# Zur Reduzierung der Modellordnung in elektromagnetischen Feldsimulationen



**Cuvillier Verlag Göttingen** 

## Zur Reduzierung der Modellordnung in elektromagnetischen Feldsimulationen

Vom Fachbereich Elektrotechnik und Informationstechnik der Technischen Universität Darmstadt

> zur Erlangung der Würde eines Doktor-Ingenieurs (Dr.-Ing.) genehmigte

#### DISSERTATION

von Dipl.-Ing. Tilmann Wittig geboren am 12. Mai 1972 in Leverkusen

Darmstadt 2003

Referent: Korreferent: Prof. Dr.-Ing. Thomas Weiland Prof. Dr. Wilhelmus H. A. Schilders

Tag der Einreichung: Tag der mündlichen Prüfung: 31. Oktober 2003

02. September 2003

D 17 Darmstädter Dissertation

#### **Bibliografische Information Der Deutschen Bibliothek**

Die Deutsche Bibliothek verzeichnet diese Publikation in der Deutschen Nationalbibliografie; detaillierte bibliografische Daten sind im Internet über <u>http://dnb.ddb.de</u> abrufbar.

1. Aufl. - Göttingen : Cuvillier, 2004 Zugl.: Darmstadt, Techn. Univ., Diss., 2003 ISBN 3-86537-208-2

© CUVILLIER VERLAG, Göttingen 2004 Nonnenstieg 8, 37075 Göttingen Telefon: 0551-54724-0 Telefax: 0551-54724-21 www.cuvillier.de

Alle Rechte vorbehalten. Ohne ausdrückliche Genehmigung des Verlages ist es nicht gestattet, das Buch oder Teile daraus auf fotomechanischem Weg (Fotokopie, Mikrokopie) zu vervielfältigen. 1. Auflage, 2004 Gedruckt auf säurefreiem Papier

ISBN 3-86537-208-2

# Inhaltsverzeichnis

<b>1</b>	$\mathbf{Ein}$	leitung	g 1			
	1.1	Einfüł	nrung			
	1.2	Übers	icht			
<b>2</b>	Die Methode der Finiten Integration 5					
	2.1	Die M	axwellschen Gleichungen			
		2.1.1	Materialeigenschaften			
	2.2	Diskre	etisierung der Maxwellschen Gleichungen			
		2.2.1	Die Gitter-Maxwellgleichungen			
		2.2.2	Materialdiskretisierung			
		2.2.3	Randbedingungen und Anregung des Rechengebiets 14			
3	FIT	in Sy	stemdarstellungen 27			
	3.1	Zustai	ndsraumdarstellung der Impedanz			
		3.1.1	Klassischer Zustandsraum			
		3.1.2	Curl-Curl-Formulierung			
		3.1.3	Systeme höheren Grades			
	3.2	System	neigenschaften			
		3.2.1	Kausalität			
		3.2.2	Stabilität			
		3.2.3	Passivität von Impedanzfunktionen			
		3.2.4	Steuerbarkeit und Beobachtbarkeit			
	3.3	Streup	parameter $\ldots \ldots 42$			
		3.3.1	Grundlagen			
		3.3.2	Streuparameter aus Impedanzmatrizen			
		3.3.3	Zustandsraumdarstellung der Streuparameter 45			
<b>4</b>	Red	Reduzierung der Modellordnung 47				
	4.1	Einführung				
	4.2	4.2 Mathematische Grundlagen				
		4.2.1	Ordnungsreduktion durch Projektion			
		4.2.2	Krylov-Unterraum-Verfahren			
	4.3	Verfah	ren zur Reduktion der Modellordnung			

		4.3.1 Partielle Realisierungen	57		
		4.3.2 Korrigierte Modalanalyse	70		
		4.3.3 Padé-Approximationen	72		
		4.3.4 Two-Step-Lanczos	85		
		4.3.5 Weitere Verfahren	90		
<b>5</b>	Spel	tralschätzung aus Zeitbereichsdaten	93		
	5.1	FIT-Simulationen im Zeitbereich	93		
	5.2	Filterbasierte Spektralschätzung	95		
		5.2.1 ARMA-Modelle	96		
		5.2.2 Iterativer Prony und Verfahren nach Steiglitz-McBride	97		
		5.2.3 Ein Beispiel	98		
	5.3	4SID	.00		
6	Generierung von Ersatzschaltbildern				
	6.1	Einführung	01		
	6.2	Interpretation als Knotenanalysemodell	03		
		6.2.1 Lineare Systeme	04		
		6.2.2 Curl-Curl Systeme	05		
	6.3	Pol-Residuen-Darstellung	.09		
7	Anw	endungsbeispiele 1	11		
	7.1	Langer-Filter	11		
	7.2	6-Kreis Hohlleiter-Filter	22		
	7.3	Patchantenne	25		
	7.4	Chip-Interconnect-Modell	27		
8	Zusa	mmenfassung und Ausblick 1	31		
A	Der	Bi-Lanczos-Algorithmus 1	35		
Symbolverzeichnis					
Li	Literaturverzeichnis				
	Dankaogung				
Di	Danksagung				
W	Wissenschaftlicher Werdegang 1				

# Kapitel 1

## Einleitung

### 1.1 Einführung

Numerische Simulationsprogramme sind in den letzten Jahren zu unverzichtbaren Werkzeugen in vielen Bereichen der Ingenieurwissenschaften geworden. Simulationen ermöglichen beschleunigte Designoptimierung, ersparen häufig den Bau von Prototypen und entsprechen damit dem grundsätzlichen Trend zu immer kürzeren Entwicklungszyklen. Zudem ermöglicht die Simulation häufig Einblicke in Zusammenhänge, die aufgrund der Miniaturisierung in dieser Form messtechnisch gar nicht mehr erfasst werden können.

Einen besonders dynamischen Bereich stellt in diesem Zusammenhang die elektromagnetische Feldsimulation mit gitterbasierten Methoden dar. Dies beruht insbesondere auf dem rasanten Fortschreiten der Informationstechnologie in allen Bereichen der Technik und des alltäglichen Lebens sowie der damit einhergehenden Verwendung immer höherer Frequenzen in elektronischen Schaltungen.

Immer höher werdende Frequenzen haben in zweierlei Hinsicht Einfluss auf den Simulationsprozess: Zum Einen erfordern die kürzeren Wellenlängen die feinere räumliche Abtastung von Strukturen und führen auf immer größere Gleichungssysteme, die im Rahmen der Simulation gelöst werden müssen. Zum Anderen erhalten Feldeffekte auch immer größere Bedeutung in Bereichen, die bis vor kurzem komplett der Schaltkreissimulation zugerechnet wurden. So gewinnen Effekte wie Laufzeitverzögerungen, Nebensprechen oder Abstrahlung auch in klassischen Netzwerken oder sogar in einzelnen Teilen wie Chipzuleitungen und Steckverbindungen zunehmend an Bedeutung.

Da es auch in nächster Zukunft nicht möglich sein wird, ganze logische Schaltungen komplett durch Feldsimulationsprogramme zu erfassen, bleibt als Alternative die Verkopplung zweier separat arbeitender Simulationsprogramme zur Netzwerkund zur Feldsimulation. Eine weitere und komfortablere Möglichkeit stellt die Generierung so genannter Makromodelle dar, welche das Verhalten des feldbehafteten Bauteils im interessierenden Frequenzbereich durch ein System möglichst niedriger Ordnung beschreiben. Diese Modelle können beispielsweise in Form eines Ersatzschaltbildes in das Netzwerksimulationsprogramm einbezogen werden, womit zur Simulation des Gesamtsystems schließlich nur eine einzige Simulationsplattform benötigt wird.

Dass ein solches Modell mit stark reduzierter Modellordnung überhaupt existiert, wird anschaulich klar, wenn man bedenkt, dass das diskretisierte Modell Tausende bis hin zu Millionen von Unbekannten hat, während das Übertragungsverhalten im interessierenden Frequenzbereich oft nur eine kleine Anzahl von Polstellen besitzt.

Insbesondere wenn allein das Übertragungsverhalten einer feldbehafteten Struktur von Interesse ist, können Modelle reduzierter Ordnung jedoch auch direkt zur Lösung des diskretisierten Problems innerhalb der Feldsimulation herangezogen werden. Anstatt das Modell zu lösen, das sich aus der Diskretisierung ergibt und das häufig bis zu Millionen von Unbekannten hat, kann zunächst ein Reduzierungsschritt vorangestellt werden. Gelöst wird dann schließlich nur das System mit geringer Ordnung. Ein solches Vorgehen wird auch als *Fast Frequency Sweep* bezeichnet. Es ist offensichtlich, dass in diesem Fall die Rechenzeit zur Erstellung des Modells kleiner sein sollte als die Rechenzeit zur Lösung des unreduzierten Systems.

Makromodelle finden auch im Optimierungsprozess Anwendung, da das Verhalten bereits optimierter oder unveränderlicher Bereiche der Struktur durch ein nur einmalig zu erstellendes Modell erfasst werden kann, während der verbleibende Rest durch die Simulation beschleunigt optimiert werden kann. Auch wenn eine Teilstruktur innerhalb eines größeren Rechengebiets mehrfach vorkommt, kann der Einsatz eines Makromodells sinnvoll sein.

Es wird somit deutlich, dass je nach geplantem Einsatz des Modells die Schwerpunkte der Reduzierung unterschiedlich gewichtet sind: Soll das Modell für einen *Fast Frequency Sweep* verwendet werden, ist neben der Genauigkeit des Modells vor allem die Rechenzeit interessant, die zur Reduzierung benötigt wird. Wird das Modell jedoch nur ein einziges Mal erzeugt, um dann viele Male beispielsweise in einem Optimierungsprozess eingesetzt oder mit anderen Simulatoren verkoppelt zu werden, ist eine möglichst geringe Modellgröße und die Erhaltung physikalischer Eigenschaften wie Stabilität und Passivität von vorrangigem Interesse. Rechenzeit ist in diesem Fall nur von zweitrangiger Bedeutung.

Zum Auffinden eines reduzierten Modells wird im Rahmen dieser Arbeit ein sehr allgemeiner Projektionsansatz beschrieben und untersucht. Dieser ermöglicht unterschiedliche Varianten zur Wahl der Projektionsmatrizen. Als besonders geeignet erweisen sich dazu einzelne Feldlösungen, Eigenvektoren der betrachteten Polstellen, Taylormomente oder so genannte Krylov-Unterraum-Vektoren. Diese Varianten unterscheiden sich zum Teil deutlich in Rechenaufwand und resultierender Modellgröße.

Besonders die Kombination einer so genannten partiellen Realisierung basierend auf Krylov-Unterraum-Vektoren und einem momenten-basierten Verfahren zeigt sich als sehr effizient, was sowohl Rechenzeit als auch Modellgröße betrifft. Der unter dem Namen *Two-Step-Lanczos (TSL)* in dieser Arbeit vorgeschlagene Algorithmus erhält für resonante Systeme zusätzlich Stabilität und Passivität, läuft vollständig automatisiert ab und das resultierende Modell lässt sich auf einfache Weise als Ersatzschaltbild interpretieren.

Als alternatives Vorgehen wird ein Verfahren untersucht, bei dem das System zunächst mit einem sehr effizienten Zeitbereichslöser teilweise berechnet wird. Da bei resonanten Systemen die Signalamplitude jedoch nur sehr langsam abklingt, wird die Rechnung schließlich abgebrochen und das Übertragungsverhalten aus dem bereits berechneten Zeitsignal mittels moderner Signalverarbeitungsmethoden geschätzt.

### 1.2 Übersicht

Im Anschluss an diese Einleitung wird im Kapitel 2 die Methode der *Finiten Integration* vorgestellt. Da dieses Verfahren grundlegende physikalische Eigenschaften der kontinuierlichen Maxwellschen Gleichungen auch im Diskreten beibehält, ist es für die spätere Modellgenerierung besonders geeignet.

In Kapitel 3 werden die diskretisierten Modelle als Systeme betrachtet. Hierbei kommen klassische sowie erweiterte Zustandsraumdarstellungen zur Anwendung. Wichtige Systemeigenschaften wie Kausalität, Stabilität und Passivität werden ebenso betrachtet wie die Zusammenhänge zwischen den Impedanz- und den Streuparameter-Übertragungsfunktionen.

Kapitel 4 stellt den Kern der Arbeit dar und beschreibt den Prozess der Reduzierung der Ordnung mit Hilfe verschiedener Projektionsverfahren. Aus den jeweiligen Vorteilen einer partiellen Realisierung und einer momente-erhaltenden Padé-Approximation wird schließlich der *Two-Step-Lanczos*-Algorithmus abgeleitet und untersucht.

Verfahren zur Spektralschätzung aus Zeitsignalen werden als alternative Möglichkeit zur schnellen Berechnung des Übertragungsverhaltens einer Struktur in Kapitel 5 vorgestellt.

Kapitel 6 befasst sich mit unterschiedlichen Methoden, aus der Zustandsraumdarstellung des reduzierten Modells tatsächlich ein Netzwerk abzuleiten, das als Ersatzschaltbild verwendet werden kann. Das reduzierte System wird hierzu als Knotenanalysemodell interpretiert oder in eine Pol-Residuen-Darstellung überführt.

Die Vor- und Nachteile der verschiedenen Verfahren werden schließlich in Kapitel 7 anhand von vier praxisrelevanten Beispielen aus dem Hochfrequenzbereich verglichen. Dies sind zwei resonante Filterstrukturen, ein Antennenbeispiel sowie ein Chipgehäuse mit einer großen Zahl von Anschlüssen.

Die Arbeit schließt mit einer Zusammenfassung und einem Ausblick.

## Kapitel 2

## Die Methode der Finiten Integration

Die Maxwellschen Gleichungen und die zugehörigen Materialbeziehungen bilden die Grundlage der klassischen Elektrodynamik. Die Methode der Finiten Integration, die in diesem Kapitel vorgestellt werden soll, stellt eine Transformation dieser Gleichungen in einen diskreten Gitterraum dar, die wichtige physikalische Eigenschaften der Maxwellschen Gleichungen erhält.

Zunächst wird die Grundidee der Methode mit der Diskretisierunng der Gleichungen sowie der Materialbeziehungen beschrieben. Besondere Aufmerksamkeit erhalten frequenzabhängige Zusammenhänge wie dispersive Materialien und komplexe Berandungen des Rechengebiets wie Impedanzwände oder absorbierende Ränder, da diese bei der Interpretation des Modells als System von entscheidender Bedeutung sind.

#### 2.1 Die Maxwellschen Gleichungen

Früheste Beobachtungen sowohl elektrischer als auch magnetischer Phänomene reichen bereits in die Antike zurück. Erste quantitative Untersuchungen erfolgten jedoch erst im 18. Jahrhundert auf dem Gebiet der Elektrostatik durch H. Cavendish (1773) und C. A. de Coulomb (1785). Die Verkopplung elektrischer und magnetischer Felder wurde erstmals 1826 von A.-M. Ampère in einer ersten Fassung des Durchflutungsgesetzes erfasst, 1831 folgte M. Faraday durch Aufstellung des Induktionsgesetzes. James Clark Maxwell erweiterte schließlich 1873 die bestehenden Ansätze zu einer einheitlichen elektromagnetischen Theorie [1]. Sein wesentlicher Beitrag hierbei war in Deutung der Ableitung der elektrischen Flussdichte als Stromdichte im Durchflutungsgesetz. Die vier - heute nach ihm benannten - Gleichungen bilden seitdem die Grundlage der klassischen makroskopischen Elektrodynamik.

Die Maxwellschen Gleichungen verknüpfen fünf vektorielle Grundgrößen<sup>1</sup>, die elektrische Feldstärke  $\vec{E}$ , die elektrische Flussdichte  $\vec{D}$ , die elektrische Stromdichte  $\vec{J}$ , die magnetische Feldstärke  $\vec{H}$  sowie die magnetische Flussdichte  $\vec{B}$  und die skalare

<sup>&</sup>lt;sup>1</sup>Ein Verzeichnis der verwendeten Symbole und Schreibweisen findet sich im Anhang.

Raumladungsdichte  $\rho$ . Die ersten beiden Gleichungen setzen jeweils die zeitliche Ableitung einer Flussgröße über einer beliebigen Fläche A mit der über ihren Rand  $\partial A$ abfallenden Spannung in Verbindung, während die anderen beiden Gleichungen die in einem Volumen V eingeschlossene Ladung mit den Flüssen durch deren geschlossene Oberfläche  $\partial V$  in Beziehung setzen, bzw. die Nichtexistenz der Ladung zeigen. Für eine ausführliche Darstellung siehe z.B. [2, 3]. Unter der Annahme ruhender Medien lauten die Gleichungen:

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

$$\oint_{\partial A} \vec{H}(\vec{r},t) \cdot d\vec{s} = \int_{A} \left( \frac{\partial \vec{D}(\vec{r},t)}{\partial t} + \vec{J}(\vec{r},t) \right) \cdot d\vec{A} \qquad \forall A \subset \mathbb{R}^{3}, \qquad (2.1.1b)$$

$$\oint_{\partial V} \vec{D}(\vec{r},t) \cdot d\vec{A} = \int_{V} \rho(\vec{r},t) \, dV \qquad \forall V \subset \mathbb{R}^3, \qquad (2.1.1c)$$

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

Nach ihren Urhebern werden Gleichung 2.1.1a auch als Faradaysches, Gl. 2.1.1b als Ampèresches und Gl. 2.1.1c als Gaußsches Gesetz bezeichnet.

Die elektrische Stromdichte

$$\vec{J}(\vec{r},t) = \vec{J}_e(\vec{r},t) + \vec{J}_l(\vec{r},t) + \vec{J}_k(\vec{r},t)$$
(2.1.2)

in Gl. 2.1.1b stellt die Summe aus einer von außen eingeprägten Stromdichte  $\vec{J_e}$ , der sich aufgrund einer Leitfähigkeit im elektrischen Feld einstellenden Leitungsstromdichte  $\vec{J_l}$ , sowie der Konvektionsstromdichte  $\vec{J_k}$ , hervorgerufen durch von elektromagnetischen Kräften bewegten Ladungen, dar.

