Abbildung 5.5: Konvergenz der diskreten Eigenfrequenzen  $\hat{\omega}$ , bezüglich  $\Delta t \rightarrow 0$  für beide Zeitbereichsverfahren für den Zylinderhohlleiter mit Materialeinsatz  $\varepsilon_r = 16$ ,  $m = 1$ ,  $N_\rho = 3$ ,  $N_z = 9$ , 3 Schichten PML mit  $R = 10^{-3}$  und einem quadratischem Profil. Konvergenzanalyse für variierte  $\Delta t$  mit  $\Delta t \rightarrow 0$  in (a) und Vergleich der konvergierten Eigenwerte in (b).

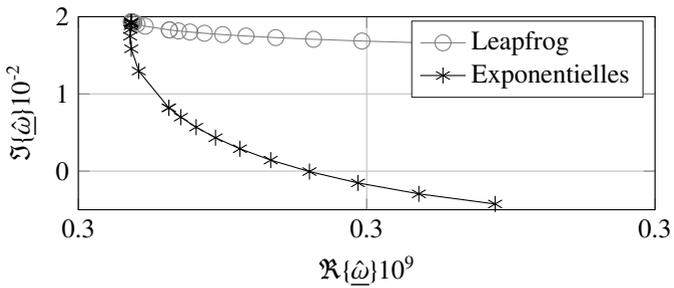


Abbildung 5.6: Vergrößerter Ausschnitt aus Abb. 5.5(a) mit einem für einen Zeitschritt  $\Delta t$  nahe dem CFL-Kriterium instabilen Pol für das *Exponentielle Zeitbereichsschema*.

nus modulierter Gaußpuls, der auf den  $\rho$ -Kanten entlang der PMC Randbedingung eingeprägt wird. Es werden Frequenzen im Bereich  $137,81 \text{ MHz} \leq f \leq 204,42 \text{ MHz}$  verwendet. Somit ist die Frequenz der Anregung immer größer als die Cutoff Frequenz der ersten ausbreitungsfähigen Mode, sowohl im Bereich des mit Vakuum als auch des mit Materialeinsatz mit  $\varepsilon_r = 16$  gefüllten Zylinderhohlleiters.

Die Energie wird wie üblich in dB angegeben und mit Bezug auf das Maximum normiert. Bei Zeitbereichssimulationen ist es üblich, ein sogenanntes „Energiekriterium“ anzugeben. Dieses bildet eine Schranke, bis zu welchem Wert an abgeklungener Energie die Berechnung im Zeitbereich durchgeführt wird. Zudem ist bei der Verwendung numerischer Programme die Rechengenauigkeit in der Regel auf „double precision“<sup>2</sup> begrenzt. Dadurch ist die Auflösung des Zahlenbereiches limitiert. Die Energie in dB kann also nur bis zur sogenannten „numerischen Rauschgrenze“ von  $-320 \text{ dB}$  dargestellt werden.

### Energie des Leapfrog-Verfahrens mit arithmetischer Mittelung

Für das *Leapfrog-Verfahren* mit *arithmetischer Mittelung* ist der Energieverlauf für den Zylinderhohlleiter mit und ohne Materialeinsatz in Abb. 5.15(a) zu sehen. Der Bereich am Anfang ist als vergrößerter Ausschnitt in der Abb. 5.15(b) daneben abgebildet. Im Wesentlichen erhält man das Verhalten, das nach der Berechnung der Eigenwerte zu erwarten war. Für die Struktur ohne Materialeinsatz, bei der alle Eigenwerte im stabilen Bereich lagen, klingt die Energie bis zur numerischen Rauschgrenze von  $-320 \text{ dB}$  ab und verbleibt dann dort, bis zum Ende der Simulationszeit. Für die Anordnung mit Materialeinsatz gab es zwei Eigenwertpaare, die nicht dem Stabilitätskriterium genügen. Die Zeitbereichssimulation klingt wie zu erwarten ab einem Zeitpunkt unphysikalisch auf. Jedoch kann man sehen, dass dies nicht sofort passiert, sondern erst nach einer Zeit von ca.  $t = 110 \mu\text{s}$ . Davor fällt die Energie zunächst auf ca.  $-40 \text{ dB}$  ab und verbleibt dort bis zum Zeitpunkt, an dem die Pole, die nicht das Stabilitätskriterium erfüllen, dominant werden. Für dieses Beispiel soll angenommen werden, dass die Ergebnisse der Simulation, bevor das Energiekriterium den Wert von  $-40 \text{ dB}$  erreicht hat, physikalisch sind. Denn das rekursive Verfahren kann in Abhängigkeit der Eigenwerte und zugehörigen Eigenvektoren des zeitdiskreten Systems beschrieben werden. Nach einer Simulationsdauer  $T$  lässt sich der Einfluss eines einzelnen Eigenwertes  $\lambda_i$  nach Gleichung (2.18) in [ÄW13] angeben. Für den Fall, dass das

<sup>2</sup>Die „double precision“ (doppelte Genauigkeit) bezeichnet das Format der Darstellung für Gleitkomma Zahlen. So werden hier 8 Byte je dargestellter Zahl bzw. 64 Bit abgelegt.

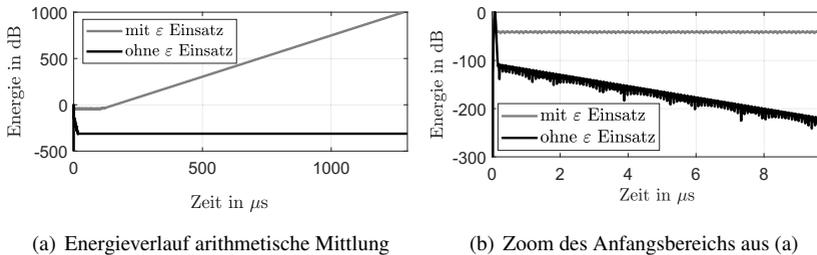


Abbildung 5.7: Energieverlauf der arithmetischen Mittelung für das Minimalbeispiel mit PML in  $z$ -Richtung. In (a) für den Zeitbereich  $t = 0 \mu s \cdots 1500 \mu s$  und in (b) für den Zoom auf den Anfangsbereich aus (a) für  $t = 0 \mu s \cdots 10 \mu s$ .

zeitdiskrete System hier schon in der Form aus Gleichung (3.57) vorliegt, kann die Lösung zum Zeitpunkt  $T$  angegeben werden als:

$$\mathbf{y}^{(T)} = \mathbf{G}^{(T-1)} \mathbf{y}^{(t_0)} \quad (5.2)$$

mit dem Start Zeitpunkt  $t_0 = 0$ . Bestimmt man nun die Eigenwerte  $\lambda_i$  der Rekursionsmatrix  $\mathbf{G}$ , dann lässt sich das Verhalten von jedem Eigenvektor  $ev$  nach einer Simulationszeit  $T$  angeben als:

$$ev_i(T) = \lambda_i^T ev_i(0). \quad (5.3)$$

Daraus kann direkt gefolgert werden, dass Eigenwerte mit  $|\lambda_i| < 1$  ein abklingendes Verhalten besitzen. Für  $|\lambda_i| = 1$  bleibt das Verhalten konstant und für  $|\lambda_i| > 1$  klingt die Lösung exponentiell auf. Dabei ist die Geschwindigkeit des Anstieges direkt von der Größe des Eigenwertes abhängig. Es ist anzunehmen, dass die Lösung des Systems so lange physikalisch bleibt, wie auch die Felder und die Energie nicht von dem instabilen Polen dominiert werden.

### Energie des Exponentiellen Zeitbereichsschemas

Die Energieverläufe des *Exponentiellen Zeitbereichsschemas* für den Zylinderhohlleiter mit und ohne Materialeinsatz sind in Abb. 5.8(a) und eine Vergrößerung des Anfangsbereiches in Abb. 5.8(b) zu sehen. Das Verhalten entspricht wie bei dem *Leapfrog-Verfahren* zuvor ebenfalls dem Verhalten, das man nach der

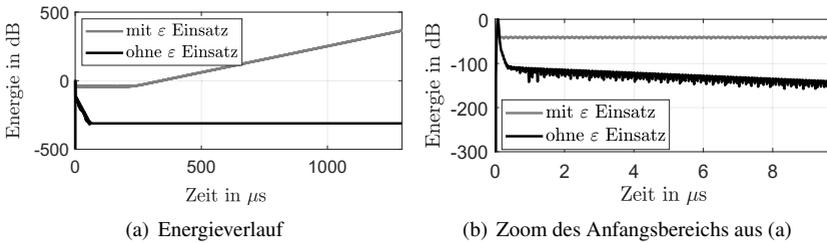


Abbildung 5.8: Energieverlauf des *Exponentiellen Zeitbereichschemas* für das Minimalbeispiel mit PML in  $z$ -Richtung. In (a) für den Zeitbereich  $t = 0 \mu\text{s} \dots 1500 \mu\text{s}$  und in (b) für den Zoom auf den Anfangsbereich aus (a) für  $t = 0 \mu\text{s} \dots 10 \mu\text{s}$ .

Eigenwertanalyse aus Abschnitt 5.1.2 erwarten würde. Für den Hohlleiter ohne Materialeinsatz klingt die Energie bis zur Rauschgrenze ab und verbleibt dann dort. Dabei ist anzumerken, dass ab einer Energie von ca.  $-100 \text{ dB}$  die Energie langsamer abklingt als dies zuvor bei dem *Leapfrog-Verfahren* der Fall war. Für den Zylinderhohlleiter mit Materialeinsatz klingt die Energie zunächst auf ca.  $-40 \text{ dB}$  ab und steigt dann nach ca.  $t = 300 \mu\text{s}$  wieder an. Dieses Verhalten ist unphysikalisch und lässt sich durch das Dominant-werden der Pole, die nicht die Stabilitätsbedingung erfüllen, erklären. Dieses Verhalten stimmt mit den zwei gefundenen Eigenwertpaaren außerhalb des Einheitskreises überein.

### 5.1.4 Stabilitätsgraph

Das Verhalten des *Hybriden Impliziten-Expliziten* Algorithmus aus Abschnitt 4.3.4, das auch das *Leapfrog-Verfahren* mit einschließt, soll bezüglich seiner Stabilität untersucht werden. Das hybride Verfahren erlaubt es die Werte  $\beta$  und  $\gamma$  innerhalb der PML Region zu variieren und im restlichen Rechengebiet die Parameter  $\beta = 0$  und  $\gamma = 0.5$  zu verwenden, die dem Standard *Leapfrog-Verfahren* entsprechen. Die Variation dieser beiden Parameter kann einen Einfluss auf die Stabilität haben. Dieses soll mit einem Stabilitätsgraph, der in Abhängigkeit von  $\beta$  und  $\gamma$  die Stabilität darstellt, ausgewertet werden. Als Testbeispiel wird hier ebenfalls der mit Vakuum gefüllte Zylinderhohlleiter aus Abb. 5.1(b) verwendet. Die Ergebnisse dieses Abschnitts wurden bereits von der Autorin in [KS20] veröffentlicht.

Hier handelt es sich um einen Zylinderhohlleiter mit Höhe  $h = 15$  m und Radius  $R = 1$  m. Die Diskretisierung erfolgt mit der Methode der Finiten Integration auf  $\rho$ - $z$ -Koordinaten mit  $m = 1$ ,  $N_\rho = 9$  und  $N_z = 116$ . Die PML in positiver  $z$ -Richtung besteht aus drei Lagen mit einer Reflektivität von  $\mathcal{R} = 10^{-2}$  und einem quadratischem Materialprofil. Die Anregung wird durch eine Stromquelle in der Ebene bei  $z = 0$  mit einem Sinus modulierten Gaußpuls im Frequenzbereich von  $138 \text{ MHz} \leq f \leq 229 \text{ MHz}$  realisiert. Die Amplituden sind räumlich gewichtet, entsprechend der Feldverteilung der  $TE_{11}$  Mode. Die maximale Anzahl an Zeitschritten ist auf  $n_{t,\max} = 1 \cdot 10^6$  begrenzt.

Um den Graphen der Stabilität zu erstellen, wird die Simulation für verschiedene Wertepaare von  $\beta$  und  $\gamma$  durchgeführt. Simulationen, bei denen die Energie bis zu Ende monoton fallend verläuft, werden als „stabil“ gewertet. Simulationen, bei denen zuvor die Energie aufklingt, werden als „instabil“ gewertet und der Zeitpunkt des Wiederanstieges der Energie wird erfasst. Die Parameter werden in den Bereichen  $\beta \in [0, 1]$  und  $\gamma \in [0, 1]$  variiert. Das Ergebnis des Stabilitätsgraphen ist in Abb. 5.9 angegeben. Dieser bildet ab, dass sich der Graph in einen stabilen

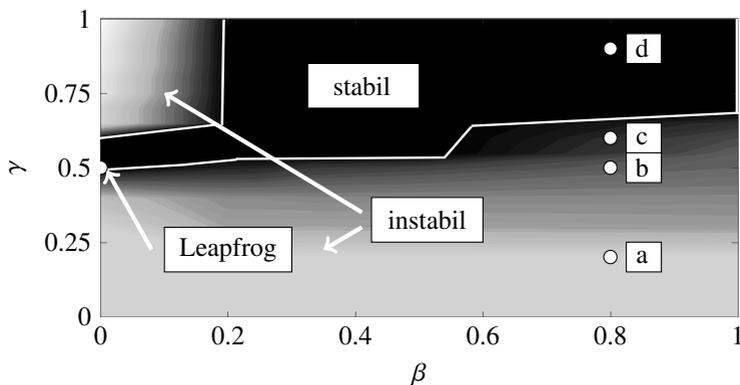


Abbildung 5.9: Stabilitätsgraph für das *Hybride Implizite-Explizite* Zeitbereichsverfahren mit PML für einen Zylinderhohlleiter der in  $z$ -Richtung mit einer PML abgeschlossen ist. Schwarz deutet auf eine stabile Rechnung hin. Je heller die Farbe, desto schneller klingt die Energie während der Berechnung auf. Abbildung in Anlehnung an die Veröffentlichung [KS20] der Autorin.

Bereich, dargestellt in schwarz und zwei instabile Bereiche in Graustufen aufteilt.

Stabile und instabile Bereiche sind dabei durch eine weiße Linie von einander abgetrennt. Je heller der instabile Bereich ist, um so früher tritt der Wiederanstieg der Energie in der Simulation auf.

Der instabile Bereich mit  $\gamma < 0.5$  entspricht den Überlegungen zur Stabilität des Vorwärtsdifferenzenquotienten aus Abschnitt 3.2.1. Denn für  $\gamma < 0.5$  erhält man einen Vorwärtsdifferenzenquotienten und dieses Verfahren ist nachgewiesen immer instabil. Interessant ist ebenfalls der Punkt mit  $\beta = 0$  und  $\gamma = 0.5$ , der dem Standard *Leapfrog-Verfahren* entspricht und hier extra mit einem weißen Punkt markiert ist. Das Verfahren liegt im instabilen Bereich jedoch sehr nah an der Grenze. Bemerkenswert ist auch, dass das Hinzufügen eines reinen Dämpfungsfaktors mit  $\gamma > 0.5$  und  $\beta = 0$  hier nicht zielführend ist, da auch der größte Teil dieses Bereichs als instabil detektiert wurde.

Um die „Graustufen“ in der instabilen Region besser zu verstehen, wurden exemplarisch vier verschiedene  $\gamma$  Werte für  $\beta = 0.8$  ausgewertet. Diese Wertepaare sind in Abb. 5.9 mit einem weißen Punkt und der Beschriftung a - d eingezeichnet. In Abb. 5.10 ist ein Ausschnitt der Energieverläufe zu sehen. Für a, b und c steigt die Energie nacheinander wieder an. Ausschließlich für die Kurve d bleibt sie bis zum Simulationsende monoton fallend. Der Zeitpunkt, an dem die instabilen Pole der Simulation dominant werden, kann also auch erst nach einer gewissen Zeit auftreten. Dies ist ein großer Unterschied zu dem instabilen Verhalten, das man durch Verletzung des CFL-Kriteriums erhält. Denn dort ist bereits mit dem ersten Zeitschritt zu erkennen, dass das zeitdiskrete System instabil ist. Zudem fällt auf, dass alle Verläufe der Energien bis zum Auftreten des instabilen Verhaltens deckungsgleich sind. Die Performance der PML scheint also bis zum Auftreten der Instabilität nicht beeinflusst zu sein. Dies kann zur Folge haben, dass bei Erreichen des vorgegeben Energiekriteriums, eine möglicherweise später auftretende Instabilität erst gar nicht bemerkt wird.

## 5.2 PML Randbedingung in $\rho$ -Richtung

Neben der PML Randbedingung in  $z$ -Richtung soll nun auch die PML in  $\rho$ -Richtung mit Hilfe akademischer Beispiele näher untersucht werden. Wie im Abschnitt zuvor, werden dafür zunächst zwei Simulationsbeispiele vorgestellt. Für diese werden die spektralen Eigenschaften der Rekursionsmatrix  $\mathbf{G}(\Delta t)$  des *Leapfrog-Verfahrens* sowie des *Exponentiellen Zeitbereichsschemas* näher untersucht. Es werden beide PML-Typen: Quasi-PML und GT-PML untersucht und

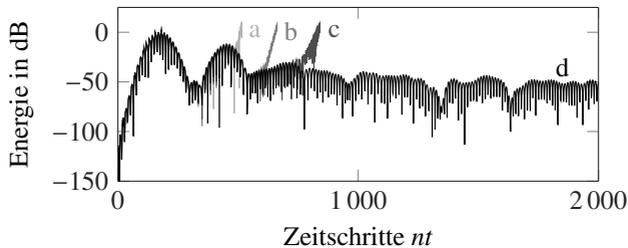


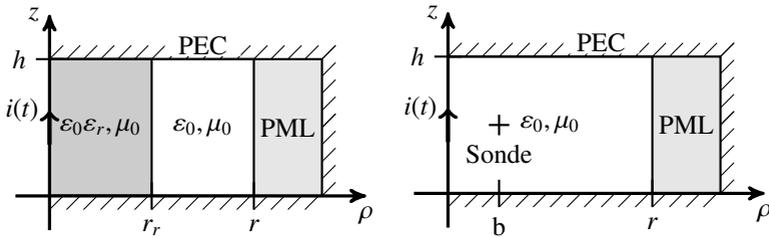
Abbildung 5.10: Ausschnitt der Energie in Abhängigkeit der Zeitschritte  $nt$  für  $\beta = 0.8$  und a)  $\gamma = 0.2$ , b)  $\gamma = 0.5$ , c)  $\gamma = 0.6$  und d)  $\gamma = 0.9$ .

verglichen. Dabei wird auch das Konvergenzverhalten bezüglich  $\Delta t \rightarrow 0$  analysiert. Es wird zudem die Zeitbereichssimulation dieser Beispiele an Hand der Energieverläufe bewertet. Abschließend wird auch hier das *Hybride Implizite-Explizite Zeitbereichsschema* bezüglich seiner Stabilität untersucht. Dies geschieht in Abhängigkeit der beiden zusätzlichen Parameter  $\beta$  und  $\gamma$  in einem Stabilitätsgraphen.

