

Forschungszentrum Karlsruhe
Technik und Umwelt

Wissenschaftliche Berichte
FZKA 5884

**Finite-Volumen-Verfahren
für die instationären
Maxwellgleichungen**

U. Voß

Institut für Neutronenphysik und Reaktortechnik

März 1997

Forschungszentrum Karlsruhe

Technik und Umwelt

Wissenschaftliche Berichte

FZKA 5884

Finite-Volumen-Verfahren für die instationären Maxwellgleichungen

Ursula Voß

Institut für Neutronenphysik und Reaktortechnik

Von der Fakultät für Mathematik der Universität Karlsruhe (TH)
genehmigte Dissertation

Forschungszentrum Karlsruhe GmbH, Karlsruhe
1997

Als Manuskript gedruckt
Für diesen Bericht behalten wir uns alle Rechte vor

Forschungszentrum Karlsruhe GmbH
Postfach 3640, 76021 Karlsruhe

ISSN 0947-8620

Zusammenfassung

In der vorliegenden Arbeit werden Finite-Volumen-Verfahren für die instationären Maxwellgleichungen auf randangepaßten Koordinaten entwickelt. Ausgehend vom Godunov-Verfahren erster und von MUSCL-Typ-Verfahren zweiter Ordnung werden verschiedene Ansätze zur Konstruktion solcher Verfahren in zwei Raumdimensionen und auf randangepaßten Koordinaten verglichen. Da diese Verfahren lokal die Wellenausbreitung in das numerische Verfahren mit einbeziehen, lassen sich sowohl physikalische als auch offene Ränder einfach und dabei sehr effizient modellieren. Diese Methoden werden als Teil einer Particle-in-Cell-Methode verwendet. Besonderer Wert muß daher auf die Einhaltung der Bedingungen an die Divergenz der elektromagnetischen Felder, insbesondere des Gauß'schen Gesetzes, gelegt werden, die bei der numerischen Simulation elektromagnetischer Phänomene bei Anwesenheit von Teilchen als Zwangsbedingungen eine wichtige Rolle spielen. Mit Hilfe eines Lagrangemultiplikators lassen sich die Divergenzgleichungen in das zu lösende Gleichungssystem einbeziehen. Mit Hilfe einer neuartigen Modifikation dieses Systems gelingt es, daraus ein rein hyperbolisches Differentialgleichungssystem zu erhalten, das alle physikalischen Eigenschaften sinnvoll modelliert und im Rahmen des entwickelten Finite-Volumen-Verfahren effizient gelöst werden kann. Numerische Ergebnisse für Testprobleme werden in jedem Kapitel vorgestellt.

Finite-Volume Methods for the Nonstationary Maxwell Equations

Abstract

The current PhD thesis presents a method for solving the nonstationary Maxwell equations based on a finite-volume approximation on boundary fitted coordinates. Starting with a first order Godunov scheme and second order MUSCL-type schemes different techniques for constructing such schemes in two dimensions and on boundary fitted coordinates are developed and compared. Especially, because the finite-volume methods include the characteristic properties of hyperbolic partial differential equations by construction, they lead to a simple but efficient modeling of physical boundary conditions as well as of absorbing boundary conditions. These methods are used as a part of a particle-in-cell method and hence it is necessary to enforce the achievement of the divergence conditions, especially of Gauss' law, playing an important role in particle methods as constraints on the electromagnetic fields. The divergence conditions are included in the considered equation using a Lagrangean multiplier. With a new modification of the Lagrangean system, a purely hyperbolic system is obtained so that the correction can be performed within the presented finite-volume framework. For each chapter, numerical results are presented to reveal the quality of the numerical methods.

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	1
2	Die Maxwellgleichungen als Erhaltungsgleichungen	5
3	Numerische Verfahren für eindimensionale Systeme	10
3.1	Finite-Differenzen-Verfahren	10
3.1.1	Warum versetzte Gitter ?	11
3.2	Verfahren in Erhaltungsform	13
4	Mehrdimensionale Systeme auf kartesischen Gittern	21
4.1	Verfahren erster Ordnung	22
4.2	Der Übergang von erster zu zweiter Ordnung	24
4.3	Ein zweidimensionaler MUSCL-Ansatz	30
4.4	Splitting-Verfahren nach Strang	32
4.5	Numerische Ergebnisse	33
5	Mehrdimensionale Systeme auf randangepaßten Koordinaten	43
5.1	Verfahren erster Ordnung	43
5.1.1	Diskretisierung der Geometrieterme	46
5.2	MUSCL-Ansatz auf randangepaßten Gittern	49
5.2.1	Rekonstruktion im physikalischen Gebiet	50
5.2.2	Rekonstruktion im logischen Gebiet	51
5.3	Splitting-Verfahren nach Strang	53
5.4	Numerische Ergebnisse	53

6	Randbedingungen	62
6.1	Ein inverses Riemannproblem	65
6.2	Allgemeine Behandlung der Randbedingungen	66
6.2.1	Einspeisung	68
6.2.2	Idealer Leiter	68
6.2.3	Offene Ränder	70
6.3	Numerische Ergebnisse	70
7	Die Divergenzbedingungen	73
7.1	Der Maxwell-Löser	74
7.2	Formulierung mit Lagrangemultiplikator	81
7.3	Approximationen	82
7.3.1	Direkte Approximation	82
7.3.2	Modifikation 1: Pseudo-Strom-Ansatz	84
7.3.3	Modifikation 2: Hyperbolischer Ansatz	86
7.4	Numerische Ergebnisse	92
8	Zusammenfassung und Ausblick	97
A	Matrizen	99
A.1	Matrizen bei der Behandlung der Maxwellgleichungen	99
A.2	Matrizen für das Korrekturverfahren	102
B	Das Leapfrog-Verfahren für die Maxwellgleichungen	105
C	Transformierte Erhaltungsgleichung	107
D	Die Particle-in-Cell-Methode und die Lorentzgleichungen	109
	Symbolverzeichnis	113
	Literaturverzeichnis	115

Kapitel 1

Einleitung

In vielen Bereichen der modernen Plasmaphysik und anderen Gebieten, die elektromagnetische Phänomene behandeln, stellen Computersimulationen ein unverzichtbares Hilfsmittel dar. Die vorliegende Arbeit befaßt sich mit der Konstruktion von Finite-Volumen-Verfahren für die zeitabhängigen Maxwellgleichungen. Hintergrund ist die Entwicklung von Ionendioden an der Karlsruher Light Ion Facility (KALIF) des Forschungszentrum Karlsruhe, die durch die Bereitstellung problemspezifischer Computersimulationen unterstützt wird. Diese sollen Erklärungsansätze für in den Dioden vermutlich auftretende Instabilitäten liefern, die für die beobachteten Abweichungen bei der Fokussierung der Teilchenstrahlen verantwortlich gemacht werden. Weiterhin können sie zur Verbesserung des Designs der Dioden beitragen.

Die Physik des in Ionendioden auftretenden nicht-neutralen Plasmas, bei dem Stöße vernachlässigt werden können, wird durch die Maxwell-Vlasov-Gleichungen beschrieben [2]. Die Maxwellgleichungen beschreiben die elektromagnetischen Felder, die sich aus einer vorhandenen Ladungs- und Stromdichte ergeben. Mit den Maxwellgleichungen gekoppelt ist die Vlasov-Gleichung, die die durch die vorhandenen Felder verursachte Änderung der Verteilungsfunktion im Phasenraum beschreibt. Daraus ergeben sich dann eine geänderte Ladungs- und Stromdichte, die wiederum als Quellen in die Maxwellgleichungen eingehen. Aufgabe einer selbstkonsistenten Beschreibung ist es, diese Kopplung zu berücksichtigen. Für viele numerische Methoden wird die Vlasov-Gleichung durch die Lorentzgleichungen ersetzt, die sich unter der Annahme, daß sich die Gesamtladung aus Punktladungen zusammensetzt, als Bestimmungsgleichungen der Charakteristiken der Vlasov-Gleichung ergeben [18].

In der Simulationsrechnung behandelt man dieses Gleichungssystem in zwei Schritten: Im ersten Schritt löst man die Maxwellgleichungen, im zweiten Schritt werden dann entsprechend den Lorentzgleichungen die Teilchenpositionen aktualisiert. Die Maxwellgleichungen werden auf einem vorgegebenen Rechengitter gelöst, während die Bewegung der geladenen Teilchen im physikalischen Raum stattfindet. Die Verbindung zwischen diesen beiden Beschreibungen wird durch zwei zusätzliche Schritte hergestellt: Zuerst werden durch Inter-

polation die Feldstärken an den Teilchenorten ermittelt und die geladenen Teilchen gemäß den Lorentzgleichungen bewegt. Danach wird aus der neuen Teilchenposition die Ladungs- und Stromdichte an den Gitterpunkten durch Extrapolation bestimmt [4, 5, 18]. Ein solches Vorgehen, bei dem eine Verteilungsfunktion im Phasenraum durch Einführen von Teilchen approximiert wird, während andere Größen auf einem Rechengitter genähert werden, wird Particle-in-Cell-Methode genannt, abgekürzt PIC-Methode [18, 34].

Für stationäre Probleme wurde am Forschungszentrum Karlsruhe bereits das Programmpaket BFCPIC (Particle-in-Cell Code based on Boundary-Fitted-Coordinates) entwickelt [48], das erfolgreich zur selbstkonsistenten Simulation von Ionendioden eingesetzt werden konnte und insbesondere bei der sogenannten selbstmagnetisch isolierten Ionendiode erheblich zur Verbesserung des Designs beigetragen hat [46]. Bei einem anderen Dioden-Typ, der sogenannten fremdmagnetisch isolierten Diode, weicht der von der numerischen Simulation vorhergesagte Strom deutlich von den Ergebnissen der Experimente ab. Als Erklärung hierfür werden Instabilitäten vermutet, die wiederum nur mit einem zeitabhängigen und dreidimensionalen Code simuliert werden können [47]. Im Projekt KADI (KARlsruher DIoden Code) wird dazu ein Programm zur numerischen Lösung der instationären Maxwell-Lorentz-Gleichungen auf randangepaßten Koordinaten entwickelt. Die Programmentwicklung findet zunächst für zwei Raumdimensionen statt, später soll das Programmpaket für dreidimensionale Anwendungen erweitert werden. Die Programme für Interpolation, Teilchenbewegung und Extrapolation können aus dem BFCPIC-Code weitgehend übernommen werden. Der erste Schritt im KADI-Projekt bestand deshalb darin, ein geeignetes Verfahren zur numerischen Lösung der zeitabhängigen Maxwellgleichungen zu erarbeiten. Daher liegt der Schwerpunkt der vorliegenden Arbeit auf der Untersuchung numerischer Verfahren für die instationären Maxwellgleichungen auf randangepaßten Koordinaten.

Insgesamt werden in diesem Zusammenhang sehr hohe Anforderungen an ein Verfahren zur Lösung der Maxwellgleichungen gestellt: Da technisch relevante, oftmals komplizierte Geometrien behandelt werden müssen, werden randangepaßte Koordinaten verwendet, die den Vorteil einer regulären Datenstruktur aufweisen [43]. Ebenso muß die Modellierung der verschiedensten Randbedingungen möglich sein. Starke Gradienten in den elektromagnetischen Feldern müssen mit wenig Gitterpunkten aufgelöst werden können, damit der Speicherplatzbedarf auch bei einer zukünftigen Erweiterung auf dreidimensionale Probleme im Rahmen des technisch Möglichen bleibt. Im Zusammenhang mit der Teilchenbehandlung muß besonderen Wert auf die Einhaltung der Divergenzgleichungen gelegt werden, um die Ladungserhaltung im numerischen Verfahren zu garantieren.

Bei den Maxwellgleichungen handelt es sich um ein lineares, strikt hyperbolisches Differentialgleichungssystem. Zur numerischen Lösung solcher Systeme sind vor allem zwei Ansätze möglich:

Ein weitverbreiteter Ansatz besteht in der Anwendung von Finite-Differenzen-Verfahren. Hier wird jede Ableitung durch einen Differenzenquotienten ersetzt. Verwendet man für alle Ableitungen zentrale Differenzenquotienten, so erhält man das Leapfrog-Verfahren, das für die Maxwellgleichungen zweckmäßig ist, da es eine einfache Bauart mit zweiter Ord-

nung Genauigkeit verbindet. Das Leapfrog-Verfahren wird für die Maxwellgleichungen auf einem versetzten Gitter verwendet, das heißt, daß die Feldkomponenten an verschiedenen Stellen im Gitter approximiert werden. Zuerst wurde ein solches Verfahren von Yee [49] vorgeschlagen. Eine Modifizierung für die inhomogenen, zylindrischen Gleichungen gibt Boris in [5] an. Erweiterungen auf randangepaßte Koordinaten werden in mehreren Arbeiten gegeben. So schlägt Holland in [19] eine Methode vor, bei der ko- oder kontravariante Komponenten ebenfalls versetzt werden. Madsen [27] erhält ebenfalls ein Verfahren auf einem versetzten Gitter, indem er über verschiedene Kontrollvolumina eines allgemeinen Gitters integriert. Eine Übersicht über neue Entwicklungen und deren Anwendungen auf dem Gebiet der Elektrodynamik gibt Taflove in [42]. Dem Vorteil der einfachen Bauart stehen aber eine Reihe von Nachteilen gegenüber: Da nicht alle Unbekannten des Problems an denselben diskreten Punkten gegeben sind, erhält man eine komplizierte Datenstruktur, die die Behandlung von realistischen Randbedingungen und auch die Anwendung von Gitterverfeinerungstechniken sehr erschwert. Insbesondere im Zusammenspiel mit der Teilchenbehandlung sind zusätzliche Mittelungen nötig, die ihrerseits Fehler verursachen.

Um diese Probleme zu überwinden, wird in dieser Arbeit ein anderer Ansatz verfolgt: Da man die Maxwellgleichungen auch in Erhaltungsform schreiben kann, besteht die Möglichkeit, die erfolgreich für die Gleichungen der Strömungsmechanik benutzten, hochauflösenden Finite-Volumen-Verfahren auf nicht-versetzten Gittern anzuwenden.

Bei Finite-Volumen-Verfahren wird statt der differentiellen eine integrale Form der Differentialgleichung approximiert. Die Gleichung in Erhaltungsform wird über eine Gitterzelle integriert und geeignete numerische Flüsse zwischen den Gitterzellen bestimmt. Nach einer auf Godunov [14] zurückgehenden Idee geschieht dies durch das Lösen von lokalen Riemannproblemen. Dadurch findet die Wellenausbreitung, die ein typisches Phänomen hyperbolischer Gleichungen darstellt, direkt Eingang in das Verfahren. Diese Verfahren wurden inzwischen auch vereinzelt zur Berechnung der Streuung elektromagnetischer Wellen an Materialgrenzen eingesetzt [6, 29, 39]. Im Gegensatz zu der in der vorliegenden Arbeit betrachteten Fragestellung tritt dort jedoch keine Wechselwirkung mit geladenen Teilchen auf, es handelt sich um reine Feldprobleme.

Bei der numerischen Behandlung von Differentialgleichungen ist es wegen der sonst zu großen Rechenzeit oft notwendig, das Rechengebiet auf denjenigen Teilbereich der gegebenen Geometrie einzuschränken, in dem sich die entscheidenden physikalischen Vorgänge abspielen. In solchen Fällen wird das Rechengebiet durch sogenannte offene Ränder begrenzt, die dadurch gekennzeichnet sind, daß sie Informationen ungehindert, das heißt ohne wesentliche Reflexionen, aus dem Rechengebiet herauslaufen lassen. Eine gute Modellierung offener Ränder ist deshalb generell ein wichtiger Aspekt bei der Entwicklung numerischer Verfahren.

Ein weiterer wichtiger Aspekt, vor allem im Hinblick auf die Kopplung mit Teilchenbewegung im KADI-Code, ist die Erfüllung der Divergenzgleichungen. Zur Approximation der zeitabhängigen Felder werden zwei der insgesamt vier Maxwellgleichungen nicht verwendet. Es handelt sich dabei um die beiden Gleichungen, die Bedingungen an die Di-

vergenz der Felder stellen. Dies ist zunächst gerechtfertigt, da sie im kontinuierlichen Fall redundant sind, wenn Ladungs- und Stromdichte die sogenannte Kontinuitätsgleichung erfüllen. Bei der Approximation können allerdings zwei Probleme auftreten. Das erste betrifft allein den Maxwell-Löser. Die Redundanz der Divergenzgleichungen gilt für den auf dem Finite-Volumen-Verfahren basierenden Maxwell-Löser nicht. Man kann aber zeigen, daß der Fehler bei der Erfüllung der Divergenzgleichungen mit der Maschenweite des Gitters gegen Null geht. Insbesondere sind keine Probleme bekannt, bei denen die numerischen Ergebnisse dadurch wesentlich verfälscht werden. Das zweite, schwerwiegendere Problem besteht darin, daß Ladungs- und Stromdichte, wie sie im Particle-in-Cell-Zyklus nach der Teilchenbehandlung durch Interpolation zur Verfügung gestellt werden, nicht die Kontinuitätsgleichung erfüllen. Ein Lösungsansatz besteht darin, aufwendige Interpolationsverfahren zu entwickeln, die sicherstellen, daß die Kontinuitätsgleichung erfüllt ist [11, 44]. Meistens aber wird das Ergebnis des Maxwell-Lösers so korrigiert, daß die Konsistenz des elektrischen Feldes mit der Ladungsdichte wieder hergestellt wird. Dazu werden die Maxwellgleichungen mit Hilfe eines Lagrangemultiplikators formuliert, wodurch man ein elliptisch-hyperbolisches System erhält [1]. Daraus kann man eine Projektionsmethode herleiten oder das System durch ein Differentialgleichungssystem eines anderen Typs approximieren. Während in [28] ein Ansatz vorgeschlagen wird, bei dem das System hyperbolisch-parabolisch gemacht wird, wird in der vorliegenden Arbeit ein neuer Ansatz verfolgt, bei dem ein rein hyperbolisches System entsteht, das sich besonders gut zur Approximation im Kontext der Finite-Volumen-Verfahren eignet.

Die vorliegende Arbeit ist folgendermaßen aufgebaut: Im zweiten Kapitel werden die Maxwellgleichungen vorgestellt, der Begriff der Erhaltungsgleichung definiert und gezeigt, daß die Maxwellgleichungen ein System von Erhaltungsgleichungen bilden. Im dritten Kapitel werden eindimensionale Finite-Differenzen- und Finite-Volumen-Verfahren vorgestellt. Die Finite-Volumen-Verfahren werden im vierten Kapitel für zwei Raumdimensionen erweitert. Dabei wird auf die Schwierigkeit eingegangen, aus eindimensionalen Verfahren zweiter Ordnung mehrdimensionale Verfahren zweiter Ordnung zu erhalten. Im fünften Kapitel werden die gefundenen Ergebnisse auf randangepaßte Koordinaten übertragen. Ausgehend von einer präzisen Approximation aller auftretenden Terme wird ein Dimensionensplittingverfahren für randangepaßte Koordinaten entwickelt. Im sechsten Kapitel wird die Modellierung von Randbedingungen und ihre Implementierung beschrieben. Anschließend werden im siebten Kapitel die Divergenzgleichungen betrachtet. Dabei wird eine hyperbolische Approximation des elliptisch-hyperbolischen Systems entwickelt und im Rahmen des Finite-Volumen-Verfahrens numerisch behandelt. Das achte Kapitel enthält eine Zusammenfassung der erzielten Ergebnisse und einen Ausblick. Jedes der Kapitel 4 bis 7 schließt mit einem Abschnitt, in dem numerische Ergebnisse zu dem jeweiligen Kapitel vorgestellt werden.

Kapitel 2

Die Maxwellgleichungen als Erhaltungsgleichungen

Unter den Maxwellgleichungen verstehen wir folgendes System von Gleichungen:

$$\frac{\partial \mathbf{D}}{\partial t} - \nabla \times \mathbf{H} = -\mathbf{j}, \quad (2.1)$$

$$\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} + \nabla \times \mathbf{E} = 0, \quad (2.2)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{D} = \rho, \quad (2.3)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{B} = 0. \quad (2.4)$$

Dabei bedeuten \mathbf{E} und \mathbf{H} das elektrische und magnetische Feld mit den Einheiten $(\frac{V}{m})$ und $(\frac{A}{m})$. Die elektrische Verschiebung \mathbf{D} $(\frac{As}{m^2})$ und die magnetische Induktion \mathbf{B} $(\frac{Vs}{m^2})$ sind mit diesen für normal dielektrische bzw. dia- oder paramagnetische Stoffe durch

$$\mathbf{D} = \epsilon \epsilon_0 \mathbf{E}, \quad (2.5)$$

$$\mathbf{B} = \mu \mu_0 \mathbf{H} \quad (2.6)$$

verknüpft. Die Größe ϵ_0 ist die elektrische Feldkonstante, $\epsilon_0 = 8,8542 \cdot 10^{-12} \frac{C^2}{Nm^2}$, und μ_0 die magnetische Feldkonstante, $\mu_0 = 4\pi 10^{-7} \frac{Vs}{Am}$. Zwischen diesen Größen und der Lichtgeschwindigkeit besteht der Zusammenhang

$$c^2 \epsilon_0 \mu_0 = 1. \quad (2.7)$$

Die Dielektrizitätskonstante und die magnetische Permeabilität werden mit ϵ bzw. μ bezeichnet. Da im folgenden nur der Fall des Vakuums betrachtet wird, werden sie gleich Eins gesetzt.

Damit kann man die elektrische Verschiebung \mathbf{D} und das magnetische Feld \mathbf{H} eliminieren und erhält

$$\frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t} - c^2 (\nabla \times \mathbf{B}) = -\frac{\mathbf{j}}{\epsilon_0}, \quad (2.8)$$

$$\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} + \nabla \times \mathbf{E} = 0, \quad (2.9)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{E} = \frac{\rho}{\epsilon_0}, \quad (2.10)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{B} = 0. \quad (2.11)$$

Bildet man in Gleichung (2.8) auf beiden Seiten die Divergenz, berücksichtigt die Vektoridentität $\nabla \cdot (\nabla \times \mathbf{F}) = 0$ für ein beliebiges differenzierbares Vektorfeld \mathbf{F} und Gleichung (2.10), so folgt, daß ρ und \mathbf{j} die sogenannte Kontinuitätsgleichung oder Ladungserhaltungsgleichung

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{j} = 0 \quad (2.12)$$

zu allen Zeiten erfüllen. Umgekehrt gilt:

Satz 1 *Gelten für eine Lösung von (2.8) und (2.9) die Gleichungen (2.10) und (2.11) zur Zeit $t = 0$ und ist die Kontinuitätsgleichung (2.12) zu allen Zeiten erfüllt, so sind die Gleichungen (2.10) und (2.11) zu allen Zeiten erfüllt.*

Beweis Der Beweis beruht im Wesentlichen auf der Operatoridentität $\nabla \cdot (\nabla \times \mathbf{F}) = 0$ für ein beliebiges differenzierbares Vektorfeld \mathbf{F} . Nach (2.8) ist

$$\frac{\partial}{\partial t} (\nabla \cdot \mathbf{E}) = c^2 \nabla \cdot (\nabla \times \mathbf{B}) - \frac{\nabla \cdot \mathbf{j}}{\epsilon_0}. \quad (2.13)$$

Mit $\nabla \cdot (\nabla \times \mathbf{B}) = 0$ und (2.12) folgt

$$\frac{\partial}{\partial t} \left(\nabla \cdot \mathbf{E} - \frac{\rho}{\epsilon_0} \right) = 0. \quad (2.14)$$

Damit folgt aus der Gültigkeit von (2.10) für die Anfangswerte die Gültigkeit dieser Gleichung für alle Zeiten. Entsprechend wird der Beweis für $\nabla \cdot \mathbf{B} = 0$ geführt. \square

Dieser Satz erlaubt es, ein Cauchyproblem für die Maxwellgleichungen zu formulieren. Man benutzt zur numerischen Behandlung instationärer Probleme in der Regel nur die Gleichungen (2.8) und (2.9). Später muß jedoch geklärt werden, ob die Lösung eines numerischen Verfahrens die Gleichungen (2.10) und (2.11) in geeigneter Weise erfüllt. Dieser Aspekt wird in Kapitel 7 behandelt.

Wir definieren nun den Begriff *Gleichung in Erhaltungsform*.

Definition 2.1 Eine partielle Differentialgleichung der Form

$$\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \nabla \cdot \mathcal{F}(\mathbf{u}) = \mathbf{q}(\mathbf{u}) \quad (2.15)$$

mit $\mathbf{u} : \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}_0^+ \rightarrow \mathbb{R}^m$, $\mathcal{F} = (\mathbf{F}_1, \dots, \mathbf{F}_n)$, wobei die \mathbf{F}_k Abbildungen $\mathbb{R}^m \rightarrow \mathbb{R}^m$ sind für $k = 1, \dots, n$ und $m, n \in \mathbb{N}$, heißt *Gleichung in Erhaltungsform in n Raumdimensionen*. Dabei ist

$$\nabla \cdot \mathcal{F}(\mathbf{u}) = \sum_{k=1}^n \frac{\partial}{\partial x_k} \mathbf{F}_k, \quad (2.16)$$

wobei die Ableitungen von \mathbf{F}_k komponentenweise zu verstehen sind.

Ist $m = 1$, so spricht man auch von einer skalaren Erhaltungsgleichung. Ist $m \geq 2$, so spricht man von einem System von Erhaltungsgleichungen.

Definition 2.2 Die Gleichung (2.15) heißt *hyperbolisch*, wenn jede reelle Linearkombination $\sum_{k=1}^n \alpha_k \mathbf{F}'_k(\mathbf{u})$ der Jakobimatrizen $\mathbf{F}'_k(\mathbf{u})$ nur reelle Eigenwerte hat.

Weiter heißt (2.15) *strikt hyperbolisch*, wenn sie hyperbolisch ist und die Rechtseigenvektoren jeder reellen Linearkombination $\sum_{k=1}^n \alpha_k \mathbf{F}'_k(\mathbf{u})$ der Jakobimatrizen $\mathbf{F}'_k(\mathbf{u})$ eine Basis des \mathbb{R}^m bilden.

Wir betrachten in dieser Arbeit den Spezialfall *linearer* hyperbolischer Systeme mit konstanten Koeffizienten, das heißt

$$\mathbf{F}_k(\mathbf{u}) = \mathcal{K}_k \mathbf{u} \quad (2.17)$$

mit $\mathcal{K}_k \in \mathbb{R}^m \times \mathbb{R}^m$, $k = 1, \dots, n$.

Mit den Definitionen

$$\mathbf{u} = (E_1, E_2, E_3, B_1, B_2, B_3)^T, \quad (2.18)$$

$$\mathcal{A} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & c^2 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -c^2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad (2.19)$$

$$\mathcal{B} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -c^2 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & c^2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad (2.20)$$

$$\mathcal{C} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & c^2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -c^2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (2.21)$$

und

$$\mathbf{q}(\mathbf{u}) = -\frac{1}{\epsilon_0}(j_1, j_2, j_3, 0, 0, 0)^T \quad (2.22)$$

lassen sich die Gleichungen (2.8) und (2.9) als System von Evolutionsgleichungen

$$\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \mathcal{A} \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial x_1} + \mathcal{B} \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial x_2} + \mathcal{C} \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial x_3} = \mathbf{q}(\mathbf{u}). \quad (2.23)$$

und wegen der Linearität auch in der Erhaltungsform (2.15) schreiben. Die Komponenten von \mathbf{u} , die sogenannten erhaltenen Größen, sind dabei die kartesischen Komponenten der Felder. $\mathcal{A}, \mathcal{B}, \mathcal{C}$ sind jeweils diagonalisierbar mit den Eigenwerten $\{-c, -c, 0, 0, c, c\}$. Ebenso sind alle reellen Linearkombinationen dieser Matrizen diagonalisierbar. Damit bilden die Maxwellgleichungen (2.8) und (2.9) ein lineares, strikt hyperbolisches System.

Für weitere Anwendungen ist es wichtig, rotationssymmetrische Probleme behandeln zu können. Dazu werden die Maxwellgleichungen in Zylinderkoordinaten transformiert:

$$x_1 = r \cos \varphi \quad (2.24)$$

$$x_2 = r \sin \varphi \quad (2.25)$$

$$x_3 = z \quad (2.26)$$

und die Ableitungen nach φ zu Null gesetzt. (2.23) geht damit über in

$$\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \mathcal{A} \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial z} + \mathcal{B} \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial r} = \mathbf{q}(\mathbf{u}) + \mathbf{q}'(\mathbf{u}). \quad (2.27)$$

mit $\mathbf{u} = (E_z, E_r, E_\varphi, B_z, B_r, B_\varphi)^T$ in Abhängigkeit von (z, r, t) und

$$\mathbf{q}'(\mathbf{u}) = \left(\frac{c^2 B_\varphi}{r}, 0, 0, -\frac{E_\varphi}{r}, 0, 0 \right)^T. \quad (2.28)$$

\mathcal{A}, \mathcal{B} und $\mathbf{q}(\mathbf{u})$ bleiben unverändert und sind dieselben wie in (2.19) bis (2.22) definiert. Die Gleichungen in Zylinderkoordinaten unterscheiden sich von denen in kartesischen Koordinaten nur durch einen zusätzlichen Quellterm auf der rechten Seite. Deshalb werden die Verfahren hier für kartesische zweidimensionale Probleme entwickelt. Sie können ohne größeren Aufwand auf Zylinderkoordinaten übertragen werden. Im folgenden schreiben wir der Kürze halber x statt x_1 , y statt x_2 , \mathbf{x} für $(x, y)^T$ und benutzen die Kurzschreibweise

$$\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} = \mathbf{u}_t, \quad \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial x} = \mathbf{u}_x, \quad \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial y} = \mathbf{u}_y. \quad (2.29)$$

Kapitel 3

Numerische Verfahren für eindimensionale Systeme

3.1 Finite-Differenzen-Verfahren

Die einfachste Möglichkeit, Verfahren zur Approximation von partiellen Differentialgleichungen herzuleiten, führt auf die sogenannten Finite-Differenzen-Verfahren.

Es seien im folgenden Δx und Δt zwei positive, reelle Zahlen, die sogenannte Raum- bzw. Zeitschrittweite.

Die Funktion $u(x, t)$ wird an den Gitterpunkten $(i\Delta x, n\Delta t)$ durch Werte u_i^n approximiert; die Menge der Werte u_i^n nennt man *Gitterfunktion*.

Taylorentwicklung von u um $(i\Delta x, n\Delta t)$ und Auswerten an der Stelle $(i\Delta x, (n \pm 1)\Delta t)$ zeigt, daß die sogenannten vorwärts bzw. rückwärts genommenen Differenzenquotienten

$$\frac{u_i^{n+1} - u_i^n}{\Delta t} \quad \text{bzw.} \quad \frac{u_i^n - u_i^{n-1}}{\Delta t}$$

eine Approximation erster Ordnung von $u_t(i\Delta x, n\Delta t)$ sind, falls u mindestens zweimal stetig differenzierbar in t ist. Der zentrale Differenzenquotient

$$\frac{u_i^{n+1} - u_i^{n-1}}{\Delta t}$$

stellt eine Approximation zweiter Ordnung von $u_t(i\Delta x, n\Delta t)$ dar, falls u mindestens dreimal stetig differenzierbar in t ist [31]. Genauso lassen sich räumliche Ableitungen approximieren. Bei der Konstruktion von Finite-Differenzen-Verfahren werden nun in der Differentialgleichung alle Ableitungen durch Differenzenquotienten ersetzt. Eine umfangreiche Darstellung von Finite-Differenzen-Verfahren findet man z.B. in [24].

Hier wird nur das für die Maxwellgleichungen in verschiedenen Varianten verwendete Leapfrog-Verfahren am Beispiel der skalaren Transportgleichung in einer Raumdimension vorgestellt:

Beispiel 3.1 Beim Leapfrog-Verfahren verwendet man für alle Ableitungen zentrale Differenzenquotienten. Für die skalare Transportgleichung

$$u_t + au_x = 0 \quad (3.1)$$

erhält man

$$u_i^{n+1} = u_i^{n-1} - \frac{a\Delta t}{\Delta x}(u_{i+1}^n - u_{i-1}^n). \quad (3.2)$$

3.1.1 Warum versetzte Gitter ?

Das Standard-Leapfrog-Verfahren für die Maxwellgleichungen ist in Anhang B angegeben. Dabei wird ein versetztes Gitter verwendet. In diesem Abschnitt zeigen wir am Beispiel der linearen Transportgleichung, welchen Grund dies hat. Obwohl das Leapfrog-Verfahren im Sinne der Neumannschen Stabilitätstheorie [40] stabil ist, sind die numerischen Ergebnisse doch in manchen Fällen unbefriedigend. Dies liegt am Auftreten einer sogenannten Schachbrettmusterinstabilität (Checkerboard-Phänomen) [40]. Zeichnet man die numerische Abhängigkeit des Verfahrens

$$u_i^{n+1} = u_i^{n-1} - \frac{a\Delta t}{\Delta x}(u_{i+1}^n - u_{i-1}^n) \quad (3.3)$$

aus Beispiel 3.1 für mehrere Zeitschritte auf, so erhält man das in Abbildung 3.1 dargestellte Muster:

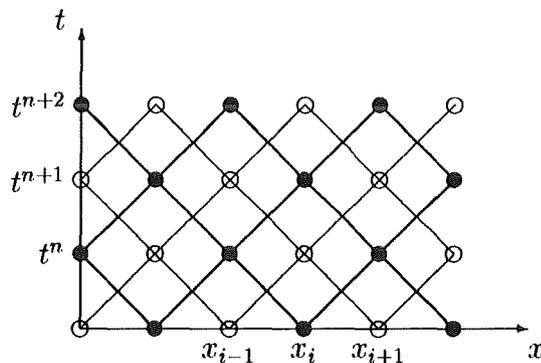


Abbildung 3.1: Leapfrog-Verfahren auf nicht-versetztem Gitter

Man erkennt an dieser Skizze, daß das Gitter in zwei Teilgitter zerfällt, die jeweils nur von einem Teil der Anfangswerte abhängen und sich gegenseitig nicht mehr beeinflussen. Dies steht nicht im Widerspruch zur bewiesenen Stabilität des Verfahrens. Die Lösungen auf den beiden Teilgittern sind die physikalisch richtigen Lösungen zu den jeweiligen Anfangswerten, nur ist die daraus zusammengesetzte Lösung im allgemeinen nicht die Lösung zu der Gesamtheit der Anfangswerte.

Eine einfach Art, Abhilfe zu schaffen, ist, eines der Teilgitter wegzulassen. Man erhält das Verfahren

$$\begin{aligned} u_{2i+1}^{2n} &= u_{2i+1}^{2n-2} - \frac{a\Delta t}{\Delta x} (u_{2i+2}^{2n+1} - u_{2i}^{2n+1}) \\ u_{2i}^{2n+1} &= u_{2i}^{2n-1} - \frac{a\Delta t}{\Delta x} (u_{2i+1}^{2n} - u_{2i-1}^{2n}) \end{aligned} \quad i \in \mathbb{Z}, n \in \mathbb{N} \quad (3.4)$$

mit dem in Abbildung 3.2 dargestellten Muster.

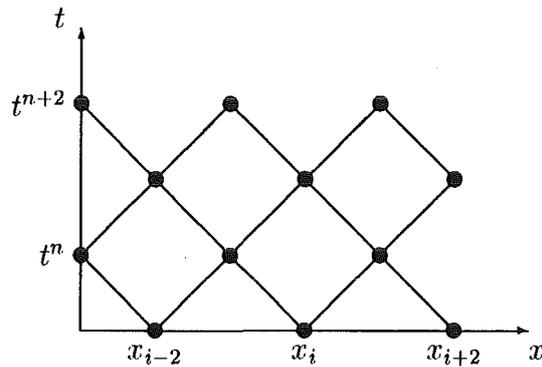


Abbildung 3.2: Ein Teilgitter wurde weggelassen

Um wieder dieselbe Auflösung zu erhalten, halbiert man den Maßstab, was in Abbildung 3.3 dargestellt ist. Dadurch treten die Unbekannten teilweise auf Positionen im Raum-Zeit-Diagramm mit halber Indizierung auf:

$$\begin{aligned} u_{i+1/2}^n &= u_{i+1/2}^{n-1} - \frac{a\Delta t}{\Delta x} (u_{i+1}^{n+1/2} - u_i^{n+1/2}) \\ u_i^{n+1/2} &= u_i^{n-1/2} - \frac{a\Delta t}{\Delta x} (u_{i+1/2}^n - u_{i-1/2}^n) \end{aligned} \quad i \in \mathbb{Z}, n \in \mathbb{N}. \quad (3.5)$$

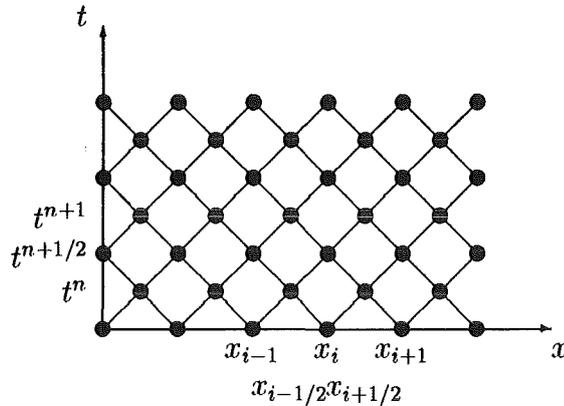


Abbildung 3.3: Leapfrog-Verfahren auf versetztem Gitter

Das entstandene Verfahren ist genauso wie das nicht-versetzte Leapfrog-Verfahren stabil und nicht-diffusiv. Bei mehrdimensionalen Systemen von Gleichungen wie den Maxwellgleichungen tritt dasselbe Phänomen auf. Geht man wie hier beschrieben vor, müssen verschiedene Komponenten des Lösungsvektors an verschiedenen Stellen im Gitter approximiert werden, vergleiche Anhang B.

3.2 Verfahren in Erhaltungsform

Verfahren in Erhaltungsform werden konstruiert als Verfahren, die numerisch die Erhaltungseigenschaften der Erhaltungsgleichung wiedergeben.

Es seien wieder Δx und Δt positive reelle Zahlen, $n \in \mathbb{N}$ und $i \in \mathbb{Z}$. Weiter sei

$$x_{i+1/2} = \left(i + \frac{1}{2}\right)\Delta x \quad (3.6)$$

$$t^n = n\Delta t \quad (3.7)$$

Das lineare System in einer Raumdimension

$$\mathbf{u}_t + \mathcal{A}\mathbf{u}_x = 0, \quad \mathcal{A} \in \mathbb{R}^{m \times m} \quad (3.8)$$

wird komponentenweise über eine Gitterzelle $[x_{i-1/2}, x_{i+1/2}]$ einen Zeitschritt $[t^n, t^{n+1}]$ integriert:

$$\int_{t^n}^{t^{n+1}} \int_{x_{i-1/2}}^{x_{i+1/2}} \mathbf{u}_t \, dx \, dt = - \int_{t^n}^{t^{n+1}} \int_{x_{i-1/2}}^{x_{i+1/2}} \mathcal{A}\mathbf{u}_x \, dx \, dt. \quad (3.9)$$

Durch

$$\mathbf{u}_i^n := \frac{1}{\Delta x} \int_{x_{i-1/2}}^{x_{i+1/2}} \mathbf{u}(x, t^n) dx \quad (3.10)$$

definiert man den integralen Mittelwert von $\mathbf{u}(x, t)$ in der Gitterzelle $[x_{i-1/2}, x_{i+1/2}]$, für den man die Evolutionsgleichung

$$\mathbf{u}_i^{n+1} = \mathbf{u}_i^n - \frac{1}{\Delta x} \int_{t^n}^{t^{n+1}} \mathcal{A}\mathbf{u}(x_{i+1/2}) - \mathcal{A}\mathbf{u}(x_{i-1/2}) dt \quad (3.11)$$

erhält. Ein Verfahren in Erhaltungsform ist eine direkte Approximation dieser Evolutionsgleichung

$$\mathbf{u}_i^{n+1} = \mathbf{u}_i^n - \frac{\Delta t}{\Delta x} (\mathbf{g}_{i+1/2} - \mathbf{g}_{i-1/2}), \quad (3.12)$$

wobei $\mathbf{g}_{i+1/2}$ der *numerische Fluß* genannt wird. Ein Verfahren in Erhaltungsform ist durch die Angabe seines numerischen Flusses vollständig bestimmt. Im einfachsten Fall hängt der numerische Fluß $\mathbf{g}_{i+1/2}$ nur von den Werten \mathbf{u}_i^n und \mathbf{u}_{i+1}^n ab. Allgemein kann er aber sowohl räumlich als auch zeitlich von weiteren Werten abhängig sein. Wir betrachten hier nur *explizite* Verfahren, das heißt Verfahren, bei denen die rechte Seite von (3.12) nur von Zellmittelwerten zur Zeit t^n abhängt. Durch die Einführung des Zellmittelwerts gründen sich diese Verfahren nicht auf Stetigkeitsannahmen. Durch eine geeignete Berechnung der numerischen Flüsse können sie auch für Probleme der Strömungsmechanik mit nicht-glatten Lösungen benutzt werden. Bei stetigen Lösungen wie im Fall der Maxwellgleichungen wird dadurch eine bessere Auflösung starker Gradienten und eine größere Robustheit erreicht.

Wir halten die definierenden Eigenschaften eines Verfahrens in Erhaltungsform in der folgenden Definition fest:

Definition 3.2 (Verfahren in Erhaltungsform in einer Raumdimension) *Ein Verfahren in der Form*

$$\mathbf{u}_i^{n+1} = \mathbf{u}_i^n - \frac{\Delta t}{\Delta x} (\mathbf{g}_{i+1/2} - \mathbf{g}_{i-1/2}) \quad (3.13)$$

mit

$$\mathbf{g}_{i+1/2} = \mathbf{g}_{i+1/2}(\mathbf{u}_{i-k+1}^n, \dots, \mathbf{u}_{i+k}^n), \quad k \in \mathbb{N}, \quad (3.14)$$

und den Anfangsdaten

$$\mathbf{u}_i^0 = \int_{x_{i-1/2}}^{x_{i+1/2}} \mathbf{w}(x) dx \quad (3.15)$$

zur Approximation des Cauchyproblems

$$\mathbf{u}_t + \mathcal{A}\mathbf{u}_x = 0 \quad (3.16)$$

$$\mathbf{u}(x, 0) = \mathbf{w}(x) \quad (3.17)$$

heißt explizites ($2k+1$ -Punkt-) Verfahren in Erhaltungsform, falls der Fluß \mathbf{g} lipschitzstetig in allen Argumenten und konsistent mit dem physikalischen Fluß ist, das heißt

$$\mathbf{g}(\mathbf{u}, \dots, \mathbf{u}) = \mathcal{A}\mathbf{u} \quad \forall \mathbf{u} \in \mathbb{R}^m. \quad (3.18)$$

Zur Berechnung des numerischen Flusses gibt es eine Reihe von Ansätzen, die die Richtung der Wellenausbreitung im Verfahren berücksichtigen. Sie sind z.B. in [31] ausführlich dargestellt. Für lineare Gleichungen führen sie alle auf dasselbe Verfahren, das zuerst von Courant, Isaacson und Rees hergeleitet wurde [9] und daher CIR-Verfahren genannt wird. Die hier folgende Herleitung entspricht der des Godunov-Verfahrens [14]. Dazu wird die grundlegende Annahme gemacht, daß die Lösung zu jeder Zeit stückweise konstant und gleich ihrem Zellmittelwert ist. An jeder Zellgrenze erhält man den zur Flußberechnung benötigten Wert $\mathbf{u}(x_{i+1/2}, t)$ aus der Lösung des Riemannproblems.

