

Andreas Zeiser

Numerik – warum Mathematik doch manchmal ganz sinnvoll ist

Research S(ch)nack
HTW Berlin
12. Oktober 2021

Stabilisierte Transportgleichung auf dünnen Gittern

Gegeben sei das dünne Tensorprodukt zweier Multiskalen-FE-Räumen, d.h.

$$V_L = \sum_{|\ell|_1 \leq L+1} V_{\ell_1}^{(1)} \otimes V_{\ell_2}^{(2)}, \quad V_1^{(i)} \subset V_2^{(i)} \subset \dots \subset H^1(\Omega^{(i)}), \quad i = 1, 2$$

mit diskontinuierlicher Zeitdiskretisierung. Sei U die Lösung der schwachen Formulierung

$$a_j^{(\delta)}(U, W) = b_j^{(\delta)}(W), \quad \text{für alle } W \in \mathbb{P}^r((t_j, t_{j+1}), V_L), \quad j = 0, \dots, N$$

$$a_j^{(\delta)}(U, W) = \int_{I_j} (\partial_t U + \partial_U + \sigma U, W + \delta(\partial_t W + \partial_W)) - \langle U, W \rangle_{(t)} dt + (U_{j-1}^+, W_{j-1}^+)$$

$$b_j^{(\delta)}(W) = \int_{I_j} (f, W + \delta(\partial_t W + \partial_W)) - \langle g, W \rangle_{(t)} dt + (U_{j-1}^-, W_{j-1}^+).$$

Dann gilt mit $h = 2^{-L}$

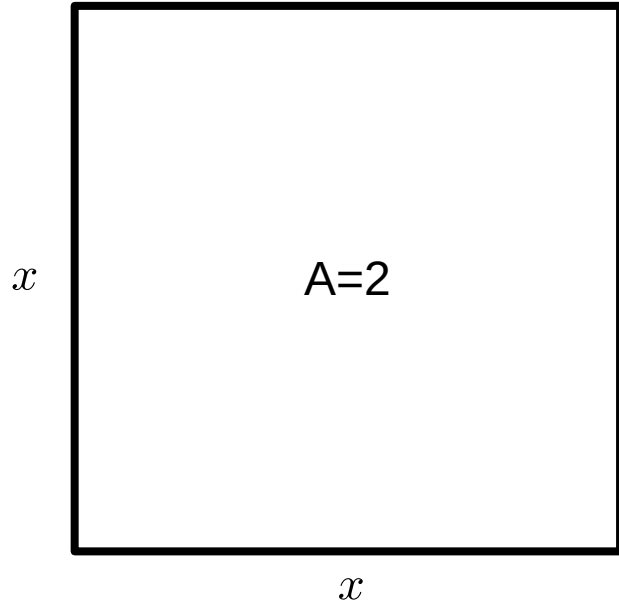
$$\|U - u\|_\delta \lesssim h^{s+1/2} (\ln h)^{1/2} \|u\|_{\mathcal{H}^{s+1}}, \quad \|u\|_{\mathcal{H}^s}^2 = \int_0^T \|\partial_t^s u\|_{L^2(\Omega)}^2 + \|u\|_{H_{\text{mix}}^s(\Omega)}^2 dt.$$

Übersicht

- Grundlagen der Numerik
- Kinetische Gleichungen
- Numerik in den Ingenieurwissenschaften

Eine Textaufgabe...

Gegeben ist ein Quadrat mit Fläche 2. Wie groß ist die Seitenlänge x ?



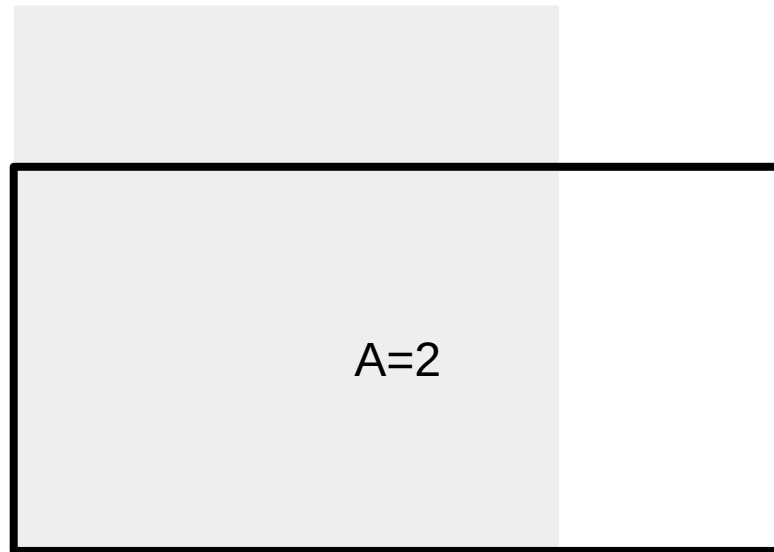
Mathematiker:

$$x^2 = 2, \quad x \geq 0 \Rightarrow x = \sqrt{2}$$

1. Algorithmus – Schritt 1

Heron-Verfahren/Babylonisches Wurzelziehen (ca. 1750 v. Chr.)

$$y_0 = \frac{2}{x_0} = 1$$



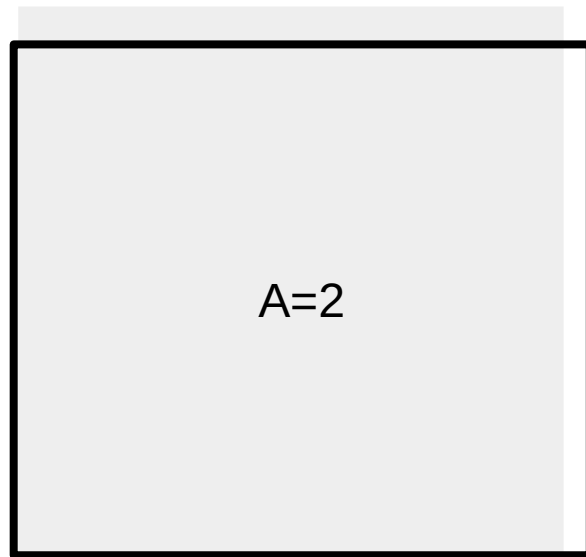
$$x_0 = 2$$

Verbesserung:

$$x_1 = \frac{1}{2}(x_0 + y_0) = \frac{3}{2}$$

1. Algorithmus – Schritt 2

$$y_1 = \frac{2}{x_1} = \frac{4}{3}$$



$$x_1 = \frac{3}{2}$$

1. Algorithmus – mathematische Formulierung

Führe folgende Iteration aus:

$$x_0 := 2$$
$$x_{n+1} := \frac{1}{2}x_n + \frac{1}{x_n}, \quad n = 0, 1, 2, \dots$$

Man erhält eine Folge von Approximationen $(x_n)_{n=0,1,\dots}$ für $\sqrt{2}$.

2. Berechnung



Quelle: http://rybn.org/human_computers/

2. Berechnung – Matlab

```
x = 2;  
for i=1:6  
    x = 0.5 * x + 1/x;  
    fprintf('%2i %30.20f\n', i, x);  
end
```

n	x_n
1	1.500000000000000000000000
2	1.41666666666666666651864
3	1.41421568627450966460
4	1.41421356237468986983
5	1.41421356237309492343
6	1.41421356237309492343

3. Konvergenz

Die Folge der Iterierten $(x_n)_n$ konvergiert quadratisch gegen $\sqrt{2}$, d.h.

$$\lim_{n \rightarrow \infty} x_n = \sqrt{2}$$

und

$$|x_{n+1} - \sqrt{2}| \leq |x_n - \sqrt{2}|^2, \quad n = 0, 1, \dots$$

3. Konvergenz – Test

n	x_n	Fehler
1	<u>1.500000000000000000000000</u>	8.58e-02
2	<u>1.41666666666666666651864</u>	2.45e-03
3	<u>1.41421568627450966460</u>	2.12e-06
4	<u>1.41421356237468986983</u>	1.59e-12
5	<u>1.41421356237309492343</u>	1.25e-16
6	<u>1.41421356237309492343</u>	1.25e-16

4. Stabilität

Wird folgende Iteration

$$x_0 := 2$$
$$x_{n+1} := \frac{1}{2}x_n + \frac{1}{x_n}, \quad n = 0, 1, 2, \dots$$

mit Gleitpunktarithmetik mit doppelter Genauigkeit ausgeführt, haben die Iterierten für große n einen maximalen Fehler von ca. $7 \cdot 10^{-16}$.

Genauer gilt für alle Häufungspunkte x^* der Folge

$$|x^* - \sqrt{2}| \leq 7 \cdot 10^{-16}$$

Fazit

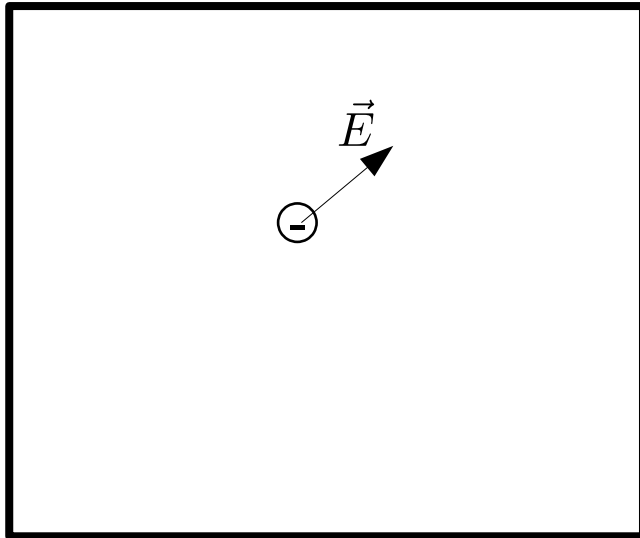
Der richtige Algorithmus mit garantierter Approximation zu jeder beliebigen Genauigkeit in optimaler Zeit.

Übersicht

- Grundlagen der Numerik
- Kinetische Gleichungen
- Numerik in den Ingenieurwissenschaften

Vlasov-Poisson – ein Elektron

Elektron im d-dimensionalen Raum
mit elektrischem Feld



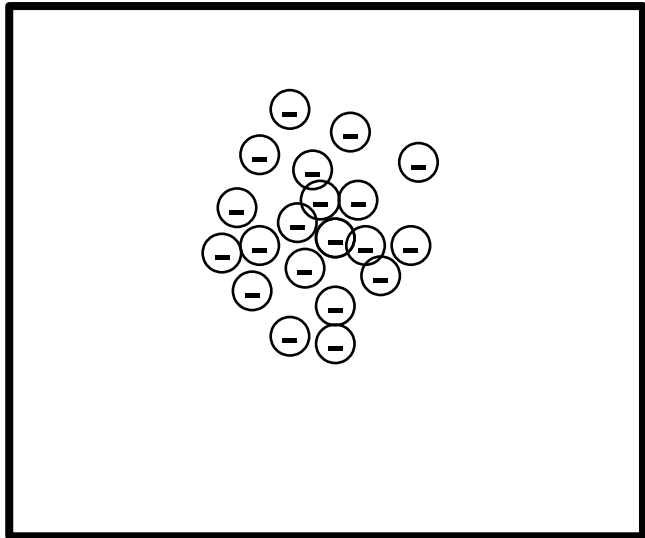
$\Omega \subset \mathbb{R}^d$

Bewegungsgleichung

$$\begin{aligned}\frac{d}{dt}\vec{x} &= v \\ \frac{d}{dt}\vec{v} &= -\frac{e}{m}\vec{E}\end{aligned}$$

Vlasov-Poisson – Elektronenverteilung im E-Feld

Elektronenverteilung



$\Omega \subset \mathbb{R}^d$

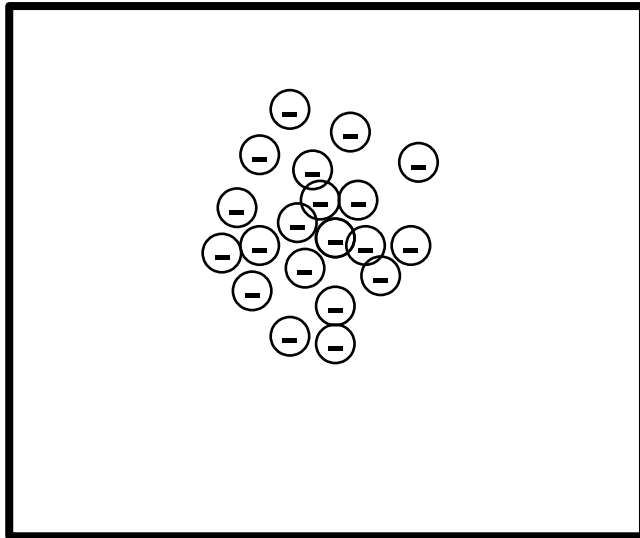
Verteilungsdichte

$$f : \mathbb{R}_0^+ \times \Omega \times \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}_0^+ \\ (t, \vec{x}, \vec{v}) \mapsto f(t, \vec{x}, \vec{v})$$

Vlasov-Poisson – kinetische Gleichung

Elektronenverteilung im d-dimensionalen
Raum mit E-Feld

Kinetische Gleichung

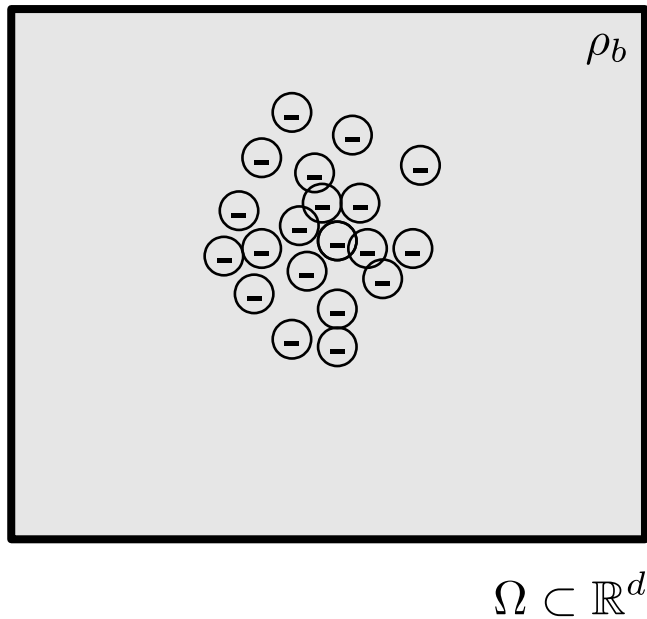


$\Omega \subset \mathbb{R}^d$

$$\partial_t f + \vec{v} \cdot \nabla_{\vec{x}} f - \frac{e}{m} \vec{E} \cdot \nabla_{\vec{v}} f = 0$$

Vlasov-Poisson

Elektronenverteilung im d-dimensionalen Raum mit selbstkonsistentem E-Feld



Kinetische Gleichung

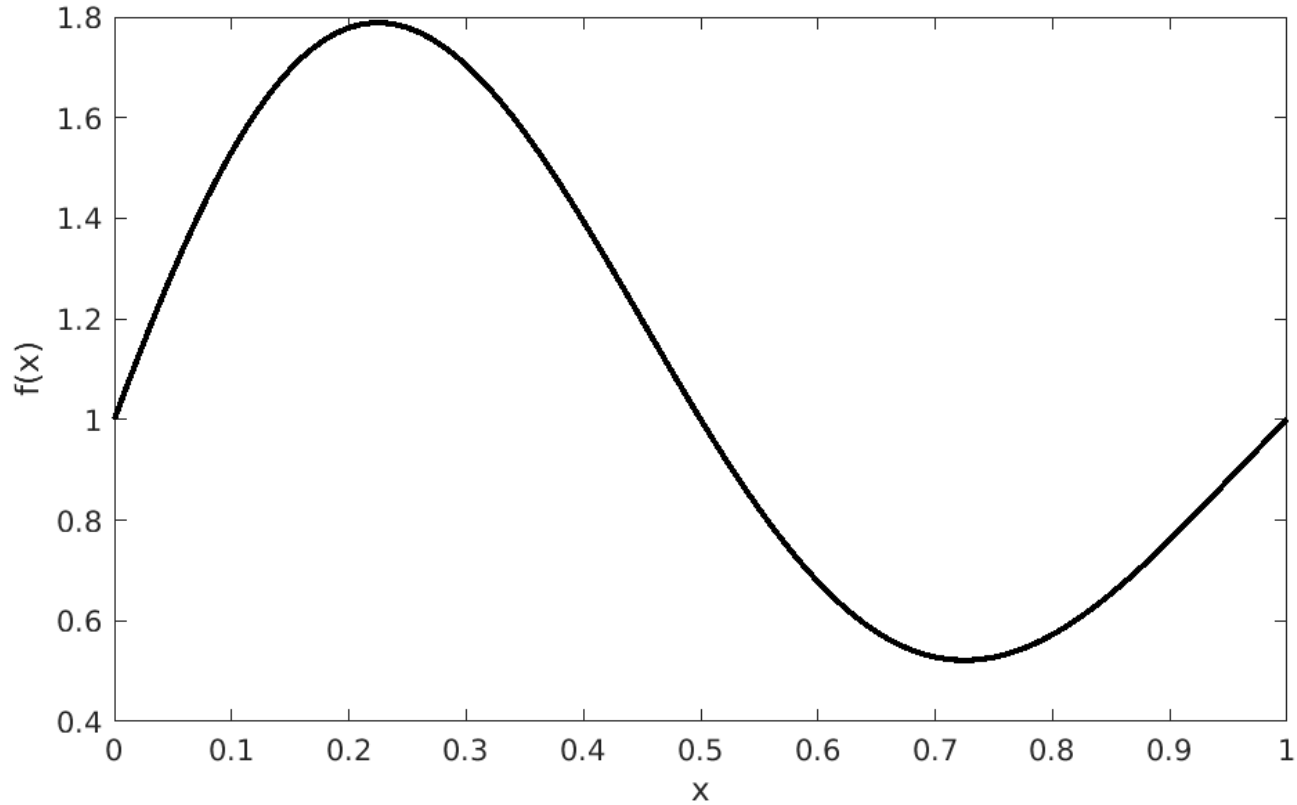
$$\partial_t f + \vec{v} \cdot \nabla_{\vec{x}} f - \frac{e}{m} \vec{E} \cdot \nabla_{\vec{v}} f = 0$$

Selbstkonsistentes E-Feld

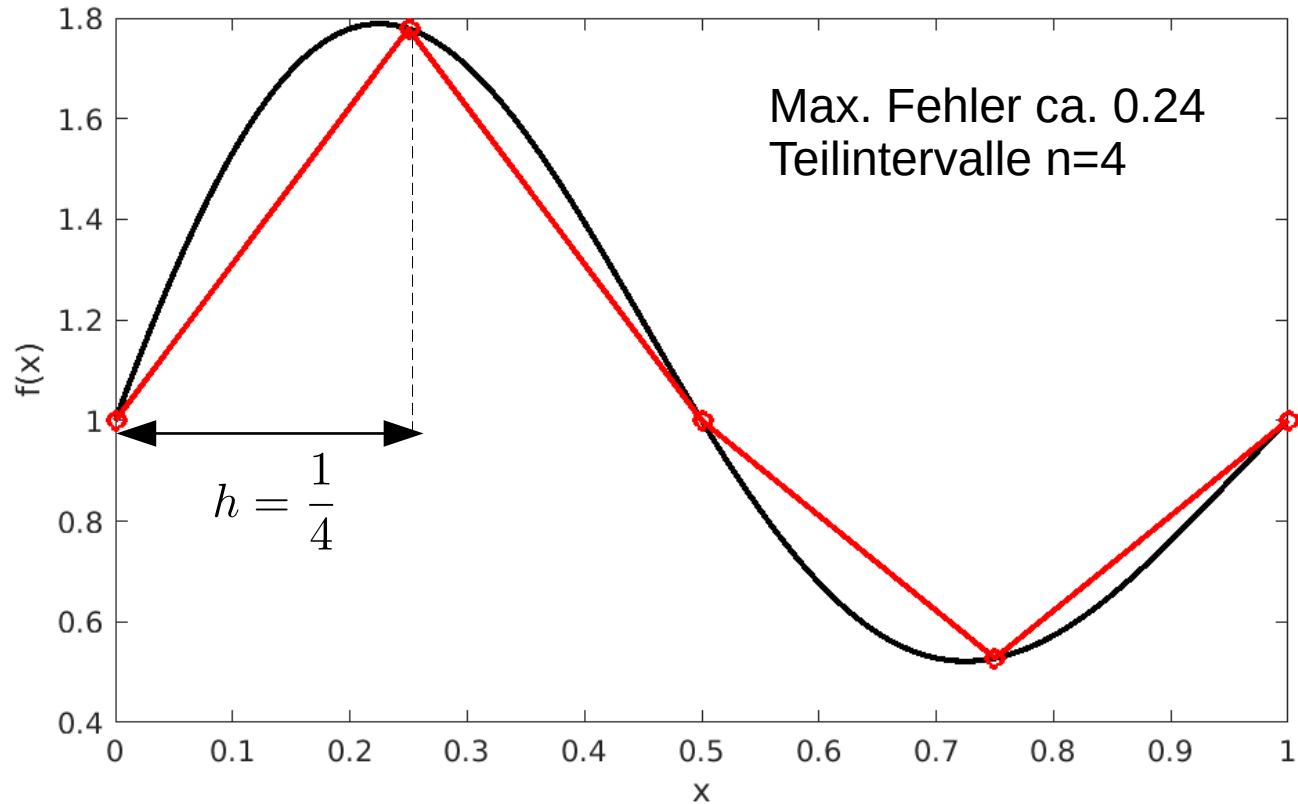
$$\Delta \phi = \rho_b - e \int_{\mathbb{R}^d} f(t, \vec{x}, \vec{v}) d\vec{v}$$
$$\vec{E} = \nabla \phi$$

mit neutralisierender Hintergrundladung ρ_b

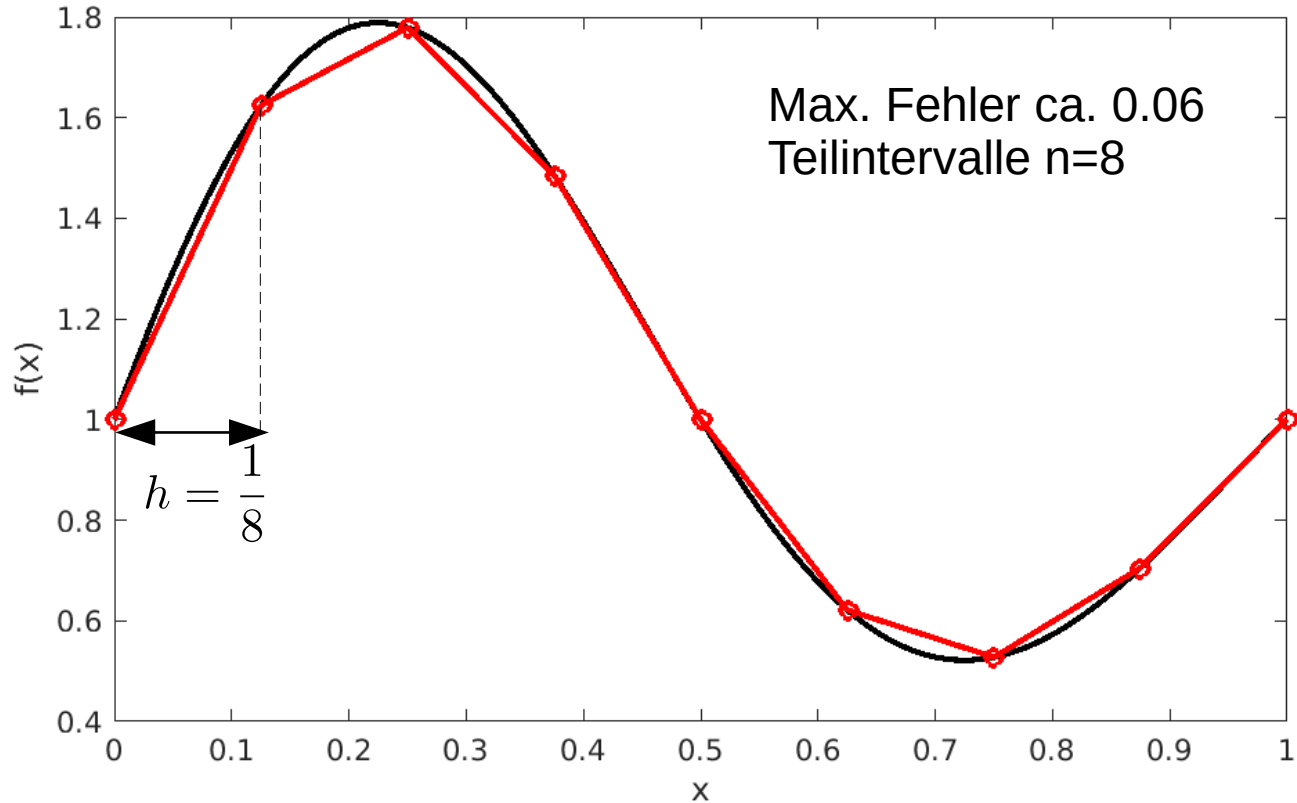
Approximation von Funktionen – $d=1$



Approximation von Funktionen – $d=1$



Approximation von Funktionen – $d=1$



Approximation von Funktionen – d=1

- Freiheitsgrade

$$N = n + 1$$

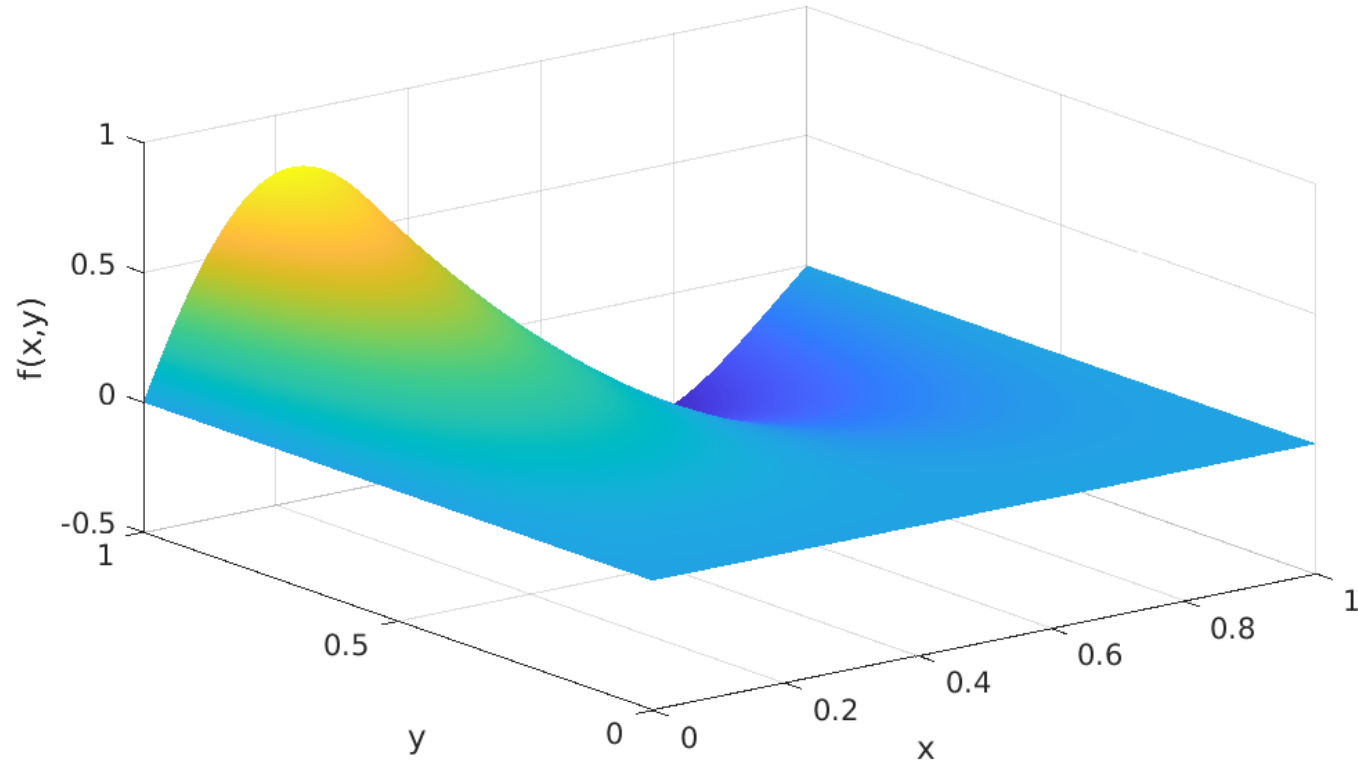
- Fehler stückweise lineare Interpolante

$$\text{Fehler} = \max_{x \in [0,1]} |f(x) - s(x)| \leq C \cdot h^2, \quad h = \frac{1}{n}$$

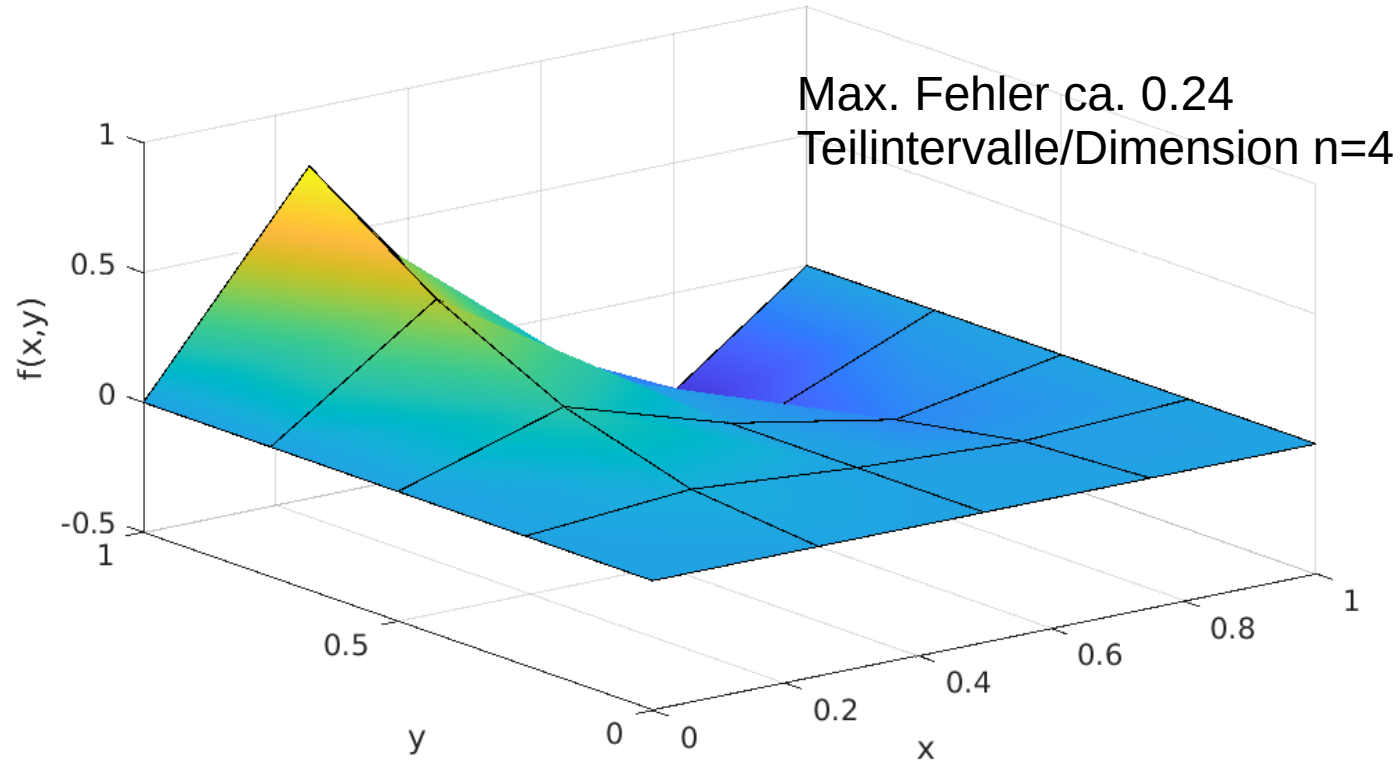
- Komplexität

$$\text{Fehler} = \max_{x \in [0,1]} |f(x) - s(x)| \leq C \cdot N^{-2}$$

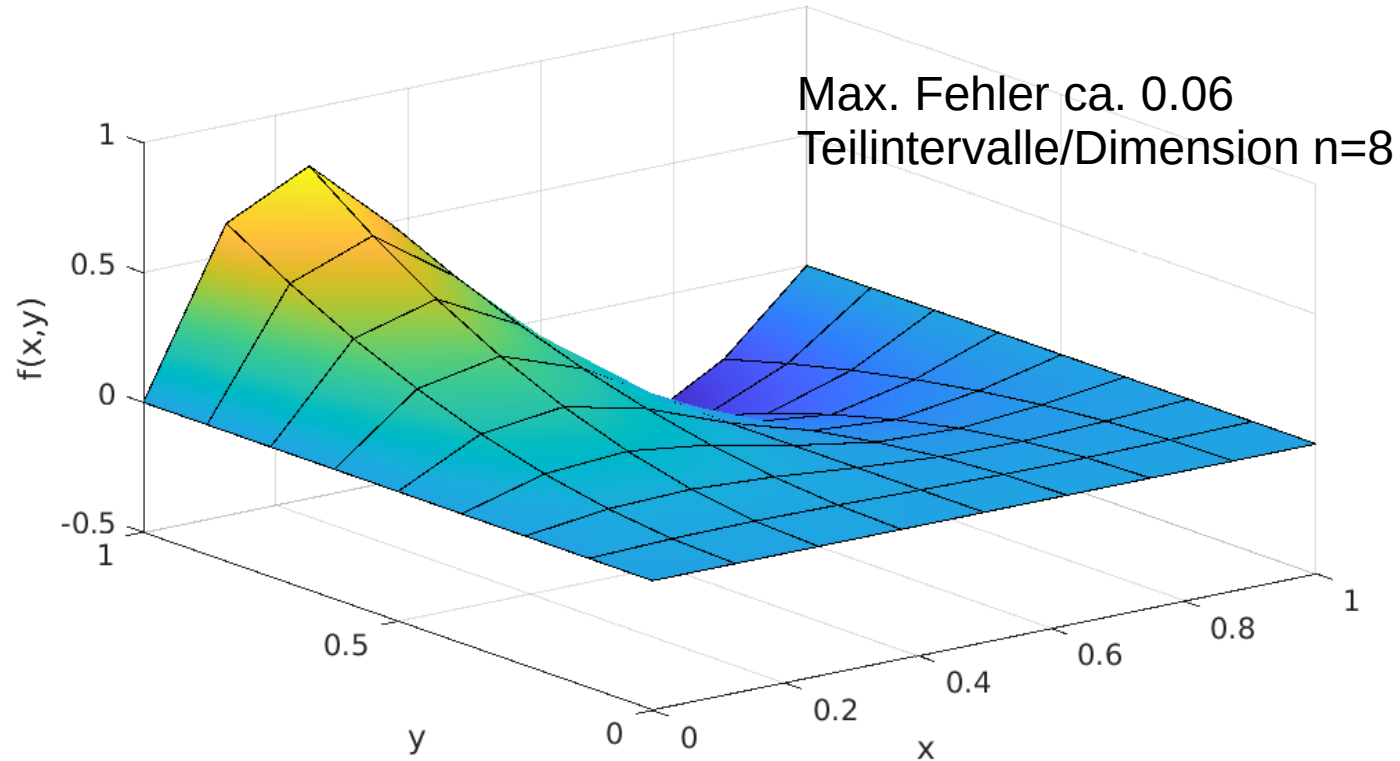
Approximation von Funktionen – $d=2$



Approximation von Funktionen – $d=2$



Approximation von Funktionen – $d=2$



Approximation von Funktionen – d=2

- Freiheitsgrade

$$N = (n + 1)^2$$

- Fehler stückweise bilineare Interpolante

$$\text{Fehler} = \max_{x \in [0,1]^2} |f(x) - s(x)| \leq C \cdot h^2, \quad h = \frac{1}{n}$$

- Komplexität

$$\text{Fehler} = \max_{x \in [0,1]^2} |f(x) - s(x)| \leq C \cdot N^{-2/2} = C \cdot N^{-1}$$

Approximation von Funktionen – d allgemein

- Freiheitsgrade

$$N = (n + 1)^d$$

Beispiel: d=6, n=100

$$N \approx 100^6 = 10^{12}$$

- Fehler stückweise d-lineare Interpolante

$$\text{Fehler} = \max_{x \in [0,1]^d} |f(x) - s(x)| \leq C \cdot h^2, \quad h = \frac{1}{n}$$

$$\text{Fehler} \approx \left(\frac{1}{100}\right)^2 = 10^{-4}$$

- Komplexität

$$\text{Fehler} = \max_{x \in [0,1]^d} |f(x) - s(x)| \leq C \cdot N^{-2/d}$$

Fehler halbieren:
8 mal mehr Freiheitsgrade

Konvergenz Algorithmus (d+d Dimensionen)

Gegeben sei die lineare Transportgleichung mit konstanten Koeffizienten

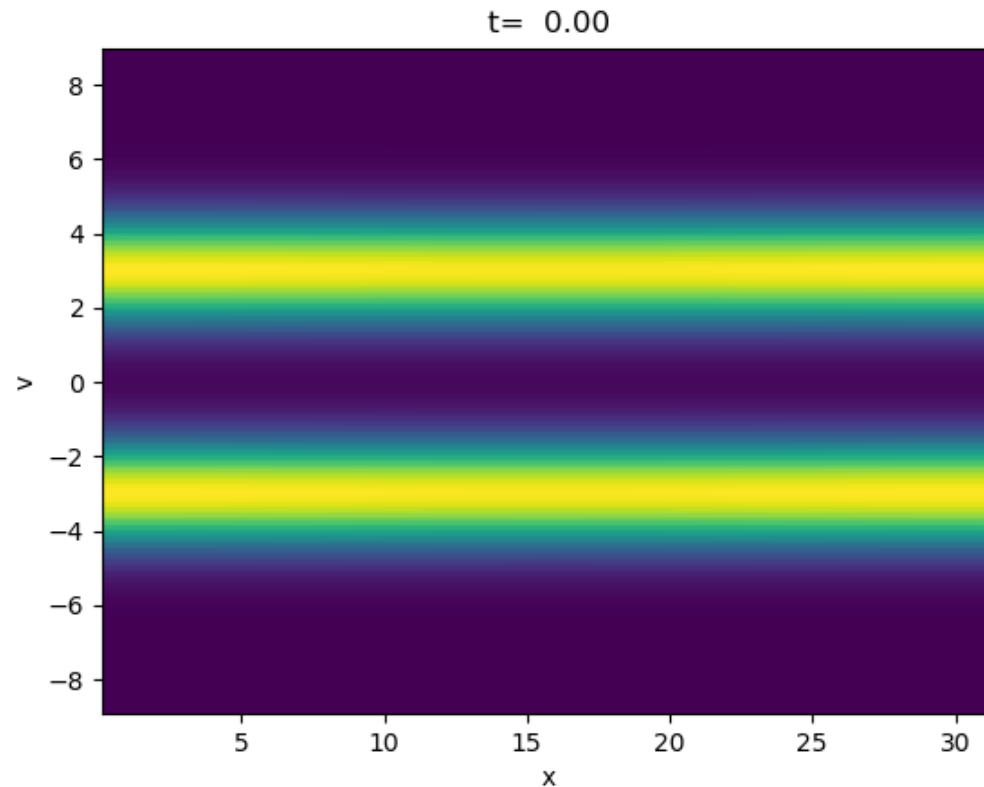
$$\partial_t f + \vec{\alpha} \cdot \nabla_{\vec{x}} f + \vec{\beta} \cdot \nabla_{\vec{v}} f = f \quad \text{in } \Omega \times \mathbb{R}^d, \quad \Omega \subset \mathbb{R}^d$$

und geeigneten Randbedingungen.

Mit dem konstruierten Algorithmus kann das Problem im wesentlichen mit der **gleichen Komplexität wie eine d-dimensionale Transportgleichung** gelöst werden.

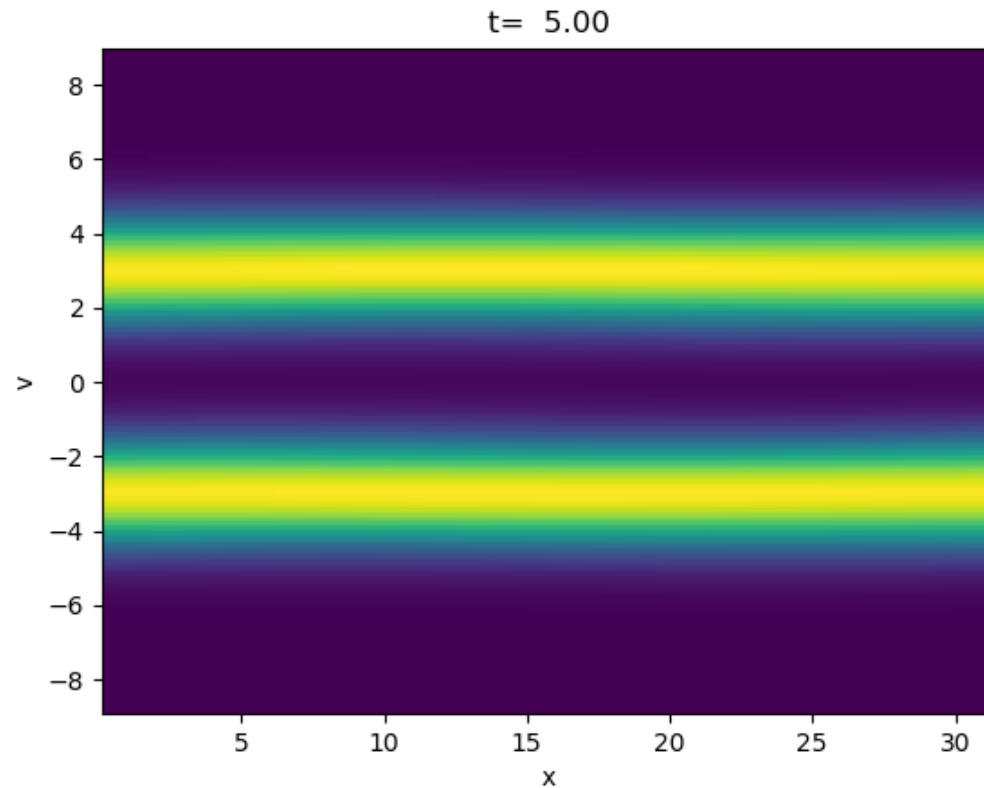
Dabei wird ein dünnes Gitter aus hierarchischen finiten Elementräumen bezüglich der beiden Variablen und eine unstetige Zeitdiskretisierung verwendet.

Vlasov Poisson 1d+1d – two-stream instability

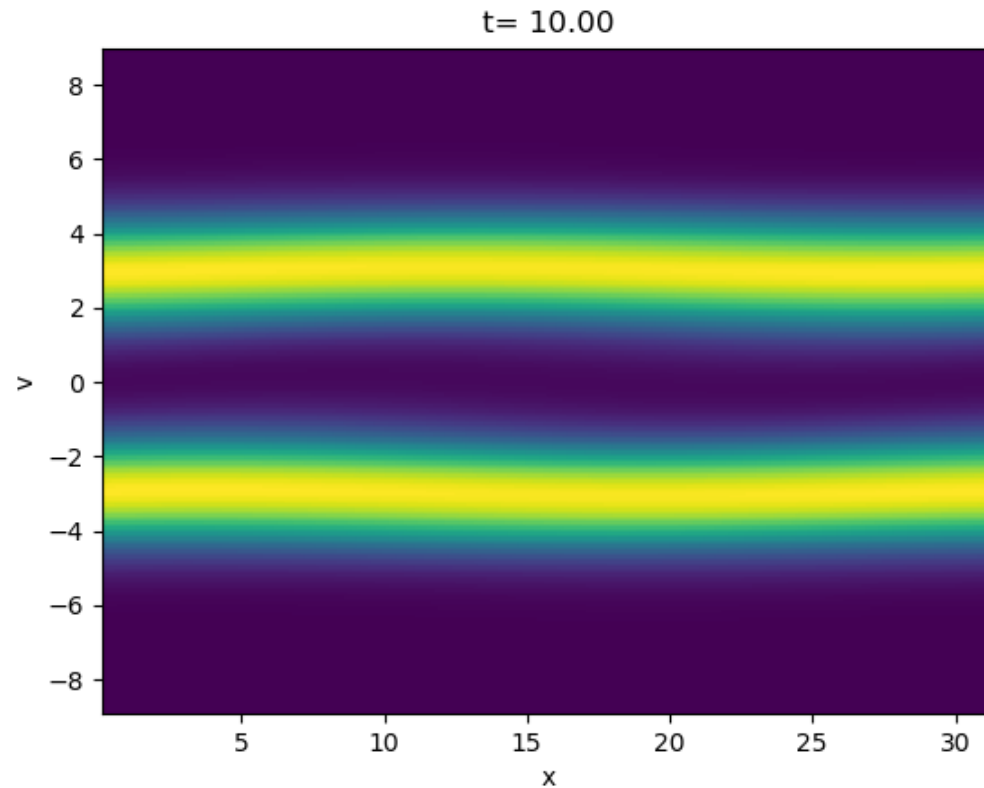


$$f(0, x, v) = \left[e^{-(v-v_0)^2/2} + e^{-(v+v_0)^2/2} \right] \cdot \left[1 + 0.1 \cos(0.2 \cdot x) \right]$$

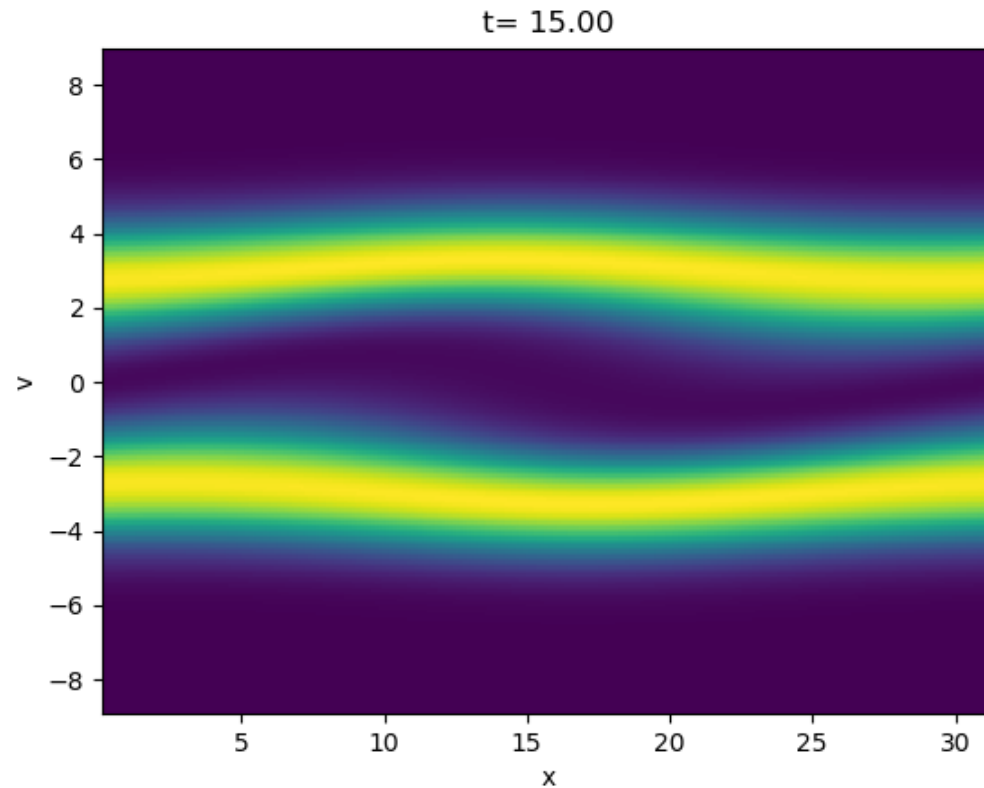
Vlasov Poisson 1d+1d – two-stream instability



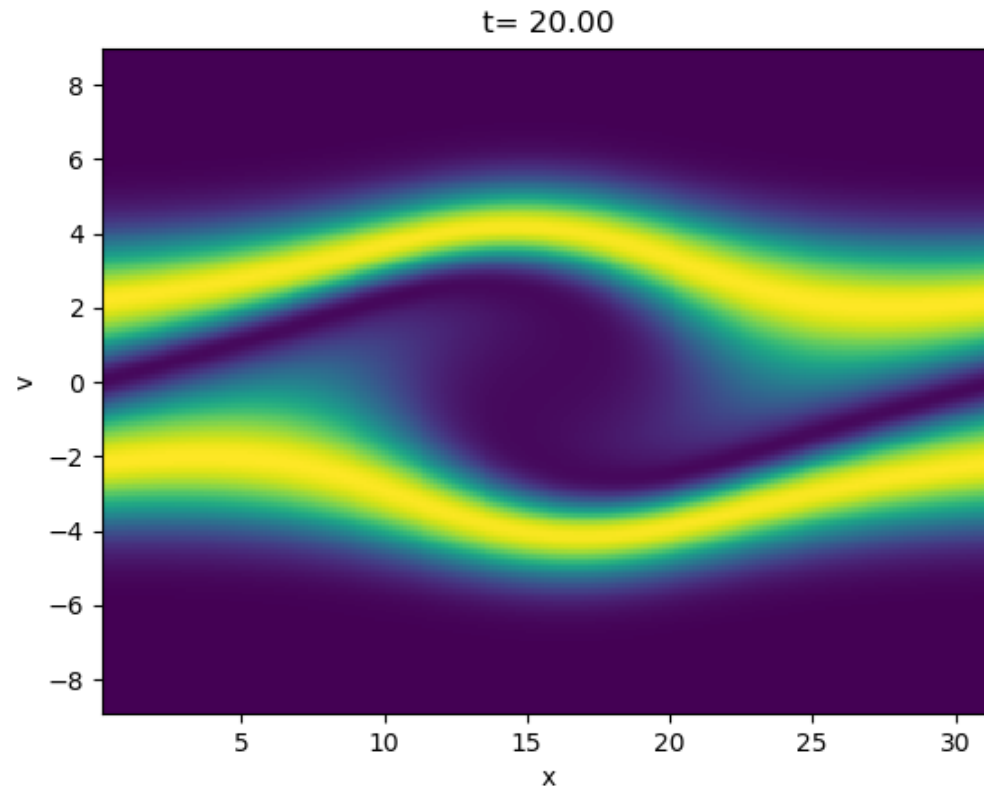
Vlasov Poisson 1d+1d – two-stream instability



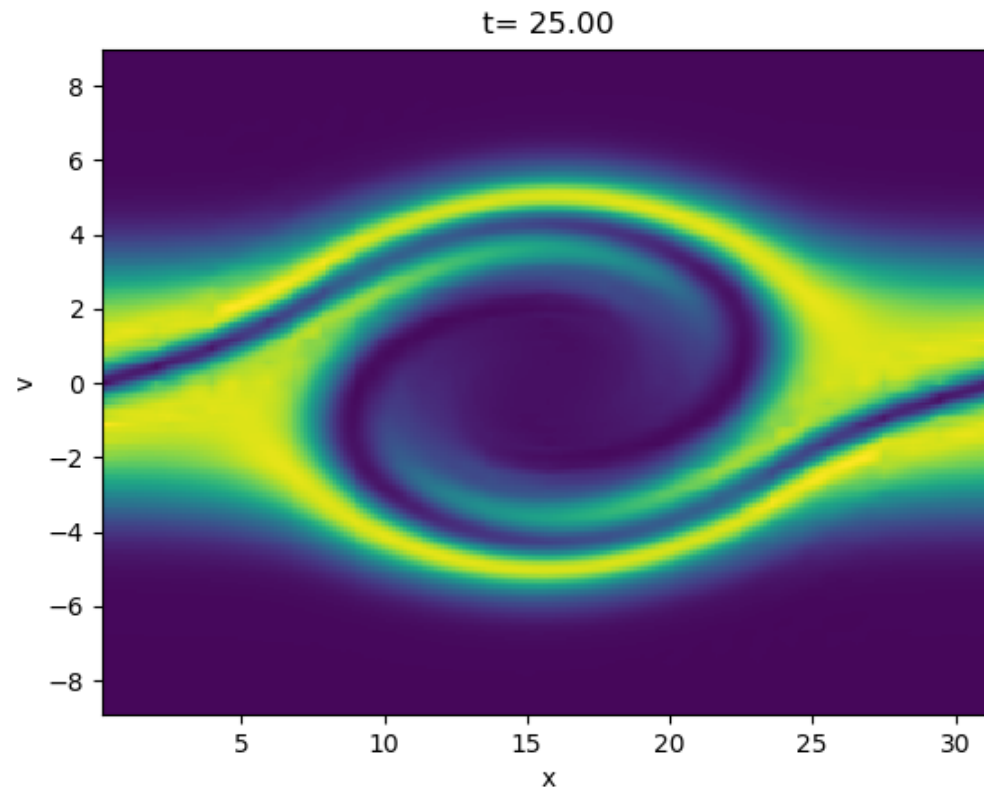
Vlasov Poisson 1d+1d – two-stream instability



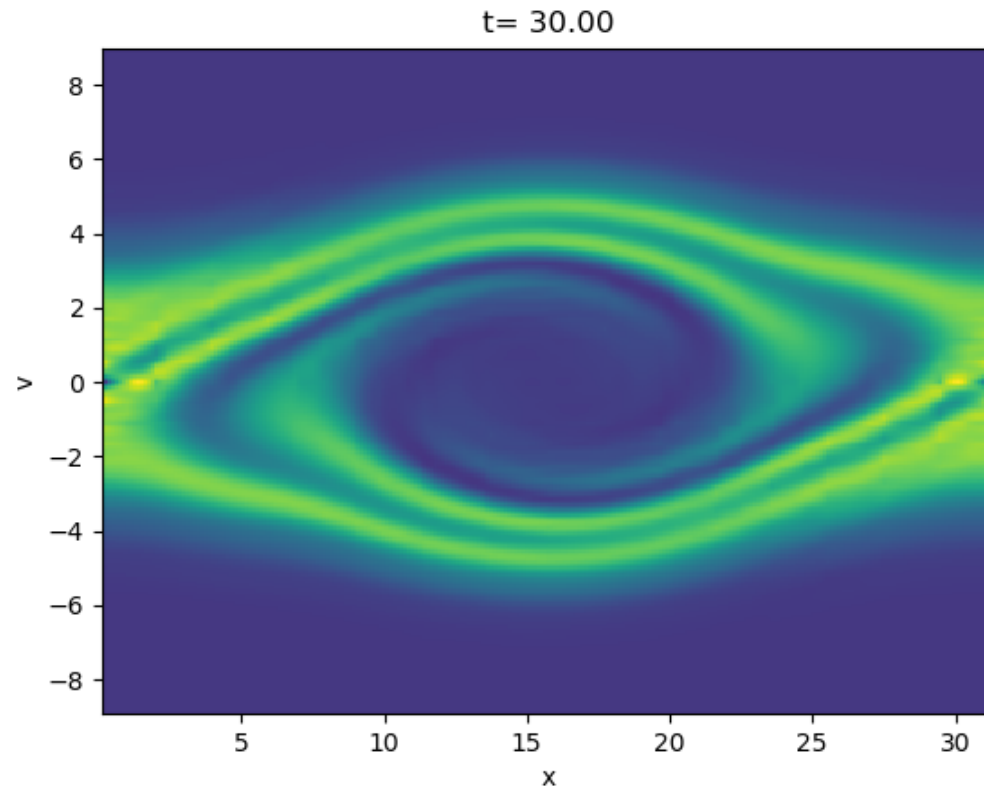
Vlasov Poisson 1d+1d – two-stream instability



Vlasov Poisson 1d+1d – two-stream instability



Vlasov Poisson 1d+1d – two-stream instability



Übersicht

- Grundlagen der Numerik
- Kinetische Gleichungen
- Numerik in den Ingenieurwissenschaften

Anforderungen in den Ingenieurwissenschaften

Ein passender

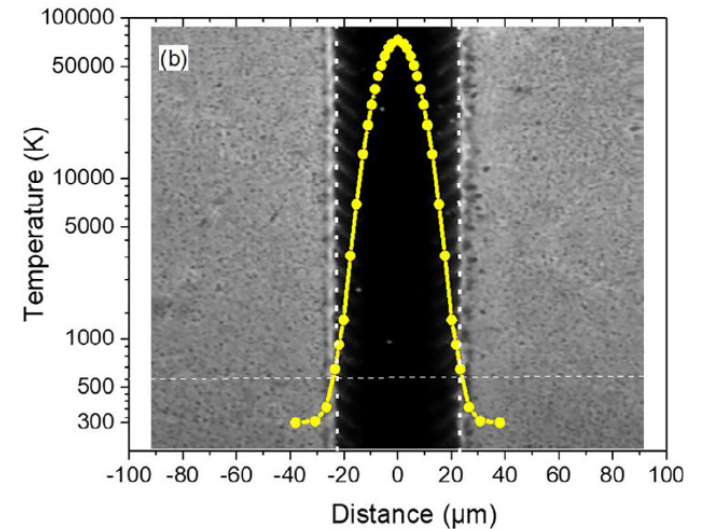
ausreichender

~~Der richtige Algorithmus mit garantierter Approximation zu jeder beliebigen Genauigkeit in optimaler Zeit.~~

vernünftiger

Projekte

- Konfidenzintervalle von Hyperfeinstrukturparametern
 - Mit Sophie Kröger et. al. (in Vorbereitung)
 - Inverse Parameterbestimmung
- Wärmeleitung beim Laserpatterning von Perowskit
 - Mit Christof Schultz et. al. (2021)
 - Wärmeleitungsgleichung
- Elektronendynamik in Halbleitern
 - Mit Andreas Bartelt (in Bearbeitung)
 - Inverse Parameterbestimmung bei partiellen Differenzialgleichungen



Schultz et. al. (2021)

Stelle: Expert_in Modellierung und Simulation

Aufgaben (Auszug):

- Fachliche Beratung und Unterstützung der Forschenden im Kompetenzgebiet Modellierung und Simulation in allen Bereichen der Ingenieurwissenschaften
- Mitarbeit bei Antragsstellung und Durchführung von Forschungsprojekten
- Vernetzung der Forschungsaktivitäten am Fachbereich in diesem Bereich

Anforderungen (Auszug):

- Promotion oder vergleichbare Qualifikation und sichtbare wissenschaftliche Expertise (Publikationen, Vorträge) im Fachgebiet
- Fundierte Kenntnisse in allen Bereichen der Numerik und gängiger Software (z.B. Matlab, FEM Programme)
- Forschungs- und Anwendungserfahrung v.a. in den Ingenieurwissenschaften

Referenzen

- N. Higham: „Accuracy and stability of numerical algorithms“, 2. Auflage, SIAM (2002).
- C. Schultz et. al.: „Laser-Based Series Interconnection of Chalcopyrite Und Perovskite Solar Cells: Analysis of Material Modifications and Implications for Achieving Small Dead Area Widths“, Materials Today: Proceedings (2021).

Vielen Dank für Ihre Aufmerksamkeit!