### 5.2.1 Numerische Beispiele

Hier wird als Testbeispiel ein Zylinderresonator aus PEC Material, der in radialer Richtung offen ist, verwendet. Die Öffnung in radialer Richtung wird dabei durch eine PML realisiert. Es gibt einen Resonator, skizziert in Abb. 5.11(a), der einen Materialeinsatz mit  $\varepsilon = \varepsilon_0 \varepsilon_r$  über die gesamte Höhe  $h$  bis zum Radius  $r_r$  besitzt und ein Modell für Freiraum in der  $\rho$ -Richtung mit Begrenzung in der  $z$ -Richtung, skizziert in Abb. 5.1(b). Die Anordnungen haben die Höhe  $h$  und den Radius  $r$ , der den Beginn der PML markiert. In  $z$ -Richtung ist der Abschluss jeweils ein PEC Rand und in  $\rho$ -Richtung gibt es eine PML, die mit PEC abgeschlossen ist. Im gesamten Abschnitt wird die FIT auf  $\rho$ - $z$ -Koordinaten angewendet mit der azimutalen Modenordnung  $m = 0$ .

In dieser Anordnung sollen im Zeitbereich elektromagnetische Wellen untersucht werden, die mit einem Stromfaden auf der  $z$ -Achse angeregt werden und sich in  $\rho$ -Richtung ausbreiten. Die Position der Stromanregung ist in Abb. 5.11 für beide Resonatoren eingezeichnet. Zudem befindet sich in der Skizze zum offenen Zylinderresonator ohne Materialeinsatz noch eine Messsonde, an der später



(a) Offener Zylinderresonator mit Materialeinsatz (b) Offener Zylinderresonator ohne Materialeinsatz

Abbildung 5.11: Simulationsanordnung zum Test der PML-Randbedingung in  $\rho$ -Richtung. Es handelt sich um einen zylindrischen Resonator aus PEC mit der Höhe  $h$  und Radius  $r$ , der in  $z$ -Richtung mit PEC abgeschlossen ist und in  $\rho$ -Richtung mit einer PML. Das Modell in (a) enthält einen Materialeinsatz mit  $\epsilon_r$  mit Radius  $r_r$ , das Modell in (b) ist ausschließlich mit Vakuum gefüllt, an der Stelle  $b$  wird eine Messsonde platziert. Die Einprägung des Stromes zur Anregung im Zeitbereich erfolgt direkt auf der  $z$ -Achse.

die Reflexion der PML in einer Zeitbereichssimulation bestimmt wird.

## 5.2.2 Eigenwerte

Zunächst werden die Eigenwerte des offenen Resonators mit Materialeinsatz aus Abb. 5.11(a) für das Standard *Leapfrog-Verfahren* sowie das *Exponentielle Zeitbereichsschema* für die Quasi-PML und die GT-PML untersucht. Der Resonator besitzt hier die Höhe  $h = 2$  m und den Radius  $r = 4$  m. Die Diskretisierung erfolgt mit  $N_\rho = 8$  und  $N_z = 4$  Punkten. Die PML in  $\rho$ -Richtung besitzt drei Schichten, einen Reflexionsfaktor von  $\mathcal{R} = 10^{-3}$  und ein quadratisches Materialprofil. Der Zeitschritt wird hier zu  $\Delta t = 1.309$  ns gewählt. Der Materialeinsatz besitzt eine Permittivität von  $\epsilon_r = 16$  und einen Radius von  $r_r = 2$  m. Die Ergebnisse der Eigenwertanalyse für beide Zeitbereichsverfahren sind in Abb. 5.12 angegeben. Für den offenen Resonator ohne Materialeinsatz aus Abb. 5.11(b) und denselben eingestellten Werten, sind die Ergebnisse der Eigenwerte in Abb. 5.13 abgebildet.

### Eigenwerte des radial offenen Zylinderresonators mit Materialeinsatz

Auch hier treten die Eigenwerte der Rekursionsmatrix  $\mathbf{G}(\Delta t)$  als paarweise komplex konjugierte Eigenwerte auf. Die Eigenwerte werden jeweils einmal für die Quasi-PML und einmal für die GT-PML berechnet. Für das *Leapfrog-Verfahren* sind die Eigenwerte in Abb. 5.12(a) und für das *Exponentielle Zeitbereichsschema* in Abb. 5.12(b) angegeben.

Dabei kann festgestellt werden, dass die Eigenwerte der beiden PML Typen sehr nah beieinanderliegen und dass jeweils das eine instabile Eigenwertpaar beider PML-Typen auf denselben Wert fällt. Die Analyse der Eigenwerte ergibt ein sehr ähnliches Bild wie bei der PML in  $z$ -Richtung, vergl. Abschnitt 5.1.2. So sind hier auch dieselben Typen von Eigenwerten vertreten: *Ungedämpfte Moden*, *leicht gedämpfte Moden*, *sehr stark gedämpfte Moden* und *statische Moden*. Eine detaillierte Beschreibung dieser Modentypen ist ebenfalls im Abschnitt 5.1.2 nachzulesen.

### Eigenwerte des radial offenen Zylinderresonators ohne Materialeinsatz

Die Eigenwerteanalyse des ausschließlich mit Vakuum gefüllten, radial offenen Zylinderresonators ist für die verschiedenen PML Typen sowie die unterschiedlichen Zeitbereichsverfahren *Leapfrog-Verfahren* und *Exponentielles Zeitbereichsschema* in Abb. 5.13 abgebildet. Für alle Eigenwerte gilt hier  $|\underline{\lambda}_{TD}| \leq 1$ ; somit sind alle Kombinationen von PML Typ und Zeitbereichsschema für dieses diskrete Beispiel stabil. Die Lage der Eigenwerte entspricht mit nur minimalen Abweichungen denen aus dem Beispiel zuvor, das sich nur durch den Materialeinsatz im Inneren des Resonators unterscheidet. Es treten demnach auch dieselben, bereits beschriebenen Modentypen, auf.

### Konvergenz der Eigenwerte

Nachdem die Eigenwerte analysiert wurden, wird auch die Konvergenz dieser bezüglich  $\Delta t \rightarrow 0$  untersucht. Die unterschiedlichen PML Typen unterscheiden sich nur in sehr geringem Ausmaß voneinander. Deshalb wird hier exemplarisch nur die Konvergenz der GT-PML für das *Leapfrog-Verfahren* und das *Exponentielle Zeitbereichsschema* dargestellt. Die diskreten Eigenfrequenzen  $\hat{\omega}$  sind in der komplexen Ebene in Abb. 5.14(a) abgebildet. Es ist zu sehen, dass beide Zeitbereichsverfahren gegen dieselben Werte konvergieren. Zur besseren Prüfung, sind die Ergebnisse der für  $\Delta t \rightarrow 0$  konvergierten Werte für beide Verfahren in

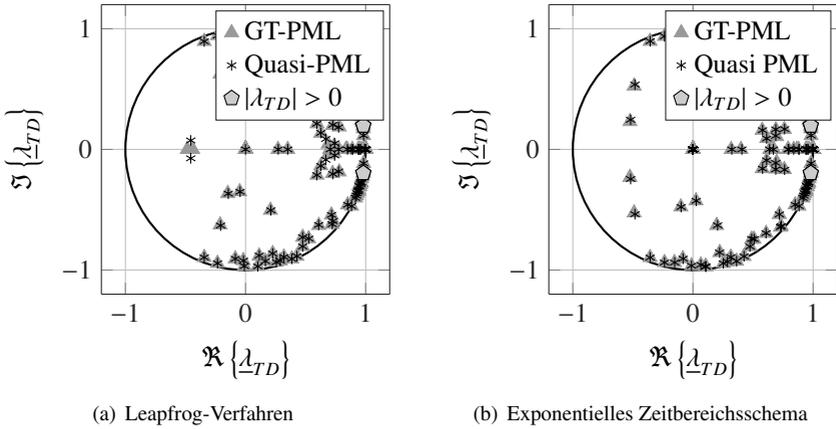
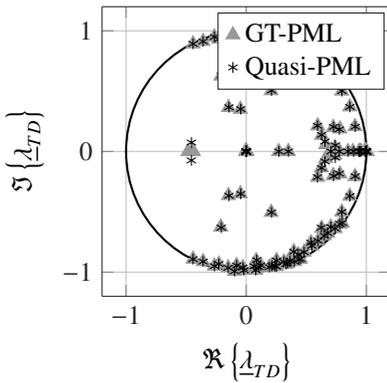
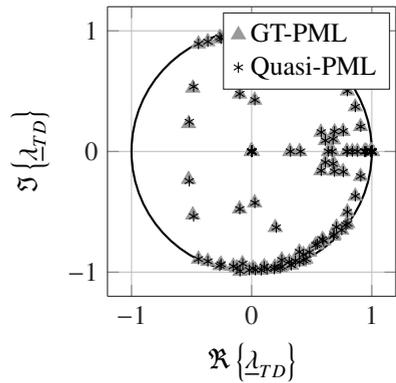


Abbildung 5.12: Komplexe Eigenwerte der Rekursionsmatrix  $\mathbf{G}(\Delta t)$  für den offenen Zylinderresonator mit Materialeinsatz  $\varepsilon_r = 16$  für das *Leapfrog-Verfahren* in (a) und das *Exponentielle Zeitbereichsschema* in (b). Mit  $N_\rho = 8$ ,  $N_z = 4$ , 3 Lagen PML in  $\rho$ -Richtung mit  $\mathcal{R} = 10^{-3}$  und quadratischem Materialprofil. Beide PML Typen weisen dieselben Pole, die nicht das Stabilitätskriterium erfüllen, auf. Sie sind durch eine gemeinsame Markierung mit einem grauen Fünfeck dargestellt.



(a) Leapfrog-Verfahren



(b) Exponentielles Zeitbereichsschema

Abbildung 5.13: Komplexe Eigenwerte der Rekursionsmatrix  $\mathbf{G}(\Delta t)$  für den offenen Zylinderresonator ohne Materialeinsatz für das *Leapfrog-Verfahren* in (a) und das *Exponentielle Zeitbereichsschema* in (b). Mit  $N_p = 8$ ,  $N_z = 4$ , 3 Lagen PML in  $\rho$ -Richtung mit  $\mathcal{R} = 10^{-3}$  und quadratischem Materialprofil.

Abb. 5.14(b) dargestellt. Sie stimmen für beide Zeitbereichsverfahren überein. Außerdem befinden sich alle konvergierten Eigenwerte im stabilen Bereich. Auffällig ist hier, dass das Konvergenzverhalten der beiden Zeitbereichsverfahren deutlich ähnlicher ist als dies zuvor bei der PML in  $z$ -Richtung der Fall war. So sind vor allem die Startwerte der Konvergenzanalyse bereits sehr nah beieinander. Dies war für die PML in  $z$ -Richtung für die allermeisten Eigenwerte nicht der Fall, vergleiche Abb. 5.5.

Zusammenfassend kann gesagt werden, dass auch hier die Zeitdiskretisierung einen Einfluss auf die Zeitbereichsschemata hat, da die Eigenwerte mit einem Zeitschritt  $\Delta t$  nahe dem CFL-Kriterium teilweise weit entfernt von den konvergierten Eigenwerten liegen. Dadurch kann es auch Pole geben, die nicht das Stabilitätskriterium erfüllen.

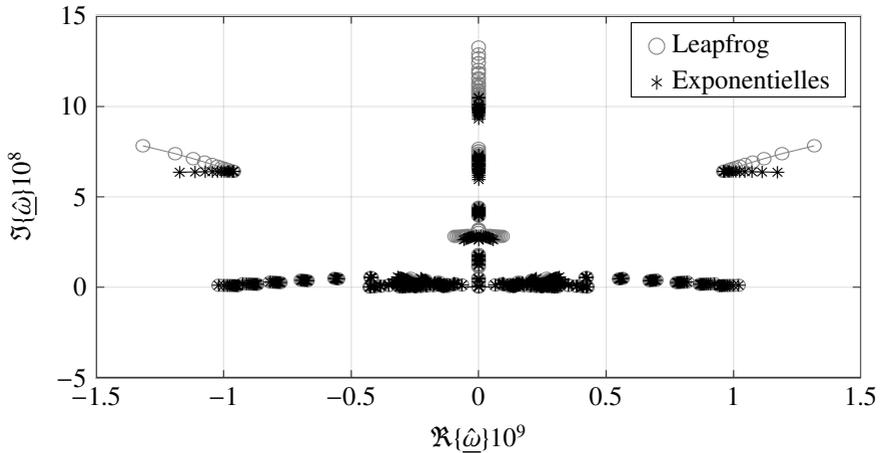
### 5.2.3 Energie

Im Folgenden wird der Energieverlauf der Zeitbereichssimulation für die Zylinderresonatoren näher untersucht. Dabei werden die Anordnungen, wie sie für die Eigenwertanalyse in 5.2.2 verwendet wurden, übernommen. Die Anregung wird entlang einer  $z$ -Kante bei  $\rho = 0$  in der Mitte des jeweiligen Resonators als Strom realisiert. Es wird ein mit einem Sinus modulierter Gaußpuls im Frequenzbereich von  $74 \text{ MHz} \leq f \leq 184 \text{ MHz}$  verwendet. Dieser regt zylinderförmige Wellen an, die sich in  $\rho$ -Richtung ausbreiten. Die PEC Ränder in positiver und negativer  $z$ -Richtung sorgen dafür, dass sich die Wellen ähnlich wie in einem Wellenleiter verhalten. Dementsprechend entstehen Felder unterschiedlicher Moden, die auch ein Cutoff Verhalten aufweisen können.

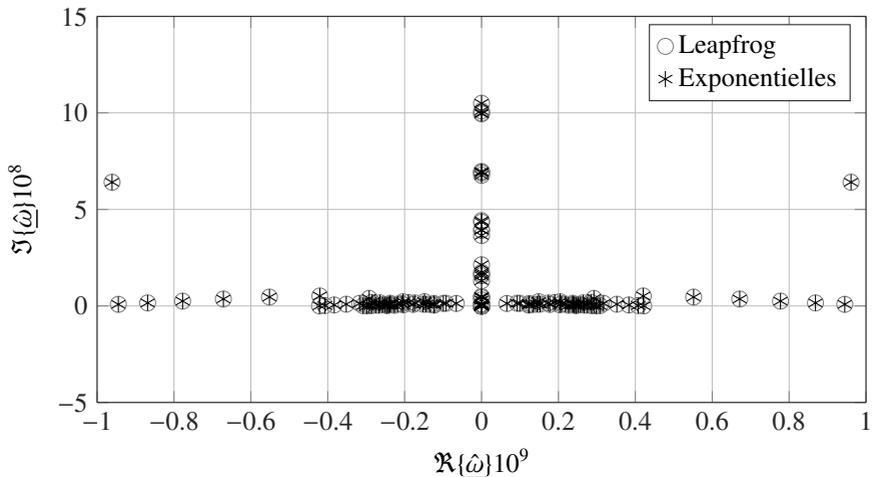
Die Berechnung der Energie erfolgt ausschließlich im Rechenggebiet ohne die PML Region, wobei die Energie zu jedem Zeitpunkt nach Gleichung (3.47) berechnet wird.

#### Energie des Leapfrog-Verfahrens mit arithmetischer Mittelung

Der Energieverlauf für das *Leapfrog-Verfahren* mit arithmetischer Mittelung ist für die GT-PML und Quasi-PML, für den offenen Resonator mit und ohne Materialeinsatz in Abb. 5.15(a) und ein vergrößerter Ausschnitt des Anfangsbereiches in Abb.5.15(b) angegeben. Die Anzahl der maximalen Iterationsschritte ist auf  $n_{t,\max} = 2 \cdot 10^6$  begrenzt. In der Grafik ist zu sehen, dass alle Energieverläufe ab ca.  $t = 250 \mu\text{s}$  die numerische Rauschgrenze erreicht haben und monoton abfallen. Das gilt auch für die beiden Kurven, die zum Resonator mit Materialeinsatz



(a) Konvergenz der Eigenwerte



(b) Konvergierte Eigenwerte

Abbildung 5.14: Konvergenz der diskreten Eigenfrequenzen  $\hat{\omega}$ , bezüglich  $\Delta t \rightarrow 0$  für beide Zeitbereichsverfahren für den Zylinderresonator mit Materialeinsatz  $\varepsilon_r = 16$ , für  $m = 1$ ,  $N_\rho = 8$ ,  $N_z = 4$ , 3 Schichten GT-PML in  $\rho$ -Richtung mit  $R = 10^{-3}$  und quadratischem Profil. In (a) Konvergenzanalyse für  $\Delta t$  und in (b) konvergierten Eigenwerte aus (a).

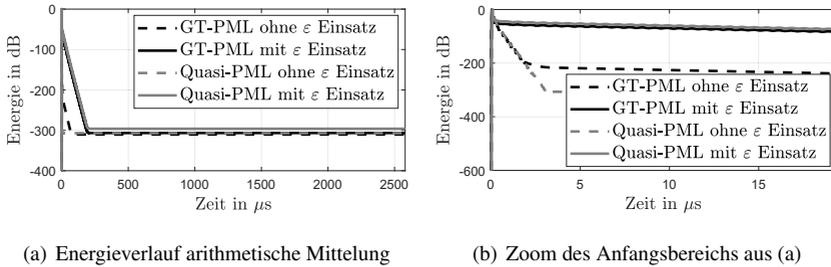


Abbildung 5.15: Energieverlauf der arithmetischen Mittelung für das Minimalbeispiel mit PML in  $\rho$ -Richtung. In (a) für den Zeitbereich  $t = 0 \mu\text{s} \dots 2500 \mu\text{s}$  und in (b) für den Zoom auf den Anfangsbereich aus (a) für  $t = 0 \mu\text{s} \dots 20 \mu\text{s}$ .

gehören. Dies lässt vermuten, dass die instabilen Pole bei diesen Beispielen sehr viel später dominant werden und in diesem konkreten Beispiel somit keine Rolle spielen.

Außerdem liegen die Kurven der GT-PML und der Quasi-PML für dieselben Anordnungen sehr dicht beieinander. Wie man in der vergrößerten Ansicht gut erkennen kann, erfolgt der Abfall der Energie für das Beispiel ohne Materialeinsatz deutlich schneller. Dies entspricht der Erwartung, dass man durch den Materialeinsatz eine Art offenen Resonator erzeugt, der durch seine Güte den Energieabfall im Rechengebiet verlangsamt.

### Energie des Exponentiellen Zeitbereichsschemas

Für das *Exponentielle Zeitbereichsschema* sind die Energieverläufe für den offenen Zylinderresonator mit und ohne Materialeinsatz, sowie GT-PML und Quasi-PML in Abb. 5.16(a) und die Vergrößerung des Anfangsbereiches in Abb. 5.16(b) zu sehen. Auch hier wurde die maximale Anzahl an Iterationen auf  $n_{t,\text{max}} = 2 \cdot 10^6$  begrenzt. Wie im Beispiel zum *Leapfrog-Verfahren* wird bereits nach einer Zeit von ca.  $t = 250 \mu\text{s}$  die numerische Rauschgrenze erreicht. Hier tritt wie zuvor dasselbe Phänomen auf, dass innerhalb dieser Zeit die Energie monoton abfällt. Wie man in der vergrößerten Ansicht des Anfangsbereiches sieht, verhalten sich auch die Steigungen der Energiekurven wie im Beispiel zuvor. Für den Resonator mit Materialeinsatz klingt die Energie langsamer ab. Für das Beispiel ohne Mate-

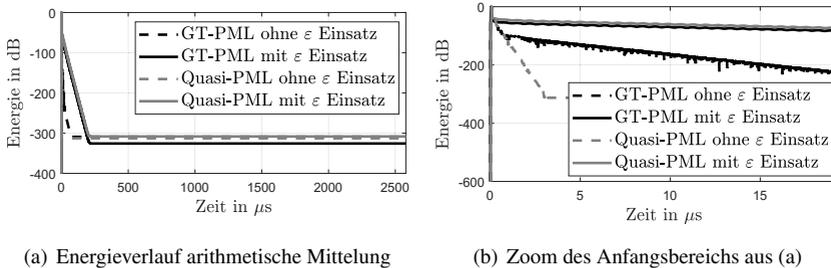


Abbildung 5.16: Energieverlauf des Exponentiellen Zeitbereichsschemas für das Minimalbeispiel mit PML in  $\rho$ -Richtung. In (a) für den Zeitbereich  $t = 0 \mu\text{s} \dots 2500 \mu\text{s}$  und in (b) für den Zoom auf den Anfangsbereich aus (a) für  $t = 0 \mu\text{s} \dots 20 \mu\text{s}$ .

rialeinsatz ergibt sich unter Verwendung der Quasi-PML eine bessere Performanz bezüglich des Energieabfalls.

Es lässt sich nach Betrachtung der Energieverläufe sowie der Eigenwerte kein nennenswerter Unterschied zwischen der GT-PML und der Quasi-PML für solche akademischen Beispiele mit nur sehr geringer Gitterauflösung feststellen.

### 5.2.4 Stabilitätsgraph

Um die Stabilität des *Hybriden Impliziten-Expliziten* Zeitbereichsverfahren mit PML Randbedingung zu evaluieren wird analog zu Abschnitt 5.1.4 vorgegangen. Die zusätzlichen Parameter  $\beta$  und  $\gamma$  werden im Bereich  $0 \leq \beta \leq 1$  und  $0.5 \leq \gamma \leq 1$  variiert. Hier wird erst bei  $\gamma = 0.5$  begonnen, da bereits gezeigt wurde, dass das Verfahren für  $\gamma < 0.5$  einem Vorwärtsdifferenzenquotienten entspricht und somit immer instabiles Verhalten aufweist.

Als Beispiel dient hier der in radialer Richtung offene Zylinderresonator aus Abb. 5.11(b) mit  $r = 30$ ,  $h = 2$ ,  $N_\rho = 185$  und  $N_z = 13$ . Die Quasi-PML in  $\rho$ -Richtung besteht aus 12 Schichten, einer Reflektivität  $\mathcal{R} = 10^{-4}$  und quadratischem Materialprofil. Es wird eine Kante in  $z$ -Richtung bei  $\rho = 0$  mit einem Strom angeregt. Die Anregung erfolgt durch einen mit einem Sinus modulierten Gaußpuls für den Frequenzbereich  $74 \text{ MHz} \leq f \leq 184 \text{ MHz}$ . Die maximale Anzahl an Iterationen wurde auf  $n_{t,\text{max}} = 0.5 \cdot 10^6$  begrenzt, da die Energie dort bereits seit langem auf den Wert von numerischem Rauschen abgeklungen ist.

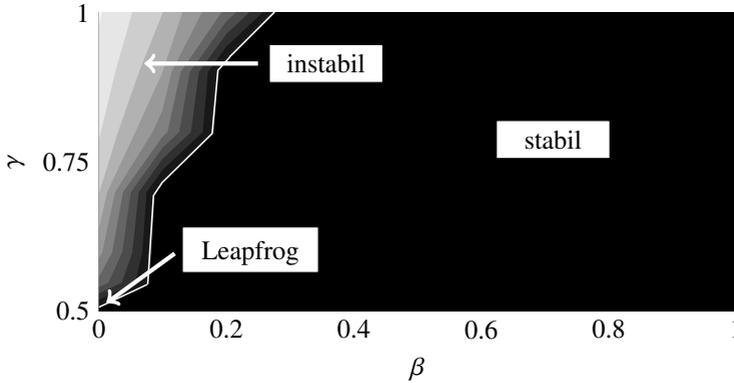


Abbildung 5.17: Stabilitätsgraph für das *Hybride Implizite-Explizite* Zeitbereichsschema für einen Zylinderresonator der in radialer Richtung mit einer PML abgeschlossen ist. Abbildung in Anlehnung an die Veröffentlichung [KS] der Autorin.

Der Stabilitätsgraph ist in Abb. 5.17 abgebildet. Die Ergebnisse dieses Beispiels wurden bereits in [KS] von der Autorin veröffentlicht.

Der Stabilitätsgraph weist eine instabile Region für  $\gamma > 0.5$  und kleine  $\beta$  Werte auf. Dies entspricht bezüglich der Lage der einen instabilen Region, wie sie bereits bei der PML in  $z$ -Richtung aufgetreten ist, vergleiche Abb. 5.9. Für dieses Beispiel hier gibt es jedoch keine zweite instabile Region. Für den Großteil der Wertepaare  $\beta$  und  $\gamma$  lässt sich ohne Probleme eine Zeitbereichssimulation durchführen. Auch der Punkt ( $\beta = 0, \gamma = 0.5$ ) der dem *Leapfrog-Verfahren* entspricht liegt hier in der stabilen Region. Wie schon in den vorangegangenen Beispielen zur PML in  $\rho$ -Richtung festgestellt wurde, ist diese offenbar weniger für eine mögliche Instabilität des zeitdiskreten Systems verantwortlich als die PML in  $z$ -Richtung.

### 5.2.5 Reflexion

Um die Auswirkung des *Hybriden Impliziten-Expliziten* Zeitbereichsverfahren mit PML noch näher zu untersuchen wird die Reflexion, die die PML verursacht, bestimmt. Dazu wird dasselbe Testbeispiel wie in Abschnitt 5.2.4 verwendet und

an der Position der Messsonde das elektrische Feld aufgezeichnet. Auf Grund der radialen Ausdehnung ist es möglich, genau einmal das hin- und einmal das rücklaufende Wellenpaket an der Messstelle aufzunehmen, ohne dass das Wellenpaket zuvor einen der Ränder erreicht. Die Reflexion  $R$  ist hier definiert als das Verhältnis der Amplituden, die sich aus der separaten Fourier-Transformation der hin- und rücklaufenden Welle bei einer Frequenz von  $f = 100$  MHz (oberhalb Cutoff) ergeben.

Die Reflexion wird hier für verschiedene vorgegebene  $\mathcal{R}$  und unterschiedliche Anzahlen an PML Schichten bestimmt. Des Weiteren werden  $\beta$  und  $\gamma$  im Bereich  $0 \leq \beta \leq 1$  und  $0.5 \leq \gamma \leq 1$  variiert. Die Ergebnisse sind in Abb. 5.18 angegeben und wurden in [KS] von der Autorin veröffentlicht.

Die Ergebnisse für die zwei unterschiedlichen Anzahlen von PML Schichten in Abb. 5.18(a) und Abb. 5.18(b) zeigen, dass die Parameterwahl von  $\beta$  und  $\gamma$  durchaus einen Einfluss auf die durch die PML erzielte Reflexion haben. Da die Parameter in beiden Fällen jedoch eine sehr unterschiedliche Wirkung auf die gemessene Reflexion haben, lässt sich kein genauere Zusammenhang feststellen. In beiden Fällen wird auch nicht die vorgegebene Reflexion von  $\mathcal{R} = 10^{-4}$  erreicht. Für eine größere Anzahl an PML Schichten kann aber ein besseres Ergebnis erzielt werden. Dieser Offset ist vermutlich auf verschiedene Effekte zurückzuführen: Zum einen die Dispersion und zum anderen die Auswirkung von Moden, die zwar mit angeregt werden, sich jedoch noch im Cutoff Bereich befinden. Auch Einflüsse des nicht besonders fein aufgelösten Gitters (hier bei 10 Linien pro Wellenlänge) könnten eine Ursache darstellen.

In Abb. 5.18(c) ist die Reflexion in Abhängigkeit von  $\beta \in [0, 1]$  und für ein festes  $\gamma = 0.5$  für unterschiedliche Anzahl an PML Schichten und zwei verschiedene für die PML eingestellte Reflexionen von  $\mathcal{R} = 10^{-2}$  und  $\mathcal{R} = 10^{-4}$  angegeben. Hier lässt sich deutlich erkennen, dass die gemessene Reflexion mit steigender Anzahl an PML Schichten geringer wird. Für eine kleine Anzahl an Schichten und einen kleinen Wert für  $\mathcal{R}$  lässt sich jedoch eine Verschlechterung der gemessenen Reflexion feststellen. Für nur drei Lagen PML ist die gemessene Reflexion für eingestelltes  $\mathcal{R} = 10^{-2}$  besser als die PML mit  $\mathcal{R} = 10^{-4}$ . Dies lässt sich erklären durch den sehr schnellen, sehr starken Anstieg der Leitfähigkeit und der damit einhergehenden Reflexion zwischen den benachbarten PML Lagen.

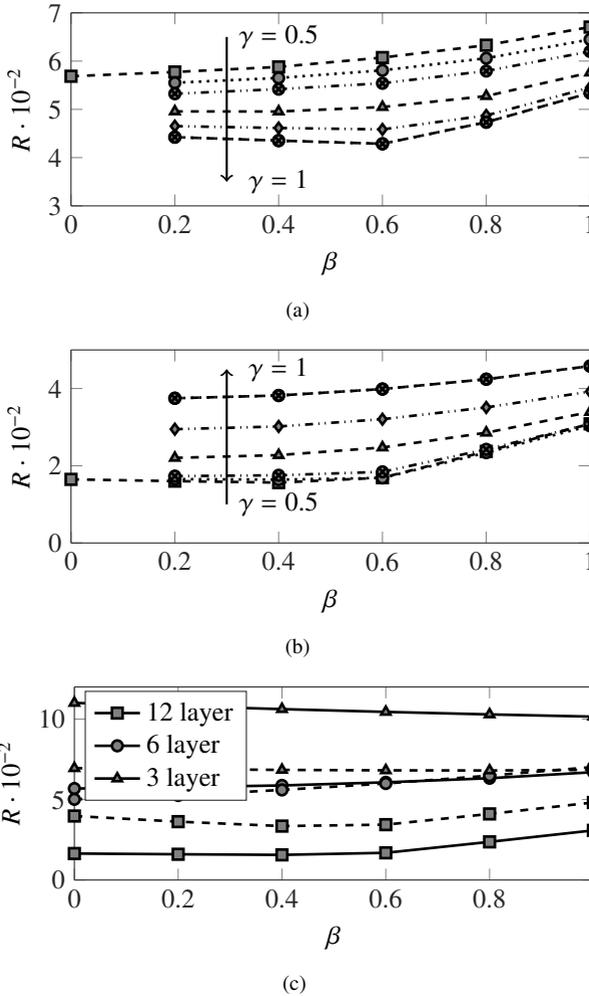


Abbildung 5.18: Reflexion in Abhängigkeit von  $\beta \in [0, 1]$  und  $\gamma \in [0.5, 1]$  für (a) 6 Schichten PML mit  $\mathcal{R} = 10^{-4}$  und (b) 12 Schichten PML mit  $\mathcal{R} = 10^{-4}$ . Und Reflexion für  $\gamma = 0.5$ , abhängig von  $\beta \in [0, 1]$  in (c) mit  $\mathcal{R} = 10^{-2}$  für die gestrichelten Linien und  $\mathcal{R} = 10^{-4}$  für die durchgezogenen Linien. Abbildung in Anlehnung an die Veröffentlichung [KS] der Autorin.

### 5.3 Zusammenfassung und Diskussion

In diesem Kapitel wurden die Zeitbereichsverfahren aus Abschnitt 4.3 für Simulationen mit der Methode der Finiten Integration auf  $\rho$ - $z$ -Koordinaten unter der Verwendung von PML Randbedingung näher untersucht. Dazu gehören das *Leapfrog-Verfahren*, das *Exponentielle Zeitbereichsschema* und das *Hybride Implizite-Explizite* Zeitbereichsschema. Bei den ersten beiden Verfahren handelt es sich um gängige Verfahren, bei denen hier nur auf die in diesem Fall verwendete Methodik zur Behandlung zeitlich verschobener Größen eingegangen wird. Bei dem dritten Verfahren, dem *Hybriden Impliziten-Expliziten* Algorithmus, handelt es sich um ein neues Schema für Zeitbereichssimulationen mit PML. Die dafür verwendeten Zeitbereichs Algorithmen, das *Newmark-beta Verfahren* [New59] und das *Standard Leapfrog-Verfahren* sowie die Methode der Hybridisierung [KS13], sind in anderem Kontext gängige Methoden. Das Zusammenführen aller Methoden um innerhalb des normalen Rechengebietes ausschließlich Standard *Leapfrog* zu rechnen und innerhalb der PML Region das implizite Verfahren zu verwenden, ist eine neue Interpretation der Hybridisierung. Hinzu kommt die Nutzung der zusätzlichen Parameter  $\beta$  und  $\gamma$  zur Stabilitätskontrolle im Bereich der PML.

Die Spektralanalyse der Eigenwerte der Rekursionsmatrix  $\mathbf{G}(\Delta t)$  konnte zeigen, dass die Lage der instabilen Pole außerhalb des Einheitskreises in der Nähe von „Cutoff“ Frequenzen liegen. Somit kann eine Instabilität des Systems auf Grund einer Verletzung des CFL-Kriteriums ausgeschlossen werden.

Die Konvergenzanalyse der genannten Eigenwerte für  $\Delta t \rightarrow 0$  konnte die Konvergenz der Zeitbereichsverfahren zu stabilen Polen belegen. Da diese konvergierten Lösungen den Eigenwerten des Frequenzbereichs entsprechen, kann hier das Problem räumlicher Instabilität ausgeschlossen werden, wie sie in der Arbeit von THOMA [Tho97] angegeben ist.

Aus diesen beiden Eigenschaften folgt, dass es sich hier um einen neuen Typ von Instabilität handelt, der durch die Zeitintegration selbst verursacht wird. Dabei tritt dieser Effekt bei PML in  $\rho$ - $z$ -Koordinaten und Kartesischen Koordinaten auf, wie bereits in der Literatur berichtet, siehe [KC03]. Die Pole, die nicht das Stabilitätskriterium erfüllen, liegen üblicher Weise in der Nähe der Cutoff Frequenzen.

Für die in diesem Kapitel vorliegenden Beispiele konnte mit Hilfe der Energie im Rechengebiet in Abhängigkeit von der Zeit  $t$  beobachtet werden, dass die Pole, die nicht das Stabilitätskriterium erfüllen, zu sehr unterschiedlichen Zeitpunkten

dominant werden. Dabei war der Einfluss der PML in  $z$ -Richtung größer als der PML in  $\rho$ -Richtung.

Auch wenn eine Aussage bezüglich der Stabilität des zeitdiskreten Systems vor Beginn der Simulation auf Grund der Komplexität dieses Problems nicht möglich ist, bietet das *Hybride Implizite-Explizite Verfahren* eine vielversprechende Lösung. Wie den Stabilitätsgraphen zu entnehmen ist, sollten sich auch für die anderen Beispielen immer Wertepaare für  $\beta$  und  $\gamma$  im Voraus wählen lassen, die eine Simulation ohne Anstieg der Energie gewährleisten.



