

TEKST NR 231A

1992

Elektrondiffusion i silicium
- en matematisk model

af

Jesper Voetmann
Karen Birkelund
Mette Olufsen
Ole Møller Nielsen

vejledt af

Johnny Ottesen og H.B. Hansen.

Roskilde Universitetscenter - juni 1991

TEKSTER fra

IMFUFA

ROSKILDE UNIVERSITETSCENTER
INSTITUT FOR STUDIET AF MATEMATIK OG FYSIK SAMT DERES
FUNKTIONER I UNDERVISNING, FORSKNING OG ANVENDELSER

IMFUFA, Roskilde Universitetscenter, Postbox 260, 4000 Roskilde

Elektrondiffusion i silicium - en matematisk model.

af: Jesper Voetmann,
 Karen Birkelund,
 Mette Olufsen,
 Ole Møller Nielsen.

Vejledere: Johnny Ottesen,
 H.B.Hansen.

IMFUFA tekst nr. 231A/92, RUC. 242 sider. ISSN 0106-6242

Abstract

I teksten, der er en RUC-rapport på fagene matematik og datalogi, opstiller vi en matematisk model for elektrontransport i silicium, diskuterer løsningsforholdene og anviser en numerisk metode til løsning af problemet.

Vi beskriver endvidere en konkret implementering i programmeringssproget SIMULA, der kan løse generelle diffusionsproblemer med forskellige typer af randbetingelser. I tekst nr. 231B findes kildetekster til denne implementering.

Emneord: Partielle differentiaalligninger, Numeriske metoder, Matematiske Modeller, Diffusion.

Forord

Nærværende projektrapport er blevet til på Roskilde Universitetscenter i 1991, som tværfagligt projekt mellem Matematik modul 3 og Datalogi modul 1.

Projektets egentlige emne er hentet fra faststoffysikken og er den røde tråd igennem hele rapporten.

Det er således vores håb at vi har formået at sammensmelte de tre forskellige fagdiscipliner i et konglomerat, der behandler vores emne fyldestgørende.

Projektet er skrevet af

Navn	Matematik modul 3	Datalogi modul 1
Jesper Voetmann	x	x
Karen Birkelund	x	
Mette Olufsen	x	x
Ole Møller Nielsen	x	

og er vejledt af

- Johnny Ottesen (Matematik)
- H.B. Hansen (Datalogi)

tak for det.

Derudover vil vi rette en særlig tak til Petr Višcor, som har udvist megen tålmodighed samt et meget energisk engagement i projektet og folkene bag RUC-projektet "Hat-modellen", som har inspireret os gennem hele processen.

Indhold

I	Elektrondiffusion i halvledere	1
1	Elektrondiffusion i silicium	5
1.1	Metal-halvleder overgang	5
1.2	Prøven indsættes i et eksternt felt	9
2	Udledningen af diffusionsligningen	15
2.1	Begyndelses- og randbetingelser	19
2.2	Begyndelsesbetingelsen	20
2.3	Randbetingelser	20
3	Ligningen bringes på dimensionsløs form	31
3.1	Randbetingelserne bringes på dimensionsløs form	33
3.2	Dimensionsløs begyndelsesbetingelse	35
4	Analytisk løsning	37
4.1	Opdeling af diffusionsligningen i to delligninger	37
5	Numerisk udregning	47
5.1	Crank Nicholson	48
6	Løsningen konverteres til fysiske størrelser	53
6.1	Fra løsningen $u(x, t)$ til ladningsdensiteten $\rho(x', t')$	53
6.2	Fra ladningsdensiteten $\rho(x, t)$ til impedansen $\tilde{Z}(\omega)$	55

7 Brugervejledning	59
7.1 En typisk arbejdsgang	60
7.2 Syntaksfejl	74
7.3 Strukturen i DIFFUSYS TM	74
7.4 Editering	79
7.5 Musen	80
7.6 Beregning af fysiske størrelser	80
7.7 Sybolliste	83
7.8 Fortolkning af resultater	86
II Matematisk baggrund	93
8 Klassifikation af partielle differentialligninger af anden orden med konstante koefficienter.	97
8.1 Generalisering til alle partielle differentialligninger af anden orden med konstante koefficienter	103
9 Linearitet	105
9.1 Linearitet af diffusionsligningen	105
9.2 Superposition	106
9.3 Konsekvenser af superposition	109
9.4 Kontinuitet og entydighed af løsninger til partielle differentialligninger	111
10 Fourierrækker	115
10.1 Generelle fourierrækker	115
10.2 Den trigonometriske fourierrække	116
10.3 Konvergens af fourierrækker	117
11 Diverse sætninger	125
III Numerisk metode	135

12 Numerisk behandling af diffusionsligningen	137
12.1 Crank Nicholson	138
13 Iterative metoder	143
13.1 Jacobiiteration	144
13.2 Gauss-Seidel iteration	147
13.3 Randbetingelser og iterationsmetoder	150
13.4 Accelerationsparameteren ω	155
13.5 Stabilitet og konvergens	169
IV Datalogisk metode	189
14 Design af en diffusionsligningsløser.	191
14.1 Det overordnede design.	192
14.2 Opstilling af ligningen - class PROBLEM	195
14.3 SOR-faciliteten - class SOLVER	199
14.4 Problemløseren - program _numcalc	206
14.5 Hjælpe faciliteter	207
14.6 Udvidelsesmuligheder.	210
15 Implementering og dokumentation	213
15.1 Generelt om programmets implementering	213
15.2 Dokumentation	213
15.3 Håndtering af fejl.	214
16 Afprøvning	219
16.1 Funktionstest - sammenligning af programresultater med kendte løsninger	220
16.2 Grænsetest af class SOLVER.	227
16.3 Intern afprøvning	228

17 Konklusion	233
17.1 Processen	233
17.2 Problemet	235
17.3 Sammenfatning	235
Litteraturliste	237
Stikordsregister	239

Liste over figurer

1.1	Prøven indsat i et elektrisk kredsløb	6
1.2	Metal-Halvlederovergang	6
1.3	Inddeling af zoner i halvlederen	7
1.4	Ladningsforskydning i Metal/halvleder-overgangen . . .	8
1.5	Energibånd før og efter udtømning	9
1.6	Fordelingen af frie ladningsbærere i prøven	10
1.7	Serie af tre parallelkoblede RC-led	11
2.1	Perfekt isolerende kontakter	21
2.2	Metal-halvlederovergangen med et lag SiO_2 i overgangen	24
2.3	Parallelkoblede RC-led i serieforbindelse. M-S beteg- ner metal- halvlederