

# ABSCHLUSSBERICHT

## 1 Allgemeine Angaben

DFG-Geschäftszeichen: Schu 1016/6-1, Schu 1016/6-2

Projektnummer: 282359752

Titel des Projekts:

Schnelle Zeitbereichsmethoden zur Analyse von Komponenten der Photonik

Name des Antragstellers: apl. Prof. Dr.-Ing. Dirk Schulz

Dienstanschrift/en: Otto-Hahn-Straße 4, 44227 Dortmund

Berichtszeitraum (gesamte Förderdauer): 01.09.2017-31.08.2020, 1.12.2021-30.11.2024

## 2 Zusammenfassung / Summary

Zusammenfassung: Der Entwurf und die Analyse von Komponenten der Photonik und der THz-Technik erfordern hochentwickelte Zeitbereichsverfahren zur elektromagnetischen Feldberechnung unter Berücksichtigung von nichtlinearen Materialeigenschaften. Unter Anwendung einer Faber-Polynom-basierten Approximation des Propagators kann im Vergleich zu konventionellen Verfahren auch bei sehr feiner Diskretisierung die Zeitschrittweite nunmehr bei hoher Genauigkeit mit einer deutlichen Reduzierung der Rechenzeit höher angesetzt werden. Methoden mit dem Ziel einer weiteren Steigerung der Rechenzeiteffizienz können eingesetzt werden, indem durch Einführung lokaler Operatoren die Vorteile einer räumlich ungleichförmigen Diskretisierung mit den erfolgreichen Eigenschaften von Faber-Polynom-basierten Approximationen des Propagators kombiniert werden, aber auch nichtlineare Materialeigenschaften berücksichtigt werden können. Verfahren sind entwickelt worden, mit denen im Ergebnis die immer wichtiger werdenden Simulationen und Analysen von multiphysikalischen Systemen unter Einbeziehung der elektromagnetischen Feldberechnung mit geringer Rechenzeit sowie hoher Genauigkeit unter Einbeziehung von Methoden der Modellreduktion und der Parallelisierung der Algorithmen realisierbar sind.

Summary: The design and analysis of components in photonics and THz technology require advanced time-domain methods for electromagnetic field calculations that take into account nonlinear material properties. By applying a Faber polynomial-based approximation of the propagator, it is now possible to use larger time step sizes with high accuracy and a significant reduction in computation time, even with very fine discretization, compared to conventional methods. Methods aimed at further increasing computational efficiency can be implemented by introducing local operators that combine the advantages of spatially non-uniform discretization with the successful properties of Faber polynomial-based approximations of the

propagator while also considering nonlinear material properties. Techniques have been developed that enable increasingly important simulations and analyses of multiphysical systems, incorporating electromagnetic field calculations with low computation times and high accuracy, along with methods for model order reduction and parallelization of algorithms.

### 3 Wissenschaftlicher Arbeits- und Ergebnisbericht

Die Motivation für dieses Vorhaben resultiert vor allem aus dem Ziel, den Propagator so zu approximieren, dass einerseits die tatsächlich vorhandene Bandbreite des Signals präzise erfasst wird und andererseits die für die Stabilität der Algorithmen erforderliche Zeitschrittweite deutlich erhöht sowie die Recheneffizienz bei gleichzeitig hoher Genauigkeit gesteigert werden kann. Zu diesem Zweck sollte der Propagator auf Grundlage des vorliegenden Eigenwertspektrums unter Verwendung geeigneter Basisfunktionen entwickelt werden, ohne dass dabei explizit die Eigenwerte berechnet werden müssen.

Bei der Umsetzung sollten zudem die typischen Ansätze der Optik zur Wahl von Einhüllendenfunktionen zur Approximation des Propagators auch für lineare Problemstellungen untersucht werden. Neben der ursprünglichen Zielsetzung wurden außerdem lineare und nichtlineare Materialmodelle einbezogen, mit denen aktive Bauelemente bevorzugt über die Einbindung von Ratengleichungen beschrieben werden können. Diese Vorgehensweise ermöglicht es, multiphysikalische Problemstellungen zu beschreiben, beispielsweise in Systemen der Photonik und THz-Technik, in denen die Wechselwirkung zwischen elektromagnetischer Wellenausbreitung und Ladungsträgertransport eine entscheidende Rolle spielt.

Folgende Aspekte waren bei den Untersuchungen wichtig:

- Besonders hervorzuheben ist die effiziente Approximation der Exponentialintegratoren mithilfe von Faber-Polynomen. Zu Beginn wurde ein elliptischer Konvergenzbereich betrachtet. Die Analyse des Eigenwertspektrums zeigte, dass durch eine gezielte Auswahl der Jordan-Kurven das Gebiet der vorhandenen Eigenwerte präziser abgegrenzt werden kann, was potenziell zu einer Verbesserung der Effizienz führt [1]. Eine weitere Eingrenzung des Eigenwertgebiets durch Vielecke könnte zusätzliche Effizienzgewinne ermöglichen. Die Form des Eigenwertgebiets wird maßgeblich durch Randbedingungen sowie verlustbehaftete Medien beeinflusst. In einem rein verlustfreien Medium liegen die Eigenwerte aufgrund der räumlichen Diskretisierung auf der imaginären Achse. Im Gegensatz dazu sind die Realteile der Eigenwerte stark von den spezifischen Eigenschaften der Randbedingungen und den verlustbehafteten Medien abhängig. Diese Eigenschaften sind zu berücksichtigen und fanden nicht nur Anwendung bei linearen, sondern auch bei nichtlinearen Materialmodellen.
- Der Ansatz zur Entwicklung auf Basis von Faber-Polynomen könnte dahingehend modifiziert werden, dass statt globaler Propagatoren für spezifische Bereiche lokale Propagatoren definiert werden. Diese würden sich an der räumlichen Diskretisierung sowie den besonderen Materialmodellen des jeweiligen Untersuchungsgebiets orientieren und somit eine zusätzliche Effizienzsteigerung ermöglichen können, denn für den gesamten Raum wird eine globale (nichtlokale) Zeitschrittweite festgelegt, während die Approximation der lokalen Propagatoren in Abhängigkeit von der räumlichen

Diskretisierung des jeweiligen Bereichs erfolgt. In Bereichen mit einer räumlich groben Diskretisierung kann eine niedrigere Entwicklungsordnung gewählt werden als in dem Bereich mit der räumlich feineren Diskretisierung. Genau diese Idee kann zu einer Effizienzsteigerung führen. Der gesamte Lösungsvektor würde in separate Lösungsvektoren für jedes unterschiedlich diskretisierte Gebiet unterteilt, auf die dann die lokalen Propagatoren angewendet werden. Die Gesamtlösung resultiert aus der Superposition dieser Teillösungen. Dieser Ansatz weist Ähnlichkeiten zu expliziten Lösungsverfahren auf, bei denen lokale Zeitschrittweiten verwendet werden, um die Zeitschrittweite an die unterschiedlichen räumlichen Diskretisierungen in verschiedenen Gebieten anzupassen [2,3].

Auf der Grundlage der mit der Finiten-Differenzen-Methode räumlich diskretisierten Maxwell'schen Gleichungen erfolgte die Lösung des entstehenden Systems gekoppelter gewöhnlicher Differentialgleichungen mithilfe eines zeitabhängigen Exponentialintegrators als Propagator. Dieser wirkt auf eine Startfeldverteilung und ist basierend auf einer Systemmatrix zu approximieren. Der Exponentialintegrator wurde unter Berücksichtigung des Eigenwertspektrums der Systemmatrix nach geeigneten Basisfunktionen entwickelt.

Die Arbeiten lassen sich in folgende Bereiche unterteilen: Zunächst erfolgte die präzise Approximation des Exponentialintegrators über Faber-Polynome für lineare Anwendungen, gefolgt von nichtlinearen Anwendungen sowie der Entwicklung parallelisierbarer lokaler Propagatoren, die unterschiedliche Materialien und räumliche Diskretisierungen berücksichtigen. Abschließend wird die „Proper Orthogonal Decomposition“-Methode zur Modellreduktion mit dem Faber-Polynom basierten Ansatz kombiniert.

### **Approximation der Exponentialintegratoren für lineare Anwendungen**

Die Auswahl der Faber-Polynome als Basisfunktionen ermöglicht eine äußerst präzise Approximation des Exponentialintegrators, wobei die Polynome über Rekursionsgleichungen bestimmt werden können. Durch die Eingrenzung des Eigenwertgebiets auf ein elliptisches Konvergenzgebiet wird die Effizienz im Vergleich zu herkömmlichen Zeitbereichsverfahren (Finiten-Differenzen-Methode, Finiten-Integrations-Technik) gesteigert. Die Halbachsen der Ellipse definieren das Gebiet der komplexen Eigenwerte, wobei Abschätzungen in Abhängigkeit von den spektralen Eigenschaften der linearen Materialmodelle, den Randbedingungen und der räumlichen Diskretisierung entwickelt wurden.

Die Faber-Polynome sind besonders geeignet für hohe Genauigkeiten. Eine festgelegte Genauigkeit kann mit deutlich geringerem Rechenaufwand erreicht werden als bei traditionellen Verfahren. Zudem ermöglicht dieser Ansatz Zeitschritte, die deutlich größer sind als bei herkömmlichen Methoden. Das Verfahren zur Festlegung der Zeitschrittweite ist effektiv von dem zur räumlichen Diskretisierung entkoppelt. Die Ergebnisse sind ausführlich in [1] dargestellt.