# 6 Anwendungsbeispiele

Dieses Kapitel beinhaltet zwei Anwendungsbeispiele aus der Optik, die einen absorbierenden Rand benötigen und somit zum Testen der Stabilität der verschiedenen Zeitbereichsverfahren mit PML geeignet sind. Als Erstes wird ein VCSEL, der zu den Oberflächenemittern gehört, untersucht. Die Abstrahlung ist hauptsächlich in  $z$ -Richtung. Als Zweites wird eine Microdisc untersucht. Diese strahlt im Wesentlichen in der  $\rho$ -Richtung ab.

Die hier vorgestellten Lösungen und Visualisierungen in  $\rho$ - $z$ -Koordinaten, wurden mit dem im Rahmen dieser Arbeit entwickelten *MATLAB*<sup>®</sup> [Mat19] Programm simuliert. Eine Ausnahme stellen die Referenzsimulationen in *CST Studio Suite*<sup>®</sup> [3DS19] und die Berechnung von Resonanzfrequenzen und Güten aus den aufgenommenen Zeitbereichssignalen, die mit dem Spektralschätzer *Harminv* [Joh06] und dem Spektralschätzer *Prony* [TW93] berechnet werden, dar.

## 6.1 VCSEL

Es wird ein Oberflächenemitter, im Englischen auch als „vertical cavity surface emitter“ (VCSEL) bezeichnet, simuliert. Die grundlegende Funktionsweise ist bereits in Abschnitt 2.2.2 näher beschrieben. Die Abstrahlung des VCSEL erfolgt in  $z$ -Richtung, sodass die Anordnung zum Testen der PML in dieser Richtung geeignet ist.

Zunächst wird das Simulationsmodell vorgestellt und mit Hilfe der Resonanzfrequenz und der Feldverteilung überprüft. Anschließend werden die Zeitbereichsverfahren mit PML aus Kapitel 4 bezüglich ihrer Stabilität an diesem Simulationsbeispiel untersucht.

### 6.1.1 Simulation: Aufbau und Durchführung

Als grundlegendes Modell wird der VCSEL aus [Deb+08] verwendet. Das Ausgangsmodell ist sehr komplex und beinhaltet unter anderem das aktive Material in Form von mehreren Quantenfilmen innerhalb der Kavität. In der Veröffentlichung

befindet sich bereits ein vereinfachtes Simulationsmodell, abgebildet in Abb.1.(a), das hier in Abb.6.1(a) dargestellt ist. Es wird hier weiter vereinfacht. Die genaue Vorgehensweise ist der Arbeit von SCHMIDT [Sch15]<sup>1</sup> zu entnehmen, eine Skizze findet sich in Abb. 6.1(b). Es werden die aktiven Schichten vernachlässigt und durch eine Stromanregung ersetzt. Die Antireflexionsbeschichtung (AR-c), aus dem Englischen für „anti-reflection coating“, wird vernachlässigt und der untere DBR-Spiegel durch einen perfekten Spiegel aus PEC ersetzt. Zusätzlich werden die Kavität und der obere gekrümmte DBR-Spiegel so dimensioniert, dass die Resonanzfrequenz der Gaußmode bei  $f_{0,0,4} = 193.37$  THz liegt. Das elektrische Feld sei hier, bezogen auf kartesische Koordinaten, in  $x$ -Richtung polarisiert. Die Krümmung des oberen Spiegels ist an die Krümmung der Gaußmode angepasst. Die Dimensionierung erfolgt nach der in Abschnitt 2.2 angegebenen Theorie. Auf Grund der Rotationssymmetrie in azimuthaler Richtung können hier  $\rho$ - $z$ -Koordinaten verwendet werden. In Abb. 6.2(a) ist der VCSEL in diesen Koordinaten abgebildet. In radialer Richtung ist das Rechenggebiet ab  $\rho_0 = 15 \mu\text{m}$  mit PEC abgeschlossen, ebenso wie am Rand von  $z_{\text{min}}$ , der dem unteren Spiegel entspricht. In positiver  $z$ -Richtung ist das Rechenggebiet ab  $z_0 = 9.3 \mu\text{m}$  mit PML abgeschlossen. Die Geometrie und Materialparameter, sowie die Werte des sich einstellenden Gaußstrahls sind in Tab. 6.1.1 angegeben. Die Anzahl der Gitterlinien je kleinster Wellenlänge (LPW), der Gitterpunkte sowie die Parameter der PML sind in den Simulationen unterschiedlich und werden erst an der entsprechenden Stelle angegeben. Bei der Angabe der Gitterpunkte wird zwischen den Punkten des Rechenggebietes ohne PML  $N_{\text{RG}}$ , den Punkten der PML Region  $N_{\text{PML}}$  und der Gesamtanzahl an Gitterpunkten  $N_{\text{GES}}$  unterschieden.

### Anregung im Zeitbereich

Die Stromanregung der Zeitbereichssimulation ersetzt hier die aktiven Quantenschichten. Dabei wird in Bezug auf die Zeit ein sinusmodulierter Gaußpuls verwendet, der Frequenzen im Bereich  $f_1 \leq f \leq f_2$  anregt. Die sich ausbreitende Mode ist  $E_x$ -polarisiert, deshalb wird hier ein Strom in  $\rho$ - und  $\varphi$ -Richtung in Kombination mit  $m = 1$  für die azimuthale Modenordnung in  $\rho$ - $z$ -Koordinate verwendet. Es wird eine Gitterreihe in radialer Richtung in der Höhe  $z_a$  zum Einprägen der Ströme ausgewählt. Für diese Position in  $z$ -Richtung lässt sich das gaußförmige Profil der  $E_x$  Komponente mit Gleichung (2.61) bestimmen. Das kontinuierliche

---

<sup>1</sup>Die Masterarbeit von Frau Schmidt wurde von der Autorin betreut und weiterführende gemeinsam erarbeitete Ergebnisse in [KSS16] präsentiert.

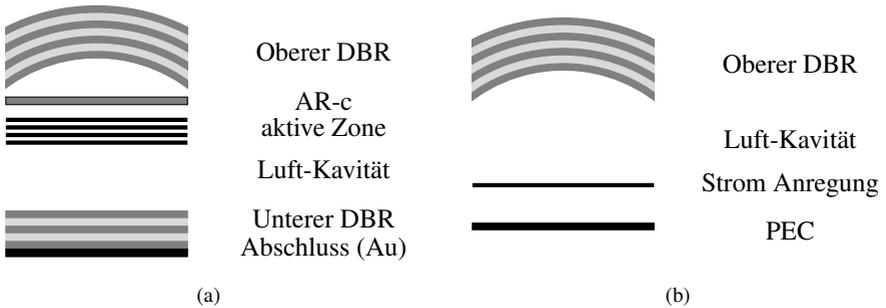


Abbildung 6.1: (a) Vereinfachtes Modell einer VCSEL aus Abb.1.(b), aus [Deb+08], (b) aus (a) weiter vereinfachtes Modell ohne AR-c, aktive Zone, unteren DBR und Abschluss aus Gold (Au) nach [Sch15]. Die aktive Zone wird durch eine Stromanregung ersetzt. Beide Abbildungen sind nicht in richtigen Skalen.

Geometrie		Material		Gaußstrahl	
$L$	$3.15 \mu\text{m}$	GaAs: $n_1$	3.38	$\lambda$	$1.55 \mu\text{m}$
$D$	$16 \mu\text{m}$	AlGaAs: $n_2$	2.99	$f_{0,0,4}$	193.37 THZ
$R$	$80 \mu\text{m}$	Anzahl Schichten $n_1$	17	$2w_0$	$2.77 \mu\text{m}$
$d_{n_1}$	$0.1146 \mu\text{m}$	Anzahl Schichten $n_2$	16		
$d_{n_2}$	$0.1296 \mu\text{m}$				
$\rho_0$	$9.3 \mu\text{m}$				
$z_0$	$15 \mu\text{m}$				

Tabelle 6.1: Geometrie- und Materialparameter des VCSEL und Werte des sich einstellenden Gaußstrahls in der Luft-Kavität.

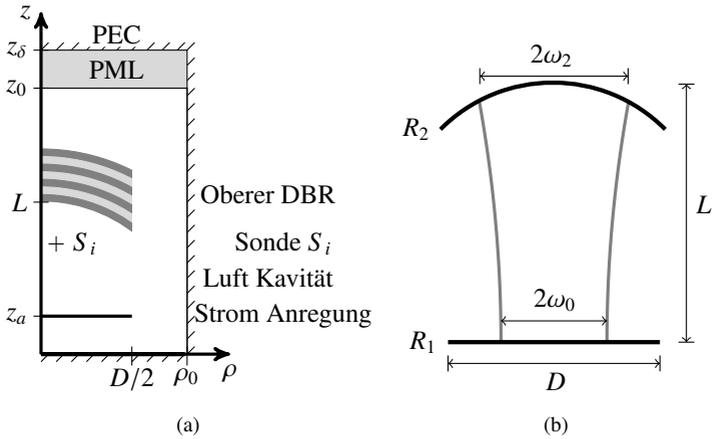


Abbildung 6.2: (a) Beispiel des VCSEL auf  $\rho$ - $z$ -Koordinaten mit den wichtigsten Abmessungen, der Stromanregung, der Sonde zur Aufzeichnung von Zeitbereichssignalen und den Randbedingungen. (b) Schematische Darstellung der Luft-Kavität, approximiert durch zwei perfekte Spiegel aus PEC mit den wichtigsten Größen der sich ausbreitenden Gaußmode. Beide Abbildungen sind Skizzen und nicht zu skalieren.

Profil wird nun diskretisiert, indem die Amplitudenwerte jeweils am Mittelpunkt einer Kante in  $\rho$ -Richtung abgetastet werden.

### Analytische Lösung

Die analytische Lösung wurde bereits bei der Dimensionierung verwendet, siehe Skizze in Abb. 6.2(b). Die Luft-Kavität des VCSEL kann vereinfacht durch zwei perfekte Spiegel aus PEC dargestellt werden. Wie in Abschnitt 2.2 bereits beschrieben, breitet sich eine gaußförmige Mode im Resonator aus, deren schmalste Strahltaille sich an der Position des geraden Spiegels befindet, siehe Abb. 6.2(b). Hier soll die gaußförmige Grundmode über vier Intensitätsmaxima innerhalb des Resonators verfügen. Somit erhält man laut Gleichung (2.62) die Resonanzfrequenz mit  $f_{0,0,4} = 193.37$  THz. Das elektrische Feld kann für eine feste Höhe  $z$  unter Verwendung der Gleichung (2.61) bestimmt werden.

### Referenzsimulation

Als weitere Referenz werden hier die Simulationsergebnisse mit *CST Studio Suite*® [3DS19] aus der Arbeit von SCHMIDT [Sch15] verwendet. Die Simulation wird in kartesischen Koordinaten durchgeführt und auf Grund der Symmetrie der in  $x$ -Richtung polarisierten gaußförmigen Grundmode kann in der  $x$ - $z$ -Ebene ein magnetischer Rand (PMC) und in der  $y$ - $z$ -Ebene ein elektrischer Rand (PEC) verwendet werden. Die Anregung im Zeitbereich erfolgt mit einer Gaußstrahlenquelle, die auf einer ganzen Schnittfläche in der  $x$ - $y$ -Ebene innerhalb der Kavität eine gaußförmig verteilte Stromanregung einspeist. Das „*Gaussian-Beam-Macro*“, das dazu von *CST Studio Suite*® zur Verfügung gestellt wird, benötigt als Übergabe Parameter: die minimale Strahltaille  $w_0$  und den Abstand der Quelle zur minimalen Strahltaille. Für die entsprechenden Parameter werden die Ergebnisse der analytischen Betrachtung verwendet. Auf Grund der 3D Simulation ist die Anzahl der benötigten Gitterpunkte und damit auch die Rechenzeit sehr hoch. In Tab. 6.4 befinden sich die Ergebnisse der Konvergenzstudie. Zur Übersicht ist ebenfalls die Anzahl der Gitterpunkte, sowie die Simulationszeit aufgeführt. Die Rechnungen wurden auf einem PC mit Standard Hardware<sup>2</sup> durchgeführt. Die Resonanzfrequenz wird mit Hilfe von HARMINV [Joh06] aus einem Zeitsignal bestimmt, das im Inneren der Kavität aufgenommen wird. Das Abbruchkriterium der *CST Studio Suite*® Referenzsimulation für die Energie beträgt auf

---

<sup>2</sup>Der verwendete PC verfügt über 16 GB Arbeitsspeicher und Intel(R) Core(TM) i7 – 2600K Prozessor mit 3.40 GHz.

Nr.	Gitter				PML		Zeitbereich $\Delta t \cdot 10^{-16}$
	LPW	$N_{RG}$	$N_{PML}$	$N_{GES}$	Lagen	$\mathcal{R}$	
1	5	14193	996	15190	4	$10^{-3}$	5.66
2	10	56100	2958	59058	6	$10^{-4}$	2.88
3	15	125550	6642	132192	9	$10^{-4}$	1.88
4	20	426510	426510	442338	12	$10^{-4}$	1.41

Tabelle 6.2: Gitter-, PML- und Zeitbereichsparameter für die Konvergenzanalyse des VCSEL in  $\rho$ - $z$ -Koordinaten mit unterschiedlicher Anzahl an LPW. Hier beträgt  $z_0 = 9.3 \mu\text{m}$ . Die PML ist in  $\rho$ - und  $z$ -Richtung.

Grund der sehr hohen Simulationszeiten nur  $-10$  dB. Der Frequenzbereich ist auf  $184 \text{ THz} \leq f \leq 198 \text{ THz}$  begrenzt.

### 6.1.2 Validierung der Simulation

Die Simulation des VCSEL mit dem in dieser Arbeit entstandenen *MATLAB*<sup>®</sup> Programm soll zunächst auf die Richtigkeit der berechneten Mode untersucht werden. Dazu dienen zum einen die Resonanzfrequenz und Güte. Hier liegen Vergleichswerte für die Resonanzfrequenz aus der analytischen Lösung und der Referenzsimulation aus der Arbeit von SCHMIDT [Sch15] vor. Die dazugehörigen Güten können bezüglich ihrer Konvergenz überprüft werden. Zum anderen wird das Feld bezüglich des gaußförmigen Profils hin untersucht. Die Simulationsparameter für die verschiedenen Anordnungen sind in Tab. 6.2 nach Nummern geordnet angegeben.

#### Resonanzfrequenz und Güte

Für Resonanzfrequenz und Güte wird jeweils eine Konvergenzstudie durchgeführt. Dazu wird eine Messsonde im Inneren der Kavität platziert, siehe Skizze in Abb.6.2(a). An dieser Stelle wird die  $\rho$ -Komponente des elektrischen Feldes über die gesamte Simulationszeit aufgenommen. Dieses Zeitsignal wird anschließend verwendet, um mit *Harminv* [Joh06] die Resonanzfrequenz und die Güte zu bestimmen. Auf Grund des sehr *welligen* Signals, siehe Abb. 6.3, werden hier für die  $\rho$ - $z$ -Simulation die gesuchten Werte zu unterschiedlichen Zeitpunkten bestimmt. Daraus ergeben sich in der Grafik Fehlerbalken mit einem Mittelwert sowie einem minimalen und maximalen Wert.

LPW	Sim. $\rho$ - $z$ -Koordinaten		
	$t_{\text{Sim}}$	$f_{\text{res}}$ [THz]	$Q \cdot 10^3$
5	11min	191.66 – 192.64	0.054 – 0.077
10	51min	191.66 – 192.7	0.34 – 0.5
15	1h35min	192.86 – 193.29	0.93 – 1.12
20	11h58min	193.1 – 193.4	1.05 – 1.15

Tabelle 6.3: Ergebnisse der Konvergenzstudie der Simulation in  $\rho$ - $z$  Koordinaten für die Resonanzfrequenz und Güte des VCSEL. Die Simulationen wurden auf einem PC mit 32 GB Arbeitsspeicher und Intel(R) Core(TM) i7 – 8700K Prozessor mit 3.70 GH durchgeführt.

Es werden die Anzahl Linien pro Wellenlänge (LPW) zwischen 5 - 20 variiert. Dies entspricht den Simulationsparametern Nr. 1 - 4 aus Tabelle 6.2. Für die PML soll gelten, dass sie immer mindestens  $\lambda/2$  beträgt. Diese Forderung entspricht 6 Lagen diskreter PML je 10 LPW und quadratischem Materialprofil. Die PML ist dabei in  $\rho$ - und  $z$ -Richtung, um das evaneszente Feld im Resonator nicht zu verfälschen.

Die Ergebnisse der eigenen Simulation in  $\rho$ - $z$ -Koordinaten sind in Tabelle 6.3 angegeben und die Referenzergebnisse der 3D Simulation aus [Sch15] sind in Tab.6.4 aufgeführt. Es werden auf Grund der sehr hohen Rechenzeit der 3D Simulation ausschließlich Simulationen bis zu 20 Linien pro Wellenlänge durchgeführt. Die Konvergenz der Resonanzfrequenz und der Güte sind in Abb. 6.4 angegeben. Für die Resonanzfrequenz lässt sich mit zunehmender Anzahl an LPW feststellen, dass sowohl die Werte der eignen Simulation in  $\rho$ - $z$ -Koordinaten als auch die Referenzlösung von CST gegen die analytische Lösung konvergieren. Der Unterschied im Konvergenzverhalten kann durch das längere Abklingen der Energie in der Simulation in  $\rho$ - $z$ -Koordinaten erklärt werden. Dies ist möglich, da die Simulationszeiten erheblich kürzer sind, siehe Eintrag in der Tabelle 6.3

Für ein sehr ähnliches Setup wurden bereits in [KS18b] Resultate für Resonanzfrequenz und Güte von der Autorin veröffentlicht. Der Unterschied zu den hier vorgestellten Resultaten ist, dass hier zusätzlich ein PML-Rand in radialer Richtung hinzugefügt wurde. In [KS18b] wurde ausschließlich in  $z$ -Richtung eine PML verwendet. Auch hier konnte bereits Konvergenz für die Resonanzfrequenz und Güte gezeigt werden.

LPW	Sim. 3D Referenz		
	$N_{Ges}$	$t_{Sim}$	$f_{res}$ [THz]
5	$1.1 \cdot 10^6$	14 min	187.64
10	$7.3 \cdot 10^6$	2 h35 min	191.76
15	$23.2 \cdot 10^6$	11 h18 min	192.68
20	$53.0 \cdot 10^6$	33 h38 min	192.72

Tabelle 6.4: Ergebnisse der Konvergenzstudie der Simulation in 3D für die Resonanzfrequenz und Güte des VCSEL, entnommen aus [Sch15]. Die Simulationen wurden auf einem PC mit 16 GB Arbeitsspeicher und Intel(R) Core(TM) i7 – 2600K Prozessor mit 3.40 GHz durchgeführt.

## Feldverlauf

Es wird das Simulationssetup Nr.2 mit 10 LPW verwendet. Das Energiekriterium liegt hier bei  $-40$  dB. Die Feldverteilung kann entlang einer Linie in radialer Richtung bei einer festen Höhe  $z$  betrachtet und mit der analytischen Lösung verglichen werden. Dazu wird die  $\rho$ -Komponente der elektrischen Feldstärke auf den entsprechenden Gitterkanten im Feldmonitor ausgelesen. Für eine Höhe von  $z = 0.2 \mu\text{m}$  ist der Verlauf zusammen mit der analytischen Lösung in Abb. 6.5 abgebildet. Es ist deutlich zu sehen, dass die berechnete Lösung das Profil einer Gaußmode besitzt und bereits bei einer Gitterauflösung von 10 LPW fast deckungsgleich mit der analytischen Lösung ist.

In Abb. 6.6 ist für dieselbe Simulation die Feldintensität der  $E_\rho$ -Komponente des elektrischen Feldes angegeben. Innerhalb der Kavität zwischen PEC und DBR Spiegel sind die 4 Maxima der gaußförmigen  $f_{0,0,4}$  Mode zu erkennen. Über dem Spiegel ist die Abstrahlung des Lichtes in Form eines Gaußstrahls zu sehen. Die unterschiedlich ausgeprägten Intensitäten sind durch den DBR Spiegel verursacht, der einen Reflexionsgrad von 99.96% aufweist und somit nur ein kleiner Teil des Lichts aus der Kavität in den Außenraum abgestrahlt wird.

## Zusammenfassung

An Hand der Überprüfung von Resonanzfrequenz, Güte und dem Feldbild der Mode im Resonator kann die Validität der Simulation in  $\rho$ - $z$ -Koordinaten bestätigt werden. Die Resonanzfrequenz konvergiert bereits bei einem Abbruch der Simulation für ein Energiekriterium vom  $-20$  dB sehr gut. Die Güte konvergiert

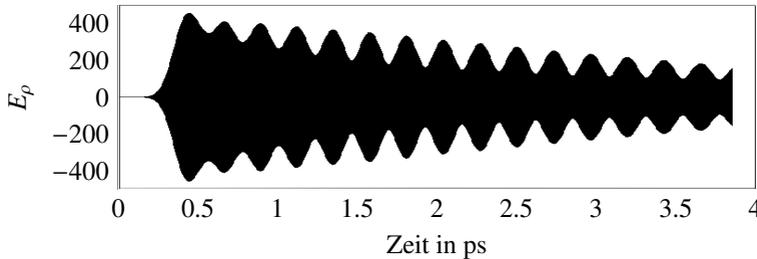


Abbildung 6.3: Zeitsignal einer  $E_\rho$  Komponente, aufgenommen an der Messstelle innerhalb der Kavität, für eine Simulation mit 10 LPW und 6 Lagen PML in  $\rho$ - und  $z$ -Richtung mit  $\mathcal{R} = 10^{-4}$  und quadratischem Materialprofil. Das Zeitsignal klingt nach der Anregung mit dem sinusmodulierten Gaußpuls ab, weist jedoch eine Welligkeit auf, die durch Resonanzfrequenzen, die nahe beieinanderliegen, verursacht wird.

mit zunehmender Anzahl LPW. Dies ist an der Sättigung des Verlaufs deutlich zu erkennen. Daraus folgt, dass der PML Rand seine Aufgabe als absorbierende Randbedingung gut erfüllt.

Das Feldbild der Mode innerhalb des Resonators konnte durch Vergleich mit der analytischen Lösung bestätigt werden. Es stellt sich eine Gaußmode ein, es gibt keine Anzeichen für die Existenz von BESSELFunktionen. Dies bedeutet, dass der Rand in  $\rho$ -Richtung funktioniert und nicht zu einer falschen Lösung führt.

### 6.1.3 Stabilität der Zeitbereichsverfahren mit PML

In diesem Abschnitt sollen die drei Zeitbereichsverfahren mit PML aus Abschnitt 4.3 am Beispiel des VCSEL bezüglich ihrer Stabilität untersucht werden. Um die Rechenzeit zu verkürzen, wird der Bereich oberhalb des DBR Spiegels von ca.  $4\lambda$  auf  $1\lambda$  verkürzt. Die PML ist immer noch genügend weit von der Struktur entfernt.

Als Erstes werden das *Leapfrog-Verfahren* und das *Exponentielle Zeitbereichschema* untersucht. Dann folgt das *Hybride Implizite-Explizite Zeitbereichsverfahren*.

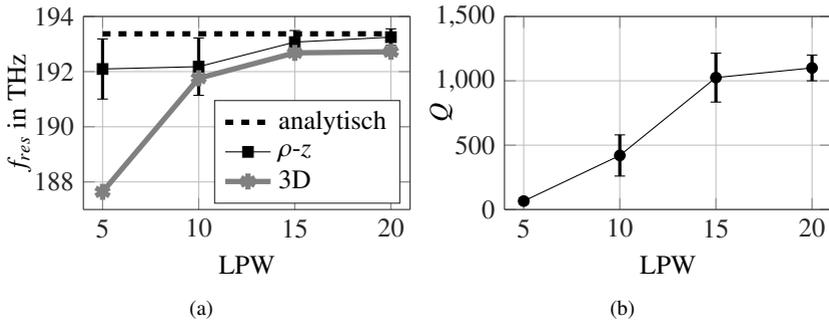


Abbildung 6.4: Ergebnisse der Konvergenzstudie für Resonanzfrequenz  $f_{res}$  in (a) und Güte  $Q$  in (b), mit PML in  $\rho$ - und  $z$ -Richtung,  $\mathcal{R} = 10^{-3}$  und quadratischem Materialprofil. Die Ergebnisse  $f_{3D}$  für die Resonanzfrequenz sind [Sch15] entnommen.

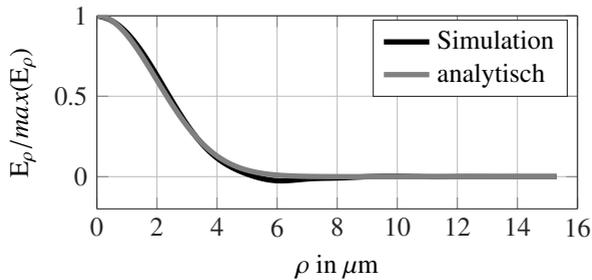


Abbildung 6.5: Verlauf des elektrischen Feldes innerhalb der Kavität des VCSEL entlang  $\rho$  für eine Höhe  $z = 0,2 \mu\text{m}$ . Es sind 10 LPW und ein Energiekriterium von  $-40 \text{ dB}$  bei 6 Lagen PML in  $\rho$ - und  $z$ -Richtung verwendet worden.

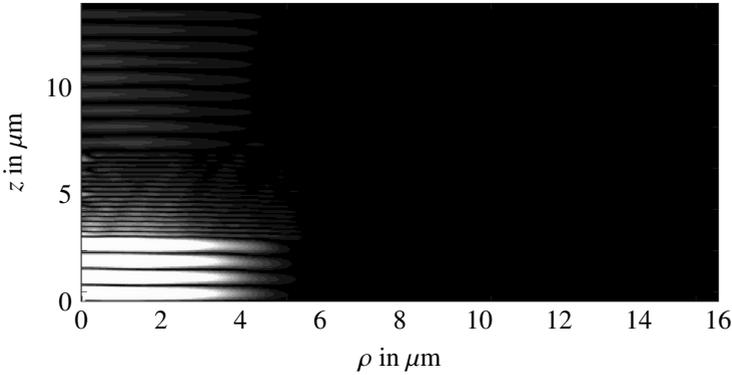


Abbildung 6.6: Intensität der  $E_\rho$  Komponente für eine Simulation mit 10 LPW und 6 Lagen PML in  $\rho$ - und  $z$  Richtung. Die Intensität der Abstrahlung ist um Größenordnungen kleiner, da die Reflektivität des DBR-Spiegels bei 99.96% liegt.

### Leapfrog-Verfahren und Exponentielles Zeitbereichsschema

Für ein Simulationssetup mit nur 6 Lagen PML,  $\mathcal{R} = 10^{-3}$  und quadratischem Profil wurden in [KJS17b] das Ergebnis der beiden Zeitbereichsschemata von der Autorin veröffentlicht. In diesem Fall ist der Energieverlauf für das *Leapfrog-Verfahren* bis zum Ende der Simulationszeit monoton fallend und erreichte einen Wert von  $-40$  dB. Für das *Exponentielle Zeitbereichsschema* sind zwei Verläufe angegeben: die Energie des einen steigt nach einer Simulationszeit von  $t = 15$  ps wieder an und die des anderen Verfahrens bleibt bis zum Energiekriterium von  $-40$  dB monoton fallend. Der Unterschied der Verfahren liegt hier im gewählten Zeitschritt mit  $\Delta t_{\text{cfl}} > \Delta t_{\text{exp,instabil}} > \Delta t_{\text{exp,stabil}}$ . Beide gewählten Zeitschritte sind kleiner als die vom CFL-Kriterium vorgegebene Schranke. Dieses Beispiel zeigt, wie bei der Eigenwertanalyse aus Abschnitt 5.1.2, dass für kleiner werdende Zeitschritte die Pole des zeitdiskreten Systems gegen Pole konvergieren, die das Stabilitätskriterium erfüllen. Denn der Verlauf der Energie bleibt für das kleinere  $\Delta t$  für eine längere Simulationsdauer monoton fallend.

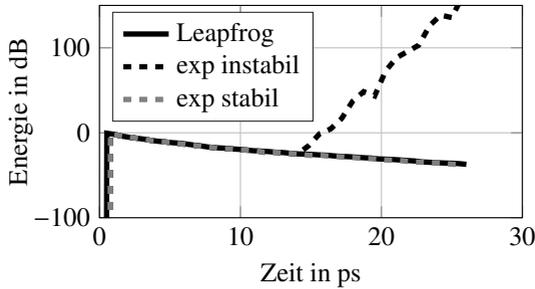


Abbildung 6.7: Verlauf der im Rechengebiet (ohne PML Region) berechneten Energie für das *Leapfrog*-Verfahren und das *Exponentielle Zeitbereichsschema*. Für die Zeitschritte der beiden Kurven des exponentiellen Zeitbereichsschemas gilt:  $\Delta t_{\text{eff}} > \Delta t_{\text{exp,instabil}} > \Delta t_{\text{exp,stabil}}$ , mit 6 Lagen PML,  $\mathcal{R} = 10^{-3}$  und quadratischem Materialprofil, Ergebnisse bereits von der Autorin in [KJS17b] veröffentlicht.

## Hybrider Impliziter-Expliziter Algorithmus

Um den *Hybriden Impliziten-Expliziten Algorithmus* zu bewerten, wird nach derselben Vorgehensweise aus Abschnitt 5.1.4 ein Stabilitätsgraph für  $\beta \in [0, 1]$  und  $\gamma \in [0.5, 1]$  aufgenommen. Das Beispiel dazu hat 10 LPW, bezogen auf Vakuum, was die Spiegel etwas schlechter diskretisiert. Jede Spiegelschicht wird jedoch noch durch die Diskretisierung erfasst. Dies wird hier auf Grund der sonst sehr hohen Anzahl an Gitterpunkten vorgenommen, um den Aufwand zu reduzieren, weil für den Stabilitätsgraphen sehr viele Simulationen notwendig sind. Des Weiteren wird hier das Energiekriterium auf  $-80$  dB eingestellt. Alle Simulationen, die bis zum Erreichen des Energiekriteriums eine monoton fallende Energie aufweisen, werden als *stabil* gewertet. Die PML in  $z$ -Richtung besitzt 12 Schichten,  $\mathcal{R} = 10^{-4}$  und ein quadratisches Materialprofil. Zusammen mit der PML besitzt das Rechengebiet  $N_p = (94 + 12) \cdot 101 = 10,706$  Gitterpunkte. Für den hybriden Algorithmus, bei dem insgesamt 4 Größen ( $\hat{\mathbf{e}}, \hat{\mathbf{h}}, \Phi, \Psi$ ) je Zeitschritt berechnet werden, die jeweils drei Komponenten besitzen ( $\rho, \varphi, z$ ), resultieren 71,508 Unbekannte. Die Ergebnisse dieses Abschnittes wurden bereits in [KS20] von der Autorin veröffentlicht. Der Stabilitätsgraph ist in Abb. 6.8 angegeben. In Schwarz sind hier die als stabil detektierten Wertepaare  $\beta, \gamma$  eingefärbt. Die als instabil ge-

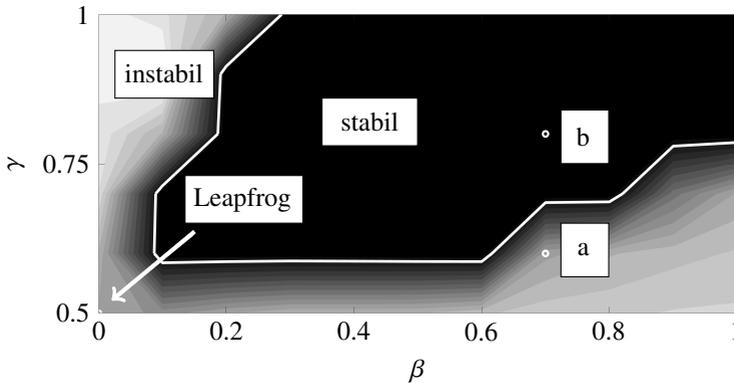


Abbildung 6.8: Stabilitätsgraph des VCSEL für 10 LPW und 6 Lagen PML in  $z$ -Richtung. Eine dunklere Farbe entspricht einer höheren Anzahl an Zeitschritten, ohne ein unphysikalisches wieder Ansteigen der Energie, Abbildung in Anlehnung an die Veröffentlichung der Autorin [KS].

werteten Wertepaare sind in Graustufen dargestellt. Eine weiße Linie separiert beide Bereiche. Zunächst kann festgehalten werden, dass der Punkt  $(0, 0.5)$ , der dem *Leapfrog-Verfahren* entspricht, für dieses Beispiel innerhalb der instabilen Region liegt und sich dieses Verfahren für dieses Beispiel nicht eignet. Des Weiteren sind für  $\gamma = 0.7$  zwei Wertepaare im Stabilitätsgraphen markiert. Dabei liegt der Punkt a im instabilen und der Punkt b im stabilen Bereich. Die dazu passenden Kurven der Energie sind in Abb. 6.9 angegeben. Diese Energiekurven zeigen, dass mit der Konfiguration aus a bis zu einem Wert von ca.  $-10$  dB gerechnet werden kann, diese aber danach unphysikalisch ansteigt. Für die Kurve b hingegen kann bis zum Erreichen des Energiekriteriums von  $-80$  dB ohne Probleme gerechnet werden.

Anzumerken sei an dieser Stelle auch, dass die Anordnung des stabilen und instabilen Bereiches sehr ähnlich zu der in Abschnitt 5.1.4 ist. Dies lässt den Schluss zu, dass sich für andere Problemstellungen sehr ähnliche Stabilitätsgraphen ermitteln lassen. Somit könnte auch vor einer Simulation geschätzt werden, in welchem Bereich  $\beta$  und  $\gamma$  gewählt werden müssen um eine Simulation ohne Ansteigen der Energie vor dem eigentlichen Abbruchkriterium zu erhalten.

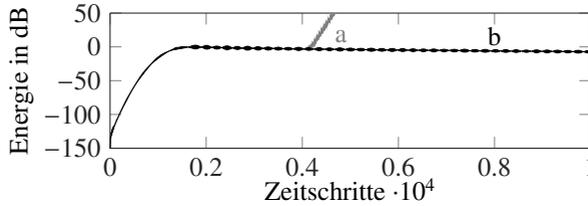


Abbildung 6.9: Verlauf der Energie für die im Stabilitätgraph aus Abb.6.8 markierten Punkte a und b. Die Abbildung ist in Anlehnung an die Veröffentlichung der Autorin [KS20].

## 6.2 Microdisc

Um die PML in  $\rho$ -Richtung zu testen wird eine Microdisc verwendet, deren Abstrahlung in  $\rho$ -Richtung am Rand der Struktur erfolgt. Der Aufbau und die grundlegende Theorie werden in Abschnitt 2.2.3 näher beschrieben. An dieser Stelle sei angemerkt, dass es sich hier um eine eigene Dimensionierung handelt, mit einer im Verhältnis zu realen Aufbauten kleinen Brechzahl. Diese wird gemacht, um eine Mode zu erhalten, die möglichst stark in der Richtung der PML am  $\rho$ -Rand abstrahlt. Daraus resultiert auch eine im Verhältnis zu realen Anwendungen sehr geringe Güte.

Zuerst wird das Simulationsmodell vorgestellt und mehrere Moden an ihrer Resonanzfrequenz, Güte und Feldverteilung überprüft. Die Resonanzfrequenz und Güte werden hier mit Hilfe des spektralen Schätzers *Prony* [TW93] aus der Fachgebiets internen *MATLAB*<sup>®</sup> Bibliothek bestimmt. Danach können die verschiedenen Zeitbereichsverfahren aus Kapitel 4 bezüglich ihrer Stabilität für diese Anordnung näher untersucht werden.

### 6.2.1 Simulation: Aufbau und Durchführung

Es wird eine Microdisc im THz Bereich mit Höhe  $d = 0.375 \mu\text{m}$ , Radius  $r = 1 \mu\text{m}$  und einer Brechzahl von  $n_d = \sqrt{6}$ , was einer relativen Permittivität von  $\epsilon_r = 6$  entspricht, untersucht. Sie ist exemplarisch in Abb. 6.10(a) skizziert.

Auf Grund der Rotationssymmetrie werden  $\rho$ - $z$ -Koordinaten verwendet. Im Folgenden werden ausschließlich TM-Moden, die von einer  $E_z$ -Komponente dominiert werden, berechnet. Dies erlaubt es als Symmetriebedingung in der  $\rho$ -

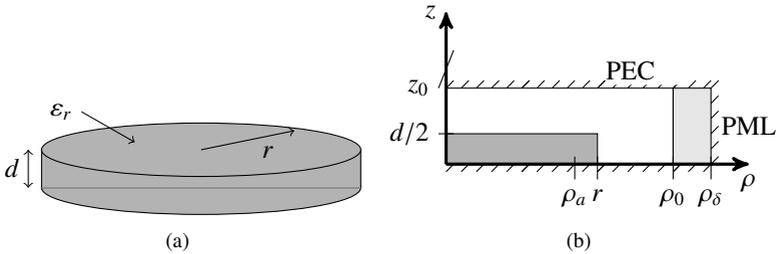


Abbildung 6.10: (a) Aufbau der Microdisc mit Höhe  $d$ , Radius  $r$  und Material  $\epsilon_r$ . (b) Schematische Darstellung des Rechengebietes mit der Microdisc. Die Struktur wird auf einem  $\rho$ - $z$ -Gitter diskretisiert mit PML Randbedingung in  $\rho$ -Richtung. Auf Grund der Symmetrie der Anordnung für TM Mode wird in der  $\rho$ - $\varphi$  Ebene eine PEC Randbedingung eingeführt. Die Skizzen sind nicht maßstabsgetreu.

$\varphi$ -Ebene einen PEC Rand zu verwenden. Das Rechengebiet wird zudem in  $\rho$ -Richtung bei  $\rho_0 = 2 \mu\text{m}$  mit PML und in  $z$ -Richtung bei  $z_0 = 0.28125 \mu\text{m}$  mit einem PEC Rand abgeschlossen. Eine schematische Darstellung des Rechengebietes inklusive der Randbedingungen ist in Abb. 6.10(b) angegeben.

### Anregung im Zeitbereich

Die Stromanregung der Zeitbereichssimulation wird hier mit einer einzelnen Kante in  $z$ -Richtung in der Nähe des  $\rho$ -Randes realisiert. Dabei wird auf eine  $z$ -Kante des Gitters bei ca.  $\rho_a = 0.9 \mu\text{m}$  ein sinusmodulierter Gaußpuls eingepreßt, der Frequenzen im Bereich  $f_1 \leq f \leq f_2$  anregt. Die Position ist so gewählt, dass sie in grober Abschätzung in der Mitte des Feldmaximums der Mode liegt, die man anregen möchte.

### Referenzsimulation

Es wird eine Referenzsimulation mit dem Zeitbereichs Löser von *CST Studio Suite*<sup>®</sup> durchgeführt. Hier werden dieselben Abmessungen für die Geometrie und das Rechengebiet verwendet. Die Randbedingungen sind in  $x$ - und  $y$ -Richtung

offen und in  $z$ -Richtung PEC. Die Anregung erfolgt mit einer Stromquelle bei  $x = 0.9\mu\text{m}$  und  $y = 0\mu\text{m}$  im selben Frequenzbereich wie in der Simulation in  $\rho$ - $z$ -Koordinaten. Es wird im Inneren eine Messsonde platziert, mit der alle Komponenten des elektrischen Feldes über die gesamte Simulationszeit aufgenommen werden. Daraus lassen sich im Anschluss mit Hilfe des spektralen Schätzers *Prony* [TW93] die Resonanzfrequenz und Güte bestimmen.

### 6.2.2 Validierung der Simulation

#### Resonanzfrequenz und Güte

Es wird im Inneren der Microdisc eine Messsonde platziert und die Komponenten des elektrischen Feldes werden über die gesamte Simulationsdauer aufgenommen. Dann können Resonanzfrequenz und Güte mit Hilfe des spektralen Schätzers *Prony* [TW93] aus dem Zeitbereichssignal ermittelt werden. Die Ergebnisse sind unter  $f_{2D}$  und  $Q_{2D}$  in Tab. 6.6 angegeben. Die Referenzwerte werden wie beschrieben mit Hilfe von *CST Studio Suite*<sup>®</sup> [3DS19] ermittelt. Die Abmessungen des Rechengebietes bleiben dabei gleich. Als Erstes werden Moden mit azimuthaler Ordnung  $m = 10, 11, \text{ und } 12$  berechnet, die in  $\rho$ - und  $z$ -Richtung jeweils ein Maximum besitzen. Um die Lösung zu validieren wird für eine Gitterauflösung von 20 LPW die Resonanzfrequenz und Güte nach Abklingen der Energie auf  $-20\text{ dB}$  bestimmt und mit der Referenzlösung verglichen. Der Frequenzbereich ist abhängig von der entsprechenden Mode, die berechnet werden soll, und in Tab.6.5 angegeben, zusammen mit dem verwendeten Zeitschritt  $\Delta t$ . Die in Abhängigkeit des simulierten Frequenzbereiches resultierende Anzahl an Gitterpunkten für den Bereich des Rechengebietes und der PML, sowie die gesamte Punktzahl sind ebenfalls in Tab. 6.5 angegeben. Die verwendete PML besitzt für alle Simulationen 22 Schichten, eine eingestellte Reflexion von  $\mathcal{R} = 10^{-4}$  und ein quadratisches Brechzahlprofil. Vergleicht man die Ergebnisse der Simulation in  $\rho$ - $z$ -Koordinaten mit der Referenz in *CST Studio Suite*<sup>®</sup> [3DS19], so kann festgestellt werden, dass die Resonanzfrequenzen leicht abweichen, die Güte nach  $-20\text{ dB}$  bereits schon sehr gute Übereinstimmungen zeigt.

#### Feldverteilung

Für die TM-Moden mit azimuthaler Ordnung  $m = 10, 11 \text{ und } 12$ , aus der Simulation der Resonanzfrequenzen und Güten, sind die Ergebnisse der Felder in Abb. 6.11 angegeben.

m	LPW	Gitter			Zeitbereich	
		$N_{RG}$	$N_{PML}$	$N_{GES}$	Frequenzbereich [THz]	$\Delta t \cdot 10^{-18}$
10	20	1530	330	1860	290 - 310	6.28
11	20	1744	352	2096	310 - 330	5.35
12	20	1955	374	2329	330 - 350	4.65

Tabelle 6.5: Parameter des Rechengitters und der PML-Randbedingung für die Microdisc bei unterschiedlichen azimutalen Modenordnungen  $m$ .

$m$	$f_{2D}$ [THz]	$Q_{2D}$	$f_{CST}$ [THz]	$Q_{CST}$
10	297.88	3058	293.86	3770
11	317.78	9389	319.66	10202
12	337.50	26765	340.36	26905

Tabelle 6.6: Ergebnis der Resonanz und Güte für die eigene Simulation in  $\rho$ - $z$ -Koordinaten und die Referenzlösung aus CST.

Für alle drei Moden ist deutlich zu erkennen, dass ihr Feldmaximum am Rand der Microdisc ist und die Anzahl an Feldmaxima der azimutalen Modenordnung entspricht.

### 6.2.3 Stabilität der Zeitbereichsverfahren mit PML

In diesem Abschnitt werden die drei Zeitbereichsverfahren mit PML aus dem Abschnitt 4.3 am Beispiel der angegebenen Microdisc untersucht. Alle Simulationen in diesem Abschnitt werden für die Mode mit azimuthaler Modenordnung  $m = 10$  bei einer Gitterauflösung von 10 LPW und einem Energiekriterium von  $-80$  dB durchgeführt. Das Gitter besitzt  $N_{GES} = 1044$  Gitterpunkte, davon  $N_{PML} = 108$  innerhalb der PML Region. Die PML in  $\rho$ -Richtung besteht aus 6 Lagen, mit  $\mathcal{R} = 10^{-4}$  und quadratischem Materialprofil.

#### Leapfrog-Verfahren und exponentielles Zeitbereichsschema

Für die Simulation des *Leapfrog-Verfahrens* und des *Exponentiellen Zeitbereichsschema* werden dieselben Einstellungen wie für die zuvor durchgeführte Stabilitätsanalyse verwendet. Für beide Algorithmen konnte bis zu einem Energiekrite-

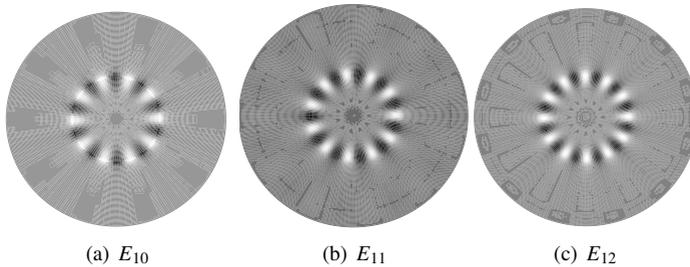


Abbildung 6.11: Feldbilder der  $E_z$ -Komponente des elektrischen Feldes aus der  $\rho$ - $z$ -Koordinaten Simulation nach Erreichen eines Energiekriteriums von  $-20$  dB, bei einer Gitterauflösung von 20 LPW.

rium von  $-120$  dB simuliert werden, ohne ein wieder ansteigendes Verhalten in der Energie zu beobachten. Dies entspricht den Ergebnissen aus dem Abschnitt 5.2. Dieser hatte bereits gezeigt, dass die PML in  $\rho$ -Richtung weniger Einfluss auf die Stabilität der Zeitdiskretisierung hat als die PML in  $z$ -Richtung.

### Hybrider Impliziter-Expliziter Algorithmus

Der Stabilitätsgraph für den Hybriden Impliziten-Expliziten Zeitbereichsalgorithmus für  $\beta \in [0, 1]$  und  $\gamma \in [0.5, 1]$  wird nach der Vorgehensweise, die in Abschnitt 5.1.4 beschrieben ist, aufgenommen. Der Stabilitätsgraph ist in Abb. 6.12 angegeben.

Für die Microdisc mit PML in  $\rho$ -Richtung besitzt der Stabilitätsgraph einen Bereich, der als instabil gekennzeichnet ist. Er liegt an der  $\gamma$ -Achse für kleine Werte von  $\beta$ . Das Wertepaar für  $\beta = 0$  und  $\gamma = 0.5$ , das dem Standard *Leapfrog-Verfahren* entspricht, liegt hier gerade im stabilen Bereich. Der Stabilitätsgraph der Microdisc ist dem für das Beispiel aus Abschnitt 5.2.4 sehr ähnlich. Daraus folgt, dass für andere Beispiele, die nur eine  $\rho$ -PML besitzen, ein sehr ähnlicher Stabilitätsgraph zu erwarten ist.

Hier wurde das Energiekriterium auf  $-80$  dB eingestellt und auch bei einem Energiekriterium von  $-120$  dB war die Energie für das *Leapfrog-Verfahren* noch monoton fallend. In Abschnitt 5.2.2 wurden für ein Beispiel mit *Leapfrog-Verfahren* Eigenwerte gefunden, die nicht dem Stabilitätskriterium genügen. Somit kann auf Grund des hier ermittelten Stabilitätsgraphen nicht der Schluss gezogen wer-

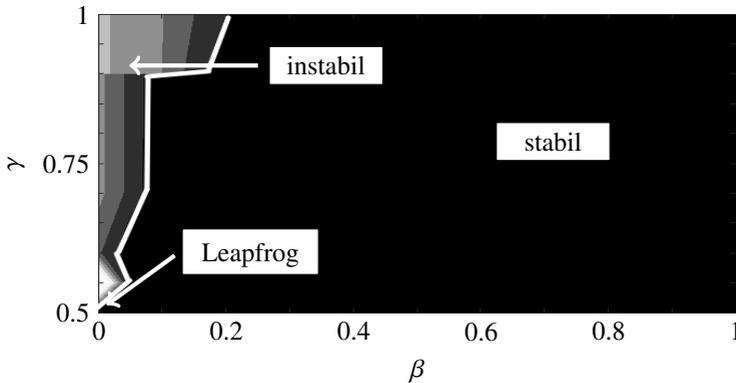


Abbildung 6.12: Stabilitätsgraph der Microdisc für 10 LPW und 6 Lagen PML in  $\rho$ -Richtung. Eine dunklere Farbe entspricht einer höheren Anzahl an Zeitschritten die gerechnet werden kann, ohne dass die Energie wieder anfängt zu steigen.

den, dass das *Leapfrog-Verfahren* immer in dem als stabil gekennzeichneten Bereich fällt. Es ist möglich, dass bei einer Simulation bis  $-120$  dB die Zeitschritte noch nicht ausreichend waren, um ein mögliches wieder ansteigen der Energie zu detektieren.

Daraus folgt für die PML in  $\rho$ -Richtung, dass sie nicht in dem Maße wie die  $z$ -PML zur Instabilität des zeitdiskreten Systems beiträgt. Vergleichsweise besitzt der Stabilitätsgraph der  $z$ -PML für alle Beispiele dieser Arbeit noch einen zweiten als instabil gekennzeichneten Bereich für alle Werte von  $\beta$  für Werte von  $\gamma$ , die etwas größer als 0.5 sind. Das Wertepaar mit  $\beta = 0$  und  $\gamma = 0.5$ , das dem *Leapfrog-Verfahren* entspricht, lag für beide Stabilitätsgraphen im stabilen Bereich.

## 6.3 Zusammenfassung und Diskussion

In diesem Kapitel wurden die beiden Standard Zeitbereichsverfahren und der *Hybride Implizite-Explizite Algorithmus* mit PML an zwei Beispielen aus der Optik näher untersucht. Dabei konnten die Simulationsergebnisse validiert und im An-

schluss die Stabilität der Zeitbereichsverfahren analysiert werden. Für den PML Rand in  $z$ -Richtung wurde ein VCSEL verwendet und für den PML-Rand in  $\rho$ -Richtung eine Microdisc.

Bei der Validierung der Simulationsbeispiele konnte für beide Anordnungen gezeigt werden, dass die Lösungen der Referenzlösung entsprechen. Damit kann auch die Funktion des implementierten absorbierenden Randes bestätigt werden. Ein wichtiger Hinweis dafür lieferte die Simulation des VCSEL mit dem Resultat, dass die Mode im Inneren der Kavität eine gaußförmige Verteilung besitzt. Denn im Fall eines nicht funktionierenden absorbierenden Randes müssten sich an entsprechender Stelle BESSELfunktionen als Lösung einstellen. Dies konnte hier mit der Betrachtung der Feldverteilung widerlegt werden. Die Konvergenz von Güte und Resonanz bestätigen dies zusätzlich. Denn die Güte stellt eine wichtige Größe dar, die durch die Struktur selbst bestimmt wird. Sie wurde im Abschnitt 2.2 als Verhältnis der im Resonator gespeicherten Energie zur verbrauchten Leistung abgegeben. Für den VCSEL und die Microdisc entspricht die verbrauchte Leistung der Abstrahlung in den Freiraum. Folglich kann diese Größe nur dann fehlerfrei berechnet werden, wenn der absorbierende Rand richtig funktioniert.

Die Analyse der Stabilität hat für die unterschiedlichen Verfahren Ergebnisse geliefert, die mit denen aus Kapitel 5 übereinstimmen. Für das *Leapfrog-Verfahren* kann hier festgehalten werden, dass es in den meisten Fällen, aber besonders bei Anwendungen mit PML in  $z$ -Richtung, zu Problemen mit der Stabilität gekommen ist. Detektiert wird diese hier durch ein wieder Ansteigen der Energie im Rechengebiet. Dies kann bereits nach wenigen hundert Zeitschritten passieren oder erst sehr viel später. Für die PML am  $\rho$ -Rand war das Verfahren meistens stabil. Das *Exponentielle Zeitbereichsschema* verhält sich ähnlich wie das *Leapfrog-Verfahren*. Für einige Strukturen konnte ein instabiles Verhalten gezeigt werden und für manche nicht.

Für das *Hybride Implizite-Explizite Zeitbereichsschema* konnten für beide PML Typen Stabilitätsgrafen ermittelt werden, die denen aus Kapitel 5 sehr ähnlich sind. Dies lässt den Schluss zu, dass für andere Simulationsanordnungen ein ähnliches Verhalten resultiert. Damit bietet das *Hybride Implizite-Explizite Zeitbereichsschema* eine gute Lösung, wenn die gängigen Verfahren keine stabile Simulation gewährleisten. Ein Wertepaar  $\beta, \gamma$  sollte sich im Voraus in guter Näherung so bestimmen lassen, dass das resultierende zeitdiskrete System stabil ist. Damit ist es möglich, Bauteile mit hohen Güten, die dementsprechend langsamer

abklingende Zeitsignale besitzen, zu simulieren, ohne dass die Energie zu einem späteren Zeitpunkt der Simulation wieder beginnt unphysikalisch anzusteigen.



# 7 Zusammenfassung und Ausblick

Für Zeitbereichssimulationen mit PML Randbedingungen wird immer wieder über instabiles Verhalten berichtet. Erkennen lässt sich ein instabiles System in der Zeitbereichssimulation dann, wenn der oder die Pole, die nicht das Stabilitätskriterium erfüllen, dominant werden. Ist dies eingetreten, lässt sich ein unphysikalisches Ansteigen im Verlauf der bereits abklingenden Energie feststellen. Für Anwendungen mit hoher Güte sind im Zeitbereich lange Simulationen erforderlich, da die Energie nur sehr langsam abklingt. Deshalb lässt sich bei Bauteilen mit hoher Güte die Auswirkung der instabilen Pole besonders gut beobachten. Die Anwendungsbeispiele am Ende dieser Arbeit sind dementsprechend gewählt worden, es handelt sich um zwei Resonatoren aus der Optik.