Durch Anwendung der Integralsätze von Gauß und Stokes lassen sich die Gleichungen in die inhaltlich identische differenzielle Darstellung überführen:

$$\operatorname{rot} \vec{E}(\vec{r},t) = -\frac{\partial \vec{B}(\vec{r},t)}{\partial t}, \qquad (2.1.3a)$$

$$\operatorname{rot} \vec{H}(\vec{r}, t) = \frac{\partial \vec{D}(\vec{r}, t)}{\partial t} + \vec{J}(\vec{r}, t), \qquad (2.1.3b)$$

$$\operatorname{div} \vec{D}(\vec{r}, t) = \rho(\vec{r}, t), \qquad (2.1.3c)$$

$$\operatorname{div} \vec{B}(\vec{r}, t) = 0. \tag{2.1.3d}$$

Die differenzielle Form der Maxwellschen Gleichungen ist nur vollständig, wenn zusätzlich die Stetigkeit der Vektorgrößen an Grenzflächen zwischen elektrisch oder magnetisch unterschiedlichen Medien eingehalten wird. Die entsprechenden Bedingungen lauten mit dem zur Grenzfläche normalen Vektor  $\vec{n}_{12}$ , der Oberflächenladung

 $\sigma_F$  und dem Oberflächenstrom  $\vec{J}_F$ 

$$\vec{n}_{12} \times (\vec{E}_2 - \vec{E}_1) = 0, \qquad \vec{n}_{12} \times (\vec{H}_2 - \vec{H}_1) = \vec{J}_F, \qquad (2.1.4a)$$

$$\vec{n}_{12} \cdot (\vec{D}_2 - \vec{D}_1) = \sigma_F, \qquad \vec{n}_{12} \cdot (\vec{B}_2 - \vec{B}_1) = 0.$$
 (2.1.4b)

#### Materialeigenschaften 2.1.1

Eine Verkopplung der Maxwellschen Gleichungen und damit die Möglichkeit sie zu lösen ist erst gegeben, wenn zusätzlich zu den Gln. 2.1.1 oder 2.1.3 die Beziehungen zwischen den Feldstärken und Flussdichten bekannt sind. Diese sind materialabhängig und für den allgemeinen inhomogenen und anisotropen Fall durch die folgenden Materialgleichungen beschrieben:

$$\vec{D}(\vec{r},t) = \vec{D}(\vec{E}(\vec{r},t)) = \varepsilon_0 \vec{E}(\vec{r},t) + \vec{P}(\vec{E},\vec{r},t), \qquad (2.1.5a)$$

$$\vec{B}(\vec{r},t) = \vec{B}(\vec{H}(\vec{r},t)) = \mu_0 \vec{H}(\vec{r},t) + \mu_0 \vec{M}(\vec{H},\vec{r},t), \qquad (2.1.5b)$$

$$\vec{J}_l(\vec{r},t) = \vec{J}_l(\vec{E}(\vec{r},t)) = \kappa \vec{E}(\vec{r},t).$$
 (2.1.5c)

Eine Flussgröße setzt sich demnach aus einem linearen Anteil des Vakuums zur Feldstärke sowie einem im Allgemeinen komplexen Einfluss des Materials zusammen, der durch die Polarisation  $\vec{P}$  und die Magnetisierung  $\vec{M}$  beschrieben wird. Hierbei wird zwischen dispersiven, anisotropen, nichtlinearen und frequenzabhängigen Effekten unterschieden. Für den linearen hysteresefreien Fall lassen sich die Materiale<br/>inflüsse mittels elektrischer und magnetischer Suszeptibilität<br/>stensoren $\vec{\chi}_e$ und  $\vec{\chi}_m$  angeben:

$$\vec{P}(\vec{r},t) = \varepsilon_0 \,\vec{\chi}_e(\vec{r},t) * \vec{E}(\vec{r},t) + \vec{P}_r(\vec{r}) \,,$$
 (2.1.6a)

$$\vec{M}(\vec{r},t) = \vec{\chi}_m(\vec{r},t) * \vec{H}(\vec{r},t) + \vec{M}_r(\vec{r}).$$
 (2.1.6b)

Die Ausdrücke  $\vec{P_r}$  und  $\vec{M_r}$  beschreiben eine permanente Polarisation bzw. Magnetisierung, wie sie beispielsweise in Elektreten oder Permanentmagneten auftreten, sie sollen im Folgenden als Null angenommen werden. Die Faltungsausdrücke<sup>2</sup> tragen der Zeitabhängigkeit der Materialparameter Rechnung und lassen sich durch einen Übergang in den Frequenzbereich<sup>3</sup> in multiplikative, komplexwertige Ausdrücke<sup>4</sup> umwandeln

$$\vec{D}(\vec{r},t) = \varepsilon_0 \, \vec{\varepsilon}_r(\vec{r},\omega) \cdot \vec{E}(\vec{r},\omega) \,, \qquad (2.1.7a)$$

$$\vec{B}(\vec{r},t) = \mu_0 \,\vec{\mu}_r(\vec{r},\omega) \cdot \vec{H}(\vec{r},\omega). \tag{2.1.7b}$$

Für die im Allgemeinen tensoriellen und komplexen relativen Permittivitäten und Permeabilitäten gilt  $\ddot{\varepsilon}_r=\vec{\chi}_e+1$  und  $\vec{\mu}_r=\vec{\chi}_m+1.$  Das frequenzabhängige Verhalten

<sup>&</sup>lt;sup>2</sup>Der Faltungsoperator \* repräsentiert die Vorschrift  $f(t) * g(t) = \int_{-\infty}^{\infty} f(\tau)g(t-\tau)d\tau$ . <sup>3</sup>Als *Frequenzbereich* wird das Ergebnis der Fouriertransformation  $H(\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} h(t) e^{-j\omega t} dt$ betrachtet.

<sup>&</sup>lt;sup>4</sup>Da sich weite Teile dieser Arbeit mit Frequenzbereichsbetrachtungen befassen, wird auf eine spezielle Markierung komplexer Größen verzichtet. Sind Verwechslungen nicht ausgeschlossen, wird der komplexe Term mit einem hochgestellten <sup>(c)</sup> markiert.

wird durch Wechselwirkungen auf atomarer oder molekularer Ebene unter Einfluss eines eingeprägten Feldes hervorgerufen. Auf Basis der verschiedenen Mechanismen lassen sich wiederum makroskopische Beschreibungen finden.

Für den Fall von Orientierungspolarisation, der auftritt, wenn die zugrundeliegenden Moleküle eine Dipolstruktur aufweisen, ergibt sich mit der materialabhängigen Relaxationszeit  $\tau$  die relative Permittivität zu

$$\varepsilon_r(\omega) = \varepsilon_\infty + \frac{(\varepsilon_s - \varepsilon_\infty)}{1 + j\omega\tau}.$$
 (2.1.8)

wobei  $\varepsilon_s$  und  $\varepsilon_{\infty}$  die Permittivitäten im statischen Fall und für den Grenzwert unendlich hoher Frequenzen beschreiben. Dieser Polarisationseffekt wird häufig auch als Debye-Dispersion bezeichnet.

Für unpolarisierte Medien wirkt der Mechanismus der elektronischen Polarisation, der mit der ebenfalls materialabhängigen Dämpfung  $\delta$  und der Resonanzfrequenz  $\omega_0$  durch die so genannte Lorentz-Dispersion beschrieben wird

$$\varepsilon_r(\omega) = \varepsilon_\infty + \frac{(\varepsilon_s - \varepsilon_\infty)\,\omega_0}{\omega_0^2 + 2\,\delta\,j\omega - \omega^2}\,. \tag{2.1.9}$$

Für Plasmen ergibt sich mit der Kollisionsfrequen<br/>z $\nu_c$ und der Plasmafrequenz $\omega_p$  die Drude-Dispersion zu

$$\varepsilon_r(\omega) = \varepsilon_\infty + \frac{\omega_p^2}{j\omega\nu_c - \omega^2}.$$
 (2.1.10)

Eine ausführliche Darstellung dispersiver Materialien findet sich in [2, 11, 12]. Neben der eigentlichen Materialdispersion werden die genannten Modelle auch häufig eingesetzt, um andere physikalische Phänomene zu beschreiben. Beispiele hierfür sind die so genannten Metamaterialien [15], mikroskopische Resonatorstrukturen, die makroskopisch betrachtet in gewissen Frequenzbereichen negative Werte für die Permittivität und die Permeabilität annehmen und sich ebenfalls durch Lorentz-Dispersion beschreiben lassen. Eine Näherung für Substratmaterialien, die einen frequenzunabhängigen Verlustwinkel aufweisen, lässt sich durch ein angepasstes Debye-Modell finden.

In vielen Fällen kann jedoch einfach von frequenzunabhängigen und isotropen Materialien ausgegangen werden, die sich durch die einfachen Materialbeziehungen darstellen lassen, wobei  $\varepsilon_r$  und  $\mu_r$  in Gl. 2.1.7 skalare zeitunabhängige Werte annehmen:

$$\vec{D} = \varepsilon_0 \,\varepsilon_r \vec{E} \,, \tag{2.1.11a}$$

$$\vec{B} = \mu_0 \,\mu_r \vec{H}.\tag{2.1.11b}$$

## 2.2 Diskretisierung der Maxwellschen Gleichungen

Mit den Maxwellgleichungen und den Materialbeziehungen ist eine Gesetzmäßigkeit gegeben, mit der unter Kenntnis aller aktuellen elektrischen und magnetischen Größen sowie aller Quellen die entsprechenden zukünftigen Werte eindeutig bestimmt werden können. Dies gilt auch für einzelne Raumteile, sofern die Feldwerte am Rand im betrachteten Zeitraum bekannt sind. Die geschlossene Lösbarkeit der gegebenen Gleichungen ist allerdings auf einfache geometrische Anordnungen beschränkt.