Für die Anregung von Wellen im Simulationsgebiet müssen zeitabhängige Quellterme in den Propagationsalgorithmus integriert werden. Diese Anregung erfolgt nur in einem begrenzten Raum, sodass bei der Approximation der Partikularlösung lediglich das Spektrum der Systemmatrix für diesen Bereich berücksichtigt wird. Dadurch kann ein reduzierter Exponentialintegrator verwendet werden, was zu einer effizienten Einbindung der Quellenanregung führt,

denn interessanterweise kann die Propagation einschließlich der Quellen über eine erweiterte Systemmatrix beschrieben werden, deren Dimension nur geringfügig größer ist als die ursprüngliche Systemmatrix ohne Quellenanregung. Dies vermeidet die Auswertung zusätzlicher Matrixfunktionen und ergänzt die Vorschrift für die Feldlösung durch eine Entwicklung der Quellverteilung nach geeigneten Basisfunktionen. Eine Systemmatrix geringfügig größerer Dimension entsteht, deren Eigenwertspektrum sich von dem Eigenwertspektrum der ursprünglichen Systemmatrix nicht ändert. Dies ist entscheidend für die Approximation des Exponentialintegrators, da nur die Eigenschaften der ursprünglichen Systemmatrix in dessen Entwicklung eingehen [4]. Zusätzlich wurde ein Einhüllendenansatz eingeführt, der eine präzisere Erfassung der Quellenanregung ermöglicht und keine Näherungen erfordert [5].

Wie bereits oben dargestellt, ermöglicht die Faber-Polynom-Methode eine sehr hohe Zeitschrittweite, solange das durch die Jordan-Kurven eingegrenzte Konvergenzgebiet auf einen Einheitskreis abgebildet wird, was die gleichmäßige Konvergenz des Exponentialintegrators gewährleistet. Die Wahl der Jordan-Kurven beeinflusst die Approximationsordnung. Ellipsen grenzen den Bereich der Eigenwerte im Eigenwertraum ein, die in das Konvergenzgebiet fallen. In diesem Fall lassen sich die Faber-Polynome sowie die entsprechenden Entwicklungskoeffizienten analytisch angeben.

Aufgrund der Struktur des Eigenwertspektrums sind jedoch auch Kurven denkbar, die den Eigenwertraum enger erfassen, wie beispielsweise Begrenzungen durch Dreiecke oder gerundete Rechtecke sowie beliebige Vielecke. Die Untersuchung dieser Alternativen ist sinnvoll, da das durch eine Ellipse begrenzte Gebiet auch Teilbereiche ohne Eigenwerte enthält. Bei der Umsetzung musste das definierte Gebiet mithilfe der Schwarz-Christoffel-Transformation auf einen Einheitskreis abgebildet werden. Im Gegensatz zu einem Ellipsengebiet müssen jedoch sowohl die Koeffizienten der Entwicklung der Schwarz-Christoffel-Transformation als auch die korrespondierenden Faber-Polynome numerisch bestimmt werden.

Nicht nur die Genauigkeit der Approximation hinsichtlich der Entwicklungsordnung und Zeitschrittweite wurde untersucht, sondern auch die Genauigkeit der numerisch bestimmten Koeffizienten. Bei den Untersuchungen der Konvergenzeigenschaften in Abhängigkeit der gewählten Approximationsordnung zeigte sich, dass bei einer ausreichend hohen Entwicklungsordnung eine hohe Genauigkeit erreicht wurde. Höhere Ordnungsterme liefern zwar einen geringen aber nicht zu vernachlässigenden Beitrag zur Approximation. Aufgrund der Notwendigkeit der Einbeziehung vieler Faber-Polynome in die Approximation ist die Effizienz hinsichtlich der Rechenzeit geringer als bei Ansätzen mit Ellipsen, Dreiecks-Ansätzen oder gerundeten Rechtecken.

Bei allen Betrachtungen wurde die Struktur des Eigenwertspektrums in Bezug auf Verlustmechanismen und Randbedingungen berücksichtigt, da beide Faktoren einen wesentlichen Einfluss auf das Eigenwertspektrum haben [6,7]. Neben der gleichförmigen Diskretisierung erfolgte auch eine Untersuchung des Eigenwertgebiets bei ungleichförmiger Diskretisierung. Diese hat jedoch keinen wesentlichen Einfluss auf die oben genannten Ergebnisse. Daher wurde ebenso auf die Betrachtung des nichtlinearen Falls verzichtet, da die gewonnenen Erkenntnisse übertragbar sind. Sie gelten für die erweiterte Systemmatrix, deren Eigenwertspektrum mit dem der Systemmatrix im linearen Fall übereinstimmt [8].

## Approximation von Exponentialintegratoren für nichtlineare Anwendungen

Die Verfahren wurden so erweitert, dass auch nichtlineare Materialmodelle berücksichtigt werden können. Diese ermöglichen neben der Modellierung verlustbehafteter Medien auch die Modellierung aktiver Medien. Dies geschieht auf physikalisch sinnvolle Weise, da die das aktive Medium beschreibenden Ratengleichungen einbezogen werden und beispielsweise bei der Verstärkung auftretende Sättigungserscheinungen erfasst werden.

Bei der Berücksichtigung des nichtlinearen Materialverhaltens ist in der Regel eine semilineare Darstellung zu wählen, die sich aus einer Linearisierung der Maxwellschen Gleichungen als nichtlineares partielles Differentialgleichungssystem ergibt. Diese Darstellung ermöglicht nach einer räumlichen Approximation die Lösung mithilfe von Exponentialintegratoren. Im Vergleich zur Lösung mit einem ausschließlich linearen Operator sind dabei zusätzliche Matrixoperationen erforderlich, die durch den auftretenden nichtlinearen Operator bedingt sind. Dies erhöht den Rechenaufwand während der Propagation. Um den Rechenaufwand deutlich zu reduzieren, wurde folgende Lösung entwickelt:

Auf Grundlage der Linearisierung zu jedem Zeitschritt mit dynamischer Bestimmung einer Jacobi-Matrix wurde die Idee verfolgt, die Lösung analog zur Beschreibung der oben genannten Quellenanregung über eine gemeinsame zeitabhängige erweiterte Systemmatrix zu berechnen. Ein Vergleich zwischen bekannten mathematischen Verfahren und der konventionellen Finiten-Differenzen-Methode wurde angestellt. Zu den mathematischen Verfahren [9] zählen die Exponential-Euler- [9], Rosenbrock-Euler- [9,10] und Rosenbrock-Integratoren [9]. Die vorgeschlagene Idee kann durch eine Faber-Polynom-basierte Approximation des Propagators umgesetzt werden. Außerdem wurde ein Ansatz mit Lawson-Integratoren 1. und 4. Ordnung [11] untersucht, bei dem lediglich Matrix-Exponentiale auftreten, die mit Faber-Polynomen bestimmt werden.

In Bezug auf die Recheneffizienz zeigt sich, dass das Rosenbrock-Verfahren in Kombination mit dem vorgeschlagenen Konzept der Faber-Polynom basierten Approximation zu einer weiteren Steigerung der Effizienz führt. Mit diesem Ansatz muss für jeden Zeitschritt nur die Approximation des Exponentialintegrators mit erweiterter Systemmatrix ausgewertet werden, wobei die Rechengenauigkeit vergleichsweise sehr hoch bleibt. Die Ergebnisse sind ausführlich in [12] dargestellt.

### Lokale Operatoren und Parallelisierung

Bei der Aufteilung der Lösungsvektoren in Teilvektoren für getrennt voneinander unterschiedlich diskretisierte Bereiche wirken die lokalen Propagatoren zwar nur auf diese Teilvektoren, im Verlauf der Approximation mit seinen Rekursionsgleichungen und mit den damit verbundenen Matrix-Vektor-Multiplikationen wird die Dimension des resultierenden Vektors aber in Abhängigkeit von der Approximationsordnung ansteigen, so dass mit steigender Ordnung der Approximation bezüglich der Stabilität auch der Teil der Systemmatrix zu berücksichtigen ist, der auf den resultierenden Vektor höherer Dimension wirkt. Das Eigenwertspektrum genau dieser Teilmatrix der Systemmatrix ist für die Approximation heranzuziehen. Wird dieser Effekt nicht berücksichtigt, resultiert hieraus ein Kommutationsfehler. Aus den dargestellten Betrachtungen resultiert ein Zusammenhang zwischen der Approximationsordnung und der Rechenzeit. Bezüglich der Rechenzeit besteht nicht unmittelbar ein

linearer Zusammenhang zwischen Ordnung der Approximation und der Dimension des Startvektors, denn mit steigender Approximationsordnung wird die Rechenzeit für jede einzelne Matrix-Vektor-Multiplikation der Rekursionsgleichung ansteigen, denn die notwendige Dimension der Teilvektoren steigt bei jeder der Multiplikationen an. Wenn dies im Algorithmus umgesetzt wird, wird dies im Folgenden als dynamischer Ansatz bezeichnet, wird hingegen direkt die höchste Ordnung angesetzt, handelt es sich um einen statischen Ansatz.

Betrachten wir zum Beispiel zwei Gebiete mit unterschiedlicher Diskretisierung, nämlich einer feinen und einer gröberen: In dem Gebiet mit feiner Diskretisierung ist die Dimension des Lösungsvektors proportional zur Entwicklungsordnung und somit im Vergleich größer als die Entwicklungsordnung im anderen Gebiet. Beide Lösungsvektoren erstrecken sich infolge in die benachbarten Bereiche hinein. Für die Stabilität ist die Approximation des Exponentialintegrators im Gebiet mit feiner Diskretisierung entscheidend. Die Gesamtlösung ergibt sich aus der Superposition dieser beiden Lösungsvektoren, wobei unterschiedliche Approximationsordnungen der lokalen Propagatoren zugrunde liegen. Im Vergleich zu gängigen Methoden mit lokalen Zeitschritten ist die Schrittgröße jeder einzelnen Region in diesem Ansatz bereits mit einer vordefinierten globalen Schrittgröße synchronisiert. Artefakte in Form nicht physikalischer Reflexionen, bedingt durch eine variable räumliche Approximation, sind nicht erkennbar.

Die theoretische Komplexität wurde abgeleitet und mit praktischen Ergebnissen verglichen, um die Effizienz zu analysieren. Dabei führt die Betrachtung des statischen und dynamischen Ansatzes praktisch zu unterschiedlichen Schlussfolgerungen. Theoretisch ist die Implementierung mit dynamisch expandierenden Submatrizen erheblich weniger komplex als die Implementierung mit statischen Submatrizen. In der Praxis erzielt Letztere deutlich bessere Laufzeiten, da sie das notwendige Indizieren der Prozessschritte innerhalb des Algorithmus umgeht. Eine Umstellung von der Hochsprache MATLAB auf die Niedrigsprache C führt ebenfalls zu nahezu denselben Ergebnissen hinsichtlich der Laufzeit. Im Vergleich zwischen dem Ansatz lokaler und globaler Operatoren fällt die aufgrund der Extraktion und Zusammenstellung zusätzlich verursachte Komplexität bei der Anwendung lokaler Operatoren auf, so dass Vorteile gegenüber rein globalen Verfahren in Bezug auf die Effizienz im Ergebnis nur schwach ausgeprägt sind.

Dennoch beweist der Einsatz von Multiprocessing, dass es möglich ist, schnellere Laufzeiten mit lokalen Operatoren als mit einem globalen Operator zu erreichen. Die Parallelisierung über die GPU führt zu noch schnelleren Laufzeiten und ist für die Auswertung des Faber-Algorithmus somit deutlich vorteilhafter gegenüber dem Einsatz der CPU. Entgegen den Erwartungen führt der zusätzliche Einsatz einer CPU in Kombination mit einer GPU nicht zu einer Reduzierung der Laufzeit im Vergleich zur Verwendung nur einer GPU. Diese Aussagen treffen auch auf aktive Modelle zu, in die zusätzlich Ratengleichungen eingehen. Die Kopplung zu den Maxwell-Gleichungen erfolgt in diesen Fällen nur über den nichtlinearen Term, welcher als Beispiel auch den strahlenden Übergang beschreibt. Die Ergebnisse sind in den Arbeiten [13-15] dargestellt.

Infolge ist nur die Wahl des Ansatzes lokaler Operatoren nicht ausreichend, um die Effizienz zu steigern. Vor allem mit der Parallelisierung über die GPU können die Vorteile lokaler Operatoren ausgenutzt werden.

## Kombination mit Methoden zur Reduktion der Modellordnung

Um die Recheneffizienz zu steigern und die Komplexität der Auswertung weiter zu reduzieren, wird der „Proper Orthogonal Decomposition“- (POD)-Ansatz [16] als Methode zur Reduktion der Modellordnung mit der vorgestellten Methode zur Approximation des Exponentialintegrators kombiniert und erweitert. In diesem Zusammenhang wird ein hybrides Modell untersucht, in dem ein mit einem vollwertigen Modell (Full order model, FOM), und mit hoher Zeitschrittweite, ermittelte POD-Basis für die Berechnung der Propagation eingesetzt wird (Reduced order model, ROM). Auf diese Weise wird das zeitliche Verhalten extrapoliert, wobei die Genauigkeit mit den Energien in den einzelnen POD-Moden überprüft werden kann. Steigt die Energie der POD-Mode zu dem niedrigsten Eigenwert über eine kritische Grenze, dann ist die POD-Basis neu zu ermitteln. Es hat sich erwiesen, dass die Systemordnung durch die Verwendung des POD-Verfahrens in Verbindung mit dem Faber-Ansatz erheblich reduziert werden kann. Die physikalischen Eigenschaften des Systems werden unverändert beschrieben und die Genauigkeit war im Vergleich zur konventionellen FDTD-Methode außergewöhnlich hoch.

Insbesondere wurde die Laufzeit des Faber-Ansatzes signifikant verringert, da die Berechnung der Propagation mehr Zeit in Anspruch nimmt als die Bestimmung der POD-Basis und die Reduktion auf den Unterraum. Ein geeignetes Kriterium für den Wechsel vom reduzierten Modell (ROM) zum vollständigen Modell (FOM) wurde entwickelt.

Zusammenfassend lässt sich sagen, dass das POD-Verfahren besonders gut für hochdimensionale Modelle mit langer Simulationszeit geeignet ist. Sobald das System ausreichend trainiert ist, finden die Berechnungen der nachfolgenden Intervalle fast immer im niederdimensionalen Unterraum statt und die Laufzeiten sind daher kürzer.

## Zusammenfassung der Ergebnisse

Zusammenfassend folgt aus der Approximation des Propagators mithilfe von Faber-Polynomen und der Eingrenzung des Eigenwertgebiets durch ein elliptisches Konvergenzgebiet ein erheblicher Erkenntnisgewinn. Im Gegensatz zu herkömmlichen Zeitbereichsverfahren ermöglicht der Exponentialintegrator eine präzise und zeiteffiziente Berechnung mit einer sehr hohen Zeitschrittweite. Dies gilt besonders für die Anwendung einfacher Jordan-Kurven zur Begrenzung des Eigenwertspektrums. Zudem ist der Algorithmus darüber hinaus parallelisierbar, da die dargestellte Approximation des Propagators der Klasse der expliziten Verfahren zuzuordnen ist.

Die Methoden zur Nutzung von Einhüllendenansätzen sowie der effektiven Einbindung von Quellen und Nichtlinearitäten sind besonders hervorzuheben, da sie in der bestehenden Literatur zu Faber-Polynomen für die Maxwell-Gleichungen nicht behandelt wurden. Während die mathematischen Grundlagen für die effektive Einbindung der Nichtlinearität bereits formuliert wurden, blieb die numerische Lösung nichtlinearer Probleme in der Elektrodynamik auf Basis dieser Ideen bislang unbeachtet. Die erzielten Ergebnisse stellen jedoch einen bedeutenden Fortschritt in diesem Bereich dar.

Die Effizienz lokaler Methoden leidet unter zusätzlicher Komplexität durch Extraktion und Zusammenstellung von Vektoren im Vergleich zu globalen Verfahren. Dennoch zeigt sich, dass durch Einsatz des Multiprocessing schnellere Laufzeiten ermöglicht werden, insbeson-

dere durch GPU-basierte Parallelisierung des Faber-Algorithmus. Eine Kombination aus einer CPU- und GPU-basierter Umsetzung führt jedoch nicht zu einer Laufzeitreduktion. In praktischen Vergleichen erweist sich die Implementierung mit statischen Submatrizen als effizienter im Vergleich zu dynamischen Ansätzen, obwohl letztere Ansätze theoretisch mit einer geringeren Komplexität verbunden sind. Ein Wechsel von MATLAB zu C führt ebenfalls zu ähnlichen Laufzeitergebnissen. Auch aktive Modelle sind von diesen Erkenntnissen betroffen. Die Wahl lokaler Operatoren allein reicht im Ergebnis nicht zur Effizienzsteigerung aus. Bei Nutzung von GPU-Parallelisierung können jedoch Vorteile realisiert werden.

Die Anwendung des POD-Verfahrens in Kombination mit dem Faber-Ansatz ermöglicht eine signifikante Reduktion der Systemordnung. Dabei bleiben die physikalischen Eigenschaften des Systems unverändert, und die Genauigkeit übertrifft die der konventionellen Finite-Difference Time-Domain (FDTD)-Methode. Die Laufzeit des Faber-Polynom basierten Ansatzes wurde deutlich verringert. Das POD-Verfahren ist besonders geeignet für hochdimensionale Modelle mit langen Simulationszeiten.

### Umgang mit Forschungsdaten

Im Rahmen des Projekts wurde der Umgang mit Daten gemäß den Richtlinien der DFG und der TU Dortmund sichergestellt. Urheberrechtsbestimmungen und Datenschutz wurden beachtet, und potenzielle Risiken identifiziert und minimiert.

Die numerisch gewonnenen Forschungsdaten wurden validiert, während Rohdaten während der Simulation erfasst wurden. Diese dienten zur Erstellung von Diagrammen und Bildern. Die Forschungswerkzeuge ermöglichten die Generierung digitaler Rohdaten sowie aktueller Metadaten wie Simulationsbedingungen. Die Roh- und Metadaten wurden auf einem Network Attached Storage (NAS)-System gespeichert, dessen Kosten durch die Grundfinanzierung der Fakultät Elektrotechnik gedeckt wurden. Das NAS ermöglichte eine gemeinsame Nutzung innerhalb der Forschungsgruppe, während ein sicherer Zugang über VPN erfolgte, und dient der Archivierung für mindestens zehn Jahre.

Nach Analyse und Archivierung wurden die Daten iterativ validiert, um Plausibilität sicherzustellen. Unplausible oder lückenhafte Daten führten zu einer Neuplanung des Simulationsexperiments, bis reproduzierbare Ergebnisse vorlagen.

### Publikationsverzeichnis

- [1] H. Kleene and D. Schulz, "Time Domain Solution of Maxwell's Equations using Faber Polynomials", IEEE Transactions on Antennas and Propagation, vol. 66, no. 11, pp. 6202-6208, 2018 (DOI: 10.1109/TAP.2018.2869037)
- [2] A. Demirel, J. Niegemann, K. Busch, M. Hochbruck "Efficient multiple time-stepping algorithms of higher order", Journal of Computational Physics, vol. 285, pp. 133–148, 2015 (DOI: 10.1016/j.jcp.2015.01.018)
- [3] M. J.Grote, T. Mitkova, „High-order explicit local time-stepping methods for damped wave equations“, Journal of Computational and Applied Mathematics, vol. 239, pp. 270-289, 2013 (DOI: 10.1016/j.cam.2012.09.046)
- [4] H. Kleene and D. Schulz, "On the Evaluation of Sources in highly accurate Time Domain Simulations on the Basis of Faber Polynomials", Progress in Electromagnetics Research 2018, Toyama, Japan, 2018 (DOI: 10.23919/PIERS.2018.8598215)
- [5] H. Kleene and D. Schulz, "Complex Envelope Faber Polynomial Method for the Solution of Maxwell's Equations", Opt. Quant. Electron., vol. 51, no. 12, p. 381, 2019 (DOI: 10.1007/s11082-019-2099-y)
- [6] W. Plotnikov, B. L. Inci and D. Schulz, "Investigation of conformal Mappings for the Approximation of Faber Polynomial based Propagators," 2022 IEEE MTT-S International Conference on Numerical Electromagnetic and

- Multiphysics Modeling and Optimization (NEMO), Limoges, France, 2022, pp. 1-3, (DOI: 10.1109/NEMO51452.2022.10038962)
- [7] W. Plotnikov, B. L. Inci and D. Schulz, "Evaluation of the Faber polynomial based Expansion on different Contours in a Lossy System," 2025 IEEE MTT-S International Conference on Numerical Electromagnetic and Multiphysics Modeling and Optimization (NEMO), 29.07.2025-01.08.2025, Tianjin, China, 2025
- [8] A. H. Al-Mohy and N. J. Higham, "Computing the Action of the Matrix Exponential, with an Application to Exponential Integrator", SIAM J. Sci. Comput., vol. 33, no. 2, pp. 488–511, 2011 (DOI: 10.1137/10078860)
- [9] M. Hochbruck and A. Ostermann, "Exponential integrators", May 2010. 2010, Acta Numerica, vol. 19, pp. 209–286, 2010 (DOI: 10.1017/S0962492910000048)
- [10] M. Pototschnig, J. Niegemann, L. Tkeshelashvili and K. Busch, "Time-Domain Simulations of the Nonlinear Maxwell Equations Using Operator-Exponential Methods", IEEE Trans. Antennas Propag., vol. 57, no. 2, pp. 475–483, 2009 (DOI: 10.1109/TAP.2008.2011181)
- [11] J. D. Lawson, "Generalized Runge-Kutta Processes for Stable Systems with Large Lipschitz Constants", SIAM J. Numer. Anal., vol. 4, no. 3, Intergovernmental Panel on Climate Change, pp. 372–380, 1967 (DOI: 10.1137/0704033)
- [12] H. Kleene, T. Luong and D. Schulz, "Faber Polynomial Based Approximations of Nonlinear Integrators for Electrodynamics," IEEE J. Multiscale and Multiphysics Computat. Techniques, vol. 6, pp. 41-49, 2021 (DOI: 10.1109/JMMCT.2021.3062459)
- [13] W. Plotnikov and D. Schulz, "Optimization of the Faber Polynomial based Propagator through Parallelization", 49th International Conference on Infrared, Millimeter and Terahertz Waves (IRMMW-THz), Perth, Australia, 2024 (DOI: 10.21203/rs.3.rs-5229711/v1)
- [14] W. Plotnikov, D. Schulz, "Performance analysis of faber polynomial based local propagators for photonics", Opt. Quant. Electron. 57, p. 170, 2025 (DOI: 10.1007/s11082-025-08072-9)
- [15] W. Plotnikov and D. Schulz, "Faber polynomial based Local Propagators for Laser Applications," IEEE MTT-S International Conference on Numerical Electromagnetic and Multiphysics Modeling and Optimization (NEMO'2024), Montreal, Canada, 11.08.24-14.08.24, 2024
- [16] Z. Luo, J. Gao, "A POD reduced-order finite difference time-domain extrapolating scheme for the 2D Maxwell equations in a lossy medium," Journal of Mathematical Analysis and Applications, vol. 444, pp. 433–451, 2016 (DOI: 10.1016/j.jmaa.2016.06.036)

## 4 Veröffentlichte Projektergebnisse

### 4.1 Kategorie A – Fachaufsätze in Peer Review-Zeitschriften, Beiträge zu Konferenzen mit Peer Review oder Sammelbänden sowie Buchpublikationen

- [A1] H. Kleene, D. Schulz, "Unitary Polynomial Propagator solving Maxwell's Equations allowing arbitrarily large Time Steps", IEEE Photonics Technology Letters, vol. 30, no. 2, pp. 193-196, 2018 (DOI:10.1109/LPT.2017.2780988)
- [A2] H. Kleene and D. Schulz, "Time Domain Solution of Maxwell's Equations using Faber Polynomials", IEEE Transactions on Antennas and Propagation, vol. 66, no. 11, pp. 6202-6208, 2018 (DOI: 10.1109/TAP.2018.2869037)
- [A3] H. Kleene and D. Schulz, "On the Evaluation of Sources in highly accurate Time Domain Simulations on the Basis of Faber Polynomials", Progress in Electromagnetics Research 2018, Toyama, Japan, 2018 (DOI: 10.23919/PIERS.2018.8598215)
- [A4] H. Kleene and D. Schulz, "Concept of a Complex Envelope Faber Polynomial Approach for the Solution of Maxwell's Equations", IEEE MTT-S International Conference on Numerical Electromagnetic and Multiphysics Modeling and Optimization, Reykjavik, Iceland, 2018 (DOI: 10.1109/NEMO.2018.8503125)
- [A5] H. Kleene and D. Schulz, "Complex Envelope Faber Polynomial Method for the Solution of Maxwell's Equations", Opt. Quant. Electronics, vol. 51, no. 12, p. 381, 2019 (DOI: 10.1007/s11082-019-2099-y)
- [A6] H. Kleene and D. Schulz, "Assessment of a Time Domain Beam Propagation Algorithm Based on Faber Polynomial Expansions", IEEE MTT-S Conference on Numerical Electromagnetic and Multiphysics Modeling and Optimization, Boston, USA, 2019 (DOI: 10.1109/NEMO.2019.8853810)

- [A7] H. Kleene and D. Schulz, "An explicit wide Band Time Domain Beam Propagation Algorithm based on Faber Polynomials", IEEE J. Multiscale and Multiphysics Computat. Techniques, vol. 4, pp. 282-289, 2019 (DOI: 10.1109/JMMCT.2019.2954943)
- [A8] H. Kleene, T. Luong and D. Schulz, "Faber Polynomial Based Approximations of Nonlinear Integrators for Electrodynamics," IEEE J. Multiscale and Multiphysics Computat. Techniques, vol. 6, pp. 41-49, 2021, (DOI: 10.1109/JMMCT.2021.3062459)
- [A9] W. Plotnikov, B. L. Inci and D. Schulz, "Investigation of conformal Mappings for the Approximation of Faber Polynomial based Propagators," 2022 IEEE MTT-S International Conference on Numerical Electromagnetic and Multiphysics Modeling and Optimization (NEMO), Limoges, France, 2022, pp. 1-3, (DOI: 10.1109/NEMO51452.2022.10038962)
- [A10] W. Plotnikov, T. Murawski and D. Schulz, "Local Propagators utilizing Faber Polynomial based Expansions," 2022 IEEE MTT-S International Conference on Numerical Electromagnetic and Multiphysics Modeling and Optimization (NEMO), Limoges, France, 2022, pp. 1-3, (DOI: 10.1109/NEMO51452.2022.10038518)
- [A11] W. Plotnikov and D. Schulz, "Faber polynomial based Local Propagators for Laser Applications," 2024 IEEE MTT-S International Conference on Numerical Electromagnetic and Multiphysics Modeling and Optimization (NEMO'2024), Montreal, Canada, 11.08.24-14.08.24, 2024
- [A12] W. Plotnikov and D. Schulz, "Optimization of the Faber Polynomial based Propagator through Parallelization", 49th International Conference on Infrared, Millimeter and Terahertz Waves (IRMMW-THz), Perth, Australia, 2024 (DOI: 10.21203/rs.3.rs-5229711/v1)
- [A13] W. Plotnikov, D. Schulz, "Performance analysis of faber polynomial based local propagators for photonics", Opt. Quant. Electron 57, p. 170, 2025 (DOI: 10.1007/s11082-025-08072-9)
- [A14] W. Plotnikov, B. L. Inci and D. Schulz, "Evaluation of the Faber polynomial based Expansion on different Contours in a lossy System," 2025 IEEE MTT-S International Conference on Numerical Electromagnetic and Multiphysics Modeling and Optimization (NEMO), 29.07.2025-01.08.2025, Tianjin, China, 2025

## 4.2 Kategorie B – Jede weitere Form öffentlich gemachter Ergebnisse

- [B1] H. Kleene, D. Schulz, "Investigation of a unitary explicit Algorithm for electromagnetic Time Domain Simulations", 25th International workshop on optical wave and waveguide theory and numerical modelling, Mai 2017, Eindhoven, Netherlands
- [B2] H. Kleene, D. Schulz, "An Assessment of Faber Polynomial Expansions for the Time Domain Solution of Maxwell's Equations", 26th Optical Wave & Waveguide Theory and Numerical Modelling - OWTNM, April 2018, Bad Sassendorf, Germany
- [B3] C. Spenner, H. Kleene, P. Sarapukdee, K. Kallis und D. Schulz, "Analysis of SiO<sub>2</sub>- and MgF<sub>2</sub>-Based Surface Plasmon Resonance Sensors", in 26th Optical Wave & Waveguide Theory and Numerical Modelling - OWTNM, P-21, April 2018, Bad Sassendorf, Germany