Ziel dieser Arbeit war es, die gängigen Zeitdiskretisierungsverfahren mit PML, unter Verwendung der Methode der Finiten Integration, mit Hauptaugenmerk auf der Stabilität des zeitdiskreten Systems zu untersuchen. Dies führte zu neuen Erkenntnissen bezüglich der Stabilität. Auf deren Grundlage wurde ein neuer *Hybrider Impliziter-Expliziter* Zeitbereichsalgorithmus mit PML vorgestellt, der bezüglich der Instabilität durch die Zeitdiskretisierung der PML robuster ist.

Die Arbeit beginnt mit einer kurzen Einführung, gefolgt von physikalischen Grundlagen. Es wurden grundlegende Konzepte optischer Resonatoren skizziert und die am Ende der Arbeit verwendeten Simulationsbeispiele vorgestellt. Danach werden die Grundlagen, sowie für die Arbeit relevante Aspekte der Methode der Finiten Integration, angegeben. Dabei wird besonders auf die Zeitdiskretisierung eingegangen, indem verschiedene Standardverfahren mit und ohne Leitfähigkeit vorgestellt werden. Hier wird bereits der Aspekt der Stabilität zeitdiskreter Systeme diskutiert. An Hand der Eigenwerte eines zeitdiskreten Systems kann die Stabilität und der Einfluss verschiedener Parameter auf die Zeitdiskretisierung diskutiert werden. Für die Standardverfahren ist dies analytisch möglich, sodass Bedingungen existieren, für die immer ein stabiles System resultiert.

Die PML, die eine Erweiterung des Rechengebietes darstellt, wird hier mit Hilfe der Koordinatenstreckung im vierten Kapitel eingeführt. Es werden zwei Standardzeitdiskretisierungsverfahren mit PML angegeben, das *Leapfrog-Verfahren* und das *Exponentielle Zeitbereichsschema*. Außerdem wird ein neuer räumlich hybrider Zeitbereichsalgorithmus eingeführt, der es erlaubt, innerhalb der PML implizit und im restlichen Rechengebiet explizit zu rechnen. Der hybride Ansatz und die Zeitdiskretisierungsverfahren sind für sich alleinstehend gängige Methoden und werden hier erstmals in dieser Art und Weise zum Erhalten eines diskreten Zeitbereichsschemas mit PML verwendet. Ein Vorteil des *Hybriden Impliziten-Expliziten Zeitbereichsverfahrens* ist, dass im Bereich der PML zwei zusätzliche Parameter existieren, mit denen man in entsprechender Kombination ein stabiles Zeitintegrationsverfahren realisieren kann, wo sonst die klassischen Verfahren versagen. Des Weiteren wird im Bereich des restlichen Rechengebietes nicht vom Standardverfahren abgewichen, sodass die Lösung dieses Gebietes nicht verändert wird.

Im darauffolgenden 5. Kapitel werden alle drei Zeitbereichsverfahren an kleinen Simulationsbeispielen bezüglich ihrer Stabilität untersucht. Dazu werden die Eigenwerte des zeitdiskreten Systems für die Standardzeitbereichsverfahren mit PML ermittelt und ihre Konvergenz bezüglich des Zeitschrittes überprüft. Es kann gezeigt werden, dass manche Problemstellungen unter der Verwendung der gängigen Zeitdiskretisierungsverfahren, instabile Pole besitzen. Diese konvergieren für einen Zeitschritt, der gegen Null geht, für alle Zeitschemata gegen denselben Pol. Die konvergierten Pole genügen der Stabilitätsanforderung. Simulationen mit Polen, die nicht dieses Kriterium erfüllen (das System ist somit instabil), zeigen in der Zeitbereichssimulation zu einem beliebigen Zeitpunkt ein unphysikalisches Ansteigen der Energie und somit auch der Feldgrößen.

Die nähere Betrachtung der Eigenwerte von instabilen Systemen zeigt, dass es sich weder um eine Verletzung des CFL-Kriteriums noch um eine sogenannte „Langzeitinstabilität“, die durch die räumliche Diskretisierung hervorgerufen wird, handelt. Hier hat man es mit einem neuen Typen von Instabilität zu tun, der direkt durch die Zeitdiskretisierung selbst verursacht wird.

Dieselben Beispiele werden auch mit dem neuen hybriden Verfahren simuliert und das Verhalten bezüglich der Stabilität in Abhängigkeit der zusätzlich einstellbaren Parameter untersucht. Ob das System für ein bestimmtes Wertepaar stabil oder instabil ist, wird in einem Stabilitätsgrafen angegeben. Es gibt auch hier Wertepaare, für die das zeitdiskrete System instabil ist. Aber der Anteil der Wer-

---

tepaare, die in einem stabilen System resultieren, überwiegen. Des Weiteren sind für diese einfachen Beispiele die Bereiche, die ein instabiles zeitdiskretes System zur Folge haben immer in denselben Gebieten zu finden. Dies lässt den Schluss zu, dass für weitere Simulationsbeispiele ähnliche Ergebnisse für den Stabilitätsgraphen zu erwarten sind.

Die Zeitbereichsverfahren mit PML werden anschließend in Kapitel 6 an praxisrelevanten Simulationsbeispielen aus der Optik getestet. Dabei handelt es sich um einen Oberflächenemitter (VCSEL) und eine Microdisc. Zunächst werden die Simulationsbeispiele mit der Hilfe von Referenzwerten überprüft. Anschließend wird die Stabilität der Verfahren untersucht. Dabei zeigen sich erneut Stabilitätsprobleme bei den Standard Zeitdiskretisierungsverfahren. Für den *Hybriden Impliziten-Expliziten Algorithmus* wird wieder ein Stabilitätsgraph aufgenommen. Bei diesem können, wie bei den Testbeispielen aus dem Kapitel zuvor, sehr ähnliche Bereiche als stabil und instabil detektiert werden. Dies unterstützt die aufgestellte Vermutung, dass sich für andere Anwendungen ähnliche Ergebnisse erzielen lassen. Es ist zu erwarten, dass sich immer zuverlässig eine Parameterwahl finden lässt, die ein stabiles zeitdiskretes System ergibt.

Ein wichtiger Aspekt des neuen hybriden Verfahrens ist noch seine Performanz. Für den Fall, dass man bereits sicher weiß, dass mit den Standardzeitbereichsverfahren kein stabiles System erhalten wird, hat man als einzige Lösung, den Zeitschritt deutlich kleiner zu machen. Denn es konnte gezeigt werden, dass für einen Zeitschritt gegen null immer alle Eigenwerte gegen eine stabile Lösung konvergieren. Ist also der Zeitschritt nur klein genug gewählt, wird man ein stabiles zeitdiskretes System erhalten. Bei einer Halbierung des Zeitschrittes würde dies zum Beispiel zu einer Verdopplung der Anzahl an Zeitschritten und somit direkt zur Verdopplung des Zeitaufwandes führen. Entscheidet man sich jedoch dafür, den Zeitschritt kurz unterhalb der CFL-Schranke zu belassen und verwendet stattdessen den neuen *Hybriden Impliziten-Expliziten Algorithmus*, dann steigt zwar auch der Aufwand, aber – wie gezeigt werden konnte – in einem vertretbaren Maße. An dieser Stelle wäre es denkbar, die übliche kanonische Indizierung des Rechengebietes aufzugeben. Denn wenn man zuerst das Rechengebiet ohne PML durchnummerieren würde und dann das Gebiet der PML, könnten für alle drei Raumrichtungen die Matrizen – nach den beiden Gebieten – getrennt aufgeschrieben werden. Somit wäre es möglich, den aufwendigeren Teil des Zeitupdates nur für den PML Bereich getrennt mit erheblich kleineren Matrizen und Vektoren zu rechnen.



# Symbolverzeichnis

## Allgemeine Symbole und Schreibweisen

$\vec{X}, \vec{x}$	Vektordarstellung
$\vec{r}, \vec{n}, \vec{t}$	Ortsvektor, Normalvektor, Tangentialvektor
$\vec{e}_u, \vec{e}_v, \vec{e}_w$	Einheitsvektoren in $u$ -, $v$ - und $w$ -Richtung
$V, A, s$	Volumen, Fläche, Strecke
$ds, dA, dV$	Weg-, Flächen- und Volumenelement
$\frac{d}{dt}, \frac{\partial}{\partial t}$	Zeitableitung und partielle Zeitableitung
$\mathbf{X}, \mathbf{x}$	Matrixdarstellung
$\mathbf{X}_{i,j}, \mathbf{x}_{i,j}$	Element einer Matrix
$\mathbf{I}$	Identitätsmatrix
$\underline{z} = a + jb$	Komplexe Zahlendarstellung
$\Re\{z\}, \Im\{z\}$	Realteil und Imaginärteil einer komplexen Zahl
$J, J'$	Besselfunktion und erste Ableitung der Besselfunktion
$H, H'$	Hankelfunktion und erste Ableitung der Hankelfunktion
$Y$	Neumannfunktion

## Klassische Feldtheorie

$\vec{E}$	Elektrische Feldstärke
$\vec{D}$	Dielektrische Verschiebung
$\vec{H}$	Magnetische Feldstärke
$\vec{B}$	Magnetische Flußdichte
$\vec{J}, \vec{J}_e, \vec{J}_k$	Elektrische Stromdichte, eingeprägte elektrische Stromdichte, Konvektionsstromdichte
$\varrho$	Raumladungsdichte
$\varrho_L$	Bewegte Ladung
$\epsilon_0, \epsilon_r, \overline{\overline{\epsilon}}$	Permittivität des Vakuums, relative Permittivität, Tensor der Permittivität
$\mu_0, \mu_r, \overline{\overline{\mu}}$	Permeabilität des Vakuums, relative Permeabilität, Tensor der Permeabilität
$\kappa, \sigma$	elektrische Leitfähigkeit, magnetische Leitfähigkeit
$n$	Optische Brechzahl
$\vec{P}, \vec{M}$	Elektrische Polarisation, Magnetische Polarisation
$Z$	Wellenwiderstand
$\vec{k}$	Wellenvektor
$c_0$	Lichtgeschwindigkeit im Vakuum
$f, f_{cut}$	Frequenz, Cutoff Frequenz
$\lambda$	Wellenlänge
$\omega, \underline{\omega}$	Kreisfrequenz, komplexe Kreisfrequenz
$r, t$	Reflexionsfaktor, Transmissionsfaktor
<b>G</b>	Rekursionsmatrix

$\underline{\lambda}_{TD}$	Komplexe Eigenwerte des Zeitbereichsschemas
$w(z), w_0$	Strahlallie des Gaußstrahls
$\Re(z)$	Ortsabhängiger Krümmungsradius des Gaußstrahls
$q$	Komplexer Strahlparameter des Gaußstrahls
$\Psi$	Langsam variierende Feldamplitude des Gaußstrahls
$g_i$	Resonatorparameter
$\Gamma$	Streckungsfaktor der Felder
$\overline{\Lambda}, \overline{\Lambda}_\varepsilon, \overline{\Lambda}_\mu$	Materialtensoren

## Methoden der finiten Integration

$N_P$	Anzahl der Gitterpunkte
$N_u, N_v, N_w$	Anzahl der Gitterpunkte in $u$ -, $v$ - und $w$ -Richtung
$M_u, M_v, M_w$	Inkrement für die $u$ -, $v$ - und $w$ -Richtung
$n$	Kanonischer Index
$\Delta, \Delta t$	Gitterschrittweite, Zeitschrittweite
$\bar{z}, \bar{\mathbf{e}}$	Elektrische Gitterspannung
$\bar{d}, \bar{\mathbf{d}}$	Dielektrischer Gitterfluss
$\bar{h}, \bar{\mathbf{h}}$	Magnetische Gitterspannung
$\bar{b}, \bar{\mathbf{b}}$	Magnetischer Gitterfluss
$\bar{j}, \bar{\mathbf{j}}$	Gitterstrom
$\Phi$	Integrierte elektrische Gitterspannung
$\Psi$	Integrierte magnetische Gitterspannung

$L, \tilde{L}$	Primäre Gitterkante, duale Gitterkante
$A, \tilde{A}$	Primäre Gitterfläche, duale Gitterfläche
$C, \tilde{C}$	Primäre Rotationsmatrix, duale Rotationsmatrix
$S, \tilde{S}$	Primäre Divergenzmatrix, duale Divergenzmatrix
$\mathbf{P}_u, \mathbf{P}_v, \mathbf{P}_w$	Diskrete partielle Differentiationsoperatoren für die $u$ -, $v$ - und $w$ -Richtung
$\mathbf{M}_\varepsilon$	Materialmatrix der Permittivität
$\mathbf{M}_\mu$	Materialmatrix der Permeabilität
$\mathbf{M}_\kappa$	Materialmatrix der Leitfähigkeit
$\mathbf{M}_{\kappa_n}, \mathbf{M}_{\kappa_{t1}}, \mathbf{M}_{\kappa_{t2}}$	Elektrische Leitfähigkeit der PML
$\mathbf{M}_{\sigma_n}, \mathbf{M}_{\sigma_{t1}}, \mathbf{M}_{\sigma_{t2}}$	Elektrische Leitfähigkeit der PML
$\mathbf{D}$	Diagonalmatrizen
$\mathbf{G}(\Delta t)$	Rekursionsmatrix
$\mathbf{A}_{cc}$	Sytsematrix
$\Gamma_D, \Lambda_D$	Diskreter Streckungsfaktor, diskreter Materialtensor
$\mathcal{R}$	Analytisch bestimmte Reflexion der PML

# Abkürzungsverzeichnis

<b>BEM</b>	Methode der Randelemente, engl.: Boundary Element Methode
<b>CFL</b>	COURANT-FRIEDRICHS-LEWI Bedingung
<b>DBR</b>	Verteilter BRAGG-Spiegel, engl.: distributed BRAGG Reflector
<b>FD</b>	Methode der Finiten Differenzen, engl.: Finite Differences
<b>FDTD</b>	Methode der Finiten Differenzen im Zeitbereich, engl. Finite Differences in Time Domain
<b>FEM</b>	Methode der Finten Elemente, engl.: Finite Element Methode
<b>FIT</b>	Methode der Finiten Integration, engl.: Finite Integration Technique
<b>LPW</b>	Gitterlinien pro Wellenlänge, engl.: Lines Per Wavelength
<b>PBA</b>	Teilgefüllte Zellen, engl.: Perfect Boundary Approximation
<b>PEC</b>	Perfekt elektrisch leitendes Material, engl.:Perfect Electric Conductor
<b>PMC</b>	Perfekt magnetisch leitendes Material, engl.:Perfect Magnetic Conductor
<b>PML</b>	Perfekt angepasste Schicht, engl.: Perfectly Matched Layer
<b>TE</b>	Transversal elektrisch
<b>TM</b>	Transversal magentisch
<b>VCSEL</b>	Vertikal emittierender Laser, engl.: Vertical Cavity Surface Emitting Laser
<b>WGM</b>	engl.: Whispering Gallary Modes



# Literaturverzeichnis

## Analytische Feldtheorie

- [Hen20] Heino Henke. *Elektromagnetische Felder: Theorie und Anwendung*. 6. Aufl. Springer-Verlag, 2020.
- [Max73] James Clerk Maxwell. *A treatise on electricity and magnetism*. Bd. 1. Oxford: Clarendon Press, 1873.
- [Ray96] John William Strutt Baron Rayleigh. *The theory of sound*. Bd. 2. Macmillan, 1896.
- [Sim93] K Simonyi. *Theoretische Elektrotechnik*. 10. 1993.

## Optik

- [Deb+08] Pierluigi Debernardi u. a. “Modal Properties of Long-Wavelength Tunable MEMS-VCSELs With Curved Mirrors: Comparison of Experiment and Modeling”. In: *IEEE journal of quantum electronics* 44.4 (2008), S. 391–399.
- [DWH74] Raymond Dingle, William Wiegmann und Charles H Henry. “Quantum states of confined carriers in very thin Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As-GaAs-Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As heterostructures”. In: *Physical Review Letters* 33.14 (1974), S. 827.
- [Hal+62] Robert N Hall u. a. “Coherent light emission from GaAs junctions”. In: *Physical Review Letters* 9.9 (1962), S. 366.
- [HÖY13] Lina He, Şahin Kaya Özdemir und Lan Yang. “Whispering gallery microcavity lasers”. In: *Laser & Photonics Reviews* 7.1 (2013), S. 60–82.
- [Kne+20] Michael Kneissl u. a. *Semiconductor Nanophotonics: Materials, Models, and Devices*. Bd. 194. Springer Nature, 2020.

- 
- [KS08] Fritz Kurt Kneubühl und Markus Werner Sigrist. *Laser*. Springer-Verlag, 2008.
- [KL66] Herwig Kogelnik und Tingye Li. “Laser beams and resonators”. In: *Applied optics* 5.10 (1966), S. 1550–1567.
- [Mai60] TH Maiman. “Stimulated optical radiation in ruby masers”. In: *Nature London* 187 (1960), S. 493–494.
- [Mor+21] M. Svaluto Moreolo u. a. “Programmable VCSEL-based photonic system architecture for future agile Tb/s metro networks”. In: *J. Opt. Commun. Netw.* 13.2 (Feb. 2021), A187–A199. DOI: 10.1364/JOCN.411964. URL: <http://jocn.osa.org/abstract.cfm?URI=jocn-13-2-A187>.
- [Ric39] RD Richtmyer. “Dielectric resonators”. In: *Journal of Applied Physics* 10.6 (1939), S. 391–398.
- [Sod+79] Haruhisa Soda u. a. “GaInAsP/InP surface emitting injection lasers”. In: *Japanese Journal of Applied Physics* 18.12 (1979), S. 2329.
- [VI75] JP Van der Ziel und M Ilegems. “Multilayer GaAs-Al 0.3 Ga 0.7 As dielectric quarter wave stacks grown by molecular beam epitaxy”. In: *Applied Optics* 14.11 (1975), S. 2627–2630.
- [VP19] Edgar Voges und Klaus Petermann. *Optische Kommunikationstechnik: Handbuch für Wissenschaft und Industrie*. Springer-Verlag, 2019.
- [VD20] Frank Vollmer und Y Deshui. *Optical Whispering Gallery Modes for Biosensing*. Springer, 2020.
- [Xia+21] Yao Xiao u. a. “High efficiency and high power density VCSEL chip for 3D sensing”. In: *Vertical-Cavity Surface-Emitting Lasers XXV*. Hrsg. von Chun Lei und Kent D. Choquette. Bd. 11704. International Society for Optics and Photonics. SPIE, 2021. DOI: 10.1117/12.2578024. URL: <https://doi.org/10.1117/12.2578024>.
- [YY07] Amnon Yariv und Pochi Yeh. *Photonics: optical electronics in modern communications*. Bd. 6. Oxford University Press New York, 2007.

## Numerische Feldsimulation

- [ÅW13] Karl J Åström und Björn Wittenmark. *Computer-controlled systems: theory and design*. Courier Corporation, 2013.
- [CW07] J Chen und J Wang. “Stability condition for body-of-revolution finite-difference time-domain method”. In: *Electronics Letters* 43.21 (2007), S. 1126–1126.
- [CFL28] Richard Courant, Kurt Friedrichs und Hans Lewy. “Über die partiellen Differenzgleichungen der mathematischen Physik”. In: *Mathematische annalen* 100.1 (1928), S. 32–74.
- [Fus90] Mario Fusco. “FDTD algorithm in curvilinear coordinates (EM scattering)”. In: *IEEE Transactions on Antennas and Propagation* 38.1 (1990), S. 76–89.
- [Ged11] Stephen D Gedney. “Introduction to the finite-difference time-domain (FDTD) method for electromagnetics”. In: *Synthesis Lectures on Computational Electromagnetics* 6.1 (2011), S. 1–250.
- [Hol94] Richard Holland. “Finite-difference time-domain (FDTD) analysis of magnetic diffusion”. In: *IEEE transactions on electromagnetic compatibility* 36.1 (1994), S. 32–39.
- [Jac07] John David Jackson. *Classical electrodynamics*. John Wiley & Sons, 2007.
- [Kra90] Frank Krawczyk. *A contribution to the numerical calculation of static electromagnetic fields in unbounded domains*. Dissertation, 1990.
- [KK73] Raymond D Krieg und Samuel W Key. “Transient shell response by numerical time integration”. In: *International Journal for Numerical Methods in Engineering* 7.3 (1973), S. 273–286.
- [KC03] F Kung und HT Chuah. “Stability of classical finite-difference time-domain (FDTD) formulation with nonlinear elements—A new perspective”. In: *Progress In Electromagnetics Research* 42 (2003), S. 49–89.
- [LR56] Peter D Lax und Robert D Richtmyer. “Survey of the stability of linear finite difference equations”. In: *Communications on pure and applied mathematics* 9.2 (1956), S. 267–293.

- 
- [Mül+82] W Müller u. a. “Numerical solution of 2-or 3-dimensional nonlinear field problems by means of the computer program PROF1”. In: *Archiv für Elektrotechnik* 65.4-5 (1982), S. 299–307.
- [Mur81] Gerrit Mur. “Absorbing boundary conditions for the finite-difference approximation of the time-domain electromagnetic-field equations”. In: *IEEE transactions on Electromagnetic Compatibility* 4 (1981), S. 377–382.
- [New59] Nathan M Newmark. “A method of computation for structural dynamics”. In: *Journal of the engineering mechanics division* 85.3 (1959), S. 67–94.
- [Pet00] Peter G Petropoulos. “Numerical dispersion and absorbing boundary conditions”. In: *International Journal of Numerical Modelling: Electronic Networks, Devices and Fields* 13.5 (2000), S. 483–498.
- [RB00] Thomas Rylander und Anders Bondeson. “Stable FEM-FDTD hybrid methode for Maxwell’s equations”. In: *Computer Physics Communications* 125.1-3 (2000), S. 75–82.
- [Saa03] Yousef Saad. *Iterative methods for sparse linear systems*. SIAM, 2003.
- [TH+95] Allen Taflove, Susan C Hagness u. a. “Computational electrodynamics: the finite-difference time-domain method”. In: *Norwood, 2nd Edition, MA: Artech House, 1995* (1995).
- [TW93] P Thoma und T Weiland. “Calculation of Q-factors of lossy resonators in the time domain using the Prony-Pisarenko approximation”. In: *AIP Conference Proceedings*. Bd. 297. 1. American Institute of Physics. 1993, S. 66–73.
- [Wei83] Thomas Weiland. “On the computation of resonant modes in cylindrically symmetric cavities”. In: *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research* 216.3 (1983), S. 329–348.
- [Yee66] K.S. Yee. “Numerical Solution of Initial Boundary Value Problems Involving Maxwell’s Equations in Isotropic Media”. In: *IEEE Transactions on Antennas and Propagation* (17 1966), S. 585–589.
- [Zei12] Eberhard Zeidler. *Springer-Handbuch der Mathematik I: Begründet von IN Bronstein und KA Semendjaew Weitergeführt von G. Grosche, V. Ziegler und D. Ziegler Herausgegeben von E. Zeidler*. Bd. 1. Springer-Verlag, 2012.

## Finite Integrationstechnik

- [Deh93] Micha Dehler. *Numerische Lösung der Maxwellschen Gleichung auf kreiszylindrischen Gittern*. Dissertation D17. TH Darmstadt, 1993.
- [Doh92] Martin Dohlus. *Ein Beitrag zur numerischen Berechnung elektromagnetischer Felder im Zeitbereich*. Dissertation D17. TH Darmstadt, 1992.
- [ESW04] Fredrik Edelvik, Rolf Schuhmann und Thomas Weiland. “A general stability analysis of FIT/FDTD applied to lossy dielectrics and lumped elements”. In: *International Journal of Numerical Modelling: Electronic Networks, Devices and Fields* 17.4 (2004), S. 407–419.
- [Fis14] Christoph Fischer. *Behandlung aktiver Materialien in der Methode der Finiten Integration zur numerischen Simulation von zylindrischen Laserresonatoren*. Dissertation EIM-E/300. Universität Paderborn, 2014.
- [KKS16] S. Kirsch, L. Kuen und R. Schuhmann. “Accurate Treatment of Non-conformal Material Interfaces in the Finite Integration Technique”. In: *IEEE Transactions on Magnetics* 52.3 (2016), S. 1–4.
- [Kir10] Stefan Kirsch. “Absorbierende Randbedingungen für die kreiszylindrische Formulierung der Methode der Finiten Integration”. Diplomarbeit. Universität Paderborn, 1. Apr. 2010.
- [Kir16] Stefan Kirsch. *Cylindrical and Nonconformal Material Interfaces in the Finite Integration Technique*. Dissertation. TU Berlin, 2016.
- [KS13] Stefan Kirsch und Rolf Schuhmann. “Cylindrical FDTD with improved time step size based on hybrid Newmark-Beta discretization”. In: *2013 International Symposium on Electromagnetic Theory. IEEE*. 2013, S. 995–998.
- [Kri+98] Bernd Krietenstein u. a. “The perfect boundary approximation technique facing the big challenge of high precision field computation”. In: *Proceedings of the XIX International Linear Accelerator Conference (LINAC 98), Chicago, USA*. 1998, S. 860–862.
- [Rie89] Ulla van Rienen. *Zur numerischen Berechnung zeitharmonischer elektromagnetischer Felder in offenen, zylindersymmetrischen Strukturen unter verwendung von Mehrgitterverfahren*. Dissertation D17. TH Darmstadt, 1989.

- 
- [Sch99] Rolf Schuhmann. *Die Nichtorthogonale Finite-Integrations-Methode zur Simulation elektromagnetischer Felder*. Dissertation D17. TH Darmstadt, 1999.
- [SW01] Rolf Schuhmann und Thomas Weiland. “Conservation of discrete energy and related laws in the finite integration technique”. In: *Progress In Electromagnetics Research* 32 (2001), S. 301–316.
- [Tho97] Peter Thoma. *Zur numerischen Lösung der Maxwellschen Gleichungen im Zeitbereich*. Dissertation D17. TH Darmstadt, 1997.
- [Wei77] Thomas Weiland. “A Discretization Model for the Solution of Maxwell’s Equations for Six-Component Fields”. In: *Archiv Elektronik und Übertragungstechnik* 31 (1977), S. 116–120.
- [Wei86] Thomas Weiland. “Modes in Infinitely Repeating Structures of Cylindrical Symmetry”. In: *1986 Linear Accelerator Conference Proceedings Stanford Linear Accelerator Center*. Stanford University, Stanford, California, 1986, S. 992–995.
- [WS12] Thomas Weiland und Rolf Schuhmann. “Elektromagnetische Feldsimulation: Vorlesungsskript”. 2012.

## Perfectly Matched Layer

- [Ber96] J-P Berenger. “Perfectly matched layer for the FDTD solution of wave-structure interaction problems”. In: *IEEE Transactions on antennas and propagation* 44.1 (1996), S. 110–117.
- [Ber94] Jean-Pierre Berenger. “A perfectly matched layer for the absorption of electromagnetic waves”. In: *Journal of computational physics* 114.2 (1994), S. 185–200.
- [Che+13] Yiwang Chen u. a. “A cylindrical higher-order FDTD algorithm with PML and quasi-PML”. In: *IEEE transactions on antennas and propagation* 61.9 (2013), S. 4695–4704.
- [CW94] Weng Cho Chew und William H Weedon. “A 3D perfectly matched medium from modified Maxwell’s equations with stretched coordinates”. In: *Microwave and optical technology letters* 7.13 (1994), S. 599–604.

- [Ged96] Stephen D Gedney. “An anisotropic perfectly matched layer-absorbing medium for the truncation of FDTD lattices”. In: *IEEE transactions on Antennas and Propagation* 44.12 (1996), S. 1630–1639.
- [HL99] Jiang-Qi He und Qing Huo Liu. “A nonuniform cylindrical FDTD algorithm with improved PML and quasi-PML absorbing boundary conditions”. In: *IEEE transactions on geoscience and remote sensing* 37.2 (1999), S. 1066–1072.
- [Joh08] Steven G Johnson. “Notes on perfectly matched layers (PMLs)”. In: *Lecture notes, Massachusetts Institute of Technology, Massachusetts* 29 (2008), S. 23.
- [KM96] Mustafa Kuzuoglu und Raj Mittra. “Frequency dependence of the constitutive parameters of causal perfectly matched anisotropic absorbers”. In: *IEEE Microwave and Guided wave letters* 6.12 (1996), S. 447–449.
- [LH98] QH Liu und JQ He. “Quasi-PML for waves in cylindrical coordinates”. In: *Microwave and Optical Technology Letters* 19.2 (1998), S. 107–111.
- [Sac+95] Zachary S Sacks u. a. “A perfectly matched anisotropic absorber for use as an absorbing boundary condition”. In: *IEEE transactions on Antennas and Propagation* 43.12 (1995), S. 1460–1463.
- [TC97a] FL Teixeira und WC Chew. “PML-FDTD in cylindrical and spherical grids”. In: *IEEE microwave and guided wave letters* 7.9 (1997), S. 285–287.
- [TC97b] FL Teixeira und Weng Cho Chew. “Systematic derivation of anisotropic PML absorbing media in cylindrical and spherical coordinates”. In: *IEEE microwave and guided wave letters* 7.11 (1997), S. 371–373.
- [Zha00] Li Zhao. “The generalized theory of perfectly matched layers (GT-PML) in curvilinear co-ordinates”. In: *International Journal of Numerical Modelling: Electronic Networks, Devices and Fields* 13.5 (2000), S. 457–469.

- 
- [ZC96] Li Zhao und Andreas C Cangellaris. “GT-PML: Generalized theory of perfectly matched layers and its application to the reflectionless truncation of finite-difference time-domain grids”. In: *IEEE transactions on Microwave Theory and Techniques* 44.12 (1996), S. 2555–2563.
- [Zis97] RW Ziskowski. “The design of Maxwellian absorbers for numerical boundary conditions and for practical applications using engineered artificial materials”. In: *IEEE Transactions on Antennas and Propagation* 45.4 (1997), S. 656–671.

## Software

- [3DS19] CST Studio Suite 2019 3DS Simulia. 2019. URL: <https://www.3ds.com/de/produkte-und-services/simulia/produkte/cst-studio-suite/>.
- [Joh06] S.G. Johnson. *Harminv*. Version 1.3.1.2006. 2006. URL: <http://ab-initio.mit.edu/wiki/index.php/Harminv>.
- [Mat19] Inc. *MATLAB* 9.3.0 MathWorks. 2019. URL: <http://mathworks.com/products/matlab/>.
- [Wol18] Inc. *Mathematica*. Version 11.3 Wolfram Research. 2018.

## Eigene Veröffentlichungen im Rahmen dieser Arbeit

- [JKS17] Philipp Jorkowski, Lilli Kuen und Rolf Schuhmann. “Spectral analysis of finite difference models of open structures in time and frequency domain”. In: *2017 XXXIInd General Assembly and Scientific Symposium of the International Union of Radio Science (URSI GASS)*. IEEE. 2017, S. 1–4.
- [KJS17b] Lilli Kuen, Philipp Jorkowski und Rolf Schuhmann. “Spectral stability of PML implementations in time domain for resonators with radiation losses”. In: *2017 International Conference on Electromagnetics in Advanced Applications (ICEAA)*. IEEE. 2017, S. 1387–1390.

- [KS18b] Lilli Kuen und Rolf Schuhmann. “Quality Factor Computation in Time Domain for Cylindrical Optical Cavities”. In: *2018 IEEE International Symposium on Antennas and Propagation & USNC/URSI National Radio Science Meeting*. IEEE. 2018, S. 1159–1160.
- [KS20] Lilli Kuen und Rolf Schuhmann. “Study on the Stability of Perfectly Matched Layer Implementations Using a Hybrid Implicit–Explicit Update Scheme”. In: *IEEE Transactions on Magnetics* 56.2 (2020), S. 1–4.
- [KS] Lilli Kuen und Rolf Schuhmann. “Analysis of the Radial PML in Cylindrical Finite Integration Technique Using a Hybrid Implicit–Explicit Update Scheme”. In: *2021 XXXIVth General Assembly and Scientific Symposium of the International Union of Radio Science (URSI GASS)*. IEEE, S. 1–4.

## Eigene Vorträge und Posterpräsentationen

- [KJS17a] Lilli Kuen, Philipp Jorkowski und Rolf Schuhmann. *Spectral Stability of PML Implementations in Time Domain for Resonators with Radiation Losses*. International Conference on Electromagnetics in Advanced Applications. Verona, Italien. Sep. 2017.
- [KSS16] Lilli Kuen, Friederike Schmidt und Rolf Schuhmann. *Challenges of Time Domain Simulations for Cylindrical Cavities with the Finite Integration Technique*. Matheon-Workshop “9th Annual Meeting Photonic Devices”. Berlin, Deutschland. März 2016.
- [KS15a] Lilli Kuen und Rolf Schuhmann. *Simulation of Cylindrical Optical Cavities with the Finite Integration Technique*. 26th Workshop on “Advances in Electromagnetic Research”. Riezlern, Österreich. Aug. 2015.
- [KS15b] Lilli Kuen und Rolf Schuhmann. *Time Domain Simulations for Cylindrical Cavities with the Finite Integration Technique*. 27th Workshop on “Advances in Electromagnetic Research”. Hirschegg, Österreich. Aug. 2015.

- 
- [KS17] Lilli Kuen und Rolf Schuhmann. *Spectral Stability of PML Implementations in Time Domain for Resonators with Radiation Losses*. 28th Workshop on “Advances in Electromagnetic Research”. Riezlern, Österreich. Sep. 2017.
- [KS18a] Lilli Kuen und Rolf Schuhmann. *How the PML Affects the Q-Factor Computation in Optical Cavities*. 29th Workshop on “Advances in Electromagnetic Research”. Riezlern, Österreich. Aug. 2018.
- [KS18c] Lilli Kuen und Rolf Schuhmann. *Quality Factor Computation in Time Domain for Cylindrical Optical Cavities*. APS/URSI, Boston, Massachusetts. Juli 2018.
- [KS19a] Lilli Kuen und Rolf Schuhmann. *Analysis of Cylindrical Open Resonator in Time Domain with Absorbing Boundary Condition*. 30th Workshop on “Advances in Electromagnetic Research”. Hirschegg, Österreich. Aug. 2019.
- [KS19b] Lilli Kuen und Rolf Schuhmann. *Hybrid Time Domain Integration Scheme for the Analysis of Cylindrical Resonator with Absorbing Boundary Condition*. “Kleinheubacher Tagung 2019”, Miltenberg, Deutschland. Sep. 2019.
- [KS19c] Lilli Kuen und Rolf Schuhmann. *Radial PML in Cylindrical Finite Integration Technique Using a Hybrid Implicit-Explicit Update Scheme*. 31th Workshop on “Advances in Electromagnetic Research”. Online Workshop. Aug. 2019.
- [KS19d] Lilli Kuen und Rolf Schuhmann. *Study on the Stability of Perfectly Matched Layer Implementations Using a Hybrid Implicit-Explicit Update Scheme*. COMPUMAG 2019, the 22nd International “Conference on the Computation of Electromagnetic Fields”. Paris, Frankreich. Juli 2019.

## Betreute Studentische Arbeiten

- [But16] Ramon Butter. “Untersuchungen zur numerischen Lösung der nicht-linearen Schrödinger-Gleichung in Lichtwellenleitern”. Bachelorarbeit. Technische Universität Berlin, 17. Okt. 2016.

- [Sau18] Elias Sautter. “Operatorbasierte offene Randbedingung für elektromagnetische Feldsimulationen in Zylinderkoordinaten”. Bachelorarbeit. Technische Universität Berlin, 27. Sep. 2018.
- [Sch15] Friederike Schmidt. “Effiziente Simulation optischer Kavitäten mit gekrümmten Spiegeln”. Masterarbeit. Technische Universität Berlin, 26. Dez. 2015.