Definition 3.3 (Riemannproblem) *Unter einem Riemannproblem versteht man ein Anfangswertproblem für eine Erhaltungsgleichung mit stückweise konstanten Anfangsdaten, die genau eine Unstetigkeitsstelle haben. Ohne Beschränkung der Allgemeinheit soll sie bei $x = 0$ liegen:*

$$\mathbf{u}_t + \mathcal{A}\mathbf{u}_x = 0 \quad (3.19)$$

$$\mathbf{u}(x, 0) = \begin{cases} \mathbf{u}_l & \text{für } x < 0 \\ \mathbf{u}_r & \text{für } x > 0. \end{cases} \quad (3.20)$$

Satz 2 *Für lineare, strikt hyperbolische Systeme mit konstanten Koeffizienten existiert für beliebige $\mathbf{u}_l, \mathbf{u}_r \in \mathbb{R}^m$ eine eindeutig bestimmte Lösung des Riemannproblems.*

Beweis Da das System strikt hyperbolisch ist, existiert eine nichtsinguläre Matrix \mathcal{R} , so daß $\Lambda = \mathcal{R}^{-1}\mathcal{A}\mathcal{R}$ Diagonalgestalt hat. Durch Multiplikation der Erhaltungsgleichung (3.19) von links mit \mathcal{R}^{-1} entkoppelt das System in m skalare Transportgleichungen

$$\mathbf{v}_t + \Lambda\mathbf{v}_x = 0 \quad (3.21)$$

mit

$$\mathbf{v} = \mathcal{R}^{-1}\mathbf{u}. \quad (3.22)$$

Die Lösung der skalaren Transportgleichungen ist bei vorgegebenen Anfangswerten eindeutig bestimmt. Durch Rücktransformation erhält man daraus die eindeutig bestimmte Lösung des Riemannproblems. \square

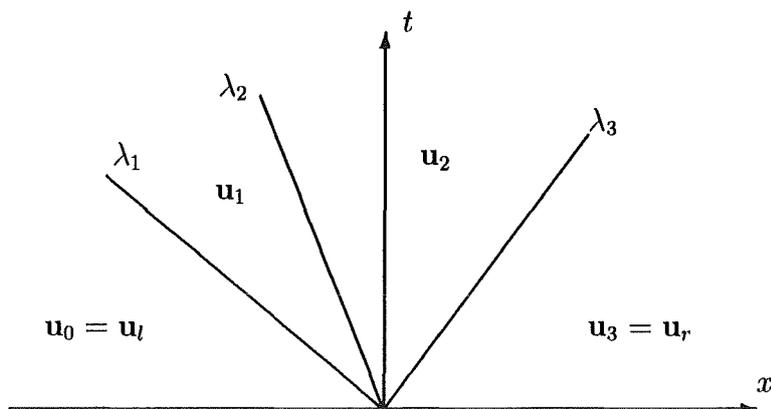


Abbildung 3.4: Lösung des Riemannproblems für $m = 3$ mit vier konstanten Zuständen, die durch die Charakteristiken zu den Eigenwerten λ_1, λ_2 und λ_3 getrennt werden.

Bemerkungen

1. $v = \mathcal{R}^{-1}u$ nennt man charakteristische Variablen.
2. Da das Riemannproblem im Fall linearer, strikt hyperbolischer Gleichungen eindeutig lösbar ist, sind keine Entropiebetrachtungen nötig, wie sie bei nichtlinearen Problemen gemacht werden müssen, um aus der Menge der möglichen Lösungen die physikalisch sinnvolle herauszufinden.

Die Lösung des Riemannproblems besteht aus $m + 1$ konstanten Zuständen

$$\mathbf{u}(x, t) = \begin{cases} \mathbf{u}_0 & x < \lambda_1 t \\ \mathbf{u}_k & \lambda_k t < x < \lambda_{k+1} t, \quad \text{für } 1 \leq k \leq m-1 \\ \mathbf{u}_m & \lambda_m t < x, \end{cases} \quad (3.23)$$

die in Abbildung 3.4 schematisch dargestellt sind. Sie kann in geschlossener Form angegeben werden [33]. Dazu wird der Sprung in den Anfangswerten in der Basis der Rechtseigenvektoren von \mathcal{A} , die mit $\mathbf{r}_j, j = 1, \dots, m$, bezeichnet werden, dargestellt:

$$\mathbf{u}_r - \mathbf{u}_l = \sum_{j=1}^m \alpha_j \mathbf{r}_j. \quad (3.24)$$

Die Lösung der Riemannproblems ist dann durch

$$\mathbf{u}_k = \mathbf{u}_l + \sum_{j=1}^k \alpha_j \mathbf{r}_j, \quad k = 0, \dots, m, \quad (3.25)$$

oder äquivalent durch

$$\mathbf{u}_k = \mathbf{u}_r - \sum_{j=k+1}^m \alpha_j \mathbf{r}_j, \quad k = 0, \dots, m, \quad (3.26)$$

gegeben. Sind die $\lambda_k \neq 0$ für $k = 1, \dots, m$, so liest man daraus die Lösung für $x = 0$ ab:

$$\begin{aligned} \mathbf{u}(0, t) &= \mathbf{u}_l + \sum_{\{j|\lambda_j < 0\}} \alpha_j \mathbf{r}_j \\ &= \mathbf{u}_r - \sum_{\{j|\lambda_j > 0\}} \alpha_j \mathbf{r}_j. \end{aligned} \quad (3.27)$$

Existiert ein $\lambda_{k_0} = 0$, so ist die Lösung für $x = 0$ zunächst nicht definiert. Da aber der Sprung der Lösung über eine Charakteristik endlich ist, kann man als Lösung auf der Charakteristik den Mittelwert aus rechts- und linksseitiger Lösung definieren, das heißt

$$\begin{aligned} \mathbf{u}(0, t) &= \frac{\mathbf{u}_{k_0-1} + \mathbf{u}_{k_0}}{2} \\ &= \mathbf{u}_l + \sum_{\{j|\lambda_j < 0\}} \alpha_j \mathbf{r}_j + \frac{1}{2} \alpha_{k_0} \mathbf{r}_{k_0} \end{aligned} \quad (3.28)$$

Um $\mathbf{g}_{i+1/2}$ zu bestimmen, multipliziert man die Lösung des Riemannproblems mit den Anfangswerten $\mathbf{u}_l = \mathbf{u}_i^n$ und $\mathbf{u}_r = \mathbf{u}_{i+1}^n$ mit \mathcal{A} :

$$\begin{aligned} \mathbf{g}_{i+1/2} &= \mathcal{A} \mathbf{u}_i^n + \sum_{\{j|\lambda_j < 0\}} \lambda_j \alpha_j \mathbf{r}_j \\ &= \mathcal{A} \mathbf{u}_{i+1}^n - \sum_{\{j|\lambda_j > 0\}} \lambda_j \alpha_j \mathbf{r}_j. \end{aligned} \quad (3.29)$$

Dabei zeigt sich, daß die Definition des Zustandes $\mathbf{u}(0, t)$ im Fall von verschwindenden Eigenwerten keinen Einfluß auf die Flußberechnung hat. Man erhält denselben Fluß, wenn man $\mathbf{u}(0, t) = \mathbf{u}_{k_0-1}$, $\mathbf{u}(0, t) = \mathbf{u}_{k_0}$ oder $\mathbf{u}(0, t) = (\mathbf{u}_{k_0-1} + \mathbf{u}_{k_0})/2$ definiert. Die Zeitabhängigkeit wird in (3.29) nicht explizit erwähnt, da $\mathbf{u}(0, t)$ und damit auch $\mathbf{g}_{i+1/2}$ zeitlich konstant ist. Mit den Definitionen

$$\lambda_j^- = \begin{cases} \lambda_j & \lambda_j < 0 \\ 0 & \text{sonst} \end{cases}, \quad \lambda_j^+ = \begin{cases} \lambda_j & \lambda_j > 0 \\ 0 & \text{sonst} \end{cases} \quad (3.30)$$

kann man die auftretenden Summen als

$$\begin{aligned} \mathbf{g}_{i+1/2} &= \mathcal{A} \mathbf{u}_i^n + \sum_{j=1}^m \lambda_j^- \alpha_j \mathbf{r}_j \\ &= \mathcal{A} \mathbf{u}_{i+1}^n - \sum_{j=1}^m \lambda_j^+ \alpha_j \mathbf{r}_j \end{aligned} \quad (3.31)$$

schreiben. Bildet man den arithmetischen Mittelwert der beiden Ausdrücke, so erhält man

$$\mathbf{g}_{i+1/2} = \frac{1}{2} \left(\mathcal{A}(\mathbf{u}_i^n + \mathbf{u}_{i+1}^n) - \sum_{j=1}^m |\lambda_j| \alpha_j \mathbf{r}_j \right). \quad (3.32)$$

Durch

$$|\Lambda| = \text{diag}(|\lambda_1|, \dots, |\lambda_m|), \quad (3.33)$$

$$|\mathcal{A}| = \mathcal{R}_{\mathcal{A}} |\Lambda| \mathcal{R}_{\mathcal{A}}^{-1} \quad (3.34)$$

mit

$$\mathcal{R}_{\mathcal{A}} = (\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_m) \quad (3.35)$$

wird eine diagonalisierbare Matrix $|\mathcal{A}|$ definiert, für die

$$|\mathcal{A}| \mathbf{r}_j = |\lambda_j| \mathbf{r}_j \quad (3.36)$$

gilt. Damit kann man den Gesamtfluß als

$$\mathbf{g}_{i+1/2} = \frac{1}{2} \left(\mathcal{A}(\mathbf{u}_i^n + \mathbf{u}_{i+1}^n) - \sum_{j=1}^m |\mathcal{A}| \alpha_j \mathbf{r}_j \right) \quad (3.37)$$

$$= \frac{1}{2} \left(\mathcal{A}(\mathbf{u}_i^n + \mathbf{u}_{i+1}^n) - |\mathcal{A}|(\mathbf{u}_{i+1}^n - \mathbf{u}_i^n) \right) \quad (3.38)$$

schreiben. Mit

$$\mathcal{A}^{\pm} = \frac{1}{2} (\mathcal{A} \pm |\mathcal{A}|) \quad (3.39)$$

erhält man den Fluß als Summe eines Flusses nach rechts und eines Flusses nach links

$$\mathbf{g}_{i+1/2} = \mathcal{A}^+ \mathbf{u}_i^n + \mathcal{A}^- \mathbf{u}_{i+1}^n. \quad (3.40)$$

Die folgenden Definitionen klären zentrale Begriffe für Stabilitätsbetrachtungen bei hyperbolischen Gleichungen. Sie werden direkt für eine beliebige Anzahl von Raumdimensionen angegeben.

Definition 3.4 (Abhängigkeitsbereich der Differentialgleichung) *Unter dem Abhängigkeitsbereich der Differentialgleichung versteht man die Menge*

$$\mathcal{D}(\bar{\mathbf{x}}, \bar{t}) = \{\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n : \mathbf{w}(\mathbf{x}) \text{ beeinflusst die Lösung in } (\bar{\mathbf{x}}, \bar{t})\} \quad (3.41)$$

Definition 3.5 (Numerischer Abhängigkeitsbereich) *Unter dem numerischen Abhängigkeitsbereich eines Verfahrens versteht man die Menge*

$$\mathcal{D}_{num}(\bar{\mathbf{x}}, \bar{t}) = \{\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n : \mathbf{w}(\mathbf{x}) \text{ beeinflusst die numerische Lösung in } (\bar{\mathbf{x}}, \bar{t})\} \quad (3.42)$$

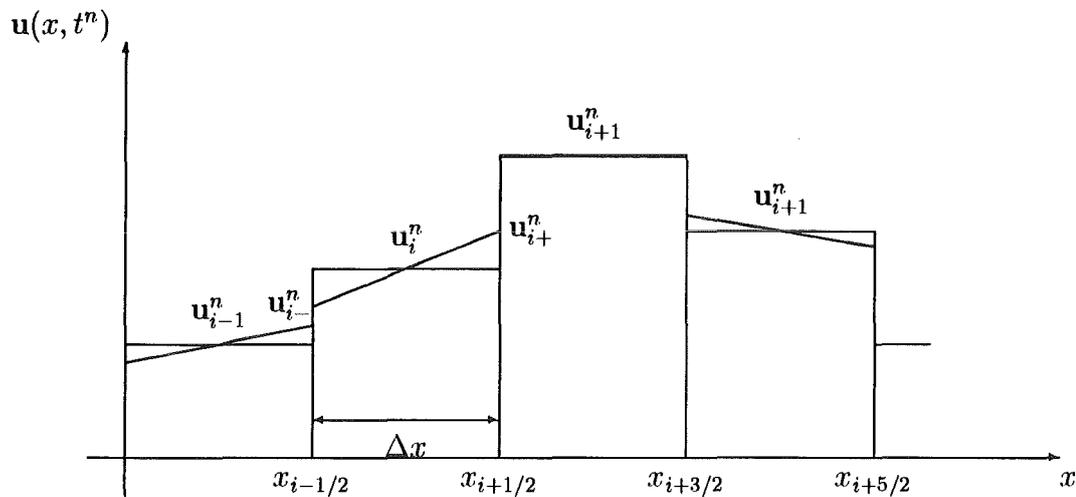


Abbildung 3.5: Bildung der auf die Zellränder extrapolierten Werte $u_{i\pm}$ beim MUSCL-Ansatz

Der numerische Abhängigkeitsbereich hängt von Δt und Δx ab. Die CFL-Bedingung (nach Courant, Friedrichs und Levy, [8]) besagt, daß der numerische Abhängigkeitsbereich den Abhängigkeitsbereich der Differentialgleichung enthalten muß:

Definition 3.6 (CFL-Bedingung) Man sagt, ein Verfahren erfüllt die CFL-Bedingung, falls

$$\mathcal{D}(x_{ij}, t^n) \subseteq \mathcal{D}_{\text{num}}(x_{ij}, t^n) \quad \forall n \in \mathbb{N}, i, j \in \mathbb{Z}. \quad (3.43)$$

Bemerkung Die CFL-Bedingung ist notwendig, aber nicht hinreichend für Stabilität [24]. Sie wird in der Regel als Bedingung an Δt und Δx formuliert.

Das Godunov-Verfahren hat in einer Raumdimension die CFL-Bedingung

$$\max\{\lambda_1, \dots, \lambda_m\} \frac{\Delta t}{\Delta x} \leq 1 \quad (3.44)$$

wie man mit charakteristischen Überlegungen zeigt [24].

Das Godunov-Verfahren ist ein Verfahren erster Ordnung. Es gibt verschiedene Ansätze, die Konsistenzordnung auf zwei zu erhöhen, die beispielsweise in [31] ausführlich dargestellt sind. Wir beschreiben hier den auf van Leer [23] zurückgehenden MUSCL-Ansatz. MUSCL steht hierbei für „Monotonic Upwind Scheme for Conservation Laws“. Diesem Ansatz liegt die folgende Idee zu Grunde: Bisher wurde angenommen, daß die Näherungslösung in jeder Zelle konstant ist. Diese Annahme wird nun durch die Annahme ersetzt, daß die

Lösung in jeder Zelle linear ist. Der Mittelwert dieser neuen Näherung soll dabei gerade der Zellmittelwert sein. Dann kann man die Lösung durch

$$\mathbf{u}(x, t^n) = \mathbf{u}_i^n + (x - x_i)(\tilde{\mathbf{u}}_x)_i^n \quad (3.45)$$

darstellen mit einer Approximation $(\tilde{\mathbf{u}}_x)_i^n$ von $(\mathbf{u}_x)_i^n$, die mindestens der Bedingung

$$(\tilde{\mathbf{u}}_x)_i^n - (\mathbf{u}_x)_i^n = O(\Delta x) \quad (3.46)$$

genügt. Dazu gibt es eine Reihe von Möglichkeiten, die ebenfalls in [31] beschrieben und verglichen werden. Man berechnet zunächst Werte $\mathbf{u}_{i\pm}^n$ an den Rändern der Gitterzelle:

$$\mathbf{u}_{i\pm}^n = \mathbf{u}_i^n \pm \frac{\Delta x}{2} (\tilde{\mathbf{u}}_x)_i^n, \quad (3.47)$$

anschließend wird daraus der Wert von $\mathbf{u}_{i\pm}^{n+1/2}$ einen halben Zeitschritt später berechnet:

$$\mathbf{u}_{i\pm}^{n+1/2} = \mathbf{u}_{i\pm}^n + \frac{\Delta t}{2} (\mathbf{u}_t)_{i\pm}^n. \quad (3.48)$$

Dazu wird eine Approximation $(\tilde{\mathbf{u}}_t)_{i\pm}^n$ von \mathbf{u}_t benötigt. Um diese zu erhalten, verwendet man die Differentialgleichung selbst:

$$\mathbf{u}_t = -\mathcal{A}\mathbf{u}_x. \quad (3.49)$$

Mit $(\tilde{\mathbf{u}}_x)_i^n$ ist auch $(\tilde{\mathbf{u}}_t)_{i\pm}^n$ in jeder Zelle konstant, und man erhält

$$\mathbf{u}_{i\pm}^{n+1/2} = \mathbf{u}_i^n \pm \frac{1}{2} \left(1 \mp \frac{\Delta t}{\Delta x} \mathcal{A} \right) \Delta x (\tilde{\mathbf{u}}_x)_i^n. \quad (3.50)$$

Diese Werte setzt man an Stelle von \mathbf{u}_i^n in die Flußberechnung (3.40) ein.

Kapitel 4

Mehrdimensionale Systeme auf kartesischen Gittern

In diesem Kapitel werden die im vorigen Kapitel vorgestellten Verfahren auf zweidimensionale Probleme, übertragen, wobei zunächst kartesische Gitter zugrundegelegt werden. Eine wünschenswerte Vorgehensweise besteht darin, mehrdimensionale Verfahren aus bekannten eindimensionalen Verfahren aufzubauen.

Die eingeführten Verfahren basieren auf der Kenntnis der Ausbreitungsrichtung. Bei einer skalaren Gleichungen ist das eine einzelne ausgezeichnete Richtung im Raum-Zeit-Diagramm. Zu ihr kann man die zugehörige charakteristische Größe bestimmen, die unverändert in diese Richtung transportiert wird. Eindimensionale Systeme lassen sich auf charakteristische Variablen transformieren, dabei entkoppeln die Gleichungen und können getrennt behandelt werden. Bei mehrdimensionalen Systemen lassen sich die Gleichungen nur dann entkoppeln, wenn die Matrizen der Flußfunktionen simultan diagonalisierbar sind. Dies ist aber im allgemeinen, so auch für die Maxwellgleichungen, nicht möglich. Die Information breitet sich kegelförmig aus, es gibt unendlich viele Ausbreitungsrichtungen. Es besteht also ein fundamentaler Unterschied bei der Informationsausbreitung in ein und zwei Raumdimensionen.

Baut man ein mehrdimensionales Verfahren aus eindimensionalen Verfahren auf, so beschreiben die eindimensionalen Verfahren die Informationsausbreitung in Richtung der Koordinatenachsen. Es gibt allerdings Probleme, bei denen die Wellenausbreitungsrichtung des Problems nicht mit einer Koordinatenrichtung zusammenfällt und sich sogar im Laufe der Zeit ändert. Diese Probleme motivierten die Entwicklung einer weiteren Klasse von Verfahren, sogenannte *rotated methods*, bei denen das Verfahren lokal gedreht angewendet wird [37]. Auch hierbei basiert das Verfahren auf eindimensionalen Verfahren, die allerdings die Ausbreitung in Richtung einer Hauptausbreitungsrichtung und einer dazu linear unabhängigen Richtung beschreiben. Schließlich wird versucht, eine dritte Klasse von Verfahren zu entwickeln, die sich nicht mehr an Achsen orientieren, sondern die Kegel der Informationsausbreitung zurückverfolgen. Diese werden *echt zweidimensionale Verfahren* genannt [12, 37].

Bei den Maxwellgleichungen breiten sich die Informationen kegelförmig aus [17]. Wegen dieser Symmetrie bereitet die Auszeichnung von Achsen, z.B. der kartesischen Koordinatenachsen, keine Probleme. Bei solchen Problemen ist das Splitting-Verfahren nach Strang eine gebräuchliche Methode [30, 32]. Dazu werden die eindimensionalen Verfahren in die verschiedenen Richtungen nacheinander angewendet, wobei die Reihenfolge der Behandlung im nächsten Zeitschritt vertauscht wird. Die CFL-Bedingung ist dabei die strengere der CFL-Bedingungen der beiden eindimensionalen Verfahren. Auch aus der Sicht der Implementierung ist somit ein zweidimensionales Verfahren einfach aus eindimensionalen Verfahren zu erhalten. Man beobachtet aber, daß auf verzerrten Koordinaten dieses Verfahren nicht in der Lage ist, eine konstante Lösung zu reproduzieren. Dies liegt daran, daß die Verfahren in die beiden Koordinatenrichtungen nicht symmetrisch verwendet werden. In manchen Fällen kann die im Zwischenschritt bestimmte Lösung auch physikalisch so unsinnig sein, daß bei der Konstruktion des Verfahrens gemachte Voraussetzungen verletzt werden, und das Verfahren deshalb scheitert.

In diesem Kapitel werden deshalb Verfahren konstruiert und untersucht, die symmetrisch aus eindimensionalen Verfahren aufgebaut sind. Im ersten Abschnitt wird die nötige Definition eines Verfahrens in Erhaltungsform in zwei Raumdimensionen angegeben. Im darauf folgenden Abschnitt wird an einem skalaren Beispiel untersucht, warum ein einfaches Addieren zweier eindimensionaler Verfahren zweiter Ordnung kein zweidimensionales Verfahren zweiter Ordnung ergibt. Dies führt auf einen ersten Vorschlag, wie man Verfahren zweiter Ordnung erhalten kann, indem der identifizierte fehlende Term direkt hinzugefügt wird. Im dritten Abschnitt wird eine Erweiterung des MUSCL-Ansatzes auf zweidimensionale Probleme vorgestellt, wie sie in [7] zu finden ist. Im vierten Abschnitt wird kurz das Strangsplitting vorgestellt, und im fünften Abschnitt werden die verschiedenen Verfahren anhand numerischer Ergebnisse verglichen.

4.1 Verfahren erster Ordnung

Wir beginnen mit der Definition von Verfahren in Erhaltungsform in zwei Raumdimensionen. Die Gleichung

$$\mathbf{u}_t + \mathcal{A}\mathbf{u}_x + \mathcal{B}\mathbf{u}_y = 0, \quad \mathcal{A}, \mathcal{B} \in \mathbb{R}^{m \times m} \quad (4.1)$$

wird über eine Gitterzelle und einen Zeitschritt integriert. Wieder seien Δx , Δy und Δt positive reelle Zahlen, die die Raumschrittweiten und die Zeitschrittweite bezeichnen.

Umformungen entsprechend denen in Abschnitt 3.2 führen auf die folgende Definition:

Definition 4.1 (Verfahren in Erhaltungsform in zwei Raumdimensionen) *Ein Verfahren in der Form*

$$\mathbf{u}_{ij}^{n+1} = \mathbf{u}_{ij}^n - \frac{\Delta t}{\Delta x} (\mathbf{G}_{i+1/2,j} - \mathbf{G}_{i-1/2,j}) - \frac{\Delta t}{\Delta y} (\mathbf{H}_{i,j+1/2} - \mathbf{H}_{i,j-1/2}) \quad (4.2)$$

mit numerischen Flüssen \mathbf{G} und \mathbf{H} und den Anfangsdaten

$$\mathbf{u}_{ij}^0 = \frac{1}{\Delta x \Delta y} \int_{x_{i-1/2}}^{x_{i+1/2}} \int_{y_{i-1/2}}^{y_{i+1/2}} \mathbf{w}(x, y) dx dy \quad (4.3)$$

zur Approximation des Cauchyproblems

$$\mathbf{u}_t + \mathcal{A}\mathbf{u}_x + \mathcal{B}\mathbf{u}_y = 0 \quad (4.4)$$

$$\mathbf{u}(x, y, 0) = \mathbf{w}(x, y) \quad (4.5)$$

heißt Verfahren in Erhaltungsform, falls die Flüsse lipschitzstetig in allen Argumenten und konsistent mit den physikalischen Flüssen sind, das heißt

$$\begin{aligned} \mathbf{G}(\mathbf{u}, \dots, \mathbf{u}) &= \mathcal{A}\mathbf{u} \\ \mathbf{H}(\mathbf{u}, \dots, \mathbf{u}) &= \mathcal{B}\mathbf{u} \end{aligned} \quad \forall \mathbf{u} \in \mathbb{R}^m. \quad (4.6)$$

Erfolgt die Flußberechnung über eindimensionale Riemannprobleme, so sprechen wir von einem *zweidimensionalen Godunov-Verfahren*. Zur Berechnung des Flusses $\mathbf{G}_{i+1/2,j}$, des „Flusses in x -Richtung“, wird das Riemannproblem, siehe Definition 3.3, mit der Matrix \mathcal{A} und den Anfangswerten $\mathbf{u}_l = \mathbf{u}_{ij}$ und $\mathbf{u}_r = \mathbf{u}_{i+1,j}$ gelöst. Zur Berechnung des Flusses $\mathbf{H}_{i,j+1/2}$, des „Flusses in y -Richtung“, werden \mathcal{B} , $\mathbf{u}_l = \mathbf{u}_{ij}$ und $\mathbf{u}_r = \mathbf{u}_{i,j+1}$ verwendet. Ist das System strikt hyperbolisch, so ergeben sich mit der Rechnung aus Abschnitt 3.2 die numerischen Flüsse

$$\mathbf{G}_{i+1/2,j} = \mathcal{A}^+ \mathbf{u}_{ij}^n + \mathcal{A}^- \mathbf{u}_{i+1,j}^n, \quad (4.7)$$

$$\mathbf{H}_{i,j+1/2} = \mathcal{B}^+ \mathbf{u}_{ij}^n + \mathcal{B}^- \mathbf{u}_{i,j+1}^n. \quad (4.8)$$

Die explizite Gestalt der Flüsse für die Maxwellgleichungen ist in Anhang A angegeben.

Satz 3 Die CFL-Bedingung für das zweidimensionale Godunov-Verfahren lautet für die Maxwellgleichungen

$$c \frac{\Delta t}{\sqrt{\Delta x^2 + \Delta y^2}} \leq \frac{1}{2}. \quad (4.9)$$

Dabei bezeichnet c die Lichtgeschwindigkeit.

Beweis Wir führen den Beweis mit vollständiger Induktion nach n und betrachten zunächst $t^1 = \Delta t$. Bei den Maxwellgleichungen breitet sich die Information kegelförmig aus. Der Abhängigkeitsbereich des Punktes $(\mathbf{x}_{ij}, \Delta t)$ ist der Kreis

$$\mathcal{D}(\mathbf{x}_{ij}, \Delta t) = \{\mathbf{x} \in \mathbb{R}^2 : \sqrt{\|\mathbf{x} - \mathbf{x}_{ij}\|^2} \leq c\Delta t\}, \quad (4.10)$$

da alle Linearkombinationen $\alpha\mathcal{A} + \beta\mathcal{B}$ mit $\alpha^2 + \beta^2 = 1$ außer Null jeweils die Eigenwerte $\pm c$ haben. $\|\cdot\|$ bezeichnet die euklidische Norm im \mathbb{R}^2 . Der numerische Abhängigkeitsbereich besteht aus den Zellen mit den Mittelpunkten $\{\mathbf{x}_{ij}, \mathbf{x}_{i\pm 1, j}, \mathbf{x}_{i, j\pm 1}\}$. Der größte Kreis um \mathbf{x}_{ij} in dieser Menge hat den Radius

$$r = \frac{1}{2}\sqrt{\Delta x^2 + \Delta y^2}. \quad (4.11)$$

Es gilt also $\mathcal{D}(\mathbf{x}_{ij}, \Delta t) \subseteq \mathcal{D}_{num}(\mathbf{x}_{ij}, \Delta t)$ genau dann, wenn

$$\frac{1}{2}\sqrt{\Delta x^2 + \Delta y^2} \geq c\Delta t. \quad (4.12)$$

Es gelte nun $\mathcal{D}(\mathbf{x}_{ij}, t^{n-1}) \subseteq \mathcal{D}_{num}(\mathbf{x}_{ij}, t^{n-1})$ für alle $i, j \in \mathbb{Z}$. Dann folgt

$$\begin{aligned} \mathcal{D}(\mathbf{x}_{ij}, t^n) &= \bigcup_{\|\mathbf{x} - \mathbf{x}_{ij}\| \leq c\Delta t} \mathcal{D}(\mathbf{x}, t^{n-1}) \\ &\subseteq \bigcup_{\substack{(l,k) \in \\ \{(i\pm 1, j), (i, j), (i, j\pm 1)\}}} \mathcal{D}_{num}(\mathbf{x}_{lk}, t^{n-1}) \\ &= \mathcal{D}_{num}(\mathbf{x}_{ij}, t^n), \end{aligned} \quad (4.13)$$

und damit die Behauptung für alle $n \in \mathbb{N}$. \square

Neben der Erhöhung der Ordnung geht es in den nächsten Abschnitten auch darum, eine günstigere CFL-Bedingung zu erhalten.

4.2 Der Übergang von erster zu zweiter Ordnung

Bei der Konstruktion von Verfahren zweiter Ordnung auf kartesischen Gittern für (4.1) tritt beim Übergang von einer zu mehreren Raumdimensionen folgendes Problem auf: Kennt man als Diskretisierung der eindimensionalen Gleichungen

$$\mathbf{u}_t + \mathcal{A}\mathbf{u}_x = 0, \quad (4.14)$$

$$\mathbf{u}_t + \mathcal{B}\mathbf{u}_y = 0 \quad (4.15)$$

die einstufigen Verfahren

$$\mathbf{u}_{ij}^{n+1} = \mathbf{u}_{ij}^n - \Delta t \mathcal{A} Q_x \mathbf{u}_{ij}^n, \quad (4.16)$$

$$\mathbf{u}_{ij}^{n+1} = \mathbf{u}_{ij}^n - \Delta t \mathcal{B} Q_y \mathbf{u}_{ij}^n \quad (4.17)$$

mit Differenzenoperatoren Q_x, Q_y für die Ableitung nach x und y (das können beispielsweise die Differenzen der Approximationen der Flüsse in x - bzw. y -Richtung sein), die die Gleichungen (4.14) und (4.15) jeweils zweiter Ordnung approximieren, dann ist das Verfahren

$$\mathbf{u}_{ij}^{n+1} = \mathbf{u}_{ij}^n - \mathcal{A}\Delta t Q_x \mathbf{u}_{ij}^n - \mathcal{B}\Delta t Q_y \mathbf{u}_{ij}^n \quad (4.18)$$

im allgemeinen dennoch nicht zweiter Ordnung.

Beispiel 4.2 Als Beispiel betrachten wir das Lax-Wendroff-Verfahren zur Approximation der eindimensionalen Transportgleichung

$$u_t + au_x = 0. \quad (4.19)$$

Es lautet

$$\begin{aligned} u_i^{n+1} &= Q(u_i^n) \\ &= u_i^n - \Delta t a Q_x(u_i^n) \end{aligned} \quad (4.20)$$

mit

$$Q_x(u_i^n) = \frac{1}{2\Delta x} (u_{i+1}^n - u_{i-1}^n) - \frac{a\Delta t}{2\Delta x^2} (u_{i+1}^n - 2u_i^n + u_{i-1}^n). \quad (4.21)$$

Wir nehmen an, daß u in x und t beliebig oft differenzierbar ist und untersuchen den lokalen Diskretisierungsfehler $\|u(x_i, t^{n+1}) - Qu(x_i, t^n)\|$ mit einer diskreten Version einer Norm im Raum der differenzierbaren Funktionen. Die Taylorentwicklung von $u(x_i, t^{n+1})$ um (x_i, t^n) lautet

$$u(x_i, t^{n+1}) = u(x_i, t^n) + \Delta t u_t(x_i, t^n) + \frac{\Delta t^2}{2} u_{tt}(x_i, t^n) + O(\Delta t^3) \quad (4.22)$$

und die Taylorentwicklung von $u(x_{i\pm 1}, t^n)$ um (x_i, t^n) lautet

$$u(x_{i\pm 1}, t^n) = u(x_i, t^n) \pm \Delta x u_x(x_i, t^n) + \frac{\Delta x^2}{2} u_{xx}(x_i, t^n) \pm \frac{\Delta x^3}{6} u_{xxx}(x_i, t^n) + O(\Delta x^4). \quad (4.23)$$

Setzt man diese Entwicklungen ein, so erhält man

$$\begin{aligned} &\|u(x_i, t^{n+1}) - Qu(x_i, t^n)\| \\ &\leq \|\Delta t (u_t(x_i, t^n) + au_x(x_i, t^n)) - \frac{\Delta t^2}{2} (u_{tt}(x_i, t^n) - a^2 u_{xx}(x_i, t^n))\| \\ &\quad + \Delta t O(\Delta t^2, \Delta x^2) \end{aligned} \quad (4.24)$$

Aus (4.19) folgt

$$u_{tt} - a^2 u_{xx} = 0 \quad \forall (x, t) \in \mathbb{R} \times \mathbb{R}_0^+, \quad (4.25)$$

so daß

$$\|u(x_i, t^{n+1}) - Qu(x_i, t^n)\| \leq \Delta t O(\Delta t^2, \Delta x^2) \quad (4.26)$$

Das Verfahren hat also nach [31] die Konsistenzordnung zwei. Für ein zusammengesetztes Verfahren

$$\begin{aligned} u_{ij}^{n+1} &= Q(u_{ij}^n) \\ &= u_{ij}^n - \Delta t a Q_x(u_{ij}^n) - \Delta t b Q_y(u_{ij}^n) \end{aligned} \quad (4.27)$$

mit

$$Q_x(u_{ij}^n) = \frac{1}{2\Delta x} (u_{i+1,j}^n - u_{i-1,j}^n) - \frac{a\Delta t}{2\Delta x^2} (u_{i+1,j}^n - 2u_{ij}^n + u_{i-1,j}^n) \quad (4.28)$$

$$Q_y(u_{ij}^n) = \frac{1}{2\Delta y} (u_{i,j+1}^n - u_{i,j-1}^n) - \frac{b\Delta t}{2\Delta y^2} (u_{i,j+1}^n - 2u_{ij}^n + u_{i,j-1}^n) \quad (4.29)$$

zur Approximation von

$$u_t + au_x + bu_y = 0 \quad (4.30)$$

erhält man analog

$$\begin{aligned} \|u(x_{ij}, y_{ij}, t^{n+1}) - Qu(x_{ij}, y_{ij}, t^n)\| \leq \\ \|\Delta t (u_t(x_{ij}, y_{ij}, t^n) + au_x(x_{ij}, y_{ij}, t^n) + bu_y(x_{ij}, y_{ij}, t^n)) \\ - \frac{\Delta t^2}{2} (u_{tt}(x_{ij}, y_{ij}, t^n) - a^2u_{xx}(x_{ij}, y_{ij}, t^n) - b^2u_{yy}(x_{ij}, y_{ij}, t^n))\| \\ + \Delta t O(\Delta t^2, \Delta x^2, \Delta y^2). \end{aligned} \quad (4.31)$$

Ausnutzen der Differentialgleichung (4.30) ergibt allerdings

$$u_{tt} - a^2u_{xx} - b^2u_{yy} - 2abu_{xy} = 0 \quad \forall (x, y, t) \in \mathbb{R}^2 \times \mathbb{R}_0^+. \quad (4.32)$$

Eben der letzte Term mit den gemischten Ableitungen fehlt in (4.31), so daß das zusammengesetzte Verfahren nicht von zweiter Ordnung ist.

Bei der Konstruktion zweidimensionaler Verfahren zweiter Ordnung kommt es nun darauf an, eine Approximation des fehlenden Terms hinzuzufügen.

Zuerst wird der fehlende Term direkt hinzugefügt.

Wir betrachten zunächst noch einmal den Fall der skalaren Gleichung. Fügt man in (4.30) den Term $\Delta t^2 abQ_x Q_y u_{ij}^n$ hinzu:

$$u_{ij}^{n+1} = u_{ij}^n - a\Delta t Q_x u_{ij}^n - b\Delta t Q_y u_{ij}^n + \Delta t^2 abQ_x Q_y u_{ij}^n, \quad (4.33)$$

so erhält man

$$u_{ij}^{n+1} = (I - a\Delta t Q_x - b\Delta t Q_y + \Delta t abQ_x Q_y) u_{ij}^n, \quad (4.34)$$

was man zu

$$u_{ij}^{n+1} = (I - a\Delta t Q_x) (I - b\Delta t Q_y) u_{ij}^n \quad (4.35)$$

umformen kann. Daß dieses Verfahren zweiter Ordnung im Raum ist, zeigt Sod in [40, Kapitel III.9.]. Speziell für das Lax-Wendroff-Verfahren ist der hinzugefügte Term eine

Approximation zweiter Ordnung von $\Delta t^2 ab u_{xy}$, wie man mit Hilfe von Taylorentwicklungen zeigen kann.

Die Lösung der letzten Gleichung kann auch in zwei Schritten erfolgen:

$$u^* = (I - a\Delta t Q_x) u_{ij}^n \quad (4.36)$$

$$u_{ij}^{n+1} = (I - b\Delta t Q_y) u^*, \quad (4.37)$$

wobei in diesen beiden Gleichungen die eindimensionalen Verfahren in anderer Schreibweise wieder auftauchen. Die im Zwischenschritt erhaltene Größe u^* wird üblicherweise mit $u_{ij}^{n+1/2}$ bezeichnet. Man erhält eine einfache Form des Dimensionensplittings. In diesem Fall ist auch das Verfahren in anderer Reihenfolge

$$u^* = (I - b\Delta t Q_y) u_{ij}^n \quad (4.38)$$

$$u_{ij}^{n+1} = (I - a\Delta t Q_x) u^* \quad (4.39)$$

ein Verfahren zweiter Ordnung.

Das vorliegende Ergebnis kann direkt auf Systeme

$$\mathbf{u}_t + \mathcal{A}\mathbf{u}_x + \mathcal{B}\mathbf{u}_y = 0, \quad \mathcal{A}, \mathcal{B} \in \mathbb{R}^{m \times m}, \quad (4.40)$$

übertragen werden, falls \mathcal{A} und \mathcal{B} kommutieren, d.h. $\mathcal{A}\mathcal{B} = \mathcal{B}\mathcal{A}$. Ist das nicht der Fall, so entsteht durch Splitting in dieser Form kein Verfahren zweiter Ordnung, man muß andere Terme ergänzen. Kennt man als Diskretisierung der eindimensionalen Gleichungen

$$\mathbf{u}_t + \mathcal{A}\mathbf{u}_x = 0, \quad (4.41)$$

$$\mathbf{u}_t + \mathcal{B}\mathbf{u}_y = 0 \quad (4.42)$$

Verfahren zweiter Ordnung

$$\mathbf{u}_{ij}^{n+1} = \mathbf{u}_{ij}^n - \Delta t \mathcal{A} Q_x \mathbf{u}_{ij}^n, \quad (4.43)$$

$$\mathbf{u}_{ij}^{n+1} = \mathbf{u}_{ij}^n - \Delta t \mathcal{B} Q_y \mathbf{u}_{ij}^n, \quad (4.44)$$

so kann man zeigen, daß

$$\mathbf{u}_{ij}^{n+1} = \frac{1}{2} [(I - \Delta t \mathcal{B} Q_y) (I - \Delta t \mathcal{A} Q_x) + (I - \Delta t \mathcal{A} Q_x) (I - \Delta t \mathcal{B} Q_y)] \mathbf{u}_{ij}^n \quad (4.45)$$

ein Verfahren zweiter Ordnung im Raum ist [40, Kapitel III.9]. Hier wurde gegenüber dem Verfahren

$$\mathbf{u}_{ij}^{n+1} = \mathbf{u}_{ij}^n - \mathcal{A} \Delta t Q_x \mathbf{u}_{ij}^n - \mathcal{B} \Delta t Q_y \mathbf{u}_{ij}^n \quad (4.46)$$

der Term $\frac{\Delta t^2}{2} (\mathcal{A} Q_x \mathcal{B} Q_y + \mathcal{B} Q_y \mathcal{A} Q_x) \mathbf{u}_{ij}^n$ hinzugefügt. Man erhält ein Verfahren, das in jedem Schritt den Mittelwert über die Flußberechnung in der einen und in der anderen

Reihenfolge benutzt. Als Hintereinanderausführung eindimensionaler Verfahren ist dieses Verfahren stabil unter der strengeren der CFL-Bedingungen der beteiligten eindimensionalen Verfahren.

Für Verfahren, die eindimensional in Erhaltungsform sind, kann man das entstandene zweidimensionale Verfahren wieder in Erhaltungsform schreiben:

Satz 4 *Es seien*

$$\mathbf{u}_{ij}^{n+1} = \mathbf{u}_{ij}^n - \frac{\Delta t}{\Delta x} \left(\mathbf{g}(\mathbf{u}_{i+,j}^{n+1/2}, \mathbf{u}_{(i+1)-,j}^{n+1/2}) - \mathbf{g}(\mathbf{u}_{(i-1)+,j}^{n+1/2}, \mathbf{u}_{i-,j}^{n+1/2}) \right), \quad (4.47)$$

$$\mathbf{u}_{ij}^{n+1} = \mathbf{u}_{ij}^n - \frac{\Delta t}{\Delta y} \left(\mathbf{h}(\mathbf{u}_{i,j+}^{n+1/2}, \mathbf{u}_{i,(j+1)-}^{n+1/2}) - \mathbf{h}(\mathbf{u}_{i,(j-1)+}^{n+1/2}, \mathbf{u}_{i,j-}^{n+1/2}) \right) \quad (4.48)$$

zwei eindimensionale Verfahren in Erhaltungsform zweiter Ordnung in x- bzw. in y-Richtung. Dann ist das zweidimensionale Verfahren, das durch Hinzufügen des Korrekturterms zu einem Verfahren zweiter Ordnung gemacht wurde, wieder ein Verfahren in Erhaltungsform

$$\begin{aligned} \mathbf{u}_{ij}^{n+1} = \mathbf{u}_{ij}^n - \frac{\Delta t}{\Delta x} \left(\mathbf{G}(\mathbf{u}_{i+,j}^{n+1/2}, \mathbf{u}_{(i+1)-,j}^{n+1/2}) - \mathbf{G}(\mathbf{u}_{(i-1)+,j}^{n+1/2}, \mathbf{u}_{i-,j}^{n+1/2}) \right) \\ - \frac{\Delta t}{\Delta y} \left(\mathbf{H}(\mathbf{u}_{i,j+}^{n+1/2}, \mathbf{u}_{i,(j+1)-}^{n+1/2}) - \mathbf{H}(\mathbf{u}_{i,(j-1)+}^{n+1/2}, \mathbf{u}_{i,j-}^{n+1/2}) \right) \end{aligned} \quad (4.49)$$

mit den numerischen Flüssen

$$\begin{aligned} \mathbf{G} = \mathbf{g} \left(\mathbf{u}_{i+,j}^n - \frac{\Delta t}{2\Delta y} \left(\mathbf{h}(\mathbf{u}_{ij}^n, \mathbf{u}_{i,j+1}^n) - \mathbf{h}(\mathbf{u}_{i,j-1}^n, \mathbf{u}_{ij}^n) \right), \right. \\ \left. \mathbf{u}_{(i+1)-,j}^n - \frac{\Delta t}{2\Delta y} \left(\mathbf{h}(\mathbf{u}_{i+1,j}^n, \mathbf{u}_{i+1,j+1}^n) - \mathbf{h}(\mathbf{u}_{i+1,j-1}^n, \mathbf{u}_{i+1,j}^n) \right) \right), \end{aligned} \quad (4.50)$$

$$\begin{aligned} \mathbf{H} = \mathbf{h} \left(\mathbf{u}_{i,j+}^n - \frac{\Delta t}{2\Delta x} \left(\mathbf{g}(\mathbf{u}_{ij}^n, \mathbf{u}_{i+1,j}^n) - \mathbf{g}(\mathbf{u}_{i-1,j}^n, \mathbf{u}_{ij}^n) \right), \right. \\ \left. \mathbf{u}_{i,(j+1)-}^n - \frac{\Delta t}{2\Delta x} \left(\mathbf{g}(\mathbf{u}_{i,j+1}^n, \mathbf{u}_{i+1,j+1}^n) - \mathbf{g}(\mathbf{u}_{i-1,j+1}^n, \mathbf{u}_{i,j+1}^n) \right) \right). \end{aligned} \quad (4.51)$$

Beweis Für die eindimensionalen Verfahren in Erhaltungsform in x-Richtung und in y-Richtung erhält man wegen

$$AQ_x \mathbf{u}_{ij}^n = \frac{1}{\Delta x} \left(\mathbf{g}(\mathbf{u}_{i+,j}^{n+1/2}, \mathbf{u}_{(i+1)-,j}^{n+1/2}) - \mathbf{g}(\mathbf{u}_{(i-1)+,j}^{n+1/2}, \mathbf{u}_{i-,j}^{n+1/2}) \right), \quad (4.52)$$

$$BQ_y \mathbf{u}_{ij}^n = \frac{1}{\Delta y} \left(\mathbf{h}(\mathbf{u}_{i,j+}^{n+1/2}, \mathbf{u}_{i,(j+1)-}^{n+1/2}) - \mathbf{h}(\mathbf{u}_{i,(j-1)+}^{n+1/2}, \mathbf{u}_{i,j-}^{n+1/2}) \right) \quad (4.53)$$

für den Korrekturterm die Darstellung

$$\begin{aligned}
\Delta x \Delta y (\mathcal{A}Q_x \mathcal{B}Q_y + \mathcal{B}Q_y \mathcal{A}Q_x) \mathbf{u}_{ij}^n = & \\
& \mathbf{g} \left(\mathbf{h}(\mathbf{u}_{i,j+}^{n+1/2}, \mathbf{u}_{i,(j+1)-}^{n+1/2}) - \mathbf{h}(\mathbf{u}_{i,(j-1)+}^{n+1/2}, \mathbf{u}_{i,j-}^{n+1/2}), \right. \\
& \quad \left. \mathbf{h}(\mathbf{u}_{i+1,j+}^{n+1/2}, \mathbf{u}_{i+1,(j+1)-}^{n+1/2}) - \mathbf{h}(\mathbf{u}_{i+1,(j-1)+}^{n+1/2}, \mathbf{u}_{i+1,j-}^{n+1/2}) \right) \\
- \mathbf{g} \left(\mathbf{h}(\mathbf{u}_{i-1,j+}^{n+1/2}, \mathbf{u}_{i-1,(j+1)-}^{n+1/2}) - \mathbf{h}(\mathbf{u}_{i-1,(j-1)+}^{n+1/2}, \mathbf{u}_{i-1,j-}^{n+1/2}), \right. \\
& \quad \left. \mathbf{h}(\mathbf{u}_{i,j+}^{n+1/2}, \mathbf{u}_{i,(j+1)-}^{n+1/2}) - \mathbf{h}(\mathbf{u}_{i,(j-1)+}^{n+1/2}, \mathbf{u}_{i,j-}^{n+1/2}) \right) \\
+ \mathbf{h} \left(\mathbf{g}(\mathbf{u}_{i+,j}^{n+1/2}, \mathbf{u}_{(i+1)-,j}^{n+1/2}) - \mathbf{g}(\mathbf{u}_{(i-1)-,j}^{n+1/2}, \mathbf{u}_{i+,j}^{n+1/2}), \right. \\
& \quad \left. \mathbf{g}(\mathbf{u}_{i+,j+1}^{n+1/2}, \mathbf{u}_{(i+1)-,j+1}^{n+1/2}) - \mathbf{g}(\mathbf{u}_{(i-1)+,j+1}^{n+1/2}, \mathbf{u}_{i+,j+1}^{n+1/2}) \right) \\
- \mathbf{h} \left(\mathbf{g}(\mathbf{u}_{i+,j-1}^{n+1/2}, \mathbf{u}_{(i+1)-,j-1}^{n+1/2}) - \mathbf{g}(\mathbf{u}_{(i-1)+,j-1}^{n+1/2}, \mathbf{u}_{i+,j-1}^{n+1/2}), \right. \\
& \quad \left. \mathbf{g}(\mathbf{u}_{i+,j}^{n+1/2}, \mathbf{u}_{(i+1)-,j}^{n+1/2}) - \mathbf{g}(\mathbf{u}_{(i-1)+,j}^{n+1/2}, \mathbf{u}_{i+,j}^{n+1/2}) \right). \tag{4.54}
\end{aligned}$$

Er besteht aus einem Hintereinanderanwenden der Flüsse. Um die zweite Ordnung zu erhalten, reicht es aus, bei der inneren Flußauswertung die Flußberechnung in erster Ordnung zu verwenden, also

$$\begin{aligned}
\Delta x \Delta y (\mathcal{A}Q_x \mathcal{B}Q_y + \mathcal{B}Q_y \mathcal{A}Q_x) \mathbf{u}_{ij}^n = & \\
& \mathbf{g} \left(\mathbf{h}(\mathbf{u}_{ij}^n, \mathbf{u}_{i,j+1}^n) - \mathbf{h}(\mathbf{u}_{i,j-1}^n, \mathbf{u}_{ij}^n), \mathbf{h}(\mathbf{u}_{i+1,j}^n, \mathbf{u}_{i+1,j+1}^n) - \mathbf{h}(\mathbf{u}_{i+1,j-1}^n, \mathbf{u}_{i+1,j}^n) \right) \\
- \mathbf{g} \left(\mathbf{h}(\mathbf{u}_{i-1,j}^n, \mathbf{u}_{i-1,j+1}^n) - \mathbf{h}(\mathbf{u}_{i-1,j-1}^n, \mathbf{u}_{i-1,j}^n), \mathbf{h}(\mathbf{u}_{ij}^n, \mathbf{u}_{i,j+1}^n) - \mathbf{h}(\mathbf{u}_{i,j-1}^n, \mathbf{u}_{ij}^n) \right) \\
+ \mathbf{h} \left(\mathbf{g}(\mathbf{u}_{ij}^n, \mathbf{u}_{i+1,j}^n) - \mathbf{g}(\mathbf{u}_{i-1,j}^n, \mathbf{u}_{ij}^n), \mathbf{g}(\mathbf{u}_{i,j+1}^n, \mathbf{u}_{i+1,j+1}^n) - \mathbf{g}(\mathbf{u}_{i-1,j+1}^n, \mathbf{u}_{i,j+1}^n) \right) \\
- \mathbf{h} \left(\mathbf{g}(\mathbf{u}_{i,j-1}^n, \mathbf{u}_{i+1,j-1}^n) - \mathbf{g}(\mathbf{u}_{i-1,j-1}^n, \mathbf{u}_{i,j-1}^n), \mathbf{g}(\mathbf{u}_{ij}^n, \mathbf{u}_{i+1,j}^n) - \mathbf{g}(\mathbf{u}_{i-1,j}^n, \mathbf{u}_{ij}^n) \right). \tag{4.55}
\end{aligned}$$

Dieser Ausdruck läßt sich auf die ursprünglichen Flüsse verteilen, und man erhält (4.50). Die Lipschitzstetigkeit dieser Flüsse folgt aus der Tatsache, daß Addition und Hintereinanderausführung lipschitzstetiger Funktionen wieder lipschitzstetig sind. Die Konsistenz mit dem physikalischen Fluß folgt aus der Konsistenz der Flüsse erster Ordnung. \square

Beispiel 4.3 Für das Godunov-Verfahren mit den numerischen Flüssen

$$\mathbf{g}(\mathbf{u}_{ij}^n, \mathbf{u}_{i+1,j}^n) = \mathcal{A}^+ \mathbf{u}_{ij}^n + \mathcal{A}^- \mathbf{u}_{i+1,j}^n, \tag{4.56}$$

$$\mathbf{h}(\mathbf{u}_{ij}^n, \mathbf{u}_{i,j+1}^n) = \mathcal{B}^+ \mathbf{u}_{ij}^n + \mathcal{B}^- \mathbf{u}_{i,j+1}^n \tag{4.57}$$

erhält man aus (4.55)

$$\begin{aligned}
\Delta x \Delta y (\mathcal{A}Q_x \mathcal{B}Q_y + \mathcal{B}Q_y \mathcal{A}Q_x) \mathbf{u}_{ij}^n = & \\
& \mathcal{A}^+ \mathcal{B}^+ (\mathbf{u}_{ij} - \mathbf{u}_{i,j-1} + \mathbf{u}_{i-1,j-1} - \mathbf{u}_{i-1,j}) + \mathcal{A}^+ \mathcal{B}^- (\mathbf{u}_{i,j+1} - \mathbf{u}_{ij} + \mathbf{u}_{i-1,j+1} - \mathbf{u}_{i-1,j}) \\
+ \mathcal{A}^- \mathcal{B}^+ (\mathbf{u}_{i+1,j} - \mathbf{u}_{i+1,j-1} + \mathbf{u}_{ij} - \mathbf{u}_{i,j-1}) + \mathcal{A}^- \mathcal{B}^- (\mathbf{u}_{i+1,j+1} - \mathbf{u}_{i+1,j} + \mathbf{u}_{i,j+1} - \mathbf{u}_{i,j}) \\
+ \mathcal{B}^+ \mathcal{A}^+ (\mathbf{u}_{ij} - \mathbf{u}_{i-1,j} + \mathbf{u}_{i-1,j-1} - \mathbf{u}_{i,j-1}) + \mathcal{B}^+ \mathcal{A}^- (\mathbf{u}_{i+1,j} - \mathbf{u}_{ij} + \mathbf{u}_{i,j-1} - \mathbf{u}_{i+1,j-1}) \\
+ \mathcal{B}^- \mathcal{A}^+ (\mathbf{u}_{i,j+1} - \mathbf{u}_{i-1,j+1} + \mathbf{u}_{i-1,j} - \mathbf{u}_{ij}) + \mathcal{B}^- \mathcal{A}^- (\mathbf{u}_{i+1,j+1} - \mathbf{u}_{i,j+1} + \mathbf{u}_{ij} - \mathbf{u}_{i+1,j}).
\end{aligned}$$

Mit Hilfe der Abkürzungen

$$\Delta_x \mathbf{u}_{ij}^n := \mathbf{u}_{ij}^n - \mathbf{u}_{i-1,j}^n \quad (4.58)$$

$$\Delta_y \mathbf{u}_{ij}^n := \mathbf{u}_{ij}^n - \mathbf{u}_{i,j-1}^n \quad (4.59)$$

läßt sich der letzte Ausdruck kürzer schreiben

$$\begin{aligned} \Delta_x \Delta_y (\mathcal{A} \mathcal{Q}_x \mathcal{B} \mathcal{Q}_y + \mathcal{B} \mathcal{Q}_y \mathcal{A} \mathcal{Q}_x) \mathbf{u}_{ij}^n = \\ \mathcal{A}^+ \mathcal{B}^+ (\Delta_y \mathbf{u}_{ij} - \Delta_y \mathbf{u}_{i-1,j}) + \mathcal{A}^+ \mathcal{B}^- (\Delta_y \mathbf{u}_{i,j+1} - \Delta_y \mathbf{u}_{i-1,j+1}) \\ + \mathcal{A}^- \mathcal{B}^+ (\Delta_y \mathbf{u}_{i+1,j} - \Delta_y \mathbf{u}_{ij}) + \mathcal{A}^- \mathcal{B}^- (\Delta_y \mathbf{u}_{i+1,j+1} - \Delta_y \mathbf{u}_{i,j+1}) \\ + \mathcal{B}^+ \mathcal{A}^+ (\Delta_x \mathbf{u}_{ij} - \Delta_x \mathbf{u}_{i,j-1}) + \mathcal{B}^+ \mathcal{A}^- (\Delta_x \mathbf{u}_{i+1,j} - \Delta_x \mathbf{u}_{i+1,j-1}) \\ + \mathcal{B}^- \mathcal{A}^+ (\Delta_x \mathbf{u}_{i,j+1} - \Delta_x \mathbf{u}_{ij}) + \mathcal{B}^- \mathcal{A}^- (\Delta_x \mathbf{u}_{i+1,j+1} - \Delta_x \mathbf{u}_{i+1,j}). \end{aligned} \quad (4.60)$$

Den hinzugefügten Term verteilt man auf die beiden numerischen Flüsse und erhält modifizierte Godunovflüsse:

$$\begin{aligned} \mathbf{G}_{i+1/2,j}^{n+1/2} &= \mathbf{g}_{i+1/2,j}^{n+1/2} \\ &\quad - \frac{\Delta t}{2\Delta y} \left(\mathcal{A}^+ \mathcal{B}^+ \Delta_y \mathbf{u}_{ij} + \mathcal{A}^+ \mathcal{B}^- \Delta_y \mathbf{u}_{i,j+1} \right. \\ &\quad \left. + \mathcal{A}^- \mathcal{B}^+ \Delta_y \mathbf{u}_{i+1,j} + \mathcal{A}^- \mathcal{B}^- \Delta_y \mathbf{u}_{i+1,j+1} \right) \\ \mathbf{H}_{i,j+1/2}^{n+1/2} &= \mathbf{h}_{i,j+1/2}^{n+1/2} \\ &\quad - \frac{\Delta t}{2\Delta x} \left(\mathcal{B}^+ \mathcal{A}^+ \Delta_x \mathbf{u}_{ij} + \mathcal{B}^+ \mathcal{A}^- \Delta_x \mathbf{u}_{i+1,j} \right. \\ &\quad \left. + \mathcal{B}^- \mathcal{A}^+ \Delta_x \mathbf{u}_{i,j+1} + \mathcal{B}^- \mathcal{A}^- \Delta_x \mathbf{u}_{i+1,j+1} \right). \end{aligned} \quad (4.61)$$

Diese Flußmodifikation ist in einer Arbeit von LeVeque zu finden [25]. Für die Maxwellgleichungen lautet die CFL-Bedingung dieses Verfahrens

$$c \frac{\Delta t}{\min\{\Delta x, \Delta y\}} \leq 1, \quad (4.62)$$

dabei bezeichnet c die Lichtgeschwindigkeit.

4.3 Ein zweidimensionaler MUSCL-Ansatz

In diesem Abschnitt wird die in Abschnitt 3.2 für eine Raumdimension beschriebene MUSCL-Idee auf zwei Raumdimensionen übertragen. Ausgangspunkt dafür ist das in Definition 4.1 erklärte zweidimensionale Verfahren in Erhaltungsform.

Wie beim eindimensionalen MUSCL-Ansatz werden die Argumente der Flußberechnung durch auf die Zellränder extrapolierte Werte $\hat{\mathbf{u}}_{i\pm,j}^n, \hat{\mathbf{u}}_{i,j\pm}^n$ ersetzt, die zusätzlich noch zur

Zeit $t^{n+1/2}$ berechnet werden müssen. Damit erhält man die zweite Ordnung in Raum und Zeit.

Mit $(\tilde{\mathbf{u}}_x)_{ij}^n$ und $(\tilde{\mathbf{u}}_y)_{ij}^n$ werden Approximationen von $(\mathbf{u}_x)_{ij}^n$ und $(\mathbf{u}_y)_{ij}^n$ bezeichnet. Damit erhält man

$$\hat{\mathbf{u}}_{i\pm,j}^n = \mathbf{u}_{ij}^n \pm \frac{\Delta x}{2} (\tilde{\mathbf{u}}_x)_{ij}^n, \quad (4.63)$$

$$\hat{\mathbf{u}}_{i,j\pm}^n = \mathbf{u}_{ij}^n \pm \frac{\Delta y}{2} (\tilde{\mathbf{u}}_y)_{ij}^n. \quad (4.64)$$

Für die Extrapolation in der Zeit erhält man

$$\hat{\mathbf{u}}_{i\pm,j}^{n+1/2} = \mathbf{u}_{ij}^n \pm \frac{\Delta x}{2} (\tilde{\mathbf{u}}_x)_{ij}^n + \frac{\Delta t}{2} (\mathbf{u}_t)_{ij}^n, \quad (4.65)$$

$$\hat{\mathbf{u}}_{i,j\pm}^{n+1/2} = \mathbf{u}_{ij}^n \pm \frac{\Delta y}{2} (\tilde{\mathbf{u}}_y)_{ij}^n + \frac{\Delta t}{2} (\mathbf{u}_t)_{ij}^n, \quad (4.66)$$

wobei bereits verwendet wurde, daß die Zeitableitung in jeder Zelle konstant ist. Die Zeitableitung ersetzt man mit Hilfe der Differentialgleichung durch Raumableitungen:

$$\mathbf{u}_t = -\mathcal{A}\mathbf{u}_x - \mathcal{B}\mathbf{u}_y. \quad (4.67)$$

Im Gegensatz zum eindimensionalen Problem müssen beide Steigungsapproximationen verwendet werden, um die Zeitableitung auszudrücken. Man möchte aber die beiden Richtungen nacheinander behandeln, und verfügt deshalb unter Umständen nicht über die Steigungsapproximation in die jeweils andere Richtung. Selbst wenn man \mathbf{u}_y genauso wie \mathbf{u}_x approximiert, verwendet man dafür in der Regel einseitige Differenzenquotienten und erhält damit einen einseitigen und u. U. wechselnden numerischen Abhängigkeitsbereich, was sich negativ auf die Größe des Zeitschritts auswirkt. Für (4.65) geht man deshalb folgendermaßen vor. Für die Approximation von $\mathcal{A}\mathbf{u}_x$ benutzt man die (bekannte) Approximation $(\tilde{\mathbf{u}}_x)_{ij}^n$ von \mathbf{u}_x . \mathbf{u}_y approximiert man in diesem Teilschritt durch den zentralen Differenzenquotienten der Werte von \mathbf{u} an den Zellgrenzen:

$$\tilde{\mathbf{u}}_y = \frac{\mathbf{u}_{i,j+1/2} - \mathbf{u}_{i,j-1/2}}{\Delta y}. \quad (4.68)$$

Die Werte $\mathbf{u}_{i,j\pm 1/2}$ an den Zellgrenzen erhält man aus der Lösung des Riemannproblems für

$$\mathbf{u}_l + \mathcal{B}\mathbf{u}_y = 0 \quad (4.69)$$

mit den Anfangswerten $\mathbf{u}_l = \mathbf{u}_{i,j-1}$, $\mathbf{u}_r = \mathbf{u}_{ij}$ um $\mathbf{u}_{i,j-1/2}$ und mit den Anfangswerten $\mathbf{u}_l = \mathbf{u}_{ij}$, $\mathbf{u}_r = \mathbf{u}_{i,j+1}$ um $\mathbf{u}_{i,j+1/2}$ zu erhalten. Damit läßt sich $\mathcal{B}\mathbf{u}_y$ durch

$$\begin{aligned} \mathcal{B}\mathbf{u}_y &= \frac{1}{\Delta y} (\mathcal{B}^+ \mathbf{u}_{ij} + \mathcal{B}^- \mathbf{u}_{i,j+1} - \mathcal{B}^+ \mathbf{u}_{i,j-1} - \mathcal{B}^- \mathbf{u}_{ij}) \\ &= \frac{1}{\Delta y} (\mathbf{h}_{i,j+1/2} - \mathbf{h}_{i,j-1/2}) \end{aligned} \quad (4.70)$$

approximieren. Für die y-Richtung geht man entsprechend vor. Man erhält

$$\hat{\mathbf{u}}_{i\pm,j}^{n+1/2} = \mathbf{u}_{ij}^n \pm \frac{\Delta x}{2} (\tilde{\mathbf{u}}_x)_{ij}^n - \mathcal{A} \frac{\Delta t}{2} (\tilde{\mathbf{u}}_x)_{ij}^n - \frac{\Delta t}{2\Delta y} \left(\mathbf{h}(\mathbf{u}_{ij}^n, \mathbf{u}_{i,j+1}^n) - \mathbf{h}(\mathbf{u}_{i,j-1}^n, \mathbf{u}_{ij}^n) \right), \quad (4.71)$$

$$\hat{\mathbf{u}}_{i,j\pm}^{n+1/2} = \mathbf{u}_{ij}^n \pm \frac{\Delta y}{2} (\tilde{\mathbf{u}}_y)_{ij}^n - \mathcal{B} \frac{\Delta t}{2} (\tilde{\mathbf{u}}_y)_{ij}^n - \frac{\Delta t}{2\Delta x} \left(\mathbf{g}(\mathbf{u}_{ij}^n, \mathbf{u}_{i+1,j}^n) - \mathbf{g}(\mathbf{u}_{i-1,j}^n, \mathbf{u}_{ij}^n) \right). \quad (4.72)$$

Setzt man diese Werte in die Flußberechnung ein, so erhält man ein Verfahren zweiter Ordnung.

Im Hinblick auf eine einfache Implementierung läßt sich auch dieses Verfahren mit Hilfe der eindimensionalen Verfahren zweiter Ordnung ausdrücken. Mit den Definitionen

$$\mathbf{u}_{i\pm,j}^{n+1/2} = \mathbf{u}_{ij}^n \pm \frac{\Delta x}{2} (\tilde{\mathbf{u}}_x)_{ij}^n - \mathcal{A} \frac{\Delta t}{2} (\tilde{\mathbf{u}}_x)_{ij}^n, \quad (4.73)$$

$$\mathbf{u}_{i,j\pm}^{n+1/2} = \mathbf{u}_{ij}^n \pm \frac{\Delta y}{2} (\tilde{\mathbf{u}}_y)_{ij}^n - \mathcal{B} \frac{\Delta t}{2} (\tilde{\mathbf{u}}_y)_{ij}^n \quad (4.74)$$

wie bei den entsprechenden eindimensionalen Problemen (vergleiche (3.50)) kann man schreiben:

$$\hat{\mathbf{u}}_{i\pm,j}^{n+1/2} = \mathbf{u}_{i\pm,j}^{n+1/2} - \frac{\Delta t}{2\Delta y} \left(\mathbf{h}(\mathbf{u}_{ij}^n, \mathbf{u}_{i,j+1}^n) - \mathbf{h}(\mathbf{u}_{i,j-1}^n, \mathbf{u}_{ij}^n) \right), \quad (4.75)$$

$$\hat{\mathbf{u}}_{i,j\pm}^{n+1/2} = \mathbf{u}_{i,j\pm}^{n+1/2} - \frac{\Delta t}{2\Delta x} \left(\mathbf{g}(\mathbf{u}_{ij}^n, \mathbf{u}_{i+1,j}^n) - \mathbf{g}(\mathbf{u}_{i-1,j}^n, \mathbf{u}_{ij}^n) \right). \quad (4.76)$$

Vom extrapolierten Wert des eindimensionalen Verfahrens wird die Flußdifferenz in die jeweils andere Richtung abgezogen. Im Vergleich mit Satz 4 zeigt sich, daß auf diese Weise der Korrekturterm hinzugefügt wurde. Die CFL-Bedingung dieses Verfahrens ist wieder die strengere der CFL-Bedingungen der beiden eindimensionalen Verfahren, da es sich um eine Hintereinanderausführung von Verfahren handelt.

4.4 Splitting-Verfahren nach Strang

Weniger aufwendig als (4.45) ist das von Strang in [41] vorgeschlagene Splitting-Verfahren, das sich mit den in Abschnitt 4.2 verwendeten Bezeichnungen als

$$\mathbf{u}_{ij}^{n+1} = \left[\left(I - \frac{\Delta t}{2} BQ_y \right) \left(I - \Delta t A Q_x \right) \left(I - \frac{\Delta t}{2} BQ_y \right) \right] \mathbf{u}_{ij}^n \quad (4.77)$$

schreiben läßt. Gegenüber (4.45) werden durch dieses Verfahren einige Terme höherer Ordnung verändert. Für die Implementierung faßt man je zwei Zeitschritte zusammen und erhält

$$\mathbf{u}_{ij}^{n+1} = (I - \Delta t A Q_x) (I - \Delta t B Q_y) \mathbf{u}_{ij}^n, \quad (4.78)$$

$$\mathbf{u}_{ij}^{n+2} = (I - \Delta t B Q_y) (I - \Delta t A Q_x) \mathbf{u}_{ij}^{n+1} \quad (4.79)$$

das bedeutet, daß man in jedem Zeitschritt die Reihenfolge der Operatoren vertauscht. Nur zu Beginn und am Ende der Rechnung sind halbe Zeitschritte notwendig.

In praktischen Rechnungen auf kartesischen Koordinaten ist das Splitting-Verfahren nach Strang die gebräuchlichste Methode, mehrdimensionale Verfahren zu konstruieren. Auch für das Splitting-Verfahren nach Strang gilt die strengere der CFL-Bedingung der beiden beteiligten eindimensionalen Verfahren. Im Vergleich mit den vorher beschriebenen Verfahren kommt man mit vier Flußauswertungen pro Zeitschritt aus, während es bei (4.45) doppelt so viele sind.

4.5 Numerische Ergebnisse

Die vorgestellten Verfahren werden nun dazu verwendet, die homogenen Maxwellgleichungen numerisch zu lösen. Dazu wird folgendes Testproblem betrachtet: In zwei Raumdimensionen entkoppeln die Maxwellgleichungen in zwei Systeme. Das eine System verknüpft die Komponenten E_3 , B_1 und B_2 , das andere die Komponenten E_1 , E_2 und B_3 . Das Problem, bei dem nur die Komponenten E_3 , B_1 und B_2 von Null verschieden sind, wird TM-Problem (transversal magnetisches Problem), das Problem, bei dem nur die Komponenten E_1 , E_2 und B_3 von Null verschieden sind, TE-Problem (transversal elektrisches Problem) genannt. In dieser Arbeit werden alle Resultate an TM-Problemen gezeigt, die besprochenen Phänomene treten aber aufgrund der symmetrischen Struktur genauso auch für TE-Probleme auf.

Bei den hier betrachteten TM-Problemen wird die E_3 -Komponente zur Zeit $t = 0$ sinusförmig angeregt:

$$E_3(\mathbf{x}, 0) = E_0 \sin(a_m x) \sin(b_n y) \quad (4.80)$$

mit

$$a_m = \frac{m\pi}{x_0} \quad \text{und} \quad b_n = \frac{n\pi}{y_0}. \quad (4.81)$$

Dabei bezeichnen x_0 und y_0 die Abmessungen des Rechengebiets in x - bzw. y -Richtung und m und n sind zwei natürliche Zahlen, wobei $\frac{m}{2}$ bzw. $\frac{n}{2}$ die Anzahl der Schwingungsperioden in x bzw. y -Richtung angibt. E_0 ist eine beliebige Konstante. Alle anderen Komponenten werden zu Beginn auf Null gesetzt. Diese Probleme werden mit TM_{nm} , entsprechend werden die TE-Probleme benannt.

Die exakte Lösung des Problems lautet für Gebiete mit ideal leitenden Rändern

$$E_3(\mathbf{x}, t) = E_0 \sin(a_m x) \sin(b_n y) \cos(\omega_{mn} t), \quad (4.82)$$

$$B_1(\mathbf{x}, t) = -\frac{y_0}{\omega_{mn}} E_0 \sin(a_m x) \cos(b_n y) \sin(\omega_{mn} t), \quad (4.83)$$

$$B_2(\mathbf{x}, t) = \frac{x_0}{\omega_{mn}} E_0 \cos(a_m x) \sin(b_n y) \sin(\omega_{mn} t), \quad (4.84)$$

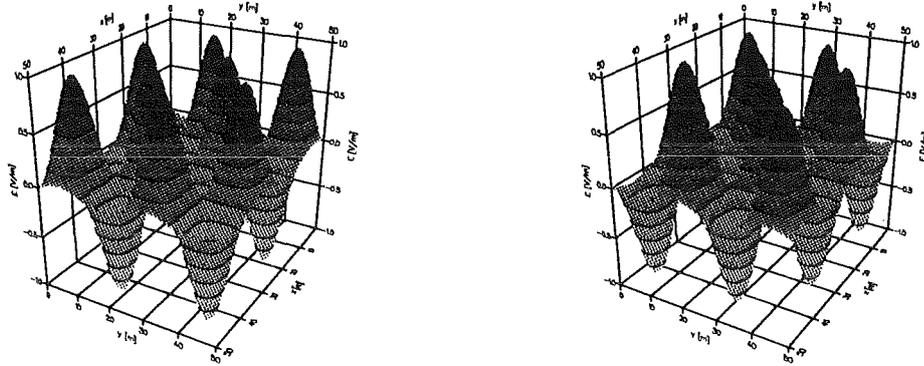


Abbildung 4.1: *TM0404-Problems: E_3 -Komponente der exakten Lösung, links zur Zeit $t = 90 ns$, rechts zur Zeit $t = 180 ns$.*

wobei ω_{mn} durch

$$\omega_{mn} = c\sqrt{a_m^2 + b_n^2} \quad (4.85)$$

definiert ist [15]. Dabei bezeichnet c die Lichtgeschwindigkeit.

In dieser Arbeit werden ein TM0404- und ein TM0805-Problem genauer untersucht.

Die Abbildungen 4.1 und 4.2 geben einen Überblick über das Aussehen der exakten Lösung. In ihnen ist jeweils die E_3 -Komponente der exakten Lösung für ein TM0404 und ein TM0805-Problem dargestellt. Alle Rechnungen wurden auf einem Rechengebiet mit $x_0 = y_0 = 50 m$ mit 100×100 Stützstellen durchgeführt. Links ist jeweils die Lösung zur Zeit $t = 90 ns$, rechts die zur Zeit $t = 180 ns$ dargestellt.

In den Abbildungen 4.3 und 4.4 ist die E_3 -Komponente für das zweidimensionale Godunov-Verfahren erster Ordnung und für das Splitting-Verfahren nach Strang erster Ordnung dargestellt. In den Abbildungen sind oben jeweils Höhenliniendarstellungen der numerischen Lösung zu sehen, darunter Schnitte der exakten (durchgezogene Linie) und der numerischen Lösung (Kreise) in x - und y -Richtung. Wieder ist links die Lösung zur Zeit $t = 90 ns$, rechts die zur Zeit $t = 180 ns$ zu sehen. Man erkennt, daß beide Verfahren bei Rechnung erster Ordnung eine starke numerische Dämpfung verursachen, die nach einer gewissen Zeit zum fast völligen Verschwinden der numerischen Lösung führt. Die kleinere CFL-Bedingung des zweidimensionalen Godunov-Verfahrens führt sogar zu einer noch stärkeren numerischen

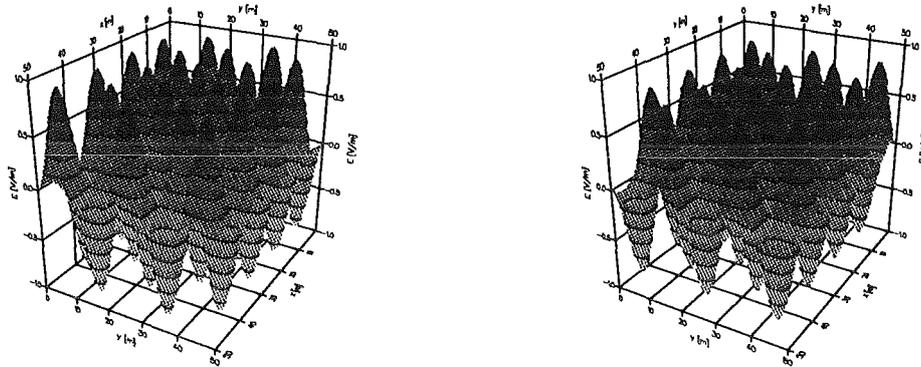


Abbildung 4.2: *TM0805-Problem: E_3 -Komponente der exakten Lösung, links zur Zeit $t = 90$ ns, rechts zur Zeit $t = 180$ ns.*

Dämpfung, so daß schon bei Verfahren erster Ordnung Splitting-Verfahren nach Strang vorteilhaft ist.

In der Regel werden aber Verfahren mindestens von mindestes zweiter Ordnung anzuwenden sein. Die Abbildungen 4.5 und 4.6 zeigen, daß der zweidimensionale MUSCL-Ansatz und das Splitting-Verfahren nach Strang identische Ergebnisse liefern, die ihrerseits wieder sehr gut mit der exakten Lösung des Problems übereinstimmen. Bei beiden Ansätzen wurde eine Steigungsberechnung in den erhaltenen Größen mit einer minmod-Limitierung verwendet [31]. Das Dimensionensplitting ist wegen der nur halb so großen Anzahl von Flußauswertungen dem zweidimensionalen MUSCL-Verfahren vorzuziehen.

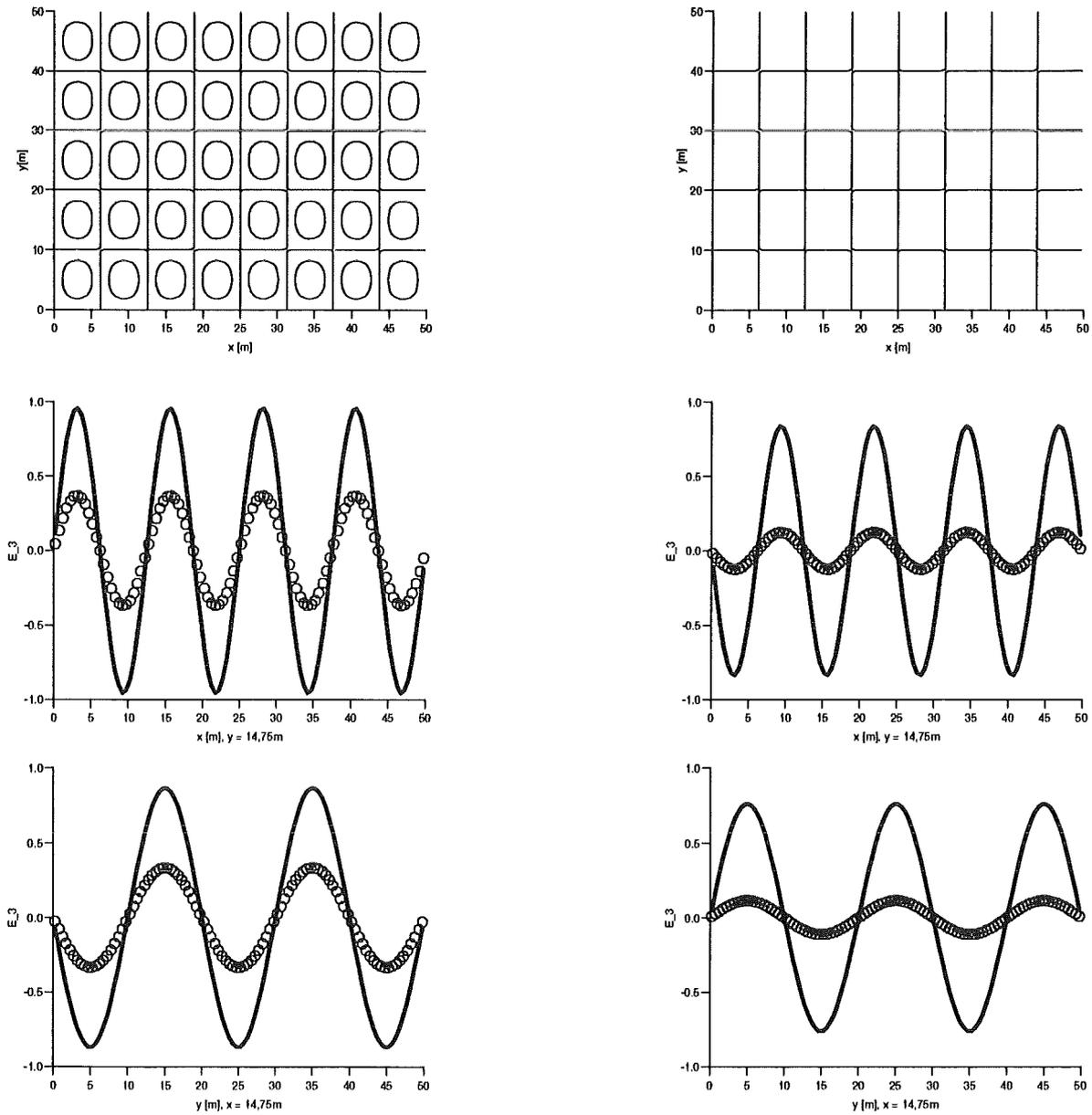


Abbildung 4.3: *TM0805-Problem: zweidimensionales Godunov-Verfahren auf einem Gebiet mit $x_0 = y_0 = 50$ m, diskretisiert mit 100 Stützstellen in jede Raumrichtung, links die Lösung zur Zeit $t = 90$ ns, rechts zur Zeit $t = 180$ ns, oben eine Höhenliniendarstellung, darunter Schnitte für $y = \text{const.}$ und $x = \text{const.}$*

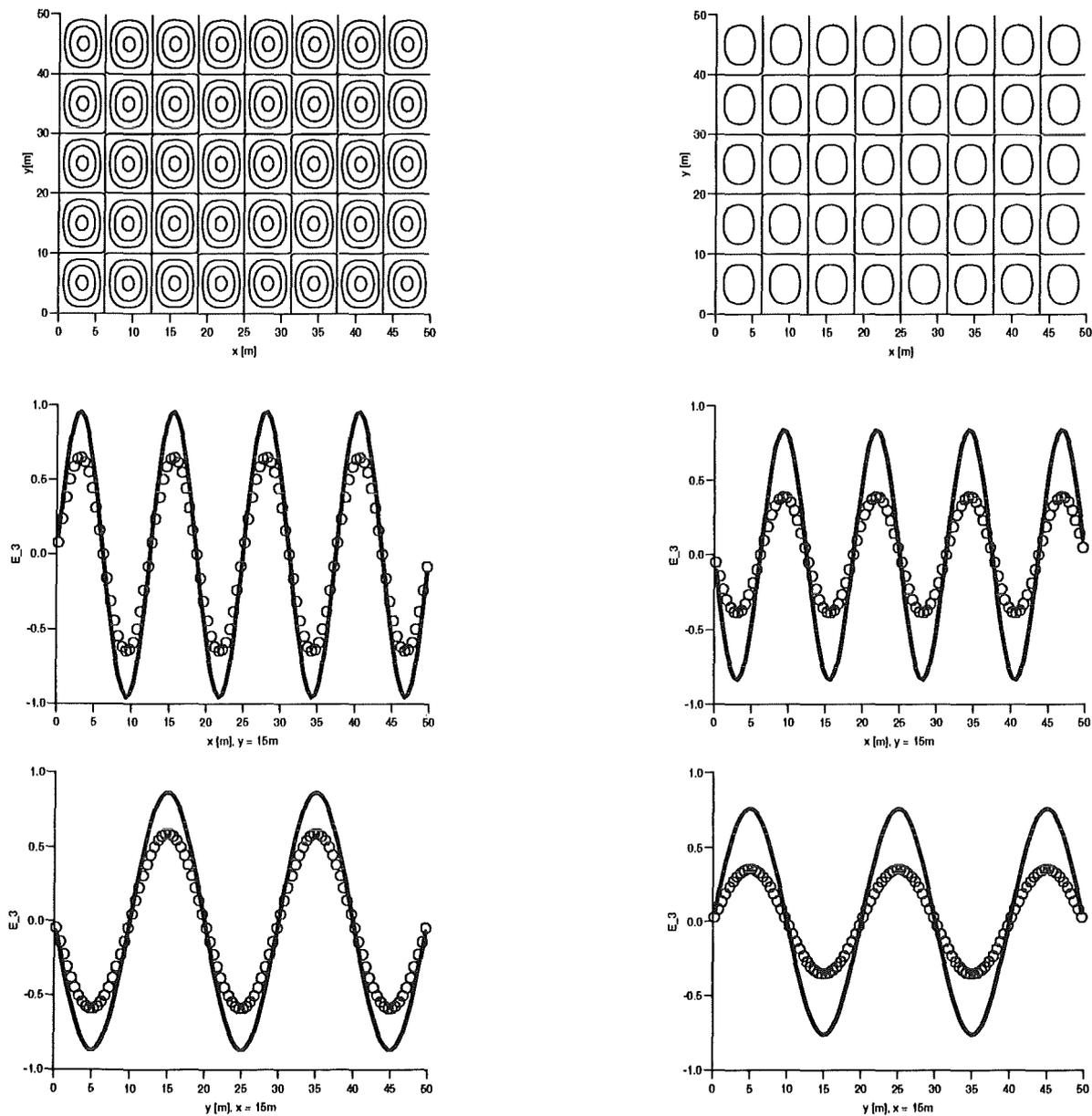


Abbildung 4.4: *TM0805-Problem: Splitting-Verfahren nach Strang erster Ordnung auf einem Gebiet mit $x_0 = y_0 = 50$ m, diskretisiert mit 100 Stützstellen in jede Raumrichtung, links die Lösung zur Zeit $t = 90$ ns, rechts zur Zeit $t = 180$ ns, oben eine Höhenliniendarstellung, darunter Schnitte für $y = \text{const.}$ und $x = \text{const.}$*

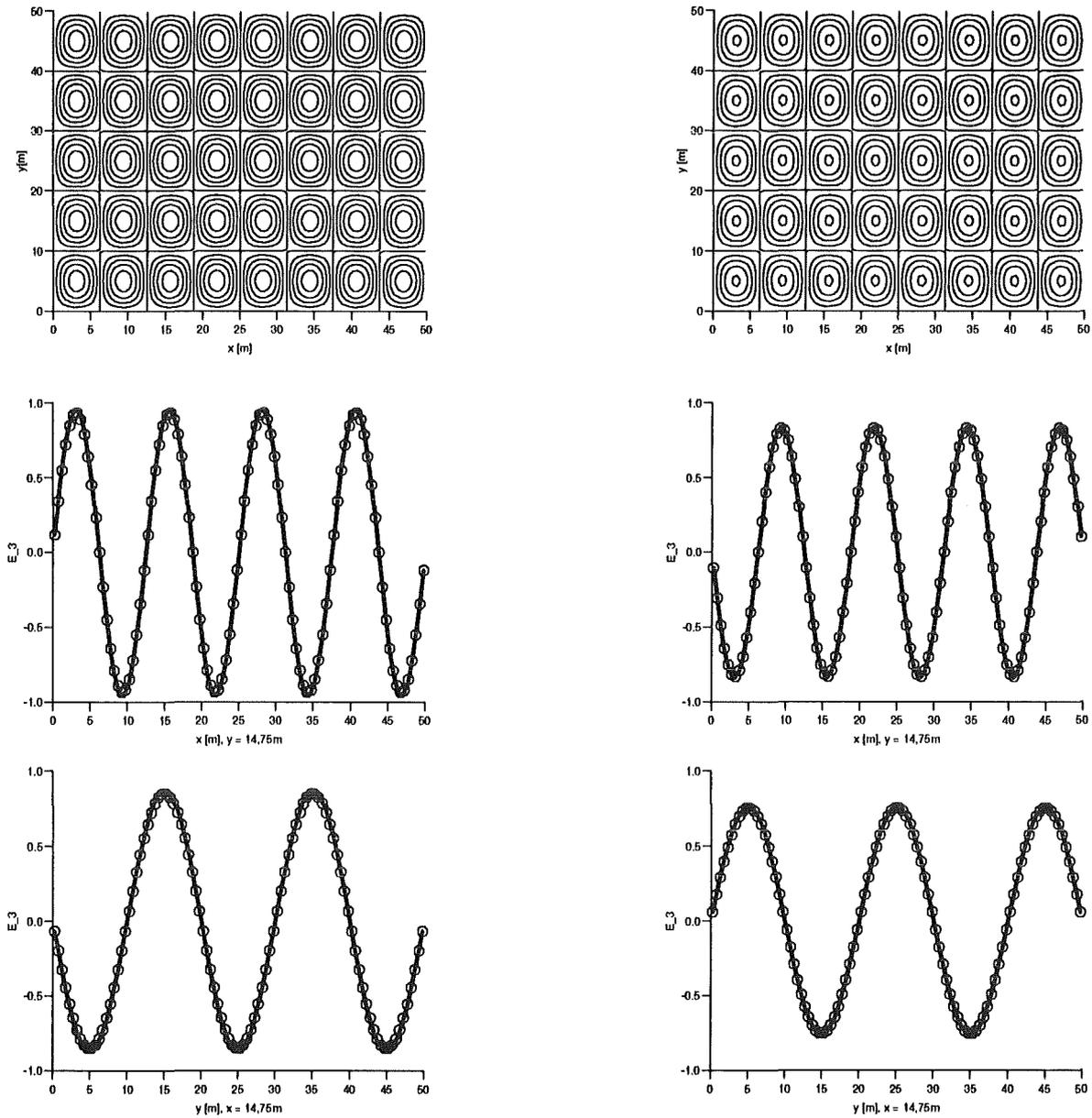


Abbildung 4.5: *TM0805-Problem: Zweidimensionaler MUSCL-Ansatz auf einem Gebiet mit $x_0 = y_0 = 50$ m, diskretisiert mit 100 Stützstellen in jede Raumrichtung, links die Lösung zur Zeit $t = 90$ ns, rechts zur Zeit $t = 180$ ns, oben eine Höhenliniendarstellung, darunter Schnitte für $y = \text{const.}$ und $x = \text{const.}$*

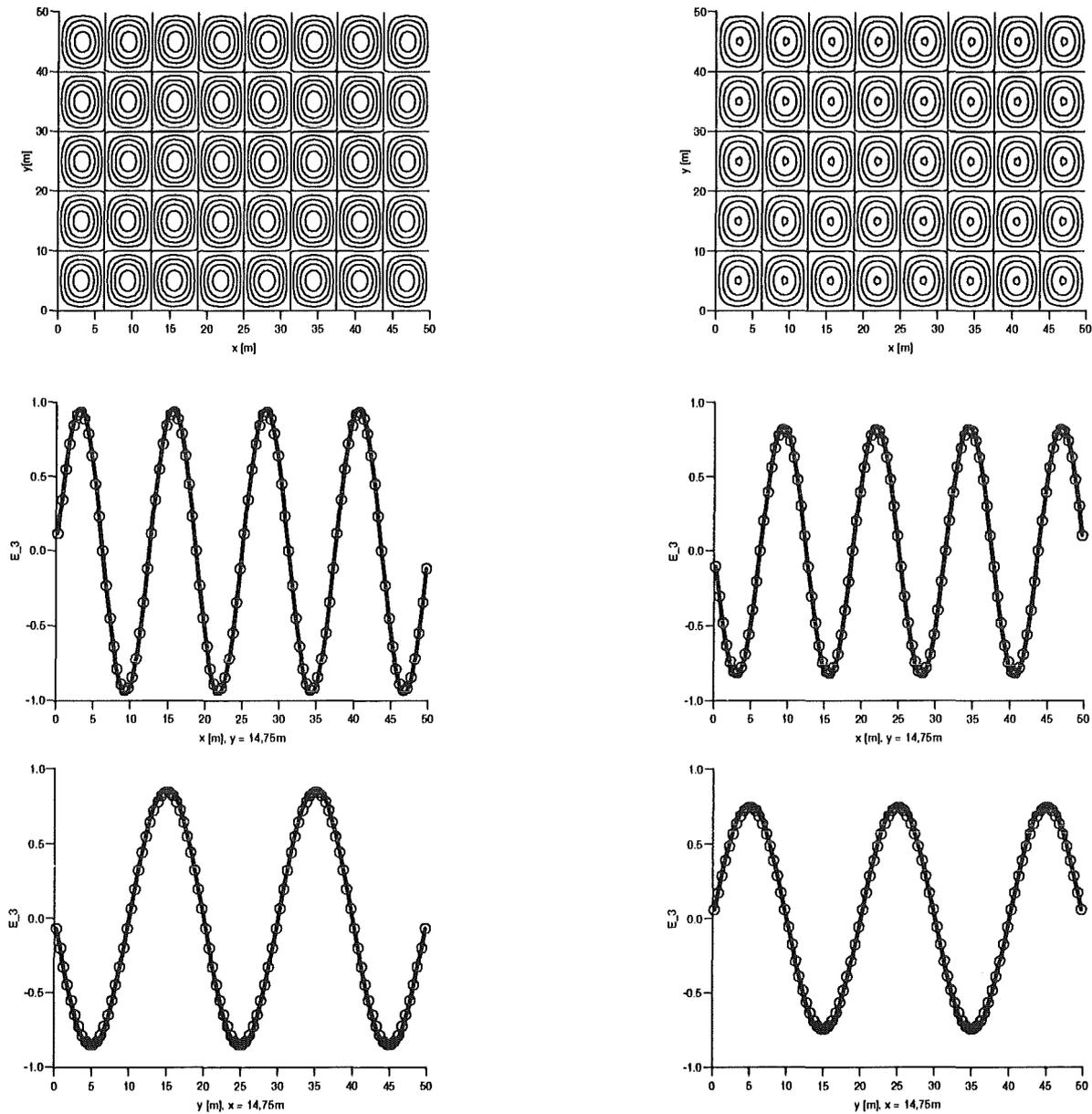


Abbildung 4.6: *TM0805-Problem: Splitting-Verfahren nach Strang auf einem Gebiet mit $x_0 = y_0 = 50$ m, diskretisiert mit 100 Stützstellen in jede Raumrichtung, links die Lösung zur Zeit $t = 90$ ns, rechts zur Zeit $t = 180$ ns, oben eine Höhenliniendarstellung, darunter Schnitte für $y = \text{const.}$ und $x = \text{const.}$*

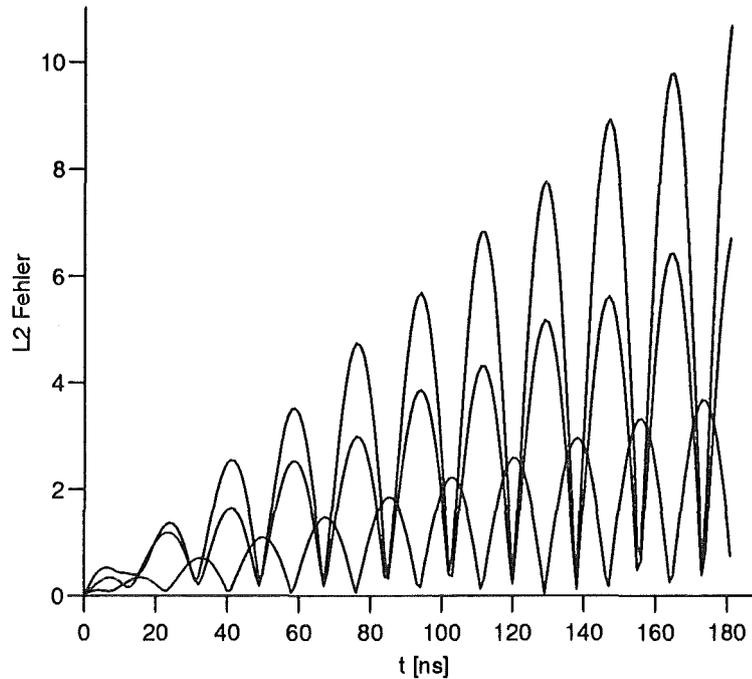


Abbildung 4.7: *TM0805-Problem: Zweidimensionaler MUSCL-Ansatz auf einem Gebiet mit $x_0 = y_0 = 50$ m, diskretisiert mit 100 Stützstellen in jede Raumrichtung. Dargestellt ist der Fehler in der L_2 -Norm von unten nach oben für die Komponenten E_3, B_1 und B_2 . Da das Problem so unterschiedliche Wellenzahlen in die beiden Raumrichtungen aufweist, ist der Fehler in der B_2 -Komponente größer als der in der B_1 -Komponente. Sind die Wellenzahlen in beide Raumrichtungen gleich, so liegen die Kurven für den Fehler in B_1 und B_2 aufeinander.*

Zum Abschluß wird untersucht, ob die Verfahren die theoretisch vorausgesagte Konvergenzordnung haben. Um die sogenannte experimentelle Konvergenzordnung zu bestimmen, vergleicht man den Fehler in einer geeigneten Norm mit dem Fehler auf einem Gitter mit der halben Schrittweite. Wir verwenden hier die für lineare Probleme besonders geeignete L_2 -Norm

$$\|f\|_2 = \sqrt{\int_V |f(x, y)|^2 dV} \quad (4.86)$$

und die damit verträgliche diskrete Norm

$$\|f_{ij}\|_2 = \sqrt{\sum_{ij} |V_{ij}| |f_{ij}|^2}. \quad (4.87)$$

Die Integration bzw. Summation erstreckt sich dabei über das ganze Rechengebiet. Der zeitliche Verlauf des Fehlers der einzelnen Komponenten ist in Abbildung 4.7 dargestellt. Die Oszillationen in Verlauf des Fehlers spiegeln das Oszillieren der Lösung wieder. Wegen dieses oszillierenden Verlaufs ist es nicht sinnvoll, die Konvergenz zu einem festen Zeitpunkt nachzuprüfen. Statt dessen mitteln wir über den betrachteten Zeitraum $0 \leq t \leq 180 \text{ ns}$. Die Werte für den zweidimensionalen MUSCL-Ansatz und für das Splitting-Verfahren nach Strang sind in Tabelle 4.1 und 4.3 dargestellt. Mit ihnen erhält man die in Tabelle 4.2 und 4.4 angegebene experimentelle Konvergenzordnung. Für das TM0404-Problem erreichen die Verfahren die aufgrund der Konstruktion erwartete Konvergenzordnung, während sie für das TM0805-Problem mit den stärkeren Gradienten etwas sinkt. Bei dem symmetrisch gebauten zweidimensionalen MUSCL-Verfahren ist die experimentelle Konvergenzordnung in den beiden Komponenten der magnetischen Induktion nahezu gleich, während beim Splitting-Verfahren nach Strang hier größere Abweichungen auftreten.

	E_3	B_1	B_2
100×100	0.29	0.68	0.68
200×200	0.07	0.17	0.17

Zweidimensionaler MUSCL-Ansatz

	E_3	B_1	B_2
100×100	0.20	0.47	0.47
200×200	0.05	0.11	0.13

Splitting-Verfahren nach Strang

Tabelle 4.1: *TM0404-Problem: L^2 -Fehler gemittelt über die Zeit $0 \leq t \leq 180$ ns, auf verschiedenen Verfeinerungsstufen des Gitters.*

	E_3	B_1	B_2
100×100	1.99	2.00	2.00

Zweidimensionaler MUSCL-Ansatz

	E_3	B_1	B_2
100×100	2.00	2.09	1.85

Splitting-Verfahren nach Strang

Tabelle 4.2: *TM0404-Problem: Experimentelle Konvergenzordnung berechnet mit den in Tabelle 4.1 dargestellten Fehlern.*

	E_3	B_1	B_2
100×100	1.26	2.31	3.50
200×200	0.33	0.59	0.90

Zweidimensionaler MUSCL-Ansatz

	E_3	B_1	B_2
100×100	1.03	1.84	2.84
200×200	0.26	0.43	0.73

Splitting-Verfahren nach Strang

Tabelle 4.3: *TM0805-Problem: L^2 -Fehler gemittelt über die Zeit $0 \leq t \leq 180$ ns, auf verschiedenen Verfeinerungsstufen des Gitters.*

	E_3	B_1	B_2
100×100	1.93	1.97	1.96

Zweidimensionaler MUSCL-Ansatz

	E_3	B_1	B_2
100×100	1.99	2.09	1.95

Splitting-Verfahren nach Strang

Tabelle 4.4: *TM0805-Problem: Experimentelle Konvergenzordnung berechnet mit den in Tabelle 4.3 dargestellten Fehlern.*

Kapitel 5

Mehrdimensionale Systeme auf randangepaßten Koordinaten

In diesem Kapitel werden die Ideen, die im vorangegangenen Kapitel für kartesische Gitter vorgestellt wurden, auf strukturierte randangepaßte Gitter übertragen. Die Ideen lassen sich bis auf den MUSCL-Ansatz mit Rekonstruktion im logischen Gebiet auch für unstrukturierte Gitter formulieren, hier aber wird bewußt die Struktur der randangepaßten Koordinaten ausgenutzt.

5.1 Verfahren erster Ordnung

Wir betrachten nun ein beliebiges Vierecksgitter¹. Die Gitterzellen werden mit V_{ij} bezeichnet, wobei i und j aus geeigneten Indexbereichen stammen. Der Rand der Zelle ∂V_{ij} besteht aus den vier Seiten $S_{ij,1}, \dots, S_{ij,4}$ und die normierten äußeren Normalen auf die entsprechenden Seiten mit $\mathbf{n}_{ij,1}, \dots, \mathbf{n}_{ij,4}$ bezeichnet, siehe Abbildung 5.1.

Wir betrachten wieder das lineare System von Erhaltungsgleichungen (2.15)

$$\mathbf{u}_t + \nabla \cdot \begin{pmatrix} \mathcal{A}\mathbf{u} \\ \mathcal{B}\mathbf{u} \end{pmatrix} = 0 \quad \mathcal{A}, \mathcal{B} \in \mathbb{R}^{m \times m}. \quad (5.1)$$

Dieses Gleichungssystem integrieren wir komponentenweise über eine Zelle V_{ij} des Gitters und einen Zeitschritt $[t^n, t^{n+1}]$ und erhalten

$$\int_{t^n}^{t^{n+1}} \int_{V_{ij}} \mathbf{u}_t dV dt = - \int_{t^n}^{t^{n+1}} \int_{V_{ij}} \nabla \cdot \begin{pmatrix} \mathcal{A}\mathbf{u} \\ \mathcal{B}\mathbf{u} \end{pmatrix} dV dt. \quad (5.2)$$

¹Dies ist keine wesentliche Voraussetzung. Die Herleitung läßt sich genauso für ein Gitter aus beliebigen Polygonen durchführen

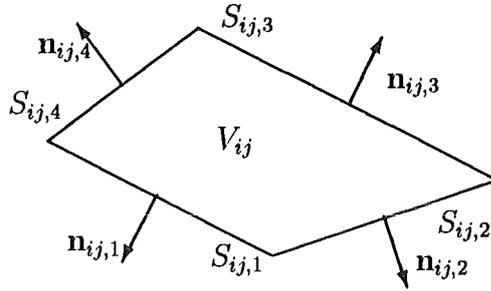


Abbildung 5.1: Bezeichnungen: Gitterzelle V_{ij} mit Rand $\partial V_{ij} = S_{ij,1} \cup \dots \cup S_{ij,4}$ und äußeren Einheitsnormalen $\mathbf{n}_{ij,1}, \dots, \mathbf{n}_{ij,4}$.

Durch Anwenden des Gaußschen Satzes auf die rechte Seite von (5.2) erhält man

$$\int_{t^n}^{t^{n+1}} \int_{V_{ij}} \mathbf{u}_t dV dt = - \int_{t^n}^{t^{n+1}} \int_{\partial V_{ij}} ((n_1)_{ij} \mathcal{A} + (n_2)_{ij} \mathcal{B}) \mathbf{u} dS dt. \quad (5.3)$$

Dabei bezeichnen $(n_1)_{ij}$ und $(n_2)_{ij}$ die Komponenten des Normalenvektors \mathbf{n}_{ij} . Gleichung (5.3) nennt man integrale Erhaltungsform.

Wir bezeichnen mit $\mathbf{u}_{ij}(t)$ den integralen Mittelwert $\frac{1}{|V_{ij}|} \int \mathbf{u}(\mathbf{x}, t) dV$ von \mathbf{u} in der Zelle (i, j) . Wie üblich verwenden wir für $\mathbf{u}_{ij}(t^n)$ die Kurzschreibweise \mathbf{u}_{ij}^n . Damit können wir die linke Seite von (5.3) umschreiben zu

$$|V_{ij}| (\mathbf{u}_{ij}^{n+1} - \mathbf{u}_{ij}^n) = - \sum_{\alpha=1}^4 \int_{t^n}^{t^{n+1}} \int_{S_{ij,\alpha}} ((n_1)_{ij,\alpha} \mathcal{A} + (n_2)_{ij,\alpha} \mathcal{B}) \mathbf{u} dS dt. \quad (5.4)$$

Eine direkte Approximation dieser Evolutionsgleichung für die Zellmittelwerte nennt man Finite-Volumen-Verfahren:

$$\mathbf{u}_{ij}^{n+1} = \mathbf{u}_{ij}^n - \frac{\Delta t}{|V_{ij}|} \sum_{\alpha=1}^4 |S_{ij,\alpha}| \mathbf{g}_{ij,\alpha}, \quad (5.5)$$

wobei $\mathbf{g}_{ij,\alpha}$ der sogenannte *numerische Fluß* durch die Seite $S_{ij,\alpha}$ mit der Länge $|S_{ij,\alpha}|$ ist. Er muß eine Approximation des physikalischen Flusses

$$\Phi_{ij,\alpha} = ((n_1)_{ij,\alpha} \mathcal{A} + (n_2)_{ij,\alpha} \mathcal{B}) \mathbf{u} \quad (5.6)$$

durch die mit α indizierte Seite sein. Das Integral über den Zeitschritt und über $S_{ij,\alpha}$ wurde dabei mit der Mittelpunktsregel ausgewertet.

Dies motiviert folgende Definition eines Finite-Volumen-Verfahrens in zwei Raumdimensionen.

Definition 5.1 (Finite-Volumen-Verfahren) *Ein Verfahren in der Form*

$$\mathbf{u}_{ij}^{n+1} = \mathbf{u}_{ij}^n - \frac{\Delta t}{|V_{ij}|} \sum_{\alpha=1}^4 |S_{ij,\alpha}| \mathbf{g}_{ij,\alpha} \quad (5.7)$$

mit Anfangswerten

$$\mathbf{u}_{ij}^0 = \frac{1}{|V_{ij}|} \int_{V_{ij}} \mathbf{w}(\mathbf{x}) dV \quad (5.8)$$

zur Approximation des Cauchyproblems

$$\begin{aligned} \mathbf{u}_t + \mathcal{A}\mathbf{u}_x + \mathcal{B}\mathbf{u}_y &= 0 \\ \mathbf{u}(\mathbf{x}, 0) &= \mathbf{w}(\mathbf{x}) \end{aligned} \quad (5.9)$$

heißt *Finite-Volumen-Verfahren auf einem strukturierten Vierecksgitter falls die Flüsse lipschitzstetig in allen Argumenten und konsistent mit den physikalischen Flüssen sind, das heißt*

$$\mathbf{g}(\mathbf{u}, \dots, \mathbf{u}, \mathbf{n}) = (n_1 \mathcal{A} + n_2 \mathcal{B}) \mathbf{u} \quad \forall \mathbf{u} \in \mathbb{R}^m, \mathbf{n} \in \mathbb{R}^2. \quad (5.10)$$

Definition 4.1 ist ein Spezialfall dieser Definition für kartesische Koordinaten. Finite-Volumen-Verfahren stellen eine direkte Verallgemeinerung der Verfahren in Erhaltungsform von kartesischen auf allgemeine Gitter dar.

Eine mögliche Approximation erhält man, indem man das Integral in (5.4) mit Hilfe der Mittelpunktsregel auswertet. Damit erhält man

$$\mathbf{g}_{ij,\alpha}(\mathbf{x}_\alpha, t^{n+1/2}) = ((n_1)_{ij,\alpha} \mathcal{A} + (n_2)_{ij,\alpha} \mathcal{B}) \mathbf{u}(\mathbf{x}_\alpha, t^{n+1/2}), \quad (5.11)$$

\mathbf{x}_α bezeichnet dabei den Mittelpunkt der mit α indizierten Seite. Bei eindimensionalen Problemen verwendet man das Riemannproblem, um den Wert der Lösung zwischen zwei Zellen zu erhalten. In zwei Raumdimensionen benutzt man für die Flußberechnung die Lösung des eindimensionalen Riemannproblems in Normalenrichtung. Das bedeutet, daß man das Riemannproblem, siehe Definition (3.3), für die Matrix

$$\mathcal{C}_{ij,\alpha} := ((n_1)_{ij,\alpha} \mathcal{A} + (n_2)_{ij,\alpha} \mathcal{B}) \quad (5.12)$$

löst. Als Anfangswerte verwendet man den Zellmittelwert der Zelle V_{ij} und den Zellmittelwert der Zelle, die mit V_{ij} die Seite α gemeinsam hat. Letzterer wird mit $\mathbf{u}_{ij,\alpha}$ bezeichnet. Ist (5.1) strikt hyperbolisch, so erhält man mit den Umformungen wie in Abschnitt 3.2 den numerischen Fluß

$$\mathbf{g}_{ij,\alpha} = \mathcal{C}_{ij,\alpha}^+ \mathbf{u}_{ij} + \mathcal{C}_{ij,\alpha}^- \mathbf{u}_{ij,\alpha}, \quad (5.13)$$

der wiederum unabhängig von t ist. Man beachte, daß der numerische Fluß nur von der Richtung der Normalen und den Werten rechts und links abhängt, nicht jedoch vom Volumen der Gitterzellen und der Seitenlänge.

Die CFL-Bedingung dieses Verfahrens lautet für die Maxwellgleichungen (vergleiche Satz 3 und dessen Beweis)

$$c \frac{\Delta t}{\min_{i,j} r_{ij}} \leq \frac{1}{2}. \quad (5.14)$$

Dabei ist

$$r_{ij} = \min\{\|\mathbf{x}_{ij} - \mathbf{x}_{i+1/2,j+1/2}\|, \|\mathbf{x}_{ij} - \mathbf{x}_{i-1/2,j+1/2}\|, \|\mathbf{x}_{ij} - \mathbf{x}_{i+1/2,j-1/2}\|, \|\mathbf{x}_{ij} - \mathbf{x}_{i-1/2,j-1/2}\|\} \quad (5.15)$$

der kleinste Abstand einer Ecke der Zelle zu deren Schwerpunkt \mathbf{x}_{ij} und c die Lichtgeschwindigkeit.

5.1.1 Diskretisierung der Geometrieterme

In der Flußberechnung treten die Normalen auf die Zellseiten auf. Diese müssen aus dem Gitter, von dem man nur die Ecken der Zellen kennt, approximiert werden. Dazu wird hier die Existenz einer nichtsingulären, stückweise mindestens einmal stetig differenzierbaren Koordinatentransformation vorausgesetzt. Diese Koordinatentransformation sei $T : \mathbb{R}^2 \rightarrow \mathbb{R}^2$, $(\xi, \eta) \mapsto (x, y)$ mit

$$\begin{aligned} x &= x(\xi, \eta) \\ y &= y(\xi, \eta), \end{aligned} \quad (5.16)$$

siehe Abbildung 5.2. Die Gitterpunkte werden wie in Abbildung 5.3 dargestellt bezeichnet.

Auf randangepaßten Koordinaten sind die Zellseiten Parameterlinien der Transformation und die Normale läßt sich mit Hilfe der Transformation beschreiben. Die Normalen $\mathbf{n}_{ij,1}$ und $\mathbf{n}_{ij,3}$ sowie die Normalen $\mathbf{n}_{ij,2}$ und $\mathbf{n}_{ij,4}$ sind jeweils Normalen an gegenüberliegende Seiten. Man faßt die Flüsse durch gegenüberliegende Seiten zusammen:

$$\mathbf{u}_{ij}^{n+1} = \mathbf{u}_{ij}^n - \frac{\Delta t}{|V_{ij}|} (|S_{ij,1}| \mathbf{g}_{ij,1} + |S_{ij,3}| \mathbf{g}_{ij,3}) - \frac{\Delta t}{|V_{ij}|} (|S_{ij,2}| \mathbf{g}_{ij,2} + |S_{ij,4}| \mathbf{g}_{ij,4}). \quad (5.17)$$

Da man die Normalen nicht zweimal berechnen zu müssen, berechnet man an den ξ -Linien die in positive η -Richtung zeigende Normale und an den η -Linien die in positive ξ -Richtung zeigende Normale. Dazu muß man bei zwei von den vier Flüssen das Vorzeichen ändern. Ebenfalls geändert werden die Bezeichnungen der Normalen, siehe Abbildung 5.3:

$$\mathbf{n}_{i-1/2,j}^{(\xi)} := -\mathbf{n}_{ij,1} \quad (5.18)$$

$$\mathbf{n}_{i,j-1/2}^{(\eta)} := -\mathbf{n}_{ij,2} \quad (5.19)$$

$$\mathbf{n}_{i+1/2,j}^{(\xi)} := \mathbf{n}_{ij,3} \quad (5.20)$$

$$\mathbf{n}_{i,j+1/2}^{(\eta)} := \mathbf{n}_{ij,4}. \quad (5.21)$$

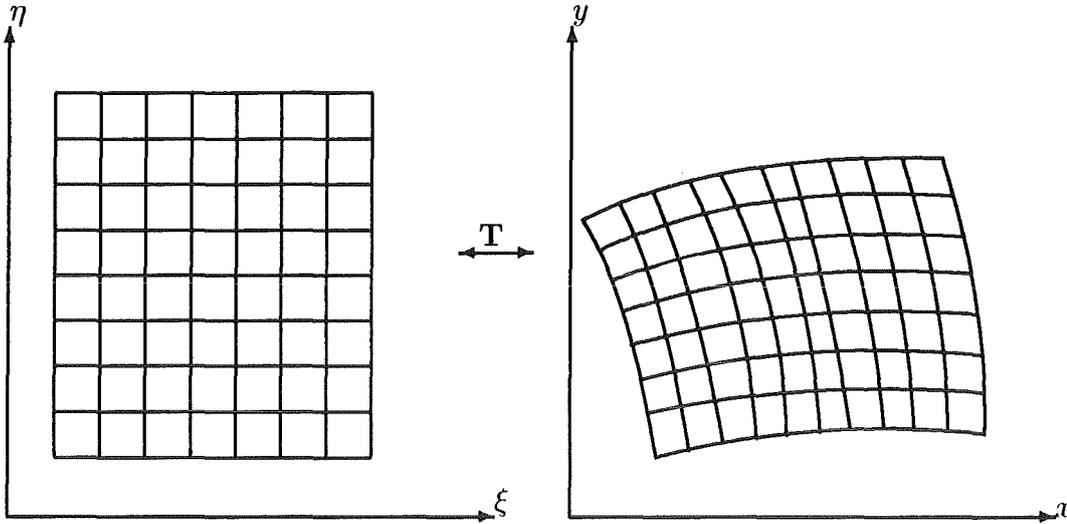


Abbildung 5.2: Die Transformation T : Links das sogenannte logische Gitter, rechts das physikalische Gitter.

Die oberen Idizees (ξ) und (η) geben dabei an, zu welchen Koordinatenlinien die entsprechenden Normalen gehören. Entsprechend werden die Seitenlängen bezeichnet:

$$|S_{i-1/2,j}^{(\xi)}| := |S_{ij,1}| \quad (5.22)$$

$$|S_{i,j-1/2}^{(\eta)}| := |S_{ij,2}| \quad (5.23)$$

$$|S_{i+1/2,j}^{(\xi)}| := |S_{ij,3}| \quad (5.24)$$

$$|S_{i,j+1/2}^{(\eta)}| := |S_{ij,4}|. \quad (5.25)$$

Das Verfahren schreibt sich dann als

$$\begin{aligned} \mathbf{u}_{ij}^{n+1} = \mathbf{u}_{ij}^n &- \frac{\Delta t}{|V_{ij}|} \left(|S_{i-1/2,j}^{(\xi)}| \mathbf{G}_{i+1/2,j} - |S_{i+1/2,j}^{(\xi)}| \mathbf{G}_{i-1/2,j} \right) \\ &- \frac{\Delta t}{|V_{ij}|} \left(|S_{i,j-1/2}^{(\eta)}| \mathbf{H}_{i,j+1/2} - |S_{i,j+1/2}^{(\eta)}| \mathbf{H}_{i,j-1/2} \right) \end{aligned} \quad (5.26)$$

mit den Vorschriften zur Flußberechnung

$$\mathbf{G}_{i+1/2,j} = \mathcal{C}_{i+1/2,j}^- \mathbf{u}_{ij} + \mathcal{C}_{i+1/2,j}^+ \mathbf{u}_{i+1,j} \quad (5.27)$$

$$\mathbf{H}_{i,j+1/2} = \mathcal{D}_{i,j+1/2}^- \mathbf{u}_{ij} + \mathcal{D}_{i,j+1/2}^+ \mathbf{u}_{i,j+1} \quad (5.28)$$

mit

$$\mathcal{C}_{i+1/2,j} = (n_1^{(\xi)})_{i+1/2,j} \mathcal{A} + (n_2^{(\xi)})_{i+1/2,j} \mathcal{B} \quad (5.29)$$

$$\mathcal{D}_{i,j+1/2} = (n_1^{(\eta)})_{i,j+1/2} \mathcal{A} + (n_2^{(\eta)})_{i,j+1/2} \mathcal{B}. \quad (5.30)$$

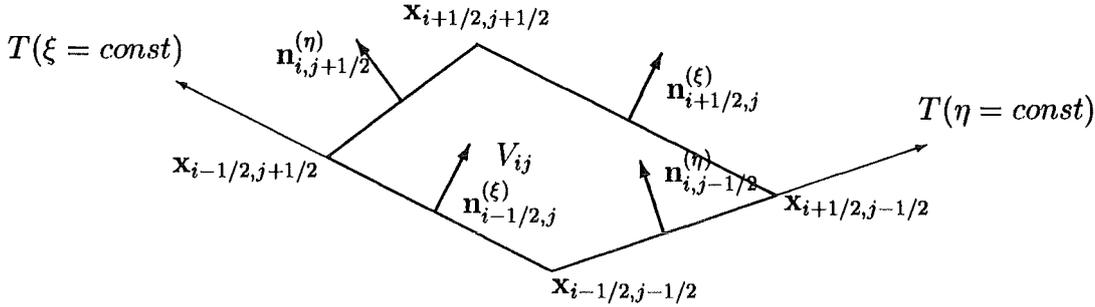


Abbildung 5.3: Bezeichnungen auf randangepaßten Koordinaten

Die Komponenten der Normalen müssen an den Seitenmittelpunkten approximiert werden. Sie lassen sich unter Verwendung der Transformation durch

$$\mathbf{n}^{(\xi)} = \frac{1}{\sqrt{x_\eta^2 + y_\eta^2}} \begin{pmatrix} -y_\eta \\ x_\eta \end{pmatrix} \quad (5.31)$$

und

$$\mathbf{n}^{(\eta)} = \frac{1}{\sqrt{x_\xi^2 + y_\xi^2}} \begin{pmatrix} -y_\xi \\ x_\xi \end{pmatrix} \quad (5.32)$$

ausdrücken.

Die geometrischen Terme werden mit Hilfe von zentralen Differenzenquotienten approximiert [7]:

$$(x_\xi)_{i, j+1/2} = \frac{x_{i+1/2, j+1/2} - x_{i-1/2, j+1/2}}{\Delta\xi} \quad (5.33)$$

$$(x_\eta)_{i+1/2, j} = \frac{x_{i+1/2, j+1/2} - x_{i+1/2, j-1/2}}{\Delta\eta} \quad (5.34)$$

$$(y_\xi)_{i, j+1/2} = \frac{y_{i+1/2, j+1/2} - y_{i-1/2, j+1/2}}{\Delta\xi} \quad (5.35)$$

$$(y_\eta)_{i+1/2, j} = \frac{y_{i+1/2, j+1/2} - y_{i+1/2, j-1/2}}{\Delta\eta}. \quad (5.36)$$

$\Delta\xi$ und $\Delta\eta$ bezeichnen die Abstände zwischen den Gitterlinien im logischen Gitter. Für

die Berechnung der Einheitsnormalen werden sie nicht gebraucht. Weiter erhält man

$$(x_\xi)_{ij} = \frac{1}{2} \left((x_\xi)_{i,j+1/2} + (x_\xi)_{i,j-1/2} \right) \quad (5.37)$$

$$(x_\eta)_{ij} = \frac{1}{2} \left((x_\eta)_{i+1/2,j} + (x_\eta)_{i-1/2,j} \right) \quad (5.38)$$

$$(y_\xi)_{ij} = \frac{1}{2} \left((y_\xi)_{i,j+1/2} + (y_\xi)_{i,j-1/2} \right) \quad (5.39)$$

$$(y_\eta)_{ij} = \frac{1}{2} \left((y_\eta)_{i+1/2,j} + (y_\eta)_{i-1/2,j} \right). \quad (5.40)$$

Damit approximiert man die Determinante der Transformation

$$(\det J)_{ij} = (x_\xi)_{ij}(y_\eta)_{ij} - (x_\eta)_{ij}(y_\xi)_{ij}. \quad (5.41)$$

Zwischen $|V_{ij}|$ und $(\det J)_{ij}$ besteht der Zusammenhang

$$|V_{ij}| = \Delta\xi \Delta\eta (\det J)_{ij}. \quad (5.42)$$

Desweiteren gilt

$$|S^{(\xi)}| := \Delta\eta \sqrt{x_\eta^2 + y_\eta^2} \quad (5.43)$$

$$|S^{(\eta)}| := \Delta\xi \sqrt{x_\xi^2 + y_\xi^2}. \quad (5.44)$$

Damit ist das Verfahren insgesamt unabhängig von $\Delta\xi$ und $\Delta\eta$, den Abständen im logischen Gitter, die zum einen unbekannt sind, da das logische Gitter nur für die theoretischen Überlegungen angenommen wurde, zum anderen in ihrem absoluten Wert die Lösung auch nicht beeinflussen dürfen, da die Größe der Zellen des logischen Gitters keinen Einfluß auf das Verfahren haben darf.

5.2 MUSCL-Ansatz auf randangepaßten Gittern

Die MUSCL-Idee besteht aus zwei Schritten: Der erste Schritt ist die Rekonstruktion der Lösung unter der Annahme, daß die Lösung stückweise linear ist und die Extrapolation der Werte auf den Rand. Diese werden dann für die Flußberechnung verwendet. Dadurch erhält man die zweite Ordnung im Raum. Der zweite Schritt dient dazu, die zweite Ordnung in der Zeit zu erhalten. Dabei gibt es grundsätzlich zwei Möglichkeiten: Man wie beim Lax-Wendroff-Verfahren vorgehen oder ein Runge-Kutta-Verfahren benutzen. Solange man nur an Verfahren zweiter Ordnung interessiert ist, kann das Lax-Wendroff-Verfahren verwendet werden, da man nur einmal eine Zeitableitung mit Hilfe der sogenannten Cauchy-Kowalewski-Prozedur ersetzen muß. Für Verfahren höherer Ordnung, z.B. ENO-Verfahren, ist dagegen die Verwendung eines Runge-Kutta Verfahrens besser geeignet.

Auf randangepaßten Koordinaten gibt es für den ersten Schritt ebenfalls

zwei Möglichkeiten: Man kann annehmen, daß die Lösung im physikalischen Gitter linear in jeder Zelle ist oder daß sie es im logischen Gitter ist. Für die Zeitextrapolation verwenden wir in beiden Fällen die Cauchy-Kowalewski-Prozedur. Die beiden Fälle werden in den nächsten beiden Abschnitten behandelt.

5.2.1 Rekonstruktion im physikalischen Gebiet

Diese Erweiterung der MUSCL-Idee wurde 1990 von Durlofsky, Engquist und Osher für Dreiecksgitter vorgeschlagen [10]. Wir verallgemeinern diesen Ansatz hier für Vierecksgitter. Die Werte an den Zellgrenzen werden durch

$$u_k^n(\mathbf{x}) = (u_k)_{ij}^n + (\mathbf{x} - \mathbf{x}_{ij}) \widetilde{\nabla}(u_k)_{ij}^n \quad (5.45)$$

approximiert, wobei $u_k, k = 1, \dots, 6$, eine der sechs Komponenten von \mathbf{u} bezeichnet, $\mathbf{x} = (x, y)^T$ und $\widetilde{\nabla}(u_k)_{ij}^n$ eine Approximation des Gradienten der k -ten Komponente in der betrachteten Zelle bezeichnet. Um den Gradienten zu approximieren, wird durch den Zellmittelwert in der betrachteten Zelle und jeweils zwei ihrer Nachbarn eine Ebene gelegt. Dies führt zu einer Menge von vier möglichen Steigungen. In einem ersten Versuch wird davon diejenige ausgewählt, deren Norm am kleinsten ist. Für die zeitliche Entwicklung benötigt man

$$\mathbf{u}(\mathbf{x})^{n+1/2} = \mathbf{u}(\mathbf{x})^n + \frac{\Delta t}{2} (\widetilde{\mathbf{u}}_t)_{ij}^{n+1/2} \quad (5.46)$$

wobei $(\widetilde{\mathbf{u}}_t)_{ij}^{n+1/2}$ eine Approximation der Zeitableitung von \mathbf{u} bezeichnet. Unter Verwendung der Differentialgleichung

$$\mathbf{u}_t + \mathcal{A}\mathbf{u}_x + \mathcal{B}\mathbf{u}_y = 0 \quad (5.47)$$

kann die k -te Komponente von \mathbf{u}_t durch $\widetilde{\nabla}(u_k)_{ij}^n$ ausgedrückt und durch die entsprechenden Approximationen ersetzt werden. Dieses Verfahren erfordert allerdings wie das zweidimensionale Godunov-Verfahren für die Maxwellgleichungen die CFL-Bedingung

$$c \frac{\Delta t}{\min_{i,j} r_{ij}} \leq \frac{1}{2}. \quad (5.48)$$

Dabei ist

$$r_{ij} = \min \{ \|\mathbf{x}_{ij} - \mathbf{x}_{i+1/2, j+1/2}\|, \|\mathbf{x}_{ij} - \mathbf{x}_{i-1/2, j+1/2}\|, \|\mathbf{x}_{ij} - \mathbf{x}_{i+1/2, j-1/2}\|, \|\mathbf{x}_{ij} - \mathbf{x}_{i-1/2, j-1/2}\| \} \quad (5.49)$$

der kleinste Abstand einer Ecke der Zelle zu deren Schwerpunkt \mathbf{x}_{ij} und c die Lichtgeschwindigkeit.

Bei diesem Verfahren wird die Struktur des randangepaßten Gitters nur hinsichtlich der Datenverwaltung benutzt, sie wird bei der Herleitung des Algorithmus nicht verwendet. Im nächsten Abschnitt wird ein Verfahren hergeleitet, bei dem auch die relativ einfache Struktur des aus Vierecken bestehenden Gitters mitverwendet wird, um so ein effizienteres Verfahren zu erhalten.

5.2.2 Rekonstruktion im logischen Gebiet

Bei dieser Erweiterung des MUSCL-Ansatzes auf randangepaßte Koordinaten von Colella [7] wird angenommen, daß die Steigung der Lösung entlang der Linien $\xi = \text{const}$ und $\eta = \text{const}$ konstant ist. Die Argumente der Flußberechnung werden durch die auf die Zellränder extrapolierten Werte und zur Zeit $t^{n+1/2}$ berechneten Werte $\hat{\mathbf{u}}_{i\pm,j}^{n+1/2}$, $\hat{\mathbf{u}}_{i,j\pm}^{n+1/2}$ ersetzt.

Zunächst bestimmt man Steigungsapproximationen in jeweils eine Richtung $(\tilde{\mathbf{u}}_\xi)_{ij}^n$ und $(\tilde{\mathbf{u}}_\eta)_{ij}^n$. Dies kann dadurch geschehen, daß der übliche minmod-Limiter auf die Werte

$$\frac{\mathbf{u}_{i+1,j} - \mathbf{u}_{ij}}{\|\mathbf{x}_{i+1,j} - \mathbf{x}_{ij}\|} \quad \text{und} \quad \frac{\mathbf{u}_{ij} - \mathbf{u}_{i-1,j}}{\|\mathbf{x}_{ij} - \mathbf{x}_{i-1,j}\|}$$

angewendet wird, um beispielsweise $(\tilde{\mathbf{u}}_\xi)_{ij}^n$ zu berechnen.

Damit erhält man

$$\hat{\mathbf{u}}_{i\pm,j}^n = \mathbf{u}_{ij}^n \pm \frac{\|\mathbf{x}_{i\pm 1/2,j} - \mathbf{x}_{ij}\|}{2} (\tilde{\mathbf{u}}_\xi)_{ij}^n, \quad (5.50)$$

$$\hat{\mathbf{u}}_{i,j\pm}^n = \mathbf{u}_{ij}^n \pm \frac{\|\mathbf{x}_{i,j\pm 1/2} - \mathbf{x}_{ij}\|}{2} (\tilde{\mathbf{u}}_\eta)_{ij}^n. \quad (5.51)$$

Die zeitliche Extrapolation erhält man durch

$$\hat{\mathbf{u}}_{i\pm,j}^{n+1/2} = \hat{\mathbf{u}}_{i\pm,j}^n + \frac{\Delta t}{2} (\tilde{\mathbf{u}}_t)_{ij}^n, \quad (5.52)$$

$$\hat{\mathbf{u}}_{i,j\pm}^{n+1/2} = \hat{\mathbf{u}}_{i,j\pm}^n + \frac{\Delta t}{2} (\tilde{\mathbf{u}}_t)_{ij}^n. \quad (5.53)$$

Da keine Approximation der Zeitableitung zur Verfügung steht, ersetzt man sie mit Hilfe der Differentialgleichung durch Raumableitungen. Dabei muß man nun die transformierte Erhaltungsgleichung (C.5) verwenden (siehe Anhang C)

$$\mathbf{u}_t + \frac{y_\eta \mathcal{A} \mathbf{u}_\xi - x_\eta \mathcal{B} \mathbf{u}_\xi}{\det J} + \frac{-y_\xi \mathcal{A} \mathbf{u}_\eta + x_\xi \mathcal{B} \mathbf{u}_\eta}{\det J} = 0. \quad (5.54)$$

Wir behandeln zunächst die Extrapolation in ξ -Richtung. In (5.52) benutzt man für die Approximation von $y_\eta \mathcal{A} \mathbf{u}_\xi - x_\eta \mathcal{B} \mathbf{u}_\xi$ die Approximation von \mathbf{u}_ξ aus der Steigungsapproximation. Dabei ist zu beachten, daß die Geometrieterme an der Stelle (i, j) gebraucht werden. Wie im kartesischen Fall approximiert man $(\mathbf{u}_\eta)_{ij}$ durch die Differenz der Werte von u an den Zellgrenzen:

$$(\mathbf{u}_\eta)_{ij} = \frac{\mathbf{u}_{i,j+1/2} - \mathbf{u}_{i,j-1/2}}{\Delta \eta}. \quad (5.55)$$

Die Werte von \mathbf{u} an den Zellgrenzen erhält man aus der Lösung des Riemannproblems

$$\mathbf{u}_t + (-y_\xi \mathcal{A} + x_\xi \mathcal{B}) \mathbf{u}_\eta = 0 \quad (5.56)$$

$$(5.57)$$

mit den Anfangswerten $\mathbf{u}_l = \mathbf{u}_{i,j-1}$ und $\mathbf{u}_r = \mathbf{u}_{ij}$, um $\mathbf{u}_{i,j-1/2}$ zu erhalten, und den Anfangswerten $\mathbf{u}_l = \mathbf{u}_{ij}$ und $\mathbf{u}_r = \mathbf{u}_{i,j+1}$, um $\mathbf{u}_{i,j+1/2}$ zu erhalten. Setzt man abkürzend

$$\mathcal{D}' = -y_\xi \mathcal{A} + x_\xi \mathcal{B}, \quad (5.58)$$

so ist

$$\frac{\mathcal{D}'_{ij}(\mathbf{u}_\eta)_{ij}}{(\det J)_{ij}} = \frac{\mathcal{D}'_{ij}^+ \mathbf{u}_{ij} + \mathcal{D}'_{ij}^- \mathbf{u}_{i,j+1} - \mathcal{D}'_{ij}^+ \mathbf{u}_{i,j-1} - \mathcal{D}'_{ij}^- \mathbf{u}_{ij}}{\Delta \eta (\det J)_{ij}}. \quad (5.59)$$

Da zur Implementierung anstelle der Komponenten der (nicht normierten) Normalen in (5.58) die Komponenten der Einheitsnormalen

$$\mathbf{n}_{ij}^{(\eta)} = \frac{1}{\sqrt{x_\xi^2 + y_\xi^2}} \begin{pmatrix} -y_\xi \\ x_\xi \end{pmatrix} \Big|_{i,j} \quad (5.60)$$

zur Verfügung stehen, definiert man zusätzlich zu (5.58)

$$\mathcal{D}_{ij} = \mathbf{n}_{ij}^{(\eta)} \begin{pmatrix} \mathcal{A} \\ \mathcal{B} \end{pmatrix}. \quad (5.61)$$

Zwischen \mathcal{D}_{ij} und \mathcal{D}'_{ij} besteht der Zusammenhang

$$\mathcal{D}_{ij} = \frac{1}{(\sqrt{x_\xi^2 + y_\xi^2})_{ij}} \mathcal{D}'_{ij}. \quad (5.62)$$

Mit Hilfe der Bezeichnungen

$$|S_{ij}^{(\eta)}| = \Delta \xi (\sqrt{x_\xi^2 + y_\xi^2})_{ij} \quad (5.63)$$

$$|V_{ij}| = \Delta \xi \Delta \eta (\det J)_{ij} \quad (5.64)$$

lst sich (5.59) zu

$$\frac{\mathcal{D}'_{ij}(\mathbf{u}_\eta)_{ij}}{(\det J)_{ij}} = \frac{|S_{ij}|}{|V_{ij}|} (\mathcal{D}_{ij}^+ \mathbf{u}_{ij} + \mathcal{D}_{ij}^- \mathbf{u}_{i,j+1} - \mathcal{D}_{ij}^+ \mathbf{u}_{i,j-1} - \mathcal{D}_{ij}^- \mathbf{u}_{ij}). \quad (5.65)$$

umformen. Dieses Resultat verwendet man in (5.54) zur Berechnung von \mathbf{u}_t , das wiederum in (5.52) verwendet wird.

Für $\hat{\mathbf{u}}_{i,j\pm}^{n+1/2}$ in (5.53) geht man entsprechend vor und definiert dafür die Matrix \mathcal{C}_{ij} durch

$$\mathcal{C}_{ij} = \mathbf{n}_{ij}^{(\xi)} \begin{pmatrix} \mathcal{A} \\ \mathcal{B} \end{pmatrix}. \quad (5.66)$$

Die letzten Bezeichnungen (5.61) und (5.66) wurden hierbei in Analogie zu Definition (5.30) gewählt, denn hier taucht wieder die Vorschrift zur Flußberechnung auf, allerdings

werden in der inneren Flußauswertung (5.59) für den linken wie den rechten Fluß die Geometrieterme an der selben Stelle (i, j) ausgewertet, im Gegensatz zur Flußberechnung beim Verfahren selbst, vergleiche (5.29, 5.30). Dies stellt sicher, daß man bei Vorgabe von konstanten Anfangswerten wieder eine konstante Lösung erhält. Insgesamt ist auch dieses Verfahren von $\Delta\xi$ und $\Delta\eta$ unabhängig.

Auch hier ergibt sich die CFL-Bedingung daraus, daß es sich um eine Hintereinander-ausführung zweier eindimensionaler Verfahren handelt. Der Zeitschritt muß so klein sein, daß die Information innerhalb eines Zeitschritts entlang der Linien der Linien $\xi = \text{const}$ bzw. $\eta = \text{const}$ nur bis in die nächste Zelle transportiert wird. Sie lautet deshalb für die Maxwellgleichungen

$$c \frac{\Delta t}{\min_{i,j} \{ \|\mathbf{x}_{i-1,j} - \mathbf{x}_{ij}\|, \|\mathbf{x}_{i,j-1} - \mathbf{x}_{ij}\| \}} \leq 1, \quad (5.67)$$

dabei bezeichnet c die Lichtgeschwindigkeit. Die angegebenen Abstände stellen bereits Näherungen an die Länge der (gekrümmten) Linien dar. In der Praxis wird diese CFL-Bedingung in der Regel in einer vereinfachten Form implementiert.

5.3 Splitting-Verfahren nach Strang

Auf kartesischen Koordinaten ist es möglich, das zweidimensionale MUSCL-Verfahren in der Form

$$\mathbf{u}_{ij}^{n+1} = \frac{1}{2} [(I - \Delta t \mathcal{B} Q_y)(I - \Delta t \mathcal{A} Q_x) + (I - \Delta t \mathcal{A} Q_x)(I - \Delta t \mathcal{B} Q_y)] \mathbf{u}_{ij}^n \quad (5.68)$$

zu schreiben (vgl. (4.45)), da die auftretenden Matrizen konstant sind. Dies zeigt, daß das Verfahren unter Verwendung von nur zwei Routinen zur Flußauswertung zu Implementieren ist. Eine weitere Verringerung des Aufwands lieferte dann die Verwendung des Splitting-Verfahrens nach Strang.

Auf randangepaßten Koordinaten werden für die innere Flußauswertung die Matrizen \mathcal{C}_{ij} und \mathcal{D}_{ij} verwendet, während für die äußere Flußberechnung je nach der betrachteten Zellseite die Matrizen $\mathcal{C}_{i\pm 1/2,j}$ und $\mathcal{D}_{ij\pm 1/2}$ zu verwenden sind. Dadurch ist auch die einfache Implementierung und die Anwendung von Strangsplitting nicht möglich. Beschränkt man sich darauf, die Matrizen \mathcal{C} und \mathcal{D} nur an einem Rand jeder Zelle auszuwerten, so kann dennoch ein Splitting-Verfahren nach Strang verwendet werden. Die so ausgewerteten Matrizen sind dann als Näherung zu verstehen.

5.4 Numerische Ergebnisse

Mit den in den vorhergehenden Abschnitten beschriebenen Godunov-Verfahren und den MUSCL-Ansätzen für randangepaßte Koordinaten auf dem in Abbildung 5.4 dargestellten

Punkt	x -Koordinate	y -Koordinate
1	5,83	5,97
2	13,77	33,85
3	18,11	35,90
4	46,78	15,92

Tabelle 5.1: *Punkte für den Vergleich der verschiedenen Verfahren*

Gitter wurde jeweils ein TM0404- und ein TM0805-Problem gerechnet. Die E_3 -Komponente der numerischen Lösung ist in den Abbildung 5.5 bis Abbildung 5.7 dargestellt. Dabei ist wieder links die Lösung zur Zeit $t = 90 ns$ und rechts die Lösung zur Zeit $t = 180 ns$ dargestellt. Obwohl das Gitter stellenweise starke Verzerrungen aufweist, ist die Lösung kaum gestört, was ein sehr gutes Ergebnis ist. In Abbildung 5.5 und 5.6 sind Ergebnisse für ein TM0404-Problem dargestellt. In Abbildung 5.5 erkennt man deutlich die für ein Verfahren erster Ordnung typische starke numerische Dämpfung, die bei dem in Abbildung 5.6 einer Rechnung mit dem zweidimensionalen MUSCL-Ansatz nach Colella (Rekonstruktion im logischen Gebiet) deutlich kleiner ist. In beiden Fällen ist die Struktur der Lösung gut wiedergegeben, die Gitterverzerrung hat fast keinen Einfluß auf die Lösung. In Abbildung 5.7 ist das Ergebnis der numerischen Rechnung mit dem zweidimensionalen MUSCL-Ansatz nach Colella für ein TM0805-Problem dargestellt. Bei diesem Problem mit sehr starken Gradienten, bedingt durch die große Zahl von Wellen in x -Richtung, ist wieder mehr numerische Dämpfung zu beobachten.

Da Schnitte durch das Rechengebiet nur noch unter Verwendung von Interpolation möglich und die Lösungen der einzelnen Verfahren untereinander sehr ähnlich sind, wählen wir die in Tabelle 5.1 angegebenen Punkte und vergleichen für diese Punkte den zeitlichen Verlauf der numerischen Lösung mit dem der exakten Lösung. Dies ist in Abbildung 5.8 und Abbildung 5.9 für ein TM0805-Problem für das Verfahren von Durlofsky et al. (Rekonstruktion im physikalischen Gebiet), das Verfahren von Colella (Rekonstruktion im logischen Gebiet) und das Splitting-Verfahren nach Strang dargestellt. Man erkennt eine etwas stärkere Dämpfung bei Verfahren von Durlofsky, die von der strengeren CFL-Bedingung herrührt. Das Verfahren nach Colella und Dimensionensplitting sind nahezu gleich gut.

Zum Abschluß untersuchen wir auch hier die experimentelle Konvergenzordnung, wieder anhand der gemittelten L_2 -Norm, dargestellt in den Tabellen 5.2 und 5.3.

Die Konvergenzordnung sinkt gegenüber den Ergebnissen auf kartesischem Gitter, die mit der selben Steigungsberechnung erzielt wurden. Dies ist als Einfluß des verzerrten Gitters zu werten. Da die CFL-Bedingung nach der kleinsten Zelle gewählt werden muß, besteht in den großen Zellen eine stärkere Dämpfung.

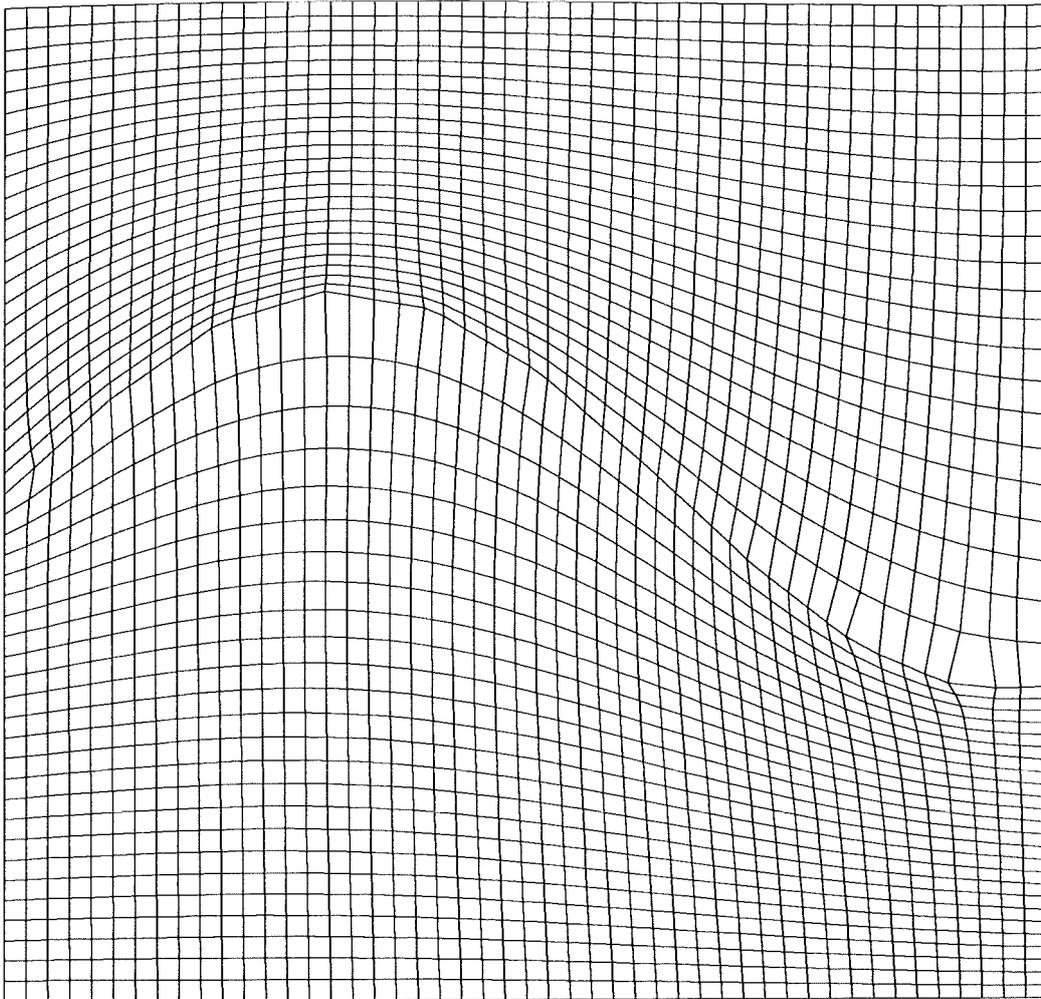


Abbildung 5.4: Gitter zum Test des FV-Verfahrens auf randangepaßten Koordinaten. Es diskretisiert ein quadratisches Rechengebiet mit $x_0 = y_0 = 50$ m.

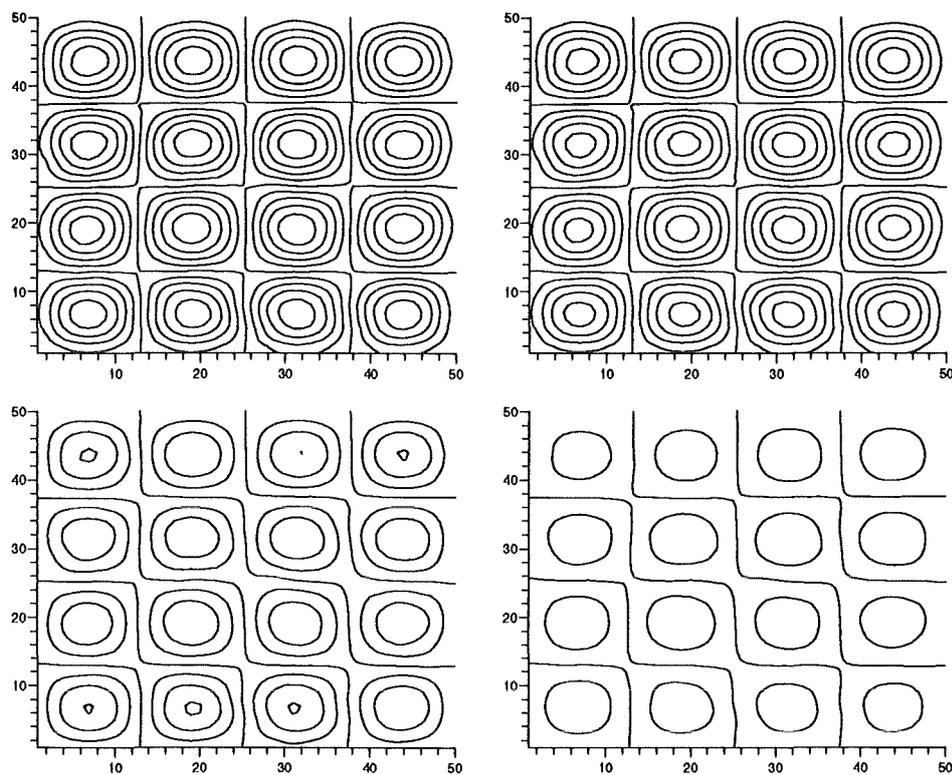


Abbildung 5.5: TM_{0404} -Problem: E_3 -Komponente des elektrischen Feldes, berechnet auf dem in Abbildung 5.4 dargestellten Gitter mit 98×98 Zellen mit einem Verfahren erster Ordnung Dargestellt ist die exakte Lösung oben und die numerische Lösung unten; rechts zur Zeit $t = 90$ ns, links zur Zeit $t = 180$ ns.

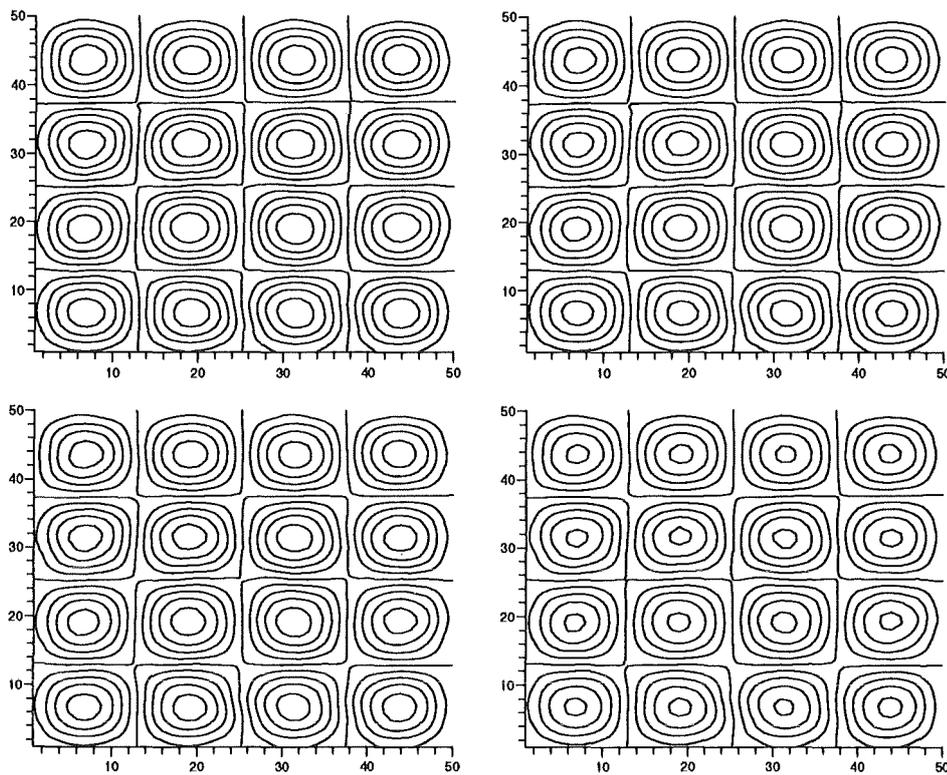


Abbildung 5.6: TM_{0404} -Problem: E_3 -Komponente des elektrischen Feldes, berechnet auf dem in Abbildung 5.4 dargestellten Gitter mit 98×98 Zellen Dargestellt ist die exakte Lösung oben und die numerische Lösung unten; rechts zur Zeit $t = 90 \text{ ns}$, links zur Zeit $t = 180 \text{ ns}$.

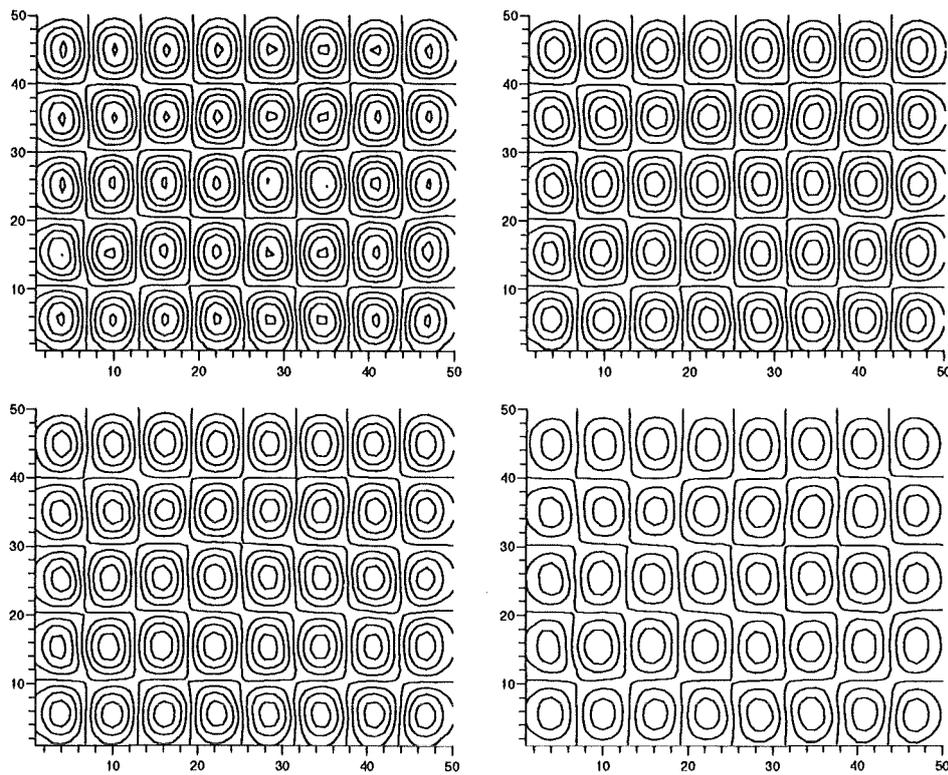


Abbildung 5.7: *TM0805-Problem: E_3 -Komponente des elektrischen Feldes, berechnet auf dem in Abbildung 5.4 dargestellten Gitter mit 98×98 Zellen mit dem zweidimensionalen MUSCL-Ansatz mit Rekonstruktion im logischen Gebiet. Dargestellt ist die exakte Lösung oben und die numerische Lösung unten; rechts zur Zeit $t = 90$ ns, links zur Zeit $t = 180$ ns.*

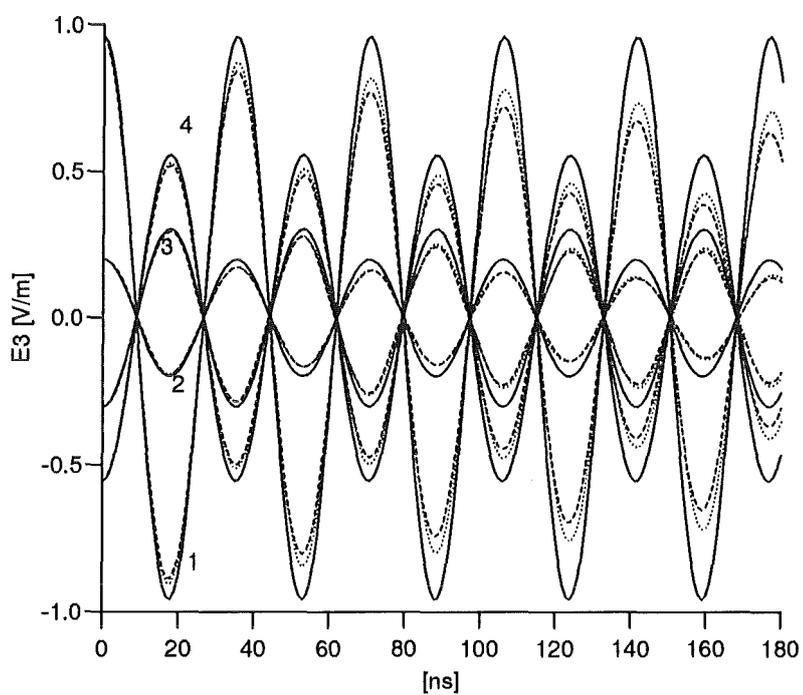


Abbildung 5.8: *TM0805-Problem: Vergleich der Lösung in den in Tabelle 5.1 angegebenen vier Punkten. Die durchgezogene Linie stellt die exakte Lösung dar, das Ergebnis des zweidimensionalen MUSCL-Ansatzes nach Colella (Rekonstruktion im logischen Gebiet) ist gepunktet, das nach Durlofsky et al. (Rekonstruktion im physikalischen Gebiet) gestrichelt dargestellt.*

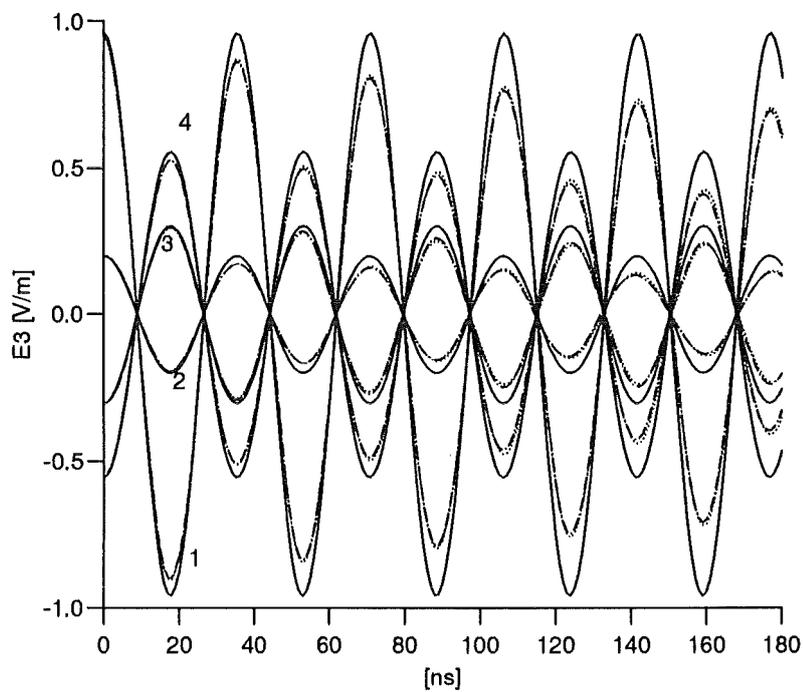


Abbildung 5.9: *TM0805-Problem: Vergleich der Lösung in den in Tabelle 5.1 angegebenen vier Punkten. Die durchgezogene Linie stellt die exakte Lösung dar, das Ergebnis des zweidimensionalen MUSCL-Ansatzes nach Colella (Rekonstruktion im logischen Gebiet) ist gepunktet dargestellt. Die gestrichelte Kurve stellt das Ergebnis bei Rechnung mit Strang-Splitting dar.*

	E_3	B_1	B_2
100×100	2.10	3.79	5.78
200×200	0.70	1.32	2.00

Methode nach Colella

	E_3	B_1	B_2
100×100	2.21	3.92	6.09
200×200	0.75	1.37	2.13

Methode nach Durlofsky et al.

	E_3	B_1	B_2
100×100	2.12	3.74	5.91
200×200	0.66	1.27	1.90

Splitting nach Strang

Tabelle 5.2: *TM0805-Problem: L^2 -Fehler, gemittelt über die Zeit $0 \leq t \leq 180$ ns, Problem auf verschiedenen Verfeinerungsstufen des Gitters.*

	E_3	B_1	B_2
100×100	1.58	1.52	1.53

Methode nach Colella

	E_3	B_1	B_2
100×100	1.56	1.52	1.52

Methode nach Durlofsky et al.

	E_3	B_1	B_2
100×100	1.68	1.56	1.63

Splitting nach Strang

Tabelle 5.3: *Experimentelle Konvergenzordnung berechnet mit den in der vorangegangenen Tabelle 5.2 dargestellten Fehlern. Die beiden Verfahren haben eine vergleichbare Konvergenzordnung, die im erwarteten Rahmen liegt.*

Kapitel 6

Randbedingungen

Zwei Arten von Randbedingungen sind zunächst zu unterscheiden. Zunächst gibt es die Randbedingungen, die physikalische Gegebenheiten modellieren. Solche physikalischen Randbedingungen treten zum Beispiel bei einem idealen Leiter, bei Symmetrieachsen der Anordnung und bei der Einspeisung von elektromagnetischer Energie auf. Sie sind dadurch charakterisiert, daß für bestimmte Größen Werte auf dem Rand vorzuschreiben sind. Eine zweite Art von Randbedingungen liegt bei den sogenannten offenen Rändern vor. Sie werden eingeführt, weil es bei der numerischen Behandlung von Differentialgleichungen oft zu aufwendig ist, die numerische Berechnung der ganzen vorgegebenen Apparatur durchzuführen. Statt dessen ist es sinnvoller, das Rechengebiet auf einen Bereich einzuschränken, in dem sich die physikalisch relevanten Vorgänge abspielen. Man muß also zusätzliche Ränder einführen, die auf die numerische Rechnung wirken, als ob an der entsprechenden Stelle kein Rand, sondern eine Fortsetzung des Rechengebietes wäre. Unter Verwendung der Charakteristikentheorie können die Werte der Größen auf dem Rand angegeben werden. Dann kann wie bei physikalischen Randbedingungen vorgegangen werden und man gelangt zu einer einheitlichen Behandlung aller Randbedingungen, die im folgenden kurz skizziert und an einem einfachen Beispiel konkret durchgeführt wird. Danach wird die Fragestellung allgemein untersucht und die Randbedingungen auch für gekrümmte Ränder formuliert.

Im folgenden gehen wir so vor, daß wir bei der Implementierung der Randbedingungen die Wellenausbreitung mitberücksichtigen, wie dies im Inneren des Rechengebiets ausgeführt wird. Um eine geeignete Flußberechnung am Rand zu erhalten, muß ein Anfangs-Randwertproblem für die Maxwellgleichungen gelöst werden. Das Anfangs-Randwertproblem wird in ein reines Anfangswertproblem umformuliert. Es wird ein geeigneter Anfangszustand gesucht, so daß die Lösung des Riemannproblems, siehe Definition 3.3, am physikalischen Rand den richtigen Wert liefert.

Wir erweitern das Rechengebiet um eine Reihe Zellen, sogenannten Dummygitterzellen. Dort wird ein Wert so vorgeschrieben, daß die Lösung des Riemannproblems auf dem Rand genau den vorgeschriebenen Wert annimmt. Den Wert der Lösung in der Dummygitterzelle bezeichnen wir mit u_l , den Wert in der ersten Zelle des Rechengebiets mit u_r ,

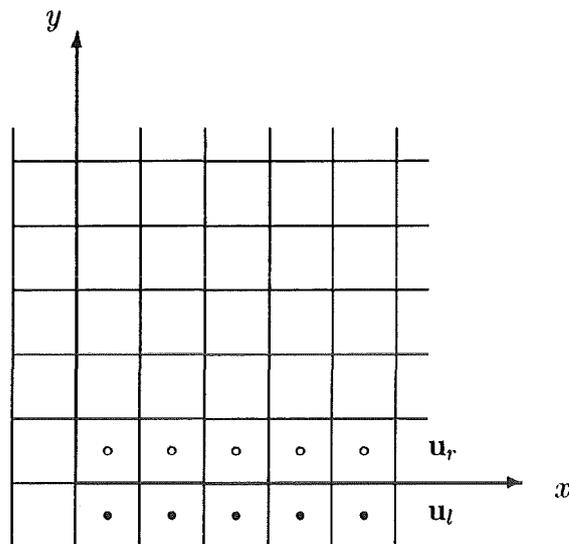


Abbildung 6.1: Linke untere Ecke eines Gitters, umgeben von einer Reihe Dummygitterzellen. Die Bezeichnung der Dummyzellen ist angegeben für die Behandlung des Randes $y = 0$.

siehe Abbildung 6.1. Aus der Lösung des Riemannproblems erhält man die Lösung auf dem Rand, in Abhängigkeit von der Unbekannten u_l . Setzt man die Lösung auf dem Rand mit der vorgeschriebenen Randbedingung gleich, so erhält man einen Wert für u_l und damit, falls diese benötigt werden, auch Werte für den Fluß durch den Rand.

Beispiel 6.1 (Idealer Leiter, kartesisch) Auf einem idealen Leiter gelten nach [20] die Bedingungen

$$\mathbf{n} \times \mathbf{E} = 0 \tag{6.1}$$

$$\mathbf{n} \cdot \mathbf{B} = 0. \tag{6.2}$$

Für einen Rand in x -Richtung, d.h. $y = 0$, lauten sie

$$E_1 = 0 \tag{6.3}$$

$$E_3 = 0 \tag{6.4}$$

$$B_2 = 0. \tag{6.5}$$

Die anderen Komponenten werden nicht vorgeschrieben. Zur Lösung des Riemannproblems in Normalenrichtung

$$\mathbf{u}_t + \mathcal{B}\mathbf{u}_y = 0 \tag{6.6}$$

$$\mathbf{u}(x, y, 0) = \begin{cases} \mathbf{u}_l & \text{für } y < 0 \\ \mathbf{u}_r & \text{für } y > 0, \end{cases} \tag{6.7}$$

benötigt man die Matrix \mathcal{R}_B der Rechtseigenvektoren von B mit Spaltenvektoren \mathbf{r}_i . Sie ist in Anhang A angegeben. Wir definieren einen Vektor α , indem der Sprung in den Anfangswerten in der Basis der Rechtseigenvektoren von B dargestellt wird:

$$\mathbf{u}_r - \mathbf{u}_l = \sum_{j=1}^m \alpha_j \mathbf{r}_j. \quad (6.8)$$

Die beiden charakteristischen Größen zum doppelten Eigenwert $\lambda = 0$ werden entlang des Randes transportiert. Die Lösung hat auf dem Rand einen endlichen Sprung. Dort definiert man daher als Lösung den Mittelwert von rechts- und linksseitiger Lösung und erhält für die Lösung auf dem Rand

$$\begin{aligned} \mathbf{u}(0) &= \mathbf{u}_l + \alpha_1 \mathbf{r}_1 + \alpha_2 \mathbf{r}_2 + \frac{1}{2} (\alpha_3 \mathbf{r}_3 + \alpha_4 \mathbf{r}_4) \\ &= \frac{1}{2} \begin{pmatrix} E_{1,l} + E_{1,r} + c(B_{3,l} - B_{3,r}) \\ E_{2,l} + E_{2,r} \\ E_{3,l} + E_{3,r} - c(B_{1,l} - B_{1,r}) \\ -\frac{1}{c}(E_{3,l} - E_{3,r}) + B_{1,l} + B_{1,r} \\ B_{2,l} + B_{2,r} \\ \frac{1}{c}(E_{1,l} - E_{1,r}) + B_{3,l} + B_{3,r} \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (6.9)$$

Gleichgesetzt mit \mathbf{u}_0 läßt sich die Beziehung allerdings nicht eindeutig nach \mathbf{u}_l auflösen. man erhält eine mögliche Belegung für die Dummygitterzellen, beispielsweise

$$E_{1,l} = -E_{1,r} \quad (6.10)$$

$$E_{2,l} = -E_{2,r} \quad (6.11)$$

$$E_{3,l} = -E_{3,r} \quad (6.12)$$

$$B_{1,l} = B_{1,r} \quad (6.13)$$

$$B_{2,l} = -B_{2,r} \quad (6.14)$$

$$B_{3,l} = B_{3,r}. \quad (6.15)$$

Die Lösung auf dem Rand ergibt sich damit zu

$$\mathbf{u}(0) = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ -\frac{1}{c}E_{3,r} + B_{1,r} \\ 0 \\ \frac{1}{c}E_{1,r} + B_{3,r} \end{pmatrix}, \quad (6.16)$$

woraus sich der Fluß durch den Rand gemäß

$$\mathbf{g} = B\mathbf{u}(0)$$

zu

$$g = \begin{pmatrix} -cE_{1,r} - c^2B_{3,r} \\ 0 \\ -cE_{3,r} + c^2B_{1,r} \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \quad (6.17)$$

berechnet.

6.1 Ein inverses Riemannproblem

Das vorangegangene Beispiel hat bereits gezeigt, daß sich die Belegung der Dummyzellen nicht eindeutig aus der Vorgabe von $\mathbf{u}(0)$ und \mathbf{u}_l ergibt. Dies ist ein allgemeines Phänomen und wird in diesem Abschnitt untersucht.

Motiviert durch das Vorgehen in Beispiel 6.1 wird nun eine gegenüber Definition 3.3 des Riemannproblems umgekehrte Fragestellung untersucht: Gegeben ist \mathbf{u}_r und \mathbf{u}_0 , gesucht \mathbf{u}_l . Bei dieser Fragestellung existiert, im Gegensatz zum Riemannproblem, im allgemeinen keine Lösung für beliebiges \mathbf{u}_r und \mathbf{u}_0 , und auch bei geeignet vorgegebenen Werten ist \mathbf{u}_l nicht eindeutig bestimmt, wie der folgende Satz zeigt.

Satz 5 Sei

$$\mathbf{u}_t + \mathcal{A}\mathbf{u}_x = 0, \quad \mathcal{A} \in \mathbb{R}^{m \times m} \quad (6.18)$$

eine lineare, strikt hyperbolische Gleichung. Das Problem

$$\mathbf{u}_t + \mathcal{A}\mathbf{u}_x = 0 \quad (6.19)$$

mit Anfangswerten

$$\mathbf{u}(x, 0) = \mathbf{u}_r \quad \text{für } x > 0 \quad (6.20)$$

und Werten

$$\mathbf{u}(0, t) = \mathbf{u}_0 \quad \text{für } t > 0 \quad (6.21)$$

mit zwei konstanten Vektoren $\mathbf{u}_r, \mathbf{u}_0 \in \mathbb{R}^m$ besitzt genau dann eine Lösung $\mathbf{u}_l \in \mathbb{R}^m$, wenn für die charakteristischen Variablen $\mathbf{v} = \mathcal{R}^{-1}\mathbf{u}$, $\mathbf{v} = (v_1, \dots, v_m)^T$, die Kompatibilitätsbedingungen

$$v_{k,0} = v_{k,r} \quad \forall k \text{ mit } \lambda_k < 0 \quad (6.22)$$

erfüllt sind. Die Lösung \mathbf{v}_l ist dann bis auf diejenigen Komponenten $v_{k,l}$ von \mathbf{v}_l , für die $\lambda_k \geq 0$ gilt, eindeutig bestimmt.

Beweis Transformation von (6.18) auf charakteristische Variablen liefert m skalare Transportgleichungen

$$(v_k)_t + \lambda_k(v_k)_x = 0, \quad k = 1, \dots, m. \quad (6.23)$$

Wir unterscheiden die Fälle $\lambda_k > 0$, $\lambda_k < 0$ und $\lambda_k = 0$:

1. $\lambda_k > 0$:
Die k -te Charakteristik läuft nach rechts. Zurückverfolgen der Charakteristiken von $x = 0$ nach links zeigt, daß $v_{k,l}$ durch $v_{k,l} = v_{k,0}$ eindeutig bestimmt ist.
2. $\lambda_k < 0$:
Die k -te Charakteristik läuft nach links. Zurückverfolgen der Charakteristiken nach rechts zeigt, daß $v_{k,0} = v_{k,r}$ erfüllt sein muß, sonst ist das Problem unlösbar. $v_{k,l}$ ist durch die Vorgaben nicht bestimmt. Dies führt zu einem Freiheitsgrad in der Lösung \mathbf{v}_l .
3. $\lambda_k = 0$:
Die k -te Charakteristik verläuft parallel zum Rand. Damit ist $v_{k,l}$ durch die Vorgabe nicht bestimmt. Dies führt ebenfalls zu einem Freiheitsgrad in der Lösung.

Insgesamt ergeben sich die Behauptungen. □

Bemerkungen

1. Definiert man wie in Abschnitt 3.2 die Lösung auf dem Rand als Mittelwert des Zustandes rechts und links neben dem Rand, so ist die Lösung \mathbf{v}_l sogar bis auf diejenigen Komponenten $v_{k,l}$ von \mathbf{v}_l , für die $\lambda_k > 0$ gilt, eindeutig bestimmt.
2. Ein entsprechender Satz läßt sich formulieren, wenn \mathbf{u}_l und \mathbf{u}_0 vorgegeben werden und \mathbf{u}_r gesucht ist.

In der Praxis werden die Randbedingungen in der Regel nicht in charakteristischen, sondern in erhaltenen Größen formuliert. Diese sind im allgemeinen Linearkombinationen der charakteristischen Variablen. Transformiert man die in Satz 5 angegebenen Freiheitsgrade, so kann eine beliebige der beteiligten erhaltenen Größen frei gewählt werden. Ebenso ergeben die Kompatibilitätsbedingungen Bedingungen an Linearkombinationen von erhaltenen Größen.

6.2 Allgemeine Behandlung der Randbedingungen

Wir verfolgen nun den im vorangegangenen Beispiel durchgeführten Ansatz für die Maxwellgleichungen für randangepaßte Koordinaten. Anwenden von Satz 5 in Normalenrichtung zeigt, welche Größen vorgeschrieben werden dürfen und wie die Dummyzellen zu

belegen sind. Ohne Beschränkung der Allgemeinheit betrachten wir den linken Rand. \mathbf{u}_r bezeichne den Wert der physikalischen Größe in der letzte Zelle des Rechengebiets und \mathbf{u}_l bezeichne die erste Dummyzelle. Wir nehmen an, daß der Zustand \mathbf{u}_r bekannt ist und auf dem Rand für alle sechs Komponenten Werte vorgeschrieben sind:

$$\mathbf{u}_0 = (E_{1,0}, E_{2,0}, E_{3,0}, B_{1,0}, B_{2,0}, B_{3,0})^T. \quad (6.24)$$

Zur Lösung des Riemannproblems benötigt man die Matrix der Rechtseigenvektoren von $\mathcal{C} = a\mathcal{A} + b\mathcal{B}$, diese ist in Anhang A angegeben. Dabei ist $(a, b)^T$ die äußere Einheitsnormale an das Gebiet. Mit der Definition eines Vektors α durch

$$\mathbf{u}_r - \mathbf{u}_l = \sum_{j=1}^m \alpha_j \mathbf{r}_j, \quad (6.25)$$

von dem die ersten vier Komponenten

$$\alpha_1 = \frac{1}{2c} (b(E_{1,r} - E_{1,l}) - a(E_{2,r} - E_{2,l}) + c(B_{3,r} - B_{3,l})) \quad (6.26)$$

$$\alpha_2 = \frac{1}{2c} (E_{3,r} - E_{3,l} - bc(B_{1,r} - B_{1,l}) + ac(B_{2,r} - B_{2,l})) \quad (6.27)$$

$$\alpha_3 = \frac{1}{2} (a(E_{1,r} - E_{1,l}) + b(E_{2,r} - E_{2,l})) \quad (6.28)$$

$$\alpha_4 = \frac{1}{2} (-a(B_{1,r} - B_{1,l}) + b(B_{2,r} - B_{2,l})) \quad (6.29)$$

benötigt werden, erhält man die Lösung auf dem Rand, wieder als arithmetisches Mittel der links- und der rechtsseitigen Lösung:

$$\begin{aligned} \mathbf{u}(0) &= \mathbf{u}_l + \alpha_1 \mathbf{r}_1 + \alpha_2 \mathbf{r}_2 + \frac{1}{2} (\alpha_3 \mathbf{r}_3 + \alpha_4 \mathbf{r}_4) \\ &= \frac{1}{2} \begin{pmatrix} E_{1,r} + E_{1,l} + bc(B_{3,r} - B_{3,l}) \\ E_{2,r} + E_{2,l} - ac(B_{3,r} - B_{3,l}) \\ E_{3,r} + E_{3,l} - bc(B_{1,r} - B_{1,l}) + ac(B_{2,r} - B_{2,l}) \\ B_{1,r} + B_{1,l} - \frac{b}{c}(E_{3,r} - E_{3,l}) \\ B_{2,r} + B_{2,l} + \frac{a}{c}(E_{3,r} - E_{3,l}) \\ B_{3,r} + B_{3,l} + \frac{b}{c}(E_{1,r} - E_{1,l}) - \frac{a}{c}(E_{2,r} - E_{2,l}) \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (6.30)$$

Gleichsetzen von \mathbf{u}_0 mit $\mathbf{u}(0)$ und Auflösen nach \mathbf{u}_l ergibt

$$E_{1,l} - bcB_{3,l} = 2E_{1,0} - E_{1,r} - cbB_{3,r} \quad (6.31)$$

$$E_{2,l} + acB_{3,l} = 2E_{2,0} - E_{2,r} + acB_{3,r} \quad (6.32)$$

$$E_{3,l} + bcB_{1,l} - acB_{2,l} = 2E_{3,0} + bcB_{1,r} - acB_{2,r} \quad (6.33)$$

$$B_{1,l} + \frac{b}{c}E_{3,l} = 2B_{1,0} - B_{1,r} + \frac{b}{c}E_{3,r} \quad (6.34)$$

$$B_{2,l} - \frac{a}{c}E_{3,l} = 2B_{2,0} - B_{2,r} - \frac{a}{c}E_{3,r} \quad (6.35)$$

$$B_{3,l} - \frac{b}{c}E_{1,l} + \frac{a}{c}E_{2,l} = 2B_{3,0} - \frac{b}{c}E_{1,r} + \frac{a}{c}E_{2,r}. \quad (6.36)$$

Setzt man Gleichung (6.31) und (6.32) in (6.36) sowie (6.34) und (6.35) in (6.33) ein, so erhält man

$$E_{3,0} - bcB_{1,0} + acB_{2,0} = E_{3,r} - bcB_{1,r} + acB_{2,r} \quad (6.37)$$

$$bE_{1,0} - aE_{2,0} + cB_{3,0} = bE_{1,r} - aE_{2,r} + cB_{3,r}. \quad (6.38)$$

Diese beiden Größen $bE_1 - aE_2 + cB_3$ und $E_3 - bcB_1 + acB_2$ sind gerade die nach links transportierten charakteristischen Variablen, die auf dem Rand nicht beliebig vorgeschrieben werden dürfen, da sie ja vom Innern des Rechengebiets her bereits bestimmt sind, wie in Abschnitt 6.1 gezeigt wurde. Es dürfen jeweils nur zwei der drei Werte $E_{3,0}, B_{1,0}, B_{2,0}$ bzw. $E_{1,0}, E_{2,0}, B_{3,0}$ vorgeschrieben werden. Sind $E_{3,0}$ und $B_{3,0}$ gerade die nicht festgelegten Werte, so erhält man mit der Wahl

$$E_{3,l} = E_{3,r} \quad (6.39)$$

$$B_{3,l} = B_{3,r} \quad (6.40)$$

die Randbedingungen

$$E_{1,l} = 2E_{1,0} - E_{1,r} \quad (6.41)$$

$$E_{2,l} = 2E_{2,0} - E_{2,r} \quad (6.42)$$

$$B_{1,l} = 2B_{1,0} - B_{1,r} \quad (6.43)$$

$$B_{2,l} = 2B_{2,0} - B_{2,r}. \quad (6.44)$$

In den folgenden Abschnitten werden alle auftretenden Randbedingungen durch Angabe der Werte auf dem Rand charakterisiert und daraus die entsprechende Belegung der Dummyzellen bestimmt. Da diese Randbedingungen physikalisch motiviert sind, ist zu erwarten, daß entweder nicht alle Komponenten vorzuschreiben sind oder daß sie die Kompatibilitätsbedingungen (6.37, 6.38) erfüllen.