Abhilfe hierbei schaffen numerische Verfahren, die es ermöglichen, die Feldverteilung bei komplexen Geometrien näherungsweise zu lösen, indem sie die Komplexität der kontinuierlichen Feldgrößen durch eine endliche Anzahl von Zustandsgrößen modellieren. Hierbei werden grundsätzlich unterschiedliche Ansätze verfolgt. Randelementmethoden (engl.: *Boundary Element Method, BEM*) [6] diskretisieren beispielsweise die Oberflächen leitender Strukturen innerhalb homogener Materialien und lösen numerisch eine äquivalente Formulierung der Maxwellgleichungen als Randintegralgleichung. Volumenbasierte Verfahren wie die *Methode der Finiten Elemente (FEM)* [7] hingegen schränken die Anzahl der Zustandsgrößen gleich in doppelter Hinsicht ein: Zunächst wird nur ein Teilgebiet des Gesamtraums als *Rechengebiet* definiert, dann werden in dessen Inneren durch ein Gitter Stützstellen für die einzelnen Feldwerte festgelegt.

Die im Rahmen dieser Arbeit verwendete und im Folgenden näher beschriebene Methode der Finiten Integration (engl. Finite Integration Theory, FIT) zählt ebenfalls zu den volumendiskretisierten Verfahren und basiert auf der direkten Anwendung der Maxwellgleichungen in ihrer integralen Form (Gl. 2.1.1) auf die durch Diskretisierung entstandenen Grundelemente im betrachteten Gebiet. Dies hat zur Folge, dass wichtige physikalische Eigenschaften der kontinuierlichen Feldlösungen direkt auf die numerischen Lösungen übertragen werden können. Das Verfahren wurde bereits 1977 erstmals von T. Weiland in [8], die heutige Notation mit Spannungen und Flüssen in [13] vorgestellt. Die folgende Darstellung orientiert sich an [9, 10, 12, 14].

#### 2.2.1 Die Gitter-Maxwellgleichungen

Ausgangspunkt bei der numerischen Berechnung elektromagnetischer Felder nach der Methode der Finiten Integration ist eine geeignete lückenlose und überschneidungsfreie Zerlegung des Rechengebiets, so dass die Struktur im Inneren genügend gut approximiert wird<sup>5</sup>. Dies gelingt durch die Definition eines dreidimensionalen Gitters G, wie in Abb. 2.1 für den kartesischen Fall dargestellt. Die Wahl des Gittertyps lässt zahlreiche Varianten zu, beispielsweise allgemeine nichtorthogonale Gitter [14] oder Tetraedergitter (für eine Klassifizierung siehe [17]), die vorliegende Arbeit beschränkt sich jedoch ausschließlich auf einfach strukturierte Gitter parallel zu kartesischen oder kreiszylindrischen Koordinatensystemen.

Zur einfacheren Strukturierung werden die einzelnen Zellen entlang der Koordinatenrichtungen durchgezählt. Zu jedem Punkt  $P_n$  können damit eindeutig ein Zellvolumen V, drei Zellflächen  $A_{nu}$ ,  $A_{nv}$  und  $A_{nw}$  sowie drei Kantenlängen  $L_{nu}$ ,  $L_{nv}$ 

 $<sup>^5 \</sup>rm Die$ Dichte des Gitters bei dynamischen Feldsimulationen hängt neben der Größe von Strukturdetails auch von der Frequenz des Feldes ab, das innerhalb des Rechengebiets betrachtet werden soll.



Abbildung 2.1: Darstellung eines kartesischen Gitters zur Diskretisierung einer Struktur sowie die Indizierung der Primärfiguren. Für eine Fläche wird die Allokation der elektrischen Spannungen und des magnetischen Flusses hervorgehoben.

und  $L_{nw}$  zugeordnet werden<sup>6</sup>, wobei die jeweils in positive Koordinatenrichtung liegende Elementarfigur dem Punkt zugerechnet wird (siehe ebenfalls Abb. 2.1). Bei den vektoriellen Größen A und L, wird auch die Richtung des Vektors in positive Koordinatenrichtung angenommen. Mit der Anzahl von Punkten I, J und K in den drei Raumrichtungen und den zugehörigen Indizes i, j und k ergibt sich für die  $N_P = I J K$  Gitterpunkte eine die Nummerierung in der Form

$$n(i, j, k) = i + (j - 1)I + (k - 1)IJ.$$
(2.2.1)

Die Diskretisierung der Maxwellgleichungen soll nun für eine beliebige Zellfläche (siehe auch Abb. 2.1, rechts) veranschaulicht werden. Mit der Definition der elektrischen Spannung  $\hat{e}_p$  mit  $p \in \{u, v, w\}$  als Integral des elektrischen Feldes  $\vec{E}$  über die Kantenlänge  $L_p$  und des magnetischen Flusses  $\hat{b}_p$  als Flächenintegral der magnetischen Flussdichte  $\vec{B}$  über die Fläche  $A_p$ 

$$\widehat{e}_p(i,j,k) = \int_{L_p(i,j,k)} \vec{E} \cdot d\vec{s}, \qquad \qquad \widehat{b}_p(i,j,k) = \int_{A_p(i,j,k)} \vec{E} \cdot d\vec{A}, \qquad (2.2.2)$$

ergibt Gl. 2.1.1a für die Fläche  $A_w(i, j, k)$ 

$$\widehat{e}_{u}(i,j,k) + \widehat{e}_{v}(i+1,j,k) - \widehat{e}_{u}(i,j+1,k) - \widehat{e}_{v}(i,j,k) = -\frac{d}{dt}\widehat{\widehat{b}}_{w}(i,j,k). \quad (2.2.3)$$

Durch die Verwendung der integralen Größen ist diese Darstellung exakt, also frei von Näherungen. Werden alle elektrischen Spannungen in einem Vektor  $\hat{\mathbf{e}}$  sowie alle magnetischen Flüsse im Vektor  $\hat{\mathbf{b}}$  zusammengefasst, lässt sich Gl. 2.2.3 für alle Flächen des Rechengebiets in einem Gleichungssystem darstellen:

$$\mathbf{C}\,\widehat{\mathbf{e}} = -\frac{d}{dt}\,\widehat{\mathbf{b}}.\tag{2.2.4}$$

<sup>&</sup>lt;sup>6</sup>Punkten am Rand des Rechengebiets werden dabei nicht existierende Volumen, Flächen und Längen zugeordnet, die meist zur Beibehaltung der Indizierung jedoch nicht eliminiert werden.

Die Matrix **C** hat dieselbe Bedeutung wie der Rotationsoperator in Gl. 2.1.3a (engl. *curl-operator*). Sie enthält hierbei, wie in Gl. 2.2.3 zu erkennen, pro Zeile zwei Einträge +1 sowie zwei -1. Sie hat folglich rein topologischen Charakter und ist sehr dünn besetzt, darüberhinaus ist die Matrix singulär. Werden die Vektoren  $\hat{\mathbf{e}}$  und  $\hat{\mathbf{b}}$  nach Gl. 2.2.1 zunächst in *u*-, dann in *v*- und zuletzt in *w*-Richtung sortiert, hat **C** eine Bandstruktur. Definiert man die Hilfsmatrizen<sup>7</sup>

$$[\mathbf{P}_{u,v,w}]_{p,q} = \begin{cases} -1 & : \quad p = q \\ 1 & : \quad p = q + r \\ 0 & : \quad \text{sonst} \end{cases}$$
(2.2.5)

mit den Fällen  $\mathbf{P}_u$ : r = 1,  $\mathbf{P}_v$ : r = I und  $\mathbf{P}_w$ : r = IJ, lässt sich  $\mathbf{C}$  wie folgt angeben<sup>8</sup>:

$$\mathbf{C} = \begin{pmatrix} \mathbf{0} & -\mathbf{P}_w & \mathbf{P}_v \\ \mathbf{P}_w & \mathbf{0} & -\mathbf{P}_u \\ -\mathbf{P}_v & \mathbf{P}_u & \mathbf{0} \end{pmatrix}.$$
 (2.2.6)

Auf entsprechende Weise wie in Gl. 2.2.3 kann auch die Nichtexistenz magnetischer Ladungen nach Gl. 2.1.1d diskretisiert werden. Betrachtet man das Oberflächenintegral über eine einzelne Zelle, ergibt sich

$$-\widehat{b}_{u}(i,j,k) + \widehat{b}_{u}(i+1,j,k) - \widehat{b}_{v}(i,j,k) + \widehat{b}_{v}(i,j+1,k) - \widehat{b}_{w}(i,j,k) + \widehat{b}_{w}(i,j,k+1) = 0.$$
 (2.2.7)

Bezogen auf das ganze Gitter resultiert daraus

$$\mathbf{S}\widehat{\mathbf{b}} = \mathbf{0} \quad \text{mit} \quad \mathbf{S} = (\mathbf{P}_u \ \mathbf{P}_v \ \mathbf{P}_w).$$
 (2.2.8)

Die Matrix **S** ist ebenfalls rein topologischer Natur und nur sehr dünn besetzt. Sie entspricht dem Divergenzoperator (engl. *source-operator*) in Gl. 2.1.3d.



Abbildung 2.2: Darstellung des dualen Gitters  $\tilde{G}$  (schwarz) relativ zum primären Gitter G (grau) sowie die Allokation der integralen Größen auf beiden Gittern.

 $<sup>^7\</sup>mathrm{Diese}$  Matrizen können als diskretes Analogon zu den partiellen Differentiationsoperatoren interpretiert werden.

<sup>&</sup>lt;sup>8</sup>Formell müssen die Hilfsmatrizen an den Rändern angepasst werden. Es zeigt sich aber, dass obige Definition in Verbindung mit den Randbedingungen, die später beschrieben werden, ebenfalls auf korrekte Lösungen führt.