6.2.1 Einspeisung

Der Fall der Einspeisung elektromagnetischer Energie ins Rechengebiet ist mit diesen allgemeinen Überlegungen bereits abgeschlossen. Unter Beachtung der Tatsache, daß nur vier der sechs Feldkomponenten vorgeschrieben werden dürfen, läßt sich aus Gleichung (6.30) die Belegung der Dummyzellen bestimmen.

6.2.2 Idealer Leiter

Mit der äußeren Einheitnormale $\mathbf{n} = (a, b)^T$ des Gebiets führen (6.1) und (6.2) auf die Randbedingungen

$$aE_2 - bE_1 = 0 \quad (6.45)$$

$$E_3 = 0 \quad (6.46)$$

$$aB_1 + bB_2 = 0. \quad (6.47)$$

Auch diese Randbedingung enthält noch genügend Freiheitsgrade, um den allgemeinen Überlegungen zu genügen. Da hier aber nur Beziehungen zwischen Größen vorgeschrieben sind, muß (6.30) in diese Gleichungen eingesetzt werden. Man erhält als eine mögliche Belegung der Dummygitterzelle

$$E_{1,l} = -E_{1,r} \quad (6.48)$$

$$E_{2,l} = -E_{2,r} \quad (6.49)$$

$$E_{3,l} = -E_{3,r} \quad (6.50)$$

$$B_{1,l} = (b^2 - a^2)B_{1,r} - 2abB_{2,r} \quad (6.51)$$

$$B_{2,l} = (a^2 - b^2)B_{2,r} - 2abB_{1,r} \quad (6.52)$$

$$B_{3,l} = B_{3,r} \quad (6.53)$$

beziehungsweise

$$B_{1,r} = -(a^2 - b^2)B_{1,l} - 2abB_{2,r} \quad (6.54)$$

$$B_{2,r} = -(b^2 - a^2)B_{2,l} - 2abB_{1,r}. \quad (6.55)$$

Für die Lösung auf dem Rand erhält man daraus

$$\mathbf{u}(0) = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ -\frac{b}{c}E_{3,r} + b^2B_{1,r} - abB_{2,r} \\ \frac{a}{c}E_{3,r} + a^2B_{2,r} - abB_{1,r} \\ -\frac{b}{c}E_{1,r} - \frac{a}{c}E_{2,r} + B_{3,r} \end{pmatrix}, \quad (6.56)$$

für den numerischen Fluß durch den Rand in Abhängigkeit von \mathbf{u}_r ,

$$\mathbf{g} = \begin{pmatrix} -b^2cE_{1,r} + abcE_{2,r} - bc^2B_{3,r} \\ +abcE_{1,r} - a^2cE_{2,r} + ac^2B_{3,r} \\ -cE_{3,r} + bc^2B_{1,r} - ac^2B_{2,r} \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad (6.57)$$

und in Abhängigkeit von \mathbf{u}_l

$$\mathbf{g} = \begin{pmatrix} +b^2cE_{1,l} - abcE_{2,l} - bc^2B_{3,l} \\ -abcE_{1,l} + a^2cE_{2,l} + ac^2B_{3,l} \\ +cE_{3,l} + bc^2B_{1,l} - ac^2B_{2,l} \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}. \quad (6.58)$$

6.2.3 Offene Ränder

Offene Ränder werden eingeführt, um das Rechengebiet klein halten zu können. Man möchte, daß diese offenen Ränder Informationen ungehindert aus dem Rechengebiet herauslaufen lassen und fordert, daß charakteristischen Variablen, die einlaufenden charakteristischen Größen entsprechen, auf dem Rand zeitlich konstant sind [16].

Wir betrachten wieder das Gleichungssystem $\mathbf{u}_t + A\mathbf{u}_x = 0$ mit einem offenen Rand bei $x = 0$. Für einen linken Rand laufen die zu positiven Eigenwerten gehörenden Charakteristiken in das Rechengebiet hinein. In charakteristischen Variablen $\mathbf{v} = \mathcal{R}^{-1}\mathbf{u}$ lautet die Randbedingung damit zunächst

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} v_5(0, t) &= 0 \\ \frac{\partial}{\partial t} v_6(0, t) &= 0 \end{aligned} \quad \forall t \in \mathbb{R}_0^+. \quad (6.59)$$

Die übrigen Komponenten bleiben unverändert.

Im ersten Schritt wird nun aus dieser Charakterisierung die Lösung auf dem Rand berechnet. Rücktransformation auf die erhaltenen Größen zeigt, daß es die Lösung des folgenden Riemannproblems ist, die die geforderten Eigenschaften hat:

$$\mathbf{u}_t + A^- \mathbf{u}_x = 0 \quad (6.60)$$

$$\mathbf{u}(x, 0) = \begin{cases} \mathbf{u}_l & \text{für } x < 0 \\ \mathbf{u}_r & \text{für } x > 0 \end{cases} \quad (6.61)$$

Dieses Riemannproblem hat als Lösung $\mathbf{u}(0) = \mathbf{u}_r$, da A^- nur nicht-positive Eigenwerte hat. Wendet man dieses Resultat für eine beliebige Richtung an, so läßt sich die Lösung auf dem Rand auch für randangepaßte Koordinaten in der selben Form wie in den vorhergehenden Beispielen angeben, mit dem einzigen Unterschied, daß sie im Falle offener Ränder von dem im Rechengebiet vorliegenden Wert abhängt.

Im zweiten Schritt kann man nun wie vorher vorgehen. Setzt man $\mathbf{u}(0)$ in (6.30) mit \mathbf{u}_r gleich, so erhält man $\mathbf{u}_l = \mathbf{u}_r$ als eine mögliche Belegung der Dummyzellen.

Diese Behandlung offener Randbedingungen stellt einen Spezialfall der Einspeisung dar. Die Randbedingung fordert, daß der Wert der hereinlaufenden charakteristischen Größen konstant bleibt. Diese hängen aber über die Rücktransformation von dem im Rechengebiet vorhandenen Werten ab. Deshalb ist auch die einzuspeisende Größe von \mathbf{u}_r abhängig.

6.3 Numerische Ergebnisse

Wir betrachten hier ein Beispiel für die homogenen Maxwellgleichungen, mit dem insbesondere die Modellierung der Einspeisung elektromagnetischer Energie und der offenen

Ränder getestet werden kann. Das Rechengebiet ist ein Viertel eines Kreisrings im ersten Quadranten mit dem inneren Radius r und dem äußeren Radius R . Am inneren Radius r wird die exakte Lösung eines sich im Ursprung befindenden Dipols eingespeist.

$$B_{1,0}(r, t) = \frac{E_0}{c} \frac{y}{r} \psi(r, t) \quad (6.62)$$

$$B_{2,0}(r, t) = -\frac{E_0}{c} \frac{x}{r} \psi(r, t) \quad (6.63)$$

mit

$$\psi(r, t) = \sin(\omega t) J_1(kr) - \cos(\omega t) Y_1(kr). \quad (6.64)$$

Dabei bezeichnen J_1 bzw. Y_1 die Besselfunktionen erster bzw. zweiter Art, E_0 beträgt $-19,54 \text{ V/m}$ und zwischen der Frequenz ω und der Wellenzahl k besteht der Zusammenhang $\omega = ck$. Entlang des äußeren Radius R wird ein offener Rand vorgeschrieben, und an den Achsen werden symmetrische Randbedingungen gesetzt. In Abb. 6.2 oben ist die numerische Lösung für die B_2 -Komponente zur Zeit $t = 30 \text{ ns}$ dargestellt. Deutlich ist zu erkennen, daß vom offenen Rand keine Reflexionen herrühren. Um die Lösung genauer vergleichen zu können, werden auf der Winkelhalbierenden vier Punkte im Abstand $r_1 = 1.01 \text{ m}$, $r_2 = 1.41 \text{ m}$, $r_3 = 2.59 \text{ m}$, und $r_4 = 2.99 \text{ m}$ vom Ursprung ausgewählt. Für jeden Punkt wird die exakte Lösung (durchgezogene Linie) mit der numerischen Lösung (Kreise) verglichen. Dies ist im unteren Teil der Abbildung dargestellt. Je größer der Abstand vom Ursprung ist, desto länger dauert es, bis die in r eingespeiste Information den jeweiligen Punkt erreicht hat. Vor allem am Punkt r_4 wird deutlich, daß keine Reflexionen von dem offenen Rand zurückkommen.

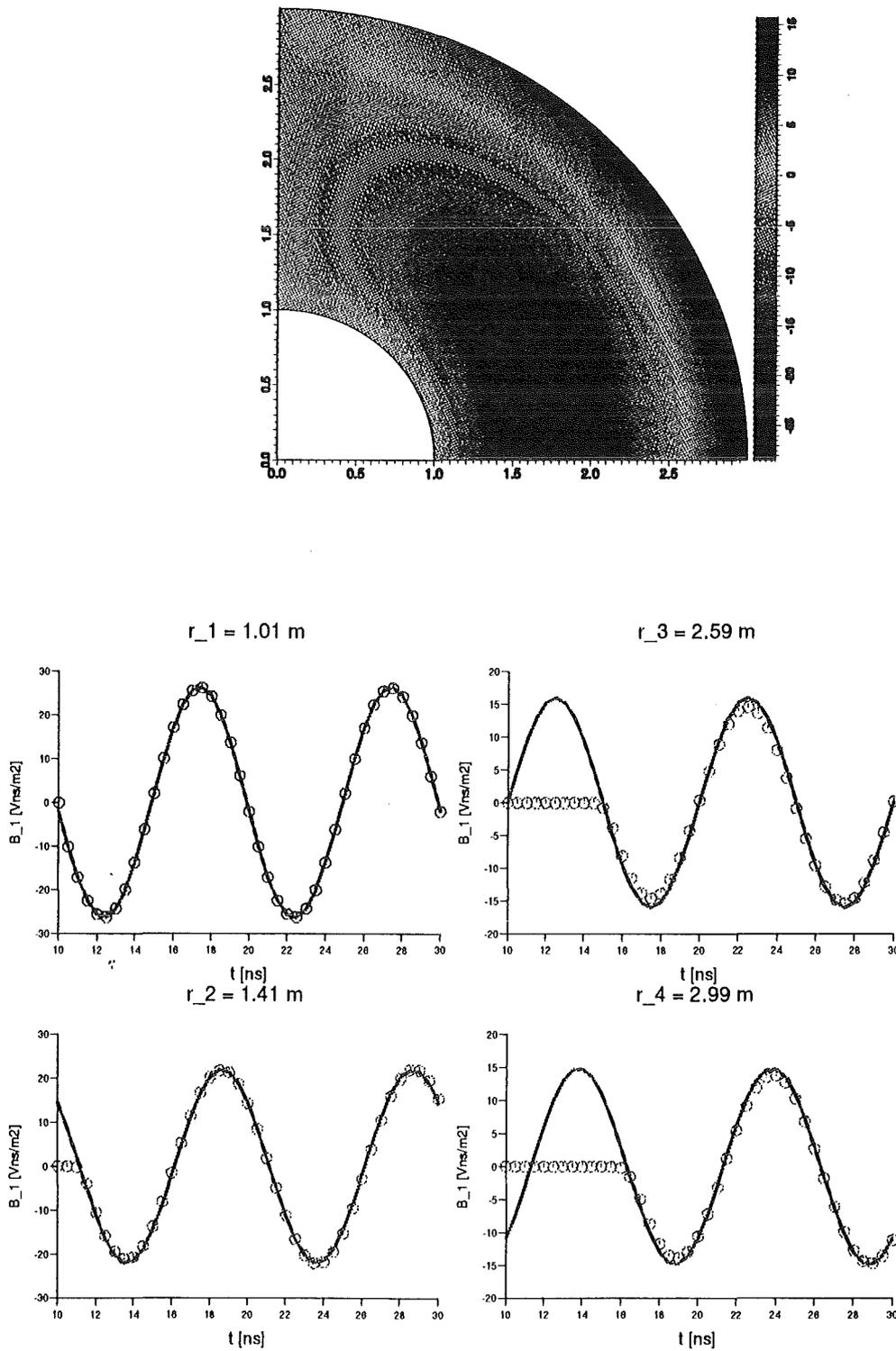


Abbildung 6.2: Problem zum Test der Modellierung von Einspeisung und offenen Rändern. Oben ist die B_2 -Komponente zur Zeit $t = 30 \text{ ns}$ dargestellt. Im unteren Teil wird für vier Punkte auf der Winkelhalbierenden mit Abstand r_i , $i = 1, \dots, 4$, vom Ursprung die exakte Lösung (durchgezogene Linie) mit der numerischen (Kreise) verglichen.

Kapitel 7

Die Divergenzbedingungen

Im ersten Kapitel wurde gezeigt, daß im kontinuierlichen Fall die Divergenzgleichungen (2.10) und (2.11) automatisch erfüllt sind, wenn die Kontinuitätsgleichung (2.12) gilt. Diese Aussage ist die Grundlage dafür, nur die Gleichungen (2.8) und (2.9) für das numerische Verfahren zu verwenden. Es bleibt daher zu untersuchen, ob und in welchem Sinne die Divergenzgleichungen (2.10), die auch Gaußsches Gesetz genannt wird, und (2.11) für die Lösung des numerischen Verfahrens gelten.

Wir nehmen zunächst an, daß ρ und \mathbf{j} analytisch gegeben sind und die Kontinuitätsgleichung erfüllen. Um die Qualität des Maxwell-Lösers beurteilen zu können, untersucht man, ob sich, wie im kontinuierlichen Fall, die richtige Ladungsdichte nachträglich aus dem elektrischen Feld ergibt, wenn eine diskrete Form der Kontinuitätsgleichung gilt. Dies reduziert sich auf die Frage, ob es ein diskretes Analogon zu $\nabla \cdot (\nabla \times \mathbf{F}) = 0$ für beliebiges differenzierbares \mathbf{F} gibt. Dieser Aspekt wird im ersten Teil dieses Kapitels, in Abschnitt 7.1, untersucht. Dabei zeigt sich, daß die Maxwell-Löser in zwei Gruppen eingeteilt werden können: die der einen Gruppe erfüllen die Divergenzgleichungen in einem diskreten Sinne exakt, die der anderen Gruppe nur näherungsweise. Für Finite-Differenzen-Verfahren, die auf zentralen Differenzenquotienten basieren, läßt sich ein diskreter Ableitungsoperator $\widetilde{\nabla}$ definieren, für den ein diskretes Analogon der oben erwähnten Identität gilt. Sie gehören damit zur ersten Gruppe. Für Finite-Volumen-Verfahren lassen sich solche Ableitungsoperatoren nicht finden, aber man kann die näherungsweise Gültigkeit von Satz 1 zeigen, das heißt, daß der Fehler der Divergenz mit der Maschenweite des Gitters gegen Null geht. Damit gehören sie zur zweiten Gruppe.

Im Zusammenspiel mit der Teilchenbewegung kommen allerdings die Schritte der Teilchenbehandlung hinzu, vergleiche hierzu Anhang D. Die resultierende Ladungs- und Stromdichte erfüllen die Kontinuitätsgleichung auf Grund von Interpolationsfehlern nicht [18]. Diese Ursache für den Verlust der Konsistenz zwischen \mathbf{E} und ρ betrifft beide der oben beschriebenen Klassen von Maxwell-Lösern. Ein Ansatz, dieses Problem zu lösen, ist, Interpolationsverfahren zu entwickeln, die gewährleisten, daß eine diskrete Version der Kontinuitätsgleichung erfüllt ist. Wir schlagen hier den Weg ein, das Ergebnis des Maxwell-Lösers so

zu korrigieren, daß das elektrische Feld wieder mit der Ladungsdichte konsistent ist. Dabei müssen die elliptischen Divergenzbedingungen in das Lösungsverfahren für die Maxwellgleichungen eingebaut werden. Dazu werden die Maxwellgleichungen mit Hilfe eines Lagrangemultiplikators formuliert. Man erhält ein hyperbolisch-elliptisches System, das entweder direkt gelöst oder mit einer geeigneten Modifikation durch ein hyperbolisch-parabolisches oder ein rein hyperbolisches System approximiert werden kann. Dies wird im zweiten Teil dieses Kapitels, in den Abschnitten 7.2 bis 7.4 behandelt.

7.1 Der Maxwell-Löser

Mit der Definition eines diskreten Divergenzoperators kann man die Divergenz des numerischen Ergebnisses bestimmen und diskrete Analoga von Satz 1 zeigen. Verschieden Maxwell-Löser lassen sich in zwei Gruppen einteilen, Je nachdem, ob sie die diskretisierten Divergenzgleichungen exakt oder nur näherungsweise erfüllen.

Wie auch sonst in dieser Arbeit beschränken wir uns auf zwei Raumdimensionen. Weiter sei $\widetilde{\nabla}_{ij} \neq 0$ ein diskreter Divergenzoperator.

Definition 7.1 Ein diskretes Feld \mathbf{F}_{ij} heißt diskret divergenzfrei (bezüglich des Divergenzoperators $\widetilde{\nabla}_{ij}$), falls

$$\widetilde{\nabla}_{ij} \cdot \mathbf{F}_{ij} = 0 \quad \forall i, j. \quad (7.1)$$

Bemerkung Die diskrete Divergenzfreiheit hängt von der Wahl des Gitters und des diskreten Divergenzoperators ab.

Beispiel 7.2 Diskreter Divergenzoperator mit zentralen Differenzenquotienten

1. Für nicht versetztes Gitter: $\mathbf{F}_{ij} = ((F_1)_{ij}, (F_2)_{ij})^T$,

$$\widetilde{\nabla}_{ij} \cdot \mathbf{F}_{ij} = \frac{(F_1)_{i+1,j} - (F_1)_{i-1,j}}{2\Delta x} + \frac{(F_2)_{i,j+1} - (F_2)_{i,j-1}}{2\Delta y} \quad (7.2)$$

2. Für versetztes Gitter: $\mathbf{F}_{i+1/2,j+1/2} = ((F_1)_{i,j+1/2}, (F_2)_{i+1/2,j})^T$,

$$\widetilde{\nabla}_{i+1/2,j+1/2} \cdot \mathbf{F}_{i+1/2,j+1/2} = \frac{(F_1)_{i+1,j+1/2} - (F_1)_{i,j+1/2}}{\Delta x} + \frac{(F_2)_{i+1/2,j+1} - (F_2)_{i+1/2,j}}{\Delta y}. \quad (7.3)$$

Für das Leapfrog-Verfahren zusammen mit dem diskreten Divergenzoperator mit zentralen Differenzenquotienten gilt der Satz:

Satz 6 Gilt für ein $n \in \mathbb{N}$ und den diskreten Divergenzoperator aus Beispiel 7.2(2.)

$$\widetilde{\nabla}_{i+1/2,j+1/2} \cdot \mathbf{E}_{i+1/2,j+1/2}^n = \frac{\rho_{i+1/2,j+1/2}^n}{\epsilon_0} \quad (7.4)$$

$$\widetilde{\nabla}_{i+1/2,j+1/2} \cdot \mathbf{B}_{i+1/2,j+1/2}^n = 0 \quad (7.5)$$

und

$$\rho_{i+1/2,j+1/2}^n = \rho_{i+1/2,j+1/2}^{n-1} - \Delta t \widetilde{\nabla}_{i+1/2,j+1/2} \cdot \mathbf{J}_{i+1/2,j+1/2}^n, \quad (7.6)$$

so erfüllt die Lösung des Leapfrog-Verfahrens die Gleichungen (7.4) und (7.5) zur Zeit t^{n+1} .

Beweis Der diskrete Divergenzoperator wird auf das Näherungsverfahren aus Anhang B für die Maxwellgleichungen angewendet. Man findet diesen Beweis z.B. in [5] oder [45].

Für Finite-Volumen-Verfahren läßt sich eine ähnliche Aussage nicht zeigen. Die Definition wird deshalb abgeschwächt:

Definition 7.3 Ein diskretes Feld \mathbf{F}_{ij} heißt näherungsweise divergenzfrei (bezüglich des Divergenzoperators $\widetilde{\nabla}_{ij}$), falls

$$\widetilde{\nabla}_{ij} \cdot \mathbf{F}_{ij} = O(\Delta^k) \quad \forall i, j \quad (7.7)$$

dabei ist $k \in \mathbb{N}$, Δ die Raumschrittweite.

Für Finite-Volumen-Verfahren gilt:

Satz 7 Gilt für ein $n \in \mathbb{N}$ und den diskreten Divergenzoperator aus Beispiel 7.2(1.)

$$\widetilde{\nabla}_{ij} \cdot \mathbf{E}_{ij}^n = \frac{\rho_{ij}^n}{\epsilon_0} \quad (7.8)$$

$$\widetilde{\nabla}_{ij} \cdot \mathbf{B}_{ij}^n = 0 \quad (7.9)$$

und

$$\rho_{ij}^{n+1} = \rho_{ij}^n - \Delta t \widetilde{\nabla}_{ij} \cdot \mathbf{J}_{ij}^n, \quad (7.10)$$

so erfüllt die Lösung eines Finite-Volumen-Verfahrens der Ordnung k die Gleichungen (7.8) und (7.9) zur Zeit t^{n+1} für $k \in \{1, 2\}$ mindestens bis zur Ordnung k , und für $k > 2$ genau bis zur Ordnung 2.

Beweis Bei einem Finite-Volumen-Verfahren

$$\mathbf{u}_{ij}^{n+1} = \mathbf{u}_{ij}^n - \frac{\Delta t}{\Delta x} (\mathbf{G}_{i+1/2,j} - \mathbf{G}_{i-1/2,j}) - \frac{\Delta t}{\Delta y} (\mathbf{H}_{i,j+1/2} - \mathbf{H}_{i,j-1/2}) \quad (7.11)$$

ter Ordnung haben die Flußdifferenzen die Approximationseigenschaft

$$\frac{\mathbf{G}_{i+1/2,j} - \mathbf{G}_{i-1/2,j}}{\Delta x} + \frac{\mathbf{H}_{i,j+1/2} - \mathbf{H}_{i,j-1/2}}{\Delta y} = \sum_{l=1}^k \frac{\Delta t^{l-1}}{l!} \left(\frac{\partial^l \mathbf{u}}{\partial t^l} \right)_{ij} + \Delta^k \mathbf{d}_{ij} + O(\Delta^{k+1}). \quad (7.12)$$

Dabei bezeichnet \mathbf{d}_{ij} den Term niedrigster Ordnung des Diskretisierungsfehlers.

Wir zeigen die Aussage für die magnetische Induktion, relevant sind also die vierte und fünfte Komponente von \mathbf{u} .

Zunächst untersuchen wir die Anwendung des diskreten Divergenzoperators auf eine kontinuierliche Funktion (f, g) mit $f, g \in C^4$, ausgewertet an der Stelle (x_i, y_j) . Mit der Kurzschreibweise $(f(x_i, y_j), g(x_i, y_j))^T = (f_{ij}, g_{ij})^T$ gilt

$$\tilde{\nabla}_{ij} \cdot (f_{ij}, g_{ij}) = (f_x)_{ij} + (g_y)_{ij} + \frac{\Delta x^2}{6} (f_{xxx})_{ij} + \frac{\Delta y^2}{6} (g_{yyy})_{ij} + O(\Delta^4). \quad (7.13)$$

Dieses Ergebnis wird nun auf das Verfahren angewendet. $\nabla_{ij} \cdot \mathbf{u}_{ij}^n$ verschwindet nach Voraussetzung, ebenso ist die kontinuierliche Lösung divergenzfrei, d.h. $(u_4)_x + (u_5)_y \equiv 0$. Weiter gehen wir davon aus, daß Zeit- und Raumableitungen vertauscht werden dürfen. Man erhält

$$\begin{aligned} \nabla_{ij} \cdot \mathbf{u}_{ij}^{n+1} &= -\nabla_{ij} \cdot \left(\frac{\Delta t}{\Delta x} (\mathbf{G}_{i+1/2,j} - \mathbf{G}_{i-1/2,j}) + \frac{\Delta t}{\Delta y} (\mathbf{H}_{i,j+1/2} - \mathbf{H}_{i,j-1/2}) \right) \\ &= -\sum_{l=1}^{k-1} \frac{\Delta x^2 \Delta t^{l-1}}{6l!} \left(\frac{\partial^3}{\partial x^3} \frac{\partial^l}{\partial t^l} u_4 \right)_{ij} - \sum_{l=1}^{k-1} \frac{\Delta y^2 \Delta t^{l-1}}{6l!} \left(\frac{\partial^3}{\partial y^3} \frac{\partial^l}{\partial t^l} u_5 \right)_{ij} \\ &\quad + \Delta^k ((d_4)_x)_{ij} + \Delta^k ((d_5)_y)_{ij} + O(\Delta^{k+1}). \end{aligned} \quad (7.14)$$

Für $k = 1$ bzw. $k = 2$ treten als Fehler niedrigster Ordnung jeweils Fehler der Ordnung $k = 1$ bzw. $k = 2$ auf. Für Verfahren der Ordnung $k \geq 3$ ist der Fehlerterm niedrigster Ordnung der Term mit $i = 1$ in der Summe. Er ist der Fehler bei der Definition des diskreten Divergenzoperators, so daß die Konsistenzordnung der Divergenz bei diesem diskreten Divergenzoperator auch bei einem Verfahren der Ordnung > 2 nicht höher sein kann als 2. Analog beweist man die Aussage für das elektrische Feld. \square

Der nächste Satz zeigt, daß für das zweidimensionale Godunov-Verfahren und den zweidimensionalen MUSCL-Ansatz der Fehler bei der Erfüllung der Divergenzgleichungen die angegebene Ordnung hat.

Satz 8 *Unter den Voraussetzungen von Satz 7 erfüllt die Lösung des zweidimensionalen Godunov-Verfahrens erster Ordnung die Divergenzgleichungen bis zur Ordnung 1 und die des zweidimensionalen MUSCL-Verfahrens zweiter Ordnung bis zur Ordnung 2.*

Beweis Hierzu muß die genaue Gestalt des Fehlers \mathbf{d}_{ij} benutzt werden, um nachzuweisen, daß in (7.14) nicht doch die Terme niedrigster Ordnung wegfallen. Für Verfahren erster Ordnung ist der Term der niedrigsten Ordnung die Divergenz der Fehler der Flußberechnung. Für die Flüsse des Godunov-Verfahrens erhält man konkret

$$\frac{(d_4)_{ij}}{\Delta y} = ((u_4)_{yy})_{ij} \quad (7.15)$$

$$\frac{(d_5)_{ij}}{\Delta x} = ((u_5)_{xx})_{ij} \quad (7.16)$$

und damit

$$\nabla_{ij} \cdot \mathbf{u}_{ij}^{n+1} = -\Delta y ((u_4)_{yyx})_{ij} - \Delta x ((u_5)_{xxy})_{ij} + O(\Delta^2). \quad (7.17)$$

Die Terme erster Ordnung heben sich nach dem Ableiten nicht gegeneinander weg, so daß die Konsistenzordnung der Divergenz insgesamt 1 ist.

Bei Verfahren zweiter Ordnung führt man Reihenentwicklung der Flüsse mit den Argumenten (4.71) durch. Dazu nehmen wir an, daß für die Steigungsapproximationen $\tilde{\mathbf{u}}_x$ und $\tilde{\mathbf{u}}_y$ jeweils gilt

$$(\tilde{\mathbf{u}}_x)_{ij} = (\mathbf{u}_x)_{ij} + \Delta x \sigma_{ij} \quad (7.18)$$

$$(\tilde{\mathbf{u}}_y)_{ij} = (\mathbf{u}_y)_{ij} + \Delta y \rho_{ij}. \quad (7.19)$$

Mit

$$\lambda_x = \frac{\Delta t}{\Delta x} \quad \text{und} \quad \lambda_y = \frac{\Delta t}{\Delta y}$$

erhält man unter Ausnutzung von

$$(\mathcal{A}^2 \mathbf{u}_{xx} + \mathcal{B} \mathcal{A} \mathbf{u}_{xy} + \mathcal{A} \mathcal{B} \mathbf{u}_{yx} + \mathcal{B}^2 \mathbf{u}_{yy}) = \mathbf{u}_{tt} \quad (7.20)$$

für den Diskretisierungsfehler

$$\Delta^2 (d_4)_{ij} = -\frac{1-3c\lambda_x}{12} \Delta y^2 ((u_3)_{yyy})_{ij} + \frac{c\lambda_x}{4} \Delta x^2 ((u_3)_{xxy})_{ij} + \frac{c^2}{2} (1-\lambda_y) \Delta y^2 ((\sigma)_4)_{yy})_{ij} \quad (7.21)$$

$$\Delta^2 (d_5)_{ij} = \frac{1-3c\lambda_x}{12} \Delta x^2 ((u_3)_{xxx})_{ij} - \frac{c\lambda_y}{4} \Delta y^2 ((u_3)_{xxy})_{ij} + \frac{c^2}{2} (1-\lambda_x) \Delta x^2 ((\rho)_5)_{xxy})_{ij}. \quad (7.22)$$

Dabei ist c die Lichtgeschwindigkeit. Untersucht man die diskrete Divergenz der Flußdifferenz, so muß man auch den Diskretisierungsfehler beim Bilden der diskreten Divergenz berücksichtigen. Mit

$$(u_4)_t = (u_3)_y \quad (7.23)$$

$$(u_5)_t = -(u_3)_x \quad (7.24)$$

erhält man

$$\frac{\Delta x^2}{6} \frac{\partial^3}{\partial x^3} \frac{\partial}{\partial t} u_4 + \frac{\Delta y^2}{6} \frac{\partial^3}{\partial y^3} \frac{\partial}{\partial t} u_5 = \frac{\Delta x^2}{6} (u_3)_{yxxx} - \frac{\Delta y^2}{6} (u_3)_{xyyy} \quad (7.25)$$

und insgesamt in (7.14)

$$\begin{aligned} \nabla_{ij} \cdot \mathbf{u}_{ij}^{n+1} = & -\frac{1}{4} \Delta y^2 ((u_3)_{yyyy})_{ij} + \frac{1}{4} \Delta x^2 ((u_3)_{xxxx})_{ij} \\ & + \frac{c^2}{2} (1 - \lambda_y) \Delta y^2 ((\sigma)_4)_{yyx}{}_{ij} + \frac{c^2}{2} (1 - \lambda_x) \Delta x^2 ((\rho)_5)_{xxy}{}_{ij} \\ & + O(\Delta^3). \end{aligned} \quad (7.26)$$

Also bleibt auch in diesem Fall ein Fehler zweiter Ordnung beim Bilden der diskreten Divergenz. Zusammen mit Satz 7 ergibt sich die Behauptung. Analog beweist man die Aussage über das elektrische Feld. \square

Abbildung 7.1 zeigt das Verhalten der diskreten Divergenz über einen längeren Zeitraum hinweg. Sie wurde zu den Ergebnissen eines TM0404-Problems auf einem kartesischen Gitter bestimmt. Man erkennt, daß die Norm der Divergenz zwar schwankt, aber auch über längere Zeit immer in der selben Größenordnung bleibt. Damit können die Ergebnisse des homogenen Maxwell-Lösers als insgesamt verlässlich angesehen werden. Daß die Divergenz auf dem größten Gitter im Lauf der Zeit langsam abnimmt, ist ein Indiz dafür, daß die Anzahl der Stützstellen für das betrachtete Problem zu klein ist. Die numerische Lösung wird gedämpft, obwohl mit einem Verfahren zweiter Ordnung gerechnet wurde. Werden mehr Stützstellen verwendet (mittlere und untere Kurve), so bleibt der Fehler der numerischen Lösung und damit auch der Fehler in der Divergenz über lange Zeit hinweg in der selben Größenordnung. Das größte Gitter wurde deshalb auch nicht in die Berechnung der experimentellen Konvergenzordnung einbezogen. Numerische Experimente, dargestellt in Tabelle 7.1, zeigen, daß die theoretisch vorausgesagte Konvergenzordnung tatsächlich erreicht wird.

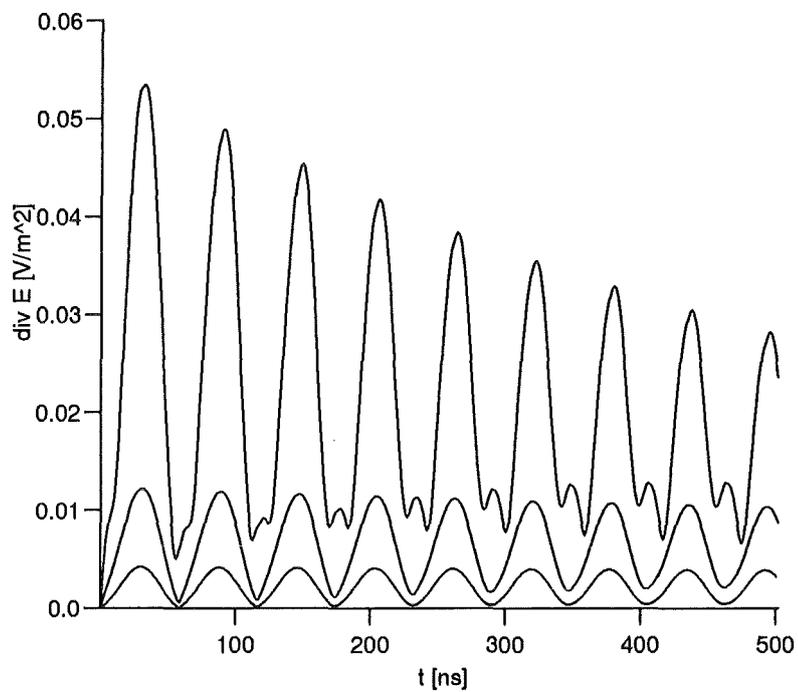


Abbildung 7.1: *TM₀₄₀₄-Problem: Divergenz des elektrischen Feldes bei Rechnung mit dem homogenen Maxwell-Löser, gemessen in der L_2 -Norm für drei verschiedene Gitter: oben 50×50 , Mitte 100×100 , unten 200×200 Gitterpunkte in jede Raumrichtung.*

	$\nabla \cdot \mathbf{B}$
100×100	0.02
200×200	0.01

1. Ordnung

	$\nabla \cdot \mathbf{B}$
100×100	0.07
200×200	0.02

2. Ordnung

Tabelle 7.1: *TM0404-Problem: L_2 -Norm des Fehlers bei der Erfüllung der Divergenzgleichungen gemittelt über die Zeit $0 \leq t \leq 180\text{ns}$, Problem auf verschiedenen Verfeinerungsstufen des Gitters. Links die Ergebnisse bei Rechnung erster Ordnung, rechts bei zweiter Ordnung. Die Werte bei Rechnung erster Ordnung sind kleiner, was auf eine stärkere numerische Dämpfung zurückzuführen ist.*

	$\nabla \cdot \mathbf{B}$
100×100	1.00

1. Ordnung

	$\nabla \cdot \mathbf{B}$
100×100	1.80

2. Ordnung

Tabelle 7.2: *Experimentelle Konvergenzordnung berechnet mit den in der vorangegangenen Tabelle dargestellten Fehlern.*

7.2 Formulierung mit Lagrangemultiplikator

Um die Erfüllung von $\nabla \cdot \mathbf{E} = \rho/\epsilon_0$ möglich zu machen, muß diese Bedingung in das numerische Verfahren eingebaut werden. Dazu führt man einen Lagrangemultiplikator ϕ ein [1] und erhält das elliptisch-hyperbolische System:

$$\frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t} - c^2 (\nabla \times \mathbf{B}) + c^2 \nabla \phi = -\frac{\mathbf{j}}{\epsilon_0}, \quad (7.27)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{E} = \frac{\rho}{\epsilon_0}. \quad (7.28)$$

Dieses System wird mit Anfangswerten für \mathbf{E}

$$\mathbf{E}(\mathbf{x}, 0) = \mathbf{E}_0(\mathbf{x}) \quad \forall \mathbf{x} \in \Omega \quad (7.29)$$

mit

$$\nabla \cdot \mathbf{E}_0(\mathbf{x}) = \frac{\rho(\mathbf{x}, 0)}{\epsilon_0} \quad \forall \mathbf{x} \in \Omega \quad (7.30)$$

und mit Randwerten für ϕ

$$\phi(\mathbf{x}) = 0 \quad \forall \mathbf{x} \in \partial\Omega \quad (7.31)$$

versehen. Dabei bezeichnet $\Omega \subset \mathbb{R}^2$ ein endliches Rechengebiet mit Rand $\partial\Omega$. Zu (7.29) bis (7.31) kommen bei praktischen Rechnungen noch Randbedingungen für die einer Wellengleichung gehorchende Größe \mathbf{E} , vergleiche Kapitel 6.

Mit Hilfe dieser Formulierung können die Folgen der nichterfüllten Kontinuitätsgleichung korrigiert werden, da die Kontinuitätsgleichung im Beweis von Satz 1 nur für den Teil, der das elektrische Feld betrifft, verwendet werden muß. Ein Lagrangemultiplikator für die magnetische Induktion ist daher nicht notwendig.

Eine vollimplizite Approximation bezüglich ϕ dieses Systems führen auf die Projektionsmethode, bei der die Divergenz des elektrischen Feldes in einem anschließenden Projektionsschritt korrigiert wird. Dazu muß in jedem Zeitschritt eine Poissongleichung gelöst werden. Das Lösen einer Poissongleichung ist jedoch vor allem auf allgemeinen Koordinaten und auf Gebieten mit inneren Strukturen, wie sie bei der Behandlung von Dioden durchaus vorkommen können, sehr aufwendig.

Ein anderer Weg besteht darin, das System (7.27 - 7.31) zunächst zu modifizieren. Ein zusätzlich eingefügter Term kann die Differentialgleichung so ändern, daß man ein System erhält, das zwar veränderte, aber immer noch sinnvolle physikalische Eigenschaften besitzt und für die numerische Behandlung günstigere mathematische Eigenschaften aufweist. Die betrachteten Modifikationen ändern den Typ der Differentialgleichung und damit auch die in der Numerik anzuwendenden Methoden, was schließlich auf ein einfacheres Verfahren führt.

Ein Ansatz in dieser Richtung wurde von Marder [28] gemacht. Er schlägt eine Modifikation vor, bei der man eine parabolische Gleichung für den Fehler erhält, was die *Diffusion* des Fehlers bewirkt. Für die numerische Behandlung läßt sich die Zwangsbedingung in einen zusätzlichen Quellterm umformen, der dann leicht numerisch behandelt werden kann.

Wir schlagen hier eine andere Modifikation vor, bei der ein rein hyperbolisches System entsteht. Im Gegensatz zum Ansatz von Marder wird dadurch ein Fehlertransport eingeführt. Als rein hyperbolisches System läßt es sich dieses System insbesondere im Rahmen von Finite-Volumen-Verfahren leicht numerisch behandeln.

7.3 Approximationen

7.3.1 Direkte Approximation

Zunächst untersuchen wir einige Eigenschaften von (7.27 - 7.31). Es ist mit dem folgenden System äquivalent:

$$\mathbf{E}_t - c^2 (\nabla \times \mathbf{B}) + c^2 \nabla \phi = -\frac{\mathbf{j}}{\epsilon_0} \quad (7.32)$$

$$c^2 \Delta \phi = -\frac{1}{\epsilon_0} (\rho_t + \nabla \cdot \mathbf{j}), \quad (7.33)$$

dabei ist $\Delta \phi = \nabla \cdot \nabla \phi$. Dazu werden Anfangswerte für \mathbf{E}

$$\mathbf{E}(\mathbf{x}, 0) = \mathbf{E}_0(\mathbf{x}) \quad \forall \mathbf{x} \in \Omega \quad (7.34)$$

mit

$$\nabla \cdot \mathbf{E}_0(\mathbf{x}) = \frac{\rho(\mathbf{x}, 0)}{\epsilon_0} \quad \forall \mathbf{x} \in \Omega \quad (7.35)$$

und Randwerte für ϕ

$$\phi(\mathbf{x}) = 0 \quad \forall \mathbf{x} \in \partial\Omega \quad (7.36)$$

vorgeschrieben.

Um die Äquivalenz zu zeigen, nimmt man die Divergenz von (7.27) und erhält

$$c^2 \Delta \phi = - \left((\nabla \cdot \mathbf{E})_t + \frac{\nabla \cdot \mathbf{j}}{\epsilon_0} \right). \quad (7.37)$$

Aus (7.28) folgt

$$(\nabla \cdot \mathbf{E})_t = \frac{\rho_t}{\epsilon_0} \quad (7.38)$$

und daraus Gleichung (7.33). Umgekehrt folgt aus (7.32) und (7.33)

$$(\nabla \cdot \mathbf{E})_t = -\frac{\nabla \cdot \mathbf{j}}{\epsilon_0} - c^2 \Delta \phi \quad (7.39)$$

$$= \frac{\rho_t}{\epsilon_0} \quad (7.40)$$

und daraus mit (7.35) die Gültigkeit von (7.28) für alle Zeiten.

Erfüllen die rechten Seiten ρ und \mathbf{j} die Kontinuitätsgleichung, so folgt aus (7.33) und den Randwerten (7.36) mit dem Maximum-Prinzip für harmonische Funktionen, daß ϕ in Ω verschwindet.

Zur numerischen Behandlung formuliert man die rechte Seite von (7.33) um, da man die Lösung der Gleichung (2.8),

$$\frac{\partial \bar{\mathbf{E}}}{\partial t} - c^2 (\nabla \times \mathbf{B}) = -\frac{\mathbf{j}}{\epsilon_0}, \quad (7.41)$$

für die man bereits Verfahren kennt, weiterverwenden und aus ihr eine Lösung des Systems (7.27- 7.31) erhalten möchte. Ihre Lösung bezeichnen wir zur Unterscheidung mit $\bar{\mathbf{E}}$. Mit

$$\frac{\partial}{\partial t} \nabla \cdot \bar{\mathbf{E}} = -\frac{\nabla \cdot \mathbf{j}}{\epsilon_0} \quad (7.42)$$

erhält man

$$c^2 \Delta \phi = \frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{\rho}{\epsilon_0} - \nabla \cdot \bar{\mathbf{E}} \right). \quad (7.43)$$

\mathbf{E} ergibt sich dann aus $\bar{\mathbf{E}}$ vermöge

$$\frac{\partial}{\partial t} (\mathbf{E} - \bar{\mathbf{E}}) + c^2 \nabla \phi = 0. \quad (7.44)$$

Die Korrektur muß den Wert von ρ zur Zeit t^{n+1} verwenden. Deshalb verwendet man rückwärtsgenommene Differenzenquotienten für die Zeitableitung und erhält ein implizites Verfahren. Da \mathbf{E} und $\bar{\mathbf{E}}$ zur Zeit t^n übereinstimmen, erhält man

$$c^2 \Delta t \Delta \phi^{n+1} = \nabla \cdot \bar{\mathbf{E}}^{n+1} - \frac{\rho^{n+1}}{\epsilon_0}. \quad (7.45)$$

Löst man diese Poissongleichung in jedem Zeitschritt, so erhält man aus (7.44) mit einer impliziten Approximation der Zeitableitung und da \mathbf{E} und $\bar{\mathbf{E}}$ zur Zeit t^n übereinstimmen,

$$\mathbf{E}^{n+1} = \bar{\mathbf{E}}^{n+1} - \Delta t c^2 \nabla \phi^{n+1}. \quad (7.46)$$

\mathbf{E}^n erfüllt damit in jedem Zeitschritt die Divergenzgleichung.

7.3.2 Modifikation 1: Pseudo-Strom-Ansatz

Die erste Modifizierung von (7.27, 7.31) und eine dazu passende Approximation wurde von Marder angegeben [28]. Mit dem zusätzlichen Term ϕ/γ in der zweiten Gleichung (7.28) erhielt er das System

$$\mathbf{E}_t - c^2 (\nabla \times \mathbf{B}) + c^2 \nabla \phi = -\frac{\mathbf{j}}{\epsilon_0}, \quad (7.47)$$

$$\frac{1}{\gamma} \phi + \nabla \cdot \mathbf{E} = \frac{\rho}{\epsilon_0}, \quad (7.48)$$

wobei γ hat die Einheit Sekunde hat. Das System wird mit Anfangswerten

$$\mathbf{E}(\mathbf{x}, 0) = \mathbf{E}_0(\mathbf{x}) \quad \forall \mathbf{x} \in \Omega \quad (7.49)$$

und

$$\phi(\mathbf{x}, 0) = -\gamma \left(\nabla \cdot \mathbf{E}_0(\mathbf{x}) - \frac{\rho(\mathbf{x}, 0)}{\epsilon_0} \right) \quad \forall \mathbf{x} \in \Omega \quad (7.50)$$

und Randwerten für ϕ

$$\phi(\mathbf{x}, t) = 0 \quad \forall \mathbf{x} \in \partial\Omega \quad (7.51)$$

versehen.

Dadurch werden die Gleichungen (7.27) und (7.28) gekoppelt, wobei die Stärke der Kopplung von der Größe des Faktors γ abhängt. Durch den Grenzübergang $\gamma \rightarrow \infty$ erhält man die Formulierung mit dem Lagrangemultiplikator (7.27) und (7.28), während man mit $\gamma = 0$ Gleichung (2.8), die erste Gleichung der ursprünglich betrachteten Maxwellgleichungen, erhält.

Auch für das System (7.47 - 7.51) existieren äquivalente Umformungen. Setzt man die zweite Gleichung in die erste ein, so erhält man

$$\mathbf{E}_t - c^2 \nabla \times \mathbf{B} = -\frac{\mathbf{j}}{\epsilon_0} - c^2 \gamma \nabla \left(\frac{\rho}{\epsilon_0} - \nabla \cdot \mathbf{E} \right), \quad (7.52)$$

durch die man (7.47) in (7.47 - 7.51) ersetzen kann. Damit ist es möglich geworden, die Zwangsbedingung an das elektrische Feld als zusätzlichen Quellterm in Gleichung (7.47) einzubringen, weshalb dieser Ansatz „Pseudo-Strom-Ansatz“ (pseudo current approach) genannt wird.

Dieser Ansatz kann auch als parabolischer Ansatz bezeichnet werden, da man für ϕ die inhomogene parabolische Gleichung

$$\phi_t - \gamma c^2 \Delta \phi = \frac{\gamma}{\epsilon_0} (\rho_t + \nabla \cdot \mathbf{j}) \quad (7.53)$$

erhält. Eine ähnliche Gleichung kann man für die zeitliche Entwicklung des Defektes $\nabla \cdot \mathbf{E} - \rho/\epsilon_0$ angeben. Hier wurde also künstlich eine *Diffusion* des Fehlers eingeführt. Umgekehrt kann aus (7.53) zusammen mit den Anfangswerten die Gültigkeit von (7.48) gefolgert werden.

Wenn Ladungs- und Stromdichte die Kontinuitätsgleichung erfüllen verschwindet die rechte Seite von (7.53). Mit $\nabla \cdot \mathbf{E}_0(\mathbf{x}) = \rho(\mathbf{x}, 0)/\epsilon_0$ erhält man dann aus den Anfangs- und Randbedingungen erhält man $\phi \equiv 0$.

Die numerische Behandlung stützt sich auf (7.52). Dies erklärt, warum eine CFL-Bedingung für die parabolische Gleichung keine brauchbare Stabilitätsbedingung für das resultierende Verfahren ergibt. Unabhängig vom verwendeten Maxwell-Löser wird Quellterm-Splitting verwendet [31]. Das Ergebnis des unkorrigierten Maxwell-Lösers, $\bar{\mathbf{E}}^{n+1}$, spielt dabei die Rolle des Zwischenschritts:

$$\bar{\mathbf{E}}^{n+1} = \mathbf{E}^n + \Delta t c^2 \tilde{\nabla} \times \mathbf{B}^{n+1/2} - \frac{\Delta t}{\epsilon_0} \mathbf{j}^{n+1/2}, \quad (7.54)$$

$$\mathbf{E}^{n+1} = \bar{\mathbf{E}}^{n+1} - c^2 \gamma \Delta t \tilde{\nabla} \left(\frac{\rho^{n+1}}{\epsilon_0} - \tilde{\nabla} \cdot \bar{\mathbf{E}}^{n+1} \right). \quad (7.55)$$

In dieser Reihenfolge wurde das Verfahren von Langdon [22] vorgeschlagen. Es stellt bereits eine kleine Verbesserung des Verfahrens von Marder dar, bei dem das Quellterm-Splitting gerade in der anderen Reihenfolge verwendet wird.

Gleichung (7.55) kann auch als

$$\mathbf{E}_k^{n+1} = \mathbf{E}_{k-1}^{n+1} - \gamma c^2 \Delta t \tilde{\nabla} \left(\frac{\rho^{n+1}}{\epsilon_0} - \tilde{\nabla} \cdot \mathbf{E}_{k-1}^{n+1} \right) \quad (7.56)$$

geschrieben und mit $\mathbf{E}_0^{n+1} = \bar{\mathbf{E}}^{n+1}$ für $k = 0, 1, \dots$ iteriert werden [22, 35]. So handelt es sich um eine Fixpunktiteration der Gleichung

$$\tilde{\nabla} \left(\frac{\rho^{n+1}}{\epsilon_0} - \tilde{\nabla} \cdot \mathbf{E}^{n+1} \right) = 0. \quad (7.57)$$

Eine solche Iteration durchzuführen ist sinnvoll, um das elektrische Feld zu der (in jedem Zeitschritt festen) Ladungsverteilung zu erhalten. Als Abbruchkriterium verwendet man $|\phi| < \epsilon$, obwohl nicht die Gleichung $\phi = 0$ durch das Iterationsverfahren approximiert wird. Dennoch liefert dieses Verfahren bei Konvergenz sinnvolle Ergebnisse. \mathbf{E} erfüllt damit die Divergenzgleichungen im Rahmen der vorgegebenen Genauigkeit.

Der im nächsten Abschnitt vorgestellte hyperbolische Ansatz liefert zum einen eine theoretisch fundierte Aussage über die Wahl des Parameters und kann zum Anderen als Iterationsverfahren für Gleichung (2.10) aufgefaßt werden.

7.3.3 Modifikation 2: Hyperbolischer Ansatz

Eine neue Modifikation von (7.27- 7.31) besteht darin, in der zweiten Gleichung den Term ϕ_t/γ^2 einzufügen. Man erhält

$$\mathbf{E}_t - c^2 (\nabla \times \mathbf{B}) + c^2 \nabla \phi = -\frac{\mathbf{j}}{\epsilon_0}, \quad (7.58)$$

$$\frac{1}{\gamma^2} \phi_t + \nabla \cdot \mathbf{E} = \frac{\rho}{\epsilon_0} \quad (7.59)$$

mit einer dimensionslosen Konstante γ . Dazu müssen Anfangswerte für \mathbf{E} und ϕ vorge-schrieben werden:

$$\mathbf{E}(\mathbf{x}, 0) = \mathbf{E}_0(\mathbf{x}) \quad \forall \mathbf{x} \in \Omega \quad (7.60)$$

und

$$\phi(\mathbf{x}, 0) = 0 \quad \forall \mathbf{x} \in \Omega \quad (7.61)$$

$$\phi_t(\mathbf{x}, 0) = -\gamma^2 \left(\nabla \cdot \mathbf{E}_0(\mathbf{x}) - \frac{\rho(\mathbf{x}, 0)}{\epsilon_0} \right) \quad \forall \mathbf{x} \in \Omega \quad (7.62)$$

Dieses System ist zu dem folgenden System äquivalent:

$$\mathbf{E}_t - c^2 (\nabla \times \mathbf{B}) + c^2 \nabla \phi = -\frac{\mathbf{j}}{\epsilon_0}, \quad (7.63)$$

$$\phi_{tt} - c^2 \gamma^2 \Delta \phi = \frac{\gamma^2}{\epsilon_0} (\rho_t + \nabla \cdot \mathbf{j}). \quad (7.64)$$

mit den Anfangswerten

$$\mathbf{E}(\mathbf{x}, 0) = \mathbf{E}_0(\mathbf{x}) \quad \forall \mathbf{x} \in \Omega \quad (7.65)$$

und

$$\phi(\mathbf{x}, 0) = 0 \quad \forall \mathbf{x} \in \Omega \quad (7.66)$$

$$\phi_t(\mathbf{x}, 0) = -\gamma^2 \left(\nabla \cdot \mathbf{E}_0(\mathbf{x}) - \frac{\rho(\mathbf{x}, 0)}{\epsilon_0} \right) \quad \forall \mathbf{x} \in \Omega \quad (7.67)$$

Um dies zu zeigen, nimmt man von (7.58) die Divergenz und von (7.59) die Zeitableitung und erhält die Wellengleichung (7.64). Umgekehrt ist

$$\frac{1}{\gamma^2} \phi_t + \nabla \cdot \mathbf{E} = \frac{\rho}{\epsilon_0} \quad (7.68)$$

zu zeigen. Wir definieren

$$\psi = \frac{1}{\gamma^2} \phi_t + \nabla \cdot \mathbf{E} - \frac{\rho}{\epsilon_0} \quad (7.69)$$

Aus den Anfangswerten (7.67) folgt $\psi(\mathbf{x}, 0) = 0$. Desweiteren gilt

$$\psi_t = \frac{1}{\gamma^2} \phi_{tt} + (\nabla \cdot \mathbf{E})_t - \frac{\rho_t}{\epsilon_0}. \quad (7.70)$$

Daraus folgt unter Verwendung von (7.64) und der Divergenz von (7.63), daß $\psi_t = 0$. Damit folgt $\psi = 0$ für alle Zeiten.

Aus (7.64) und den Anfangsbedingungen (7.66, 7.67) erhält man $\phi \equiv 0$ für den Fall, daß die Kontinuitätsgleichung gilt.

Dividiert man durch γ^2 , dann konvergiert (7.64) für $\gamma \rightarrow \infty$ gegen die elliptische Gleichung für das Korrekturpotential.

Unter Berücksichtigung der Anfangswerte für $\gamma \rightarrow 0$ erhält man die ursprüngliche Formulierung (2.8) zurück.

Ebenso läßt sich für $d = \nabla \cdot \mathbf{E} - \rho/\epsilon_0$ eine Wellengleichung

$$d_{tt} - \gamma^2 c^2 \Delta d = (\rho_t + \nabla \cdot \mathbf{j})_t \quad (7.71)$$

mit den Anfangswerten

$$d(\mathbf{x}, 0) = \nabla \cdot \mathbf{E}_0(x) - \frac{\rho(\mathbf{x}, 0)}{\epsilon_0} \quad \forall \mathbf{x} \in \Omega \quad (7.72)$$

$$d_t(\mathbf{x}, 0) = \rho_t(\mathbf{x}, 0) + \nabla \cdot \mathbf{j}(\mathbf{x}, 0) \quad \forall \mathbf{x} \in \Omega \quad (7.73)$$

herleiten. Der Fehlertransport findet mit der endlichen Geschwindigkeit γc statt, durch die die unendliche Ausbreitungsgeschwindigkeit des elliptischen Problems ersetzt wurde. Während man bei anderen Fragestellungen, wie der Strömung kleiner Machzahlen, asymptotische Entwicklungen benutzt, um physikalische Phänomene auf verschiedenen Skalen zu identifizieren [21], führt man hier umgekehrt eine neue, endliche Zeitskala ein, auf der der Fehlertransport stattfindet. Für eine wirkungsvolle Korrektur muß γ groß gewählt werden, wie groß, muß durch numerische Experimente herausgefunden werden. Auf alle Fälle muß γ größer als eins gewählt werden, damit sich der Defekt schneller ausbreitet als die relevanten physikalischen Phänomene.

Wir zeigen nun, daß die Divergenz des elektrischen Feldes für große γ gegen ρ/ϵ_0 geht. Dazu nehmen wir an, daß die rechte Seite in (7.71) verschwindet. Dies ist sinnvoll, da auf diese Weise das Problem untersucht wird, bestehende Fehler der Anfangswerte und bei der Erfüllung der Kontinuitätsgleichung zu korrigieren. Diese Situation liegt bei realistischen Problemen in jedem Zeitschritt vor, vergleiche Anhang D. Wir vereinfachen weiter und betrachten ein entsprechendes eindimensionales Modellproblem.

Satz 9 Es sei $l > 0$. Wir betrachten die Wellengleichung

$$d_{tt} - c^2 \gamma^2 d_{xx} = 0 \quad (7.74)$$

mit den Anfangswerten

$$d(x, 0) = f(x) \quad 0 \leq x \leq l \quad (7.75)$$

$$d_t(x, 0) = g(x) \quad 0 \leq x \leq l \quad (7.76)$$

mit

$$\left| \int_0^l g(y) dy \right| < \infty \quad (7.77)$$

und offenen Randbedingungen für d . Bei festem t konvergiert dann $d(x, t)$ gleichmäßig in x gegen 0 für $\gamma \rightarrow \infty$.

Beweis Nach der d'Alembertschen Lösungsformel ist

$$d(x, t) = \frac{1}{2} (\hat{f}(x - c\gamma t) + \hat{f}(x + c\gamma t)) + \frac{1}{2c\gamma} \int_{x-c\gamma t}^{x+c\gamma t} \hat{g}(y) dy \quad (7.78)$$

mit

$$\hat{f} = \begin{cases} f(x) & 0 \leq x \leq l \\ 0 & \text{sonst} \end{cases} \quad (7.79)$$

$$\hat{g} = \begin{cases} g(x) & 0 \leq x \leq l \\ 0 & \text{sonst} \end{cases} \quad (7.80)$$

da offene Randbedingungen für d gefordert sind. Bei hinreichend großem γ verschwindet dann der erste Summand in (7.78) und es gilt die Abschätzung

$$|d(x, t)| \leq \frac{1}{2c\gamma} \left| \int_0^l g(y) dy \right| \quad \forall x \in [0, l] \quad (7.81)$$

und damit gilt für $\|d(x, t)\| = \sup_{x \in [0, l]} |d(x, t)|$, daß $\|d(x, t)\| \rightarrow 0$ für $\gamma \rightarrow \infty$. \square

Der Beweis des Satzes gibt Aufschluß über Randwerte für ϕ . Diese lassen sich leicht auf den mehrdimensionalen Fall übertragen. Es muß $\phi_t(\mathbf{x}, 0) = 0$ sein für $\mathbf{x} \notin \Omega$. Mit den Anfangswerten für ϕ ergibt sich daraus $\phi(\mathbf{x}, 0) = 0$ für $\mathbf{x} \notin \Omega$. Numerische Experimente haben gezeigt, daß die Stabilität verbessert wird, wenn sogar die Randbedingungen $\phi(\mathbf{x}, t) = 0$ für alle $\mathbf{x} \in \partial\Omega$ verwendet werden.

Das erhaltene hyperbolische System läßt sich mit

$$\mathbf{u}' = (E_1, E_2, E_3, B_1, B_2, B_3, \phi)^T, \quad (7.82)$$

$$\mathbf{q}'(\mathbf{u}') = -\frac{1}{\epsilon_0}(j_1, j_2, j_3, 0, 0, 0, -\gamma^2 \rho)^T \quad (7.83)$$

und

$$\mathcal{A}' = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & c^2 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & c^2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -c^2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \gamma^2 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad (7.84)$$

$$\mathcal{B}' = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -c^2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & c^2 \\ 0 & 0 & 0 & c^2 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \gamma^2 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad (7.85)$$

als lineare Evolutionsgleichung

$$\mathbf{u}'_t + \mathcal{A}' \mathbf{u}'_x + \mathcal{B}' \mathbf{u}'_y = \mathbf{q}'(\mathbf{u}') \quad (7.86)$$

und damit in Erhaltungsform (2.15) mit $m = 7$ schreiben. Die Matrizen \mathcal{A}' , \mathcal{B}' haben jeweils die Eigenwerte $\{-\gamma c, -c, -c, 0, c, c, \gamma c\}$ und ein vollständiges System von Rechtseigenvektoren, das System ist also strikt hyperbolisch. Damit beeinflusst die Wahl von γ auch die CFL-Bedingung, sobald γ größer als eins gewählt werden muß. Die charakteristischen Variablen von \mathcal{A}' zu den Eigenwerten $\lambda_1 = \gamma c$ und $\lambda_7 = -\gamma c$ sind

$$v_{1/7} = \frac{1}{2} \left(E_1 \pm \frac{c}{\gamma} \phi \right) \quad (7.87)$$

und von \mathcal{B}' zu diesen Eigenwerten

$$v_{1/7} = \frac{1}{2} \left(E_2 \pm \frac{c}{\gamma} \phi \right). \quad (7.88)$$

Jeweils die das elektrische Feld betreffende, zum Eigenwert Null gehörende Charakteristik wurde also aufgespalten.

Als strikt hyperbolisches System kann System (7.58, 7.59) besonders gut mit einem Finite-Volumen-Verfahren behandelt werden. Dieses soll so konstruiert werden, daß es auf dem Verfahren für die unkorrigierten Maxwellgleichungen aufbaut.

Dazu wird die Matrix \mathcal{A}' als

$$\mathcal{A}' = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & c^2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -c^2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & c^2 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \gamma^2 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (7.89)$$

geschrieben. Der erste Summand ist gerade die um eine Nullzeile und -spalte erweiterte Matrix \mathcal{A} . Sie wird der Einfachheit halber weiterhin mit \mathcal{A} , der zweite Summand mit \mathcal{A}'' bezeichnet. Ebenso gilt für die Matrix \mathcal{B}

$$\mathcal{B}' = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -c^2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & c^2 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & c^2 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \gamma^2 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}. \quad (7.90)$$

Auch hier wird der erste Summand mit \mathcal{B} , der zweite mit \mathcal{B}'' bezeichnet. Der Quellterm läßt sich ebenfalls zerlegen in den aus Kapitel 2 bekannten Term $\mathbf{q}(\mathbf{u}')$ und einen zusätzlichen Anteil $\mathbf{q}''(\mathbf{u}')$:

$$\mathbf{q}'(\mathbf{u}') = -\frac{1}{\epsilon_0}(j_1, j_2, j_3, 0, 0, 0, 0)^T + \frac{1}{\epsilon_0}(0, 0, 0, 0, 0, 0, \rho)^T. \quad (7.91)$$

Gleichung (7.86) läßt sich damit folgendermaßen schreiben:

$$\mathbf{u}'_t + \mathcal{A}\mathbf{u}'_x + \mathcal{B}\mathbf{u}'_y + \mathcal{A}''\mathbf{u}'_x + \mathcal{B}''\mathbf{u}'_y = \mathbf{q}'(\mathbf{u}'). \quad (7.92)$$

Die Operatoren $\mathcal{A}\partial_x + \mathcal{B}\partial_y$ und $\mathcal{A}''\partial_x + \mathcal{B}''\partial_y$ kommutieren, deshalb kann das Splittingverfahren

$$\mathbf{u}'_t + \mathcal{A}\mathbf{u}'_x + \mathcal{B}\mathbf{u}'_y = \mathbf{q}(\mathbf{u}'), \quad (7.93)$$

$$\mathbf{u}'_t + \mathcal{A}''\mathbf{u}'_x + \mathcal{B}''\mathbf{u}'_y = \mathbf{q}''(\mathbf{u}') \quad (7.94)$$

benutzt werden. Streicht man in der ersten Gleichung die Nullzeilen- und -spalten, die ja keine praktische Bedeutung haben, so hat man hier die ursprünglichen Maxwellgleichungen,

für die man bereits ein Verfahren kennt. Es kann mit der ursprünglichen CFL-Bedingung behandelt werden.

In der zweiten Gleichung kann man die Zeilen und Spalten, die die magnetische Induktion \mathbf{B} betreffen, streichen, da sie in diesem Schritt nicht verändert wird. Nur für dieses Teilsystem gilt die strengere CFL-Bedingung. Man kann deshalb ein Sub-cycling-Verfahren anwenden und nur das zweite System mit dem kleineren Zeitschritt rechnen [26]. Die aus den Matrizen \mathbf{A}'' und \mathbf{B}'' resultierenden Flüsse sind in Anhang A angegeben. Bei Rechnungen mit Flüssen zweiter Ordnung muß auch der zweite Teil noch einmal unterteilt und die Teile mit einem Splitting nach Strang behandelt werden.

Schreiben wir System (7.94) wieder aus, so erhält man

$$\frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t} + c^2 \nabla \phi = 0, \quad (7.95)$$

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} + \gamma^2 \nabla \cdot \mathbf{E} = \gamma^2 \frac{\rho}{\epsilon_0}. \quad (7.96)$$

Im folgenden betrachten wir die Zeitdiskretisierung, wobei die räumliche Diskretisierung nicht weiter spezifiziert werden soll. Dabei muß berücksichtigt werden, daß ein um den Faktor $1/\gamma$ kleinerer Zeitschritt zu wählen ist. Anfangswert für \mathbf{E} ist das Ergebnis des unkorrigierten Maxwell-Lösers zur Zeit t^{n+1} , das wieder mit $\bar{\mathbf{E}}^{n+1}$ bezeichnet wird:

$$\mathbf{E}^{n+1} = \bar{\mathbf{E}}^{n+1} - c^2 \frac{\Delta t}{\gamma} \tilde{\nabla} \phi^n, \quad (7.97)$$

$$\phi^{n+1} = \phi^n - \gamma \Delta t \left(\tilde{\nabla} \cdot \bar{\mathbf{E}}^{n+1} - \frac{\rho^{n+1}}{\epsilon_0} \right). \quad (7.98)$$

In der Form

$$\mathbf{E}_{k+1}^{n+1} = \mathbf{E}_k^{n+1} - c^2 \frac{\Delta t}{\gamma} \tilde{\nabla} \phi_k^{n+1}, \quad (7.99)$$

$$\phi_{k+1}^{n+1} = \phi_k^{n+1} - \gamma \Delta t \left(\tilde{\nabla} \cdot \mathbf{E}_k^{n+1} - \frac{\rho^{n+1}}{\epsilon_0} \right) \quad (7.100)$$

mit

$$\mathbf{E}_0^{n+1} = \bar{\mathbf{E}}^{n+1}, \quad (7.101)$$

$$\phi_0^{n+1} = \phi^n \quad (7.102)$$

stellt dies für $k = 0, 1, \dots$ eine Fixpunktiteration für das System

$$\nabla \phi = 0, \quad (7.103)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{E} - \frac{\rho}{\epsilon_0} = 0 \quad (7.104)$$

dar, die man unter Verwendung der Abbruchbedingung $\phi_t = \nabla \cdot \mathbf{E} - \rho/\epsilon_0 = 0$ iterieren kann, Interpretiert man die Korrektur als Subcycling, so gibt γ die Anzahl der auszuführenden Schritte an. Das Ergebnis wird um so besser, je größer γ gewählt wird.

7.4 Numerische Ergebnisse

Als Testproblem werden ein elektrisches Feld und eine Ladungsverteilung vorgegeben, die nicht konsistent sind, d.h. für die $\nabla \cdot \mathbf{E} \neq \frac{\rho}{\epsilon_0}$ ist.

Als Anfangswerte werden

$$\begin{aligned} \mathbf{E}_0(\mathbf{x}) &= 0 \\ \mathbf{B}_0(\mathbf{x}) &= 0 \end{aligned} \quad \forall \mathbf{x} \in \Omega \quad (7.105)$$

und als rechte Seiten

$$\begin{aligned} \mathbf{j}(\mathbf{x}, t) &= 0 \\ \rho(\mathbf{x}, t) &= \rho_0 \delta(\mathbf{x} - \bar{\mathbf{x}}) \end{aligned} \quad \forall (\mathbf{x}, t) \in \Omega \times \mathbb{R}_0^+ \quad (7.106)$$

verwendet. Da der unkorrigierte Maxwell-Löser die Ladungsdichte ρ nicht verwendet, erhält man als Lösung

$$\begin{aligned} \mathbf{E}(\mathbf{x}, t) &= 0 \\ \mathbf{B}(\mathbf{x}, t) &= 0 \end{aligned} \quad \forall (\mathbf{x}, t) \in \Omega \times \mathbb{R}_0^+ \quad (7.107)$$

Dies ist offensichtlich nicht die gewünschte Lösung. Als Lösung mit Korrektur erwartet man das Feld einer Punktladung in $\bar{\mathbf{x}}$ mit

$$\nabla \cdot \mathbf{E} = \frac{\rho_0}{\epsilon_0} \delta(\mathbf{x} - \bar{\mathbf{x}}). \quad (7.108)$$

Die folgenden Rechnungen wurden mit den Abmessungen des Rechengebiets Ω $x_0 = y_0 = 50 \text{ m}$ und $\bar{\mathbf{x}} = (25, 5 \text{ m}, 25, 5 \text{ m})$ gemacht. Das Gebiet wurde mit 100 Stützstellen in jede Richtung diskretisiert. ρ_0 wurde so vorgegeben, daß der Zellmittelwert, der als rechte Seite in das Verfahren eingeht in der Zelle, in der sich die Ladung befindet, gerade gleich eins ist und ansonsten verschwindet. Das erhaltene elektrische Feld ist in Abbildung 7.3 dargestellt. Zum Vergleich ist in Abbildung 7.2 das elektrische Feld einer Punktladung dargestellt. Beachtenswert ist die gute Übereinstimmung zwischen den Feldern.

In Abbildung 7.4 ist die Entwicklung des elektrischen Feldes in den ersten Zeitschritten dargestellt. Man erkennt, daß sich die Information auch nach dem ersten Zeitschritt weiter ausbreitet, die Stärke des Feldes aber nicht anwächst.

In Abbildung 7.5 ist der zeitliche Verlauf des Maximalwertes der Divergenz des elektrischen Feldes für verschiedene γ aufgetragen. Dieser Wert ist gleich der Divergenz am Punkt $\bar{\mathbf{x}}$. Ist γ hinreichend groß, so ist der gewünschte Wert bereits nach einem Zeitschritt erreicht. In den weiteren Schritten korrigiert das Verfahren die Fehler des Maxwell-Lösers, und die Divergenz bleibt konstant gleich dem vorgegebenen Wert ρ_0 .

Gibt man nicht einen festen Wert von γ , sondern eine Fehlerschranke vor und verwendet das Korrekturverfahren als Iterationsverfahren, so erkennt man in Tabelle 7.3, daß im ersten Schritt eine größere Anzahl von Iterationen notwendig sind, um die Inkonsistenz der Anfangswerte auszugleichen. Danach wird lediglich das Ergebnis des Maxwell-Lösers korrigiert, was mit weniger Iterationsschritten pro Zeitschritt möglich ist.

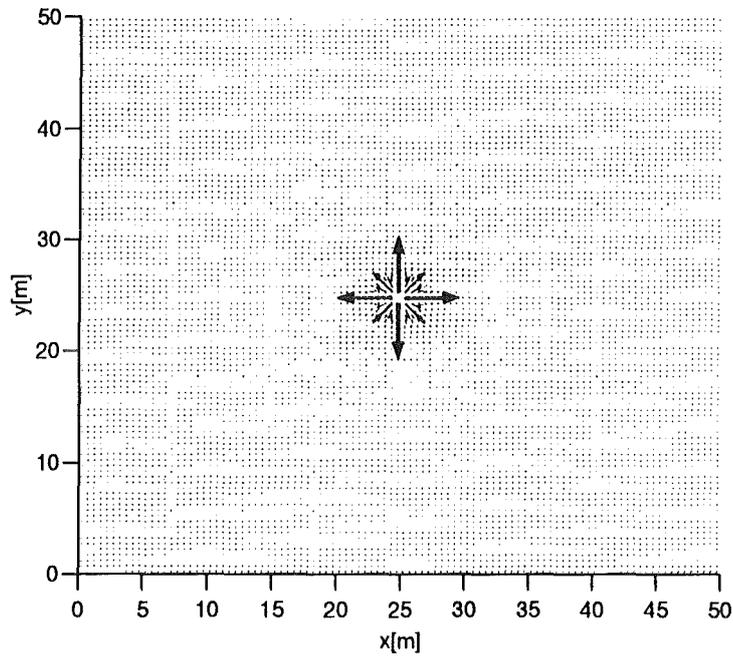


Abbildung 7.2: *Elektrisches Feld einer Punktladung in der Mitte des Rechengebietes; exakte Lösung*

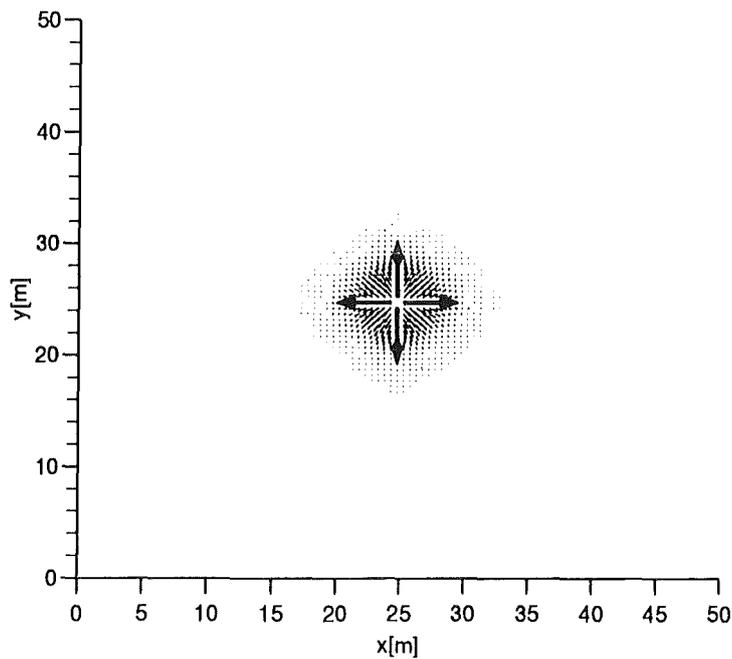


Abbildung 7.3: *Elektrisches Feld, berechnet mit der hyperbolischen Korrekturmethode*

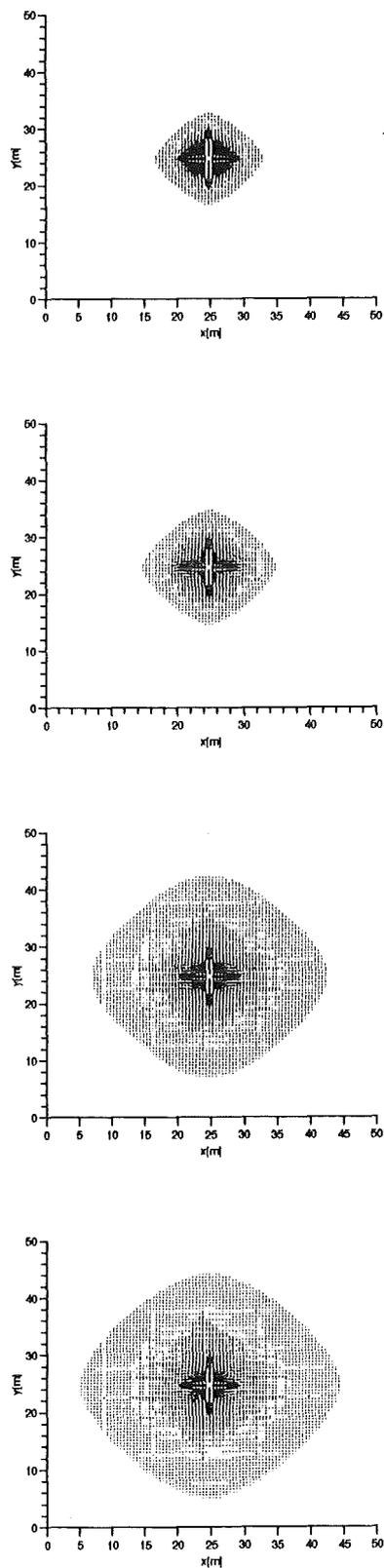


Abbildung 7.4: Zeitliche Entwicklung des elektrischen Feldes bei der hyperbolischen Korrektur in den ersten vier Zeitschritten $t = 1, 2, 3, 4$ ns.

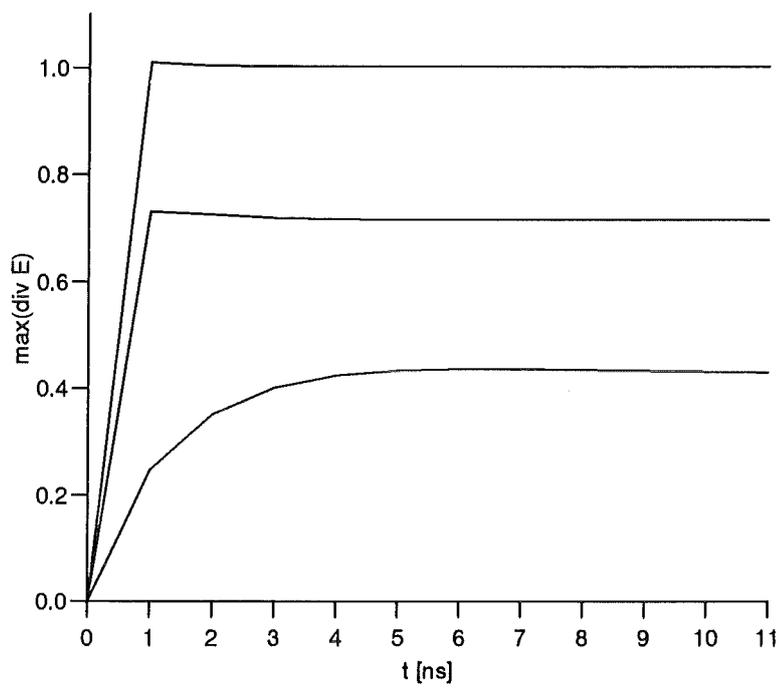


Abbildung 7.5: *Maximalwert der Divergenz von \mathbf{E} für von $\gamma = 1, 5, 10$ (von unten nach oben)*

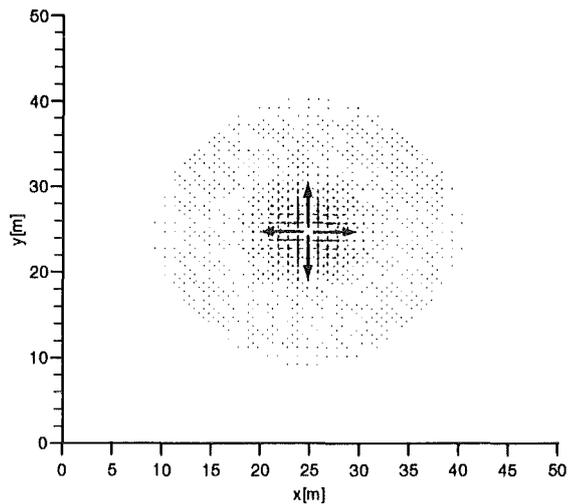


Abbildung 7.6: Elektrisches Feld berechnet mit dem Ansatz von Marder. Hier ist ein Checkerboard-Phänomen sichtbar, verursacht durch die Divergenzbildung mit zentralen Differenzen.

ϵ	# Iterationen		CPU Zeit	
	1. Schritt	weitere Schritte	gesamt	Korrektur
0.1	3	3	21.99	1.99
0.01	21	9	27.98	6.51
0.001	98	44 - 63	57.94	36.60

Tabelle 7.3: Hyperbolischer Ansatz als Iterationsverfahren verwendet. Angegeben ist die Anzahl der benötigten Iterationen für verschiedene Fehlerschranken ϵ und die Gesamtrechenzeit und die davon für die Korrektur benötigte Rechenzeit.

Kapitel 8

Zusammenfassung und Ausblick

In dieser Arbeit wurden Finite-Volumen-Verfahren für die instationären Maxwellgleichungen auf randangepaßten Koordinaten entwickelt. Da sie zur Verwendung im Rahmen einer Particle-in-Cell-Methode vorgesehen sind, wurde besonderen Wert auf die Behandlung der Divergenzgleichungen gelegt.

Die Entwicklung der Verfahren erfolgte ausgehend von eindimensionalen Verfahren über mehrdimensionale Verfahren auf kartesischen Gittern hin zu Verfahren auf randangepaßten Koordinaten. Dabei konnte auch der wesentliche Vorteil des versetzten Gitters beim Leapfrog-Verfahren geklärt werden: Es zeigte sich, daß dies zur Vermeidung einer sogenannten Schachbrettmuster-Instabilität, auch checkerboard-Phänomen genannt, notwendig ist.

In der Literatur werden verschiedene Ansätze zur Konstruktion von Verfahren zweiter Ordnung auf kartesischen Gittern vorgeschlagen. Es konnte gezeigt werden, daß sie alle den zum Erreichen der zweiten Ordnung notwendigen Term hinzufügen, wobei das Dimensionensplitting nach Strang mit den wenigsten Rechenschritten auskommt.

Theoretische und numerische Untersuchungen haben gezeigt, daß auch auf randangepaßten Koordinaten Dimensionensplitting möglich ist. Dabei müssen kaum Qualitätseinbußen in Kauf genommen werden, und man hat vor allem ein besseres Laufzeitverhalten und benötigt weniger Speicherplatz als bei den Erweiterungen des MUSCL-Ansatzes auf randangepaßte Koordinaten nach Durlofsky et al. (Rekonstruktion im physikalischen Gebiet) und nach Colella (Rekonstruktion im logischen Gebiet). Dies ist vor allem im Hinblick auf dreidimensionale Codes ein großer Vorteil. Schwierig ist eine Bestimmung der Konvergenzordnung auf allgemeinen Gittern. Theoretische Ergebnisse gibt es hierzu nicht. Für Finite-Volumen-Verfahren zeigen numerische Experimente, daß die Konvergenzordnung von 1,9 bis 2,0 auf kartesischen Gittern auf allgemeinen Gittern auf 1,7 bis 1,5 sinkt.

Die numerischen Experimente mit Finite-Volumen-Verfahren haben gezeigt, daß die verwendete, relativ einfache Formulierung offener Ränder gute Ergebnisse liefert. Bei Finite-Differenzen-Verfahren dagegen sind vor allem die offenen Ränder schwierig, wie die umfangreiche Literatur zu diesem Thema zeigt [13]. Daß die hier beschriebene, relativ einfache

Behandlung der Randbedingungen in Kombination mit Finite-Volumen-Verfahren zu so guten Ergebnissen führt, ist vor allem auf die Tatsache zurückzuführen, daß es sich bei den verwendeten Verfahren um Upwind-Verfahren handelt, die aufgrund ihrer Konstruktion die Richtung der Wellenausbreitung berücksichtigen.

Das Konzept zur Behandlung von Rändern mittels Dummygitterzellen kann auch zur Parallelisierung durch Gebietszerlegung und zur adaptiven Verfeinerung nach der AMR-Methode (Adaptive Mesh Refinement) angewendet werden. Diese Methode wurde zunächst von M. Berger [3] eingeführt und von Quirk [36] konsequent weiterentwickelt. Dabei werden die zu verfeinernden Gitterzellen mit logisch rechteckigen, feineren Gitterflicken, sog. patches, überdeckt. Man erhält eine Baumstruktur von Gittern verschiedener Feinheit. Dabei wird jedes Gitter und jeder Gitterflicken von einer oder zwei Reihen Dummyzellen umgeben, die zur Modellierung der Randbedingungen bzw. der Übergänge zwischen den Gittern dienen.

Mit der rein hyperbolischen Korrekturmethode konnte eine Methode entwickelt werden, bei der die mathematisch-physikalischen Eigenschaften vorteilhaft im numerischen Verfahren verwendet werden und das eine gute Approximation des hyperbolisch-elliptischen Systems darstellt. In Kombination mit den entwickelten Finite-Volumen-Verfahren liefert sie quantitativ und qualitativ gute Ergebnisse. Da es mit dem selben Finite-Volumen-Verfahren numerisch behandelt wird, weist es wie das Verfahren selbst eine große Flexibilität auf: Es kann ohne große Probleme für randangepaßte Koordinaten und Rechengebiete mit inneren Strukturen erweitert und auch leicht durch Gebietszerlegung parallelisiert werden.

Die entwickelten Algorithmen wurden bereits erfolgreich in das Rechenprogramm KaDi2d integriert.

Anhang A

Matrizen

A.1 Matrizen bei der Behandlung der Maxwellgleichungen

Bei der Formulierung der Maxwellgleichungen als Evolutionsgleichung treten die Matrizen

$$\mathcal{A} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & c^2 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -c^2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad (\text{A.1})$$

$$\mathcal{B} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -c^2 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & c^2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad (\text{A.2})$$

$$\mathcal{C} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & c^2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -c^2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (\text{A.3})$$

auf. Alle drei Matrizen haben jeweils die Eigenwerte $\{-c, -c, 0, 0, c, c\}$. Die Matrix \mathcal{C} wird für zweidimensionale Rechnungen nicht gebraucht.

Die Matrizen der Rechtseigenvektoren von \mathcal{A} und \mathcal{B} und ihre Inversen sind:

$$\mathcal{R}_{\mathcal{A}} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ -c & 0 & 0 & 0 & c & 0 \\ 0 & c & 0 & 0 & 0 & -c \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad (\text{A.4})$$

$$\mathcal{R}_{\mathcal{A}}^{-1} = \frac{1}{2c} \begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 & 0 & 0 & c \\ 0 & 0 & 1 & 0 & c & 0 \\ 2c & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 2c & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & c \\ 0 & 0 & -1 & 0 & c & 0 \end{pmatrix}, \quad (\text{A.5})$$

$$\mathcal{R}_{\mathcal{B}} = \begin{pmatrix} c & 0 & 0 & 0 & -c & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -c & 0 & 0 & 0 & c \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad (\text{A.6})$$

$$\mathcal{R}_{\mathcal{B}}^{-1} = \frac{1}{2c} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & c \\ 0 & 0 & 1 & -c & 0 & 0 \\ 0 & 2c & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 2c & 0 \\ -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & c \\ 0 & 0 & -1 & -c & 0 & 0 \end{pmatrix}. \quad (\text{A.7})$$

Für die Beträge der Matrizen $|\mathcal{A}| = \mathcal{R}_{\mathcal{A}}|\Lambda|\mathcal{R}_{\mathcal{A}}^{-1}$ und $|\mathcal{B}| = \mathcal{R}_{\mathcal{B}}|\Lambda|\mathcal{R}_{\mathcal{B}}^{-1}$, $|\Lambda| = \text{diag}(c, c, 0, 0, c, c)$ ergibt sich damit

$$|\mathcal{A}| = \text{diag}(0, c, c, 0, c, c), \quad (\text{A.8})$$

$$|\mathcal{B}| = \text{diag}(c, 0, c, c, 0, c) \quad (\text{A.9})$$

und für $\mathcal{A}^{\pm} = \frac{1}{2}(\mathcal{A} \pm |\mathcal{A}|)$

$$\mathcal{A}^{\pm} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \pm c & 0 & 0 & 0 & c^2 \\ 0 & 0 & \pm c & 0 & -c^2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 & \pm c & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & \pm c \end{pmatrix}, \quad (\text{A.10})$$

bzw. für $\mathcal{B}^\pm = \frac{1}{2}(\mathcal{B} \pm |\mathcal{B}|)$

$$\mathcal{B}^\pm = \begin{pmatrix} \pm c & 0 & 0 & 0 & 0 & -c^2 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \pm c & c^2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & \pm c & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & \pm c \end{pmatrix}. \quad (\text{A.11})$$

Für Rechnungen auf randangepaßten Koordinaten benötigt man $\mathcal{C} = a\mathcal{A} + b\mathcal{B}$:

$$\mathcal{C} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -bc^2 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & ac^2 \\ 0 & 0 & 0 & bc^2 & -ac^2 & 0 \\ 0 & 0 & b & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -a & 0 & 0 & 0 \\ -b & a & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}. \quad (\text{A.12})$$

Mit $a^2 + b^2 = 1$ erhält man die Eigenwerte $\{-c, -c, 0, 0, c, c\}$. Weiterhin erhält man

$$\mathcal{R} = \begin{pmatrix} cb & 0 & a & 0 & -cb & 0 \\ -ca & 0 & b & 0 & ca & 0 \\ 0 & c & 0 & 0 & 0 & -c \\ 0 & -b & 0 & a & 0 & -b \\ 0 & a & 0 & b & 0 & a \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad (\text{A.13})$$

$$\mathcal{R}^{-1} = \frac{1}{2c} \begin{pmatrix} b & -a & 0 & 0 & 0 & c \\ 0 & 0 & 1 & -cb & ac & 0 \\ 2ac & 2bc & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 2ac & 2bc & 0 \\ -b & a & 0 & 0 & 0 & c \\ 0 & 0 & -1 & -bc & ac & 0 \end{pmatrix}, \quad (\text{A.14})$$

$$|\mathcal{C}| = \begin{pmatrix} b^2c & -abc & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -abc & a^2c & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & c & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & b^2c & -abc & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -abc & a^2c & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & c \end{pmatrix} \quad (\text{A.15})$$

und

$$\mathcal{C}^\pm = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} \pm cb^2 & \mp cab & 0 & 0 & 0 & -c^2b \\ \mp cab & \pm ca^2 & 0 & 0 & 0 & c^2a \\ 0 & 0 & \pm c & c^2b & -c^2a & 0 \\ 0 & 0 & b & \pm cb^2 & \mp cab & 0 \\ 0 & 0 & -a & \mp cab & \pm ca^2 & 0 \\ -b & a & 0 & 0 & 0 & \pm c \end{pmatrix}. \quad (\text{A.16})$$

Die daraus resultierenden numerischen Flüsse sind

$$\mathbf{G}_{i+1/2,j} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} b^2 c ((E_1)_{ij} - (E_1)_{i+1,j}) - abc ((E_2)_{ij} - (E_2)_{i+1,j}) - bc^2 ((B_3)_{ij} + (B_3)_{i+1,j}) \\ -abc ((E_1)_{ij} - (E_1)_{i+1,j}) + a^2 c ((E_2)_{ij} + (E_2)_{i+1,j}) + ac^2 ((B_3)_{ij} + (B_3)_{i+1,j}) \\ c ((E_3)_{ij} - (E_3)_{i+1,j}) + bc ((B_1)_{ij} - (B_1)_{i+1,j}) - ac ((B_2)_{ij} + (B_2)_{i+1,j}) \\ b ((E_3)_{ij} - (E_3)_{i+1,j}) + b^2 c ((B_1)_{ij} - (B_1)_{i+1,j}) - abc ((B_2)_{ij} + (B_2)_{i+1,j}) \\ -a ((E_3)_{ij} - (E_3)_{i+1,j}) - abc ((B_1)_{ij} - (B_1)_{i+1,j}) + a^2 c ((B_2)_{ij} + (B_2)_{i+1,j}) \\ -b ((E_1)_{ij} - (E_1)_{i+1,j}) + a ((B_2)_{ij} - (B_2)_{i+1,j}) + c ((B_3)_{ij} + (B_3)_{i+1,j}) \end{pmatrix}$$

und

$$\mathbf{H}_{i,j+1/2} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} b^2 c ((E_1)_{ij} - (E_1)_{i,j+1}) - abc ((E_2)_{ij} - (E_2)_{i,j+1}) - bc^2 ((B_3)_{ij} + (B_3)_{i,j+1}) \\ -abc ((E_1)_{ij} - (E_1)_{i,j+1}) + a^2 c ((E_2)_{ij} + (E_2)_{i,j+1}) + ac^2 ((B_3)_{ij} + (B_3)_{i,j+1}) \\ c ((E_3)_{ij} - (E_3)_{i,j+1}) + bc ((B_1)_{ij} - (B_1)_{i,j+1}) - ac ((B_2)_{ij} + (B_2)_{i,j+1}) \\ b ((E_3)_{ij} - (E_3)_{i,j+1}) + b^2 c ((B_1)_{ij} - (B_1)_{i,j+1}) - abc ((B_2)_{ij} + (B_2)_{i,j+1}) \\ -a ((E_3)_{ij} - (E_3)_{i,j+1}) - abc ((B_1)_{ij} - (B_1)_{i,j+1}) + a^2 c ((B_2)_{ij} + (B_2)_{i,j+1}) \\ -b ((E_1)_{ij} - (E_1)_{i,j+1}) + a ((B_2)_{ij} - (B_2)_{i,j+1}) + c ((B_3)_{ij} + (B_3)_{i,j+1}) \end{pmatrix}.$$

A.2 Matrizen für das Korrekturverfahren

In diesem Abschnitt werden die für das hyperbolische Korrekturverfahren benötigten Matrizen für den Fall randangepaßter Koordinaten angegeben. Die Matrizen für kartesische Koordinaten erhält man daraus, indem man $a = 1, b = 0$ bzw. $a = 0, b = 1$ setzt. Man benötigt $\mathcal{C}' = a\mathcal{A}' + b\mathcal{B}'$:

$$\mathcal{C}' = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -c^2 b & ac^2 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & c^2 a & bc^2 \\ 0 & 0 & 0 & c^2 b & -c^2 a & 0 & 0 \\ 0 & 0 & b & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -a & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -b & a & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ a\gamma^2 & b\gamma^2 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}. \quad (\text{A.17})$$

Mit $a^2 + b^2 = 1$ erhält man die Eigenwerte $\{-\gamma c, -c, -c, 0, c, c, \gamma c\}$. Wir betrachten

$$\mathcal{C}'' = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & ac^2 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & bc^2 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ a\gamma^2 & b\gamma^2 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}. \quad (\text{A.18})$$

mit Eigenwerten $\{-c\gamma, 0, 0, 0, 0, 0, c\gamma\}$. Man erhält

$$\mathcal{R}'' = \begin{pmatrix} a & 0 & 0 & -b & 0 & 0 & c \\ b & 0 & 0 & a & 0 & 0 & c \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ \frac{\gamma}{c} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -\frac{\gamma}{c} \end{pmatrix}, \quad (\text{A.19})$$

$$(\mathcal{R}'')^{-1} = \frac{1}{2c} \begin{pmatrix} ac & bc & 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{c^2}{\gamma} \\ 0 & 0 & 2c & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 2c & 0 & 0 & 0 \\ -2bc & 2ac & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 2c & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 2c \\ ac & bc & 0 & 0 & 0 & 0 & -\frac{c^2}{\gamma} \end{pmatrix}, \quad (\text{A.20})$$

$$|\mathcal{C}''| = c\gamma \begin{pmatrix} a^2 & ab & 0 & 0 & 0 & 0 \\ ab & b^2 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (\text{A.21})$$

$$(\mathcal{C}'')^{\pm} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} \pm a^2 c\gamma & \pm abc\gamma & 0 & 0 & 0 & ac^2 \\ \pm abc\gamma & \pm b^2 c\gamma & 0 & 0 & 0 & bc^2 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ a\gamma^2 & b\gamma^2 & 0 & 0 & 0 & \pm c\gamma \end{pmatrix}. \quad (\text{A.22})$$

Die numerischen Flüsse sind damit

$$\mathbf{G}_{i+1/2,j} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} a^2 c\gamma ((E_1)_{ij} - (E_1)_{i+1,j}) + abc\gamma ((E_2)_{ij} - (E_2)_{i+1,j}) + ac^2 (\phi_{ij} + \phi_{i+1,j}) \\ abc\gamma ((E_1)_{ij} - (E_1)_{i+1,j}) + b^2 c\gamma ((E_2)_{ij} - (E_2)_{i+1,j}) + bc^2 (\phi_{ij} + \phi_{i+1,j}) \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ a\gamma^2 ((E_1)_{ij} + (E_1)_{i+1,j}) + b\gamma^2 ((E_2)_{ij} + (E_2)_{i+1,j}) + c\gamma (\phi_{ij} - \phi_{i+1,j}) \end{pmatrix}$$

und

$$\mathbf{H}_{i,j+1/2} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} a^2 c \gamma ((E_1)_{ij} - (E_1)_{i,j+1}) + abc \gamma ((E_2)_{ij} - (E_2)_{i,j+1}) + ac^2 (\phi_{ij} + \phi_{i,j+1}) \\ abc \gamma ((E_1)_{ij} - (E_1)_{i,j+1}) + b^2 c \gamma ((E_2)_{ij} - (E_2)_{i,j+1}) + bc^2 (\phi_{ij} + \phi_{i,j+1}) \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ a \gamma^2 ((E_1)_{ij} + (E_1)_{i,j+1}) + b \gamma^2 ((E_2)_{ij} + (E_2)_{i,j+1}) + c \gamma (\phi_{ij} - \phi_{i,j+1}) \end{pmatrix}.$$

Anhang B

Das Leapfrog-Verfahren für die Maxwellgleichungen

Die unbekanntenen Größen der zweidimensionalen Maxwellgleichungen (2.27) werden auf einem versetzten Gitter approximiert:

$$\mathbf{u} = \left((E_1)_{i,j+1/2}^{n-1/2}, (E_2)_{i+1/2,j}^{n-1/2}, (E_3)_{ij}^n, (B_1)_{i,j+1/2}^{n-1/2}, (B_2)_{i+1/2,j}^{n-1/2}, (B_3)_{ij}^n \right)^T. \quad (\text{B.1})$$

Wie in Abschnitt 3.1 erläutert, ersetzt man in den kartesischen bzw. den homogenen zylindrischen Gleichungen alle Ableitungen durch zentrale Differenzenquotienten und erhält den von zuerst Yee [49] vorgeschlagenen Algorithmus, der ausformuliert lautet:

$$\begin{aligned} (E_1)_{i,j+1/2}^{n+1/2} &= (E_1)_{i,j+1/2}^{n-1/2} + \frac{c^2 \Delta t}{\Delta y} \left((B_3)_{i,j+1}^n - (B_3)_{ij}^n \right) \\ (E_2)_{i+1/2,j}^{n+1/2} &= (E_2)_{i+1/2,j}^{n-1/2} - \frac{c^2 \Delta t}{\Delta x} \left((B_3)_{i+1,j}^n - (B_3)_{ij}^n \right) \\ (E_3)_{ij}^{n+1} &= (E_3)_{ij}^n + \frac{\Delta t}{\Delta x} \left((B_2)_{i+1/2,j}^{n+1/2} - (B_2)_{i-1/2,j}^{n+1/2} \right) - \frac{\Delta t}{\Delta y} \left((B_1)_{i,j+1/2}^{n+1/2} - (B_1)_{i,j-1/2}^{n+1/2} \right) \\ (B_1)_{i,j+1/2}^{n+1/2} &= (B_1)_{i,j+1/2}^{n-1/2} - \frac{\Delta t}{\Delta x} \left((E_3)_{i,j+1}^n - (E_3)_{ij}^n \right) \\ (B_2)_{i+1/2,j}^{n+1/2} &= (B_2)_{i+1/2,j}^{n-1/2} + \frac{\Delta t}{\Delta x} \left((E_3)_{i+1,j}^n - (E_3)_{ij}^n \right) \\ (B_3)_{ij}^{n+1} &= (B_3)_{ij}^n - \frac{\Delta t}{\Delta x} \left((E_2)_{i+1/2,j}^{n+1/2} - (E_2)_{i-1/2,j}^{n+1/2} \right) + \frac{\Delta t}{\Delta y} \left((E_1)_{i,j+1/2}^{n+1/2} - (E_1)_{i,j-1/2}^{n+1/2} \right). \end{aligned}$$

Eine Modifizierung für die inhomogenen zylindrischen Gleichungen gibt Boris in [5] an.

In [45] gibt Weiland für diesen Algorithmus eine Herleitung an, bei der die Maxwellgleichungen in der Form (2.27) über verschiedene Bereiche eines kartesischen Gitters integriert werden. Dabei ergibt sich auf natürliche Weise die Verwendung des versetzten Gitters.

Erweiterungen auf randangepaßte Koordinaten werden in mehreren Arbeiten gegeben. Holland [19] verwendet eine Methode, bei der sich ko- oder kontravariante Komponenten ebenfalls leapfrog-artig abwechseln. Madsen [27] benutzt wie der Finite-Volumen-Ansatz eine Integration über Bereiche des Gitters, wobei verschiedene Kontrollvolumen für die verschiedenen Größen verwendet werden. Dabei müssen doppelt so viele Unbekannte wie beim Yee-Algorithmus auf kartesischen Koordinaten verwendet werden, so daß der Ansatz von Madsen letztendlich genausoviele Unbekannte verwendet wie der Ansatz von Holland.

Anhang C

Transformierte Erhaltungsgleichung

Die Jacobimatrix der Transformation T lautet

$$J = \begin{pmatrix} x_\xi & x_\eta \\ y_\xi & y_\eta \end{pmatrix}. \quad (\text{C.1})$$

Wir setzen zusätzlich voraus, daß T zweimal stetig differenzierbar ist¹. Die Inverse von J , also die Jacobimatrix der inversen Transformation lautet dann

$$\begin{aligned} J^{-1} &= \frac{1}{\det J} \begin{pmatrix} y_\eta & -x_\eta \\ -y_\xi & x_\xi \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} \xi_x & \xi_y \\ \eta_x & \eta_y \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (\text{C.2})$$

Aus

$$\mathbf{u}_t + \mathcal{A}\mathbf{u}_x + \mathcal{B}\mathbf{u}_y = 0 \quad (\text{C.3})$$

erhält man unter Verwendung der Kettenregel

$$\mathbf{u}_t + \xi_x \mathcal{A}\mathbf{u}_\xi + \eta_x \mathcal{A}\mathbf{u}_\eta + \xi_y \mathcal{B}\mathbf{u}_\xi + \eta_y \mathcal{B}\mathbf{u}_\eta = 0. \quad (\text{C.4})$$

Mit (C.2) ergibt sich

$$\mathbf{u}_t + \frac{(y_\eta \mathcal{A}\mathbf{u}_\xi - x_\eta \mathcal{B}\mathbf{u}_\xi)}{\det J} + \frac{(-y_\xi \mathcal{A}\mathbf{u}_\eta + x_\xi \mathcal{B}\mathbf{u}_\eta)}{\det J} = 0 \quad (\text{C.5})$$

und nach Vertauschen der partiellen Ableitungen

$$\mathbf{u}_t + \frac{(y_\eta \mathcal{A}\mathbf{u} - x_\eta \mathcal{B}\mathbf{u})_\xi}{\det J} + \frac{(-y_\xi \mathcal{A}\mathbf{u} + x_\xi \mathcal{B}\mathbf{u})_\eta}{\det J} = 0. \quad (\text{C.6})$$

¹Dabei heißt eine Abbildung zweimal stetig differenzierbar, wenn alle zweiten partiellen Ableitungen existieren und stetig sind. Dann gilt der Satz von Schwartz über das Vertauschen der Differentiationsreihenfolge.

Da eine lineare Gleichung vorliegt, kann man die entstandene Gleichung in Erhaltungsform für $\hat{\mathbf{u}} := (\det J)\mathbf{u}$ schreiben:

$$\hat{\mathbf{u}}_t + (\xi_x \mathcal{A} \hat{\mathbf{u}} + \xi_y \mathcal{B} \hat{\mathbf{u}})_\xi + (\eta_x \mathcal{A} \hat{\mathbf{u}} + \eta_y \mathcal{B} \hat{\mathbf{u}})_\eta = 0. \quad (\text{C.7})$$

Bei nichtlinearen Gleichungen ist dieser Schritt unter der Voraussetzung, daß die Flüsse homogen sind, d.h. $f(\alpha \mathbf{u}) = \alpha \mathbf{F}(\mathbf{u})$ für $\alpha \in \mathbb{R}$, ebenfalls möglich.

Anhang D

Die Particle-in-Cell-Methode und die Lorentzgleichungen

Die Particle-in-Cell-Methode, abgekürzt PIC-Methode, wird verwendet, um kinetische Vorgänge z.B. in der Plasmaphysik numerisch zu simulieren. Bei der numerischen Simulation von Ionendioden müssen die Maxwell-Lorentz-Gleichungen selbstkonsistent gelöst werden. Dies bedeutet, daß sowohl von außen angelegte Felder als auch die Eigenfelder der Teilchen bei der Bestimmung der Teilchenbahnen berücksichtigt werden müssen. Dabei sind die Eigenfelder der Teilchen oft von derselben Größenordnung wie die der von außen angelegten, externen Felder.

Wir beschreiben hier einen Zeitschritt der Particle-in-Cell-Methode [15]. Die Schritte sind in Abbildung D1 schematisch dargestellt. Angenommen, die Zellmittelwerte von \mathbf{E} und \mathbf{B} sind zur Zeit t^n bekannt. Diese Zahlenwerte werden nun den Schwerpunkten der Zellen zugeordnet. Danach werden die elektromagnetischen Felder auf die aktuellen Positionen $\mathbf{x}_k(t_n)$, $k = 1, \dots, N$, der Teilchen interpoliert. Dabei bezeichnet N die Anzahl der Teilchen im Rechengebiet. Das verwendete Interpolationsschema ist eine Erweiterung der Area-Weighting-Methode auf beliebige randangepaßt Koordinaten [38]. Aus den elektromagnetischen Feldern an den Teilchenorten ergibt sich die auf jedes Teilchen wirkende Lorentzkraft \mathbf{F}_k

$$\mathbf{F}_k(t) = q_k [\mathbf{E}(\mathbf{x}_k, t) + \mathbf{v}_k \times \mathbf{B}(\mathbf{x}_k, t)], \quad k = 1, \dots, N, \quad (\text{D.1})$$

durch die die Teilchen beschleunigt werden. Hierbei bezeichnet q_k die Ladung und \mathbf{v}_k die Geschwindigkeit des k -ten Teilchens. Die neuen Phasenraumkoordinaten $(\mathbf{v}_k, \mathbf{x}_k)$ ergeben sich aus der Lösung der relativistischen Lorentzgleichung für die Elektronen und der nicht-relativistischen Lorentzgleichungen für die (wesentlich schwereren und damit wesentlich langsameren) Ionen:

$$\frac{d\mathbf{U}_k(t)}{dt} = \frac{\mathbf{F}_k(t)}{m_k}, \quad (\text{D.2})$$

$$\frac{d\mathbf{x}_k(t)}{dt} = \mathbf{v}_k(t) \quad (\text{D.3})$$

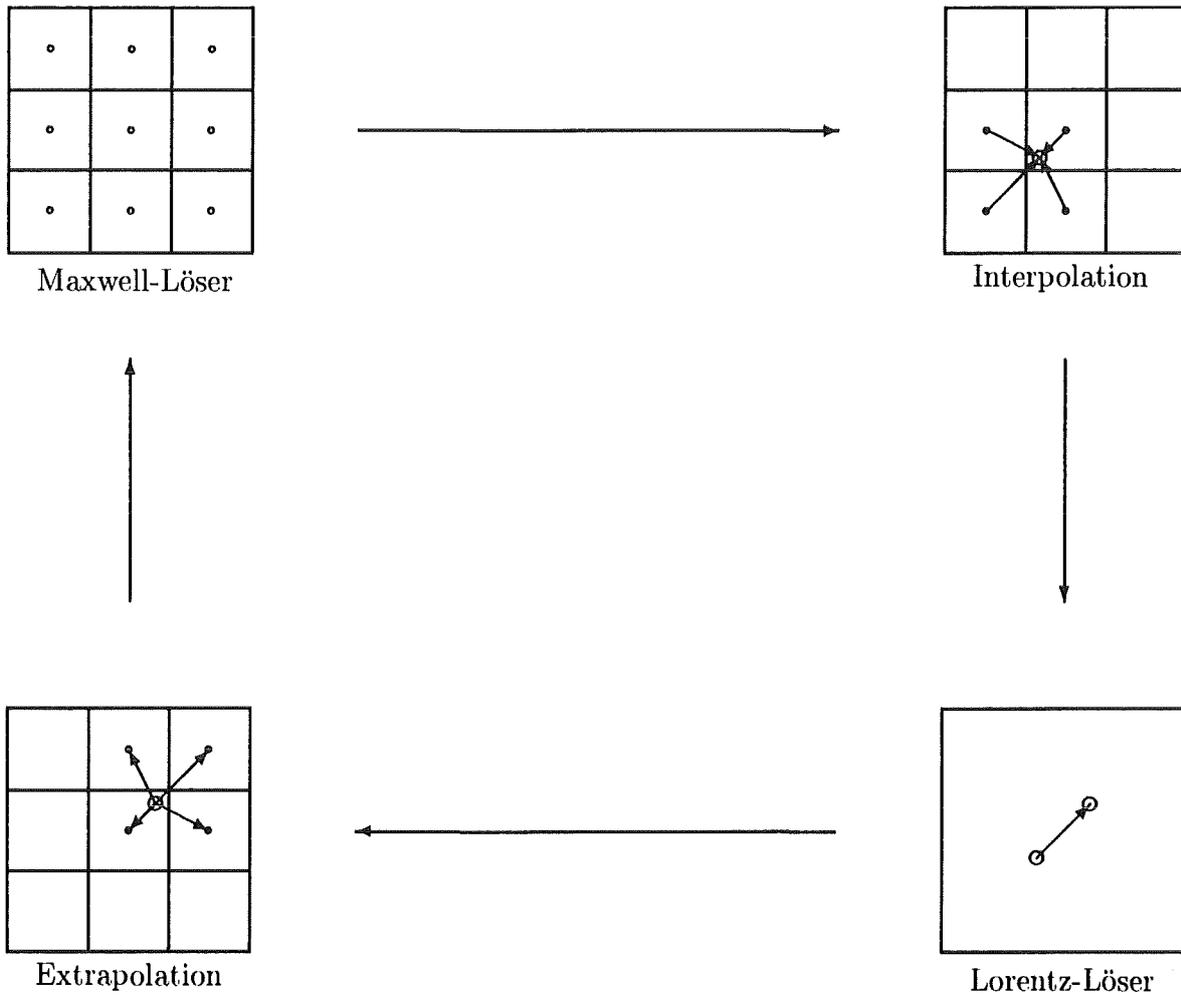


Abbildung D.1: Schematische Darstellung des Particle-Cell-Zyklus. Die Behandlung der Maxwellgleichungen auf einem Rechengitter (links oben) und das gitterfreie Lösen der Lorentzgleichungen (rechts unten) werden durch die Interpolation (rechts oben) und die Extrapolation (links unten) verbunden.

mit den Anfangswerten

$$\mathbf{U}_0 = \mathbf{U}_k^{n-1/2}, \quad (\text{D.4})$$

$$\mathbf{x}_0 = \mathbf{x}_k^n. \quad (\text{D.5})$$

Dabei bezeichnen m_k und $\mathbf{U}_k = \gamma_k \mathbf{v}_k$ Masse bzw. relativistische Geschwindigkeit des k -ten Teilchens mit

$$\gamma_k = \sqrt{1 - \frac{\mathbf{v}_k^2}{c^2}}. \quad (\text{D.6})$$

Die Lorentzgleichungen (D.2, D.3) werden mit einem Leapfrog-Verfahren numerisch gelöst:

$$\mathbf{U}_k^{n+1/2} - \mathbf{U}_k^{n-1/2} = \Delta t \frac{\mathbf{F}_k^n}{m_k}, \quad (\text{D.7})$$

$$\mathbf{x}_k^{n+1} - \mathbf{x}_k^n = \Delta t \mathbf{v}_k^{n+1/2}. \quad (\text{D.8})$$

Aus Ort und Impuls der Teilchen können die Strom- und die Ladungsdichte berechnet werden. Um die neue Ladungs- und Stromdichte nach der Teilchenbewegung zu erhalten, muß zuerst von jedem Teilchen festgestellt werden, in welcher Zelle es sich nach der Bewegung befindet. Dieser Schritt wird Lokalisierung genannt. Dazu werden Interpolationsgewichte bestimmt bezüglich den vier Zellschwerpunkten, die den neuen Teilchenort $\mathbf{x}_k(t^{n+1})$ umgeben. Mit denselben Interpolationsgewichten wird $\mathbf{j}^{n+1/2}$ berechnet, die als rechte Seite in den Maxwell-Löser eingeht. Durch Lösen der Maxwellgleichungen,

$$\frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t} - c^2 \nabla \times \mathbf{B} = -\frac{\mathbf{j}}{\epsilon_0}, \quad (\text{D.9})$$

$$\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} + \nabla \times \mathbf{E} = 0 \quad (\text{D.10})$$

mit der in dieser Arbeit beschriebenen Finite-Volumen-Methode mit \mathbf{E}^n und \mathbf{B}^n als Anfangswerten, erhält man die Zellmittelwerte von \mathbf{E} und \mathbf{B} zu einem neuen Zeitpunkt t^{n+1} . Damit schließt sich der Kreis: Mit den neuen Feldern können die Lorentzgleichungen für den nächsten Zeitschritt gelöst werden.

Die Ladungsdichte ρ^{n+1} geht in den Maxwell-Löser nicht ein, der Strom ist alleiniger Quellterm für die Felder. Die Divergenz des elektrischen Feldes stimmt deshalb zur Zeit t^{n+1} im allgemeinen nicht mehr mit der Ladungsdichte aus der Teilchenbehandlung überein, auch wenn dies zur Zeit t^n noch der Fall war. Dies kann aus zwei Gründen passieren: \mathbf{E}^{n+1} als Ergebnis des Maxwell-Lösers oder ρ^{n+1} als Ergebnis der Teilchenbehandlung kann fehlerbehaftet sein. Beide Fälle sind möglich und werden in Kapitel 7 getrennt untersucht.

Abbildung D.2 zeigt das Resultat einer selbstkonsistenten Simulation eines Elektronenstrahls im Plattenkondensator.

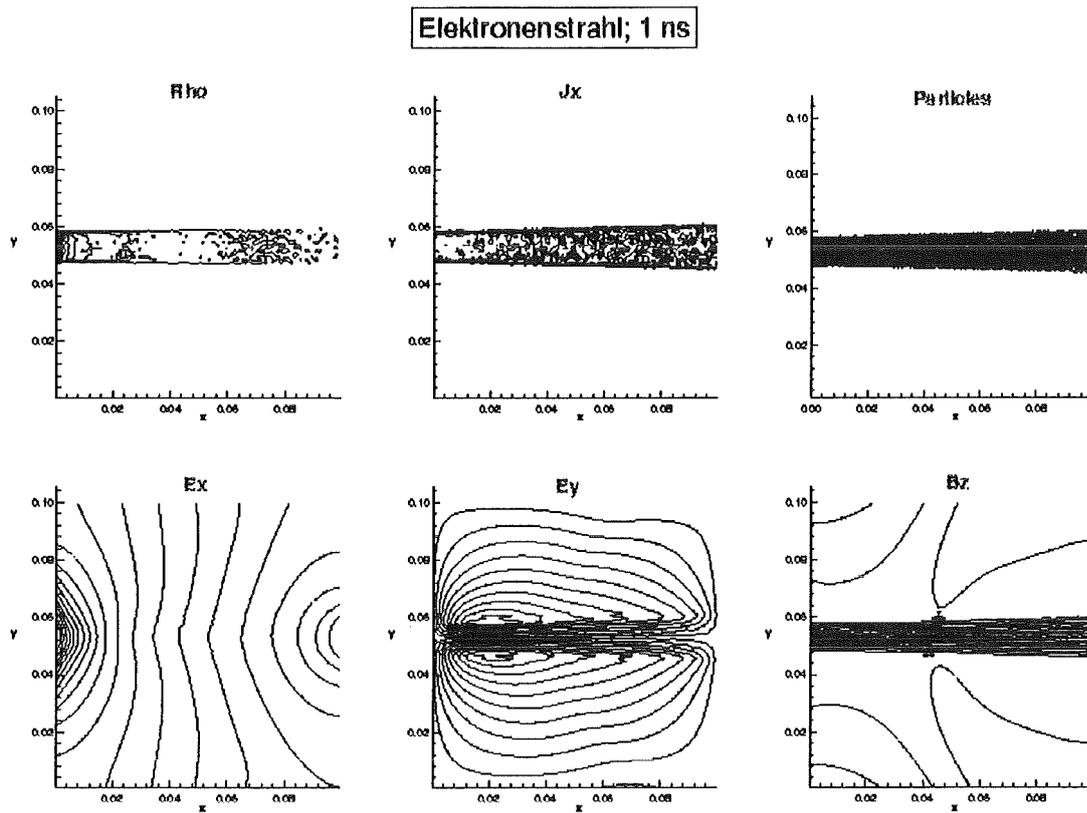


Abbildung D.2: Selbstkonsistente Simulation eines Elektronenstrahls in einem Plattenkondensator. Oben sind von rechts nach links die Ladungs- und Stromdichte und die Teilchenverteilung dargestellt, unten diejenigen Feldkomponenten, die bei dem vorliegenden Problem nicht verschwinden. In der Aufweitung des Teilchenstrahls zeigt sich die Wirkung der Eigenfelder der Teilchen, die durch die selbstkonsistente Behandlung berücksichtigt wird.

Symbolverzeichnis

\mathbf{E}	elektrisches Feld
\mathbf{H}	magnetische Feld
\mathbf{D}	elektrische Verschiebung
\mathbf{B}	magnetische Induktion
ρ	Ladungsdichte
\mathbf{j}	Stromdichte
c	Lichtgeschwindigkeit
ϵ	Dielektrizitätskonstante
ϵ_0	elektrische Feldkonstante
μ	Permeabilität
μ_0	magnetische Feldkonstante
m	Anzahl der Gleichungen
n	Anzahl der Raumdimensionen
x, y	kartesische Koordinaten
z, r, φ	Zylinderkoordinaten
\mathbf{x}	$= (x, y)^T$
i, j	Indizes des Gitters, Größen am Zellmittelpunkt
V_{ij}	Gitterzelle
\mathbf{n}	äußere Normale
$\mathbf{n}^{(\xi)}, \mathbf{n}^{(\eta)}$	Normale an ξ - und η Parameterlinien
\mathbf{u}	Vektor der erhaltenen Größen
$\mathcal{A}, \mathcal{B}, \mathcal{C}$	Flußmatrizen
\mathbf{q}	Quellterm
$\mathbf{u}_l, \mathbf{u}_r$	Anfangswerte des Riemannproblems
$\mathcal{R}, \mathcal{R}^{-1}$	Matrix der Rechtseigenvektoren und ihre Inverse
m	Anzahl der Gleichungen
n	Anzahl der Raumdimensionen

Δt	Zeitschrittweite
$\Delta x, \Delta y$	Raumschrittweiten
Δ	kurz für $\Delta x, \Delta y, \Delta t$
\mathbf{g}, \mathbf{h}	numerische Flüsse für eindimensionale Probleme
\mathbf{G}, \mathbf{H}	numerische Flüsse für zweidimensionale Probleme
u_i^n	Gitterfunktion eindimensional
u_{ij}^n	Gitterfunktion zweidimensional
\mathbf{F}	beliebiges Vektorfeld
F_1, F_2, F_3	Komponenten des Vektors
f	beliebige skalare Funktion
$ \cdot $	Betrag
$\ \cdot\ $	Norm

Literaturverzeichnis

- [1] F. ASSOUS, P. DEGOND, E. HEINTZE, P.-A. RAVIART, AND J. SEGRE, *On a finite-element method for solving the three-dimensional Maxwell equations*, J. Comput. Phys., 109 (1993), pp. 222–237.
- [2] R. BALESCU, *Transport processes in Plasmas, 1. Classical Transport Theory*, North-Holland, Amsterdam, 1988.
- [3] M. J. BERGER AND P. COLELLA, *Local adaptive mesh refinement for shock hydrodynamics*, J. Comput. Phys., 82 (1989), pp. 64–84.
- [4] C. K. BIRDSALL AND A. B. LANGDON, *Plasma Physics via Computer Simulation*, MacGraw Hill, New York, 1985.
- [5] J. P. BORIS, *Relativistic plasma simulation - optimization of a hybrid code*, in Proceedings of the Fourth Conference on Numerical Simulation of Plasmas, Naval Research Laboratory, Washington, D.C., 2.–3.11. 1970.
- [6] J. CIONI, L. FEZOU, AND H. STEVE, *A parallel time-domain Maxwell solver using upwind schemes and triangular meshes*, IMPACT of Computing in Science and Engineering, 5 (1993), pp. 215–247.
- [7] P. COLELLA, *Multidimensional upwind methods for hyperbolic conservation laws*, J. Comput. Phys., 87 (1990), pp. 171–200.
- [8] R. COURANT, K. O. FRIEDRICHS, AND H. LEWY, *Über die partiellen Differentialgleichungen der mathematischen Physik*, Math. Ann., 100 (1928), pp. 32–74.
- [9] R. COURANT, E. ISAACSON, AND M. REES, *On the solution of nonlinear hyperbolic differential equations*, Comm. Pure Appl. Math., 5 (1953), pp. 243–255.
- [10] L. DURLOFSKY, B. ENGQUIST, AND S. OSHER, *Triangle based adaptive stencils for the solution of hyperbolic conservation laws*, J. Comput. Phys., 98 (1992), pp. 64–73.
- [11] J. W. EASTWOOD, *The virtual particle electromagnetic particle-mesh method*, Comp. Phys. Comm., 64 (1991), pp. 252–266.

- [12] M. FEY, *Ein echt mehrdimensionales Verfahren zur Lösung der Eulergleichungen*, Dissertation, ETH Zürich, Zürich, 1993.
- [13] D. GIVOLI, *Non-reflecting boundary conditions*, J. Comput. Phys., 94 (1991), pp. 1–29.
- [14] S. K. GODUNOV, *Finite difference method for numerical computation of discontinuous solutions of the equations of fluid dynamics*, Mat. Sbornik, 47 (1957), pp. 271–306. (Russisch).
- [15] E. HALTER, M. KRAUSS, C.-D. MUNZ, R. SCHNEIDER, E. STEIN, U. VOSS, AND T. WESTERMANN, *Concept for the numerical solution of the Maxwell-Vlasov-system*, FZKA 5654, Forschungszentrum Karlsruhe, 1995.
- [16] G. HEDSTROM, *Non-reflecting boundary conditions for nonlinear hyperbolic systems*, J. Comput. Phys., 30 (1979), pp. 222–237.
- [17] R. L. HIGDON, *Initial boundary value problems for linear hyperbolic systems*, SIAM Rev., 28 (1986), pp. 177–217.
- [18] R. W. HOCKNEY AND J. W. EASTWOOD, *Computer Simulation using Particles*, MacGraw Hill, New York, 1981.
- [19] R. HOLLAND, *Finite-difference solution of Maxwell's equations in generalized nonorthogonal coordinates*, IEEE Trans. Nucl. Sci., NS-30 (1983), pp. 4589–4591.
- [20] J. D. JACKSON, *Classical Electrodynamics*, Wiley, New York, 1975.
- [21] R. KLEIN AND C.-D. MUNZ, *The multiple pressure variable approach for the numerical approximation of weak compressible flow*, eingereicht bei J. Comput. Phys.
- [22] A. B. LANGDON, *On enforcing Gauss' law in electromagnetic particle-in-cell codes*, Comp. Phys. Comm, 70 (1992), pp. 447–450.
- [23] B. V. LEER, *Toward the ultimate conservative difference scheme V. A second order sequel to Godunov's method*, J. Comput. Phys., 32 (1979), pp. 101–136.
- [24] R. J. LEVEQUE, *Numerical Methods for Conservation Laws*, Lectures in Mathematics, ETH Zürich, Birkhäuser, Basel, 1990.
- [25] ———, *Simplified multidimensional flux limiter methods*, in Numerical Methods for Fluid Dynamics 4, M. J. Baines and K. W. Morton, eds., Clarendon Press, Oxford, 1993, pp. 175 – 190.
- [26] R. J. LEVEQUE AND J. OLIGER, *Numerical methods based on additive splittings for hyperbolic partial differential equations*, Math. Comp., 40 (1983), pp. 469–497.

- [27] N. K. MADSEN AND R. W. ZIOLKOWSKI, *A three-dimensional modified finite volume technique for Maxwell's equations*, *Electromagnetics*, 10 (1990), pp. 147–161.
- [28] B. MARDER, *A method for incorporating Gauss' law into electromagnetic PIC codes*, *J. Comput. Phys.*, 68 (1987), pp. 48–455.
- [29] K. MORGAN, O. HASSAN, AND J. PERAIRE, *An unstructured grid algorithm for the solution of Maxwell's equations in the time domain*, *Int. J. Num. Meth. Fluids*, 19 (1994), pp. 849–863.
- [30] C.-D. MUNZ, *Theorie und Numerik nichtlinearer hyperbolischer Differentialgleichungen. II. Systeme von Erhaltungsgleichungen*, in Vorbereitung.
- [31] —, *On the numerical dissipation of high resolution schemes for hyperbolic conservation laws*, *J. Comput. Phys.*, 77 (1988), pp. 18–39.
- [32] —, *Theorie und Numerik nichtlinearer hyperbolischer Differentialgleichungen. I. Die skalare Erhaltungsgleichung*, KfK-Bericht 4805, Kernforschungszentrum Karlsruhe, 1990.
- [33] —, *Godunov-Typ-Verfahren für die Gleichungen der kompressiblen Strömungsmechanik*, KfK-Bericht 5058, Kernforschungszentrum Karlsruhe, 1992.
- [34] H. NEUNZERT, *Mathematical investigations on Particle-in-Cell methods*, *Fluid Dynamics Transaction*, 9 (1978), pp. 229–254.
- [35] D. E. NIELSEN AND A. T. DROBOT, *An analysis of the pseudo-current method*, *J. Comput. Phys.*, 89 (1990), pp. 31–40.
- [36] J. J. QUIRK, *An adaptive Grid algorithm for Computational Shock Hydrodynamics*, Dissertation, College of Aeronautics, Cranfield Institute of Technology, 1993.
- [37] P. L. ROE, *Beyond the Riemann problem II*, in *Algorithmic Trends in Computational Fluid Dynamics*, M. Y. Hussaini, A. Kumar, and M. D. Salas, eds., Springer, New York, 1993.
- [38] D. SELDNER AND T. WESTERMANN, *Algorithms for interpolation and localization in irregular 2D meshes*, *J. Comput. Phys.*, 79 (1988), pp. 1–11.
- [39] J. SHANG, *A fractional step method for solving the 3D time-domain Maxwell's equations*, *J. Comput. Phys.*, 118 (1995), pp. 109–119.
- [40] G. A. SOD, *Numerical Methods in Fluid Dynamics*, Cambridge University Press, Cambridge, 1985.
- [41] G. STRANG, *On the construction and comparison of difference schemes*, *SIAM J. Num. Anal.*, 5 (1968), pp. 505–517.

- [42] A. TAFLOVE, *Re-inventing electromagnetics: Supercomputing solution of Maxwell's equations via direct time integration on space grids*, AIAA 92-0333, American Institute of Aeronautics and Astronautics, Washington, D.C., 1992.
- [43] J. F. THOMPSON, Z. U. A. WARSI, AND C. W. MASTIN, *Boundary-fitted coordinate systems for numerical solution of partial differential equations - A review*, J. Comput. Phys., 47 (1982), pp. 1–108.
- [44] J. VILLASENOR AND O. BUNEMAN, *Rigorous charge conservation for local electromagnetic field solvers*, Comp. Phys. Comm, 69 (1992), pp. 306–316.
- [45] T. WEILAND, *Eine Methode zur Lösung der Maxwellschen Gleichungen für sechskomponentige Felder auf diskreter Basis*, AEÜ, 14 (1977), pp. 116–119.
- [46] T. WESTERMANN, *Optimization by numerical simulation of the focussing properties of self-magnetically insulated ion diodes*, Appl. Phys. Lett., 58 (1991), p. 696.
- [47] —, *CPU-intensive Simulationsrechnungen für die Hochspannungsanlage KALIF (Status und Perspektiven)*, in Supercomputing und Visualisierung, W. Hohenhinnenbusch, ed., KfK-Bericht 5184, Kernforschungszentrum Karlsruhe, 1993, pp. 11–20.
- [48] —, *Numerical modelling of the stationary Maxwell-Lorentz system*, Int. J. Num. Mod., 7 (1994), pp. 43–68.
- [49] K. S. YEE, *Numerical solution of initial boundary value problems involving Maxwell's equations in isotropic media*, IEEE Trans. Ant. Prop., AP-14 (1966), pp. 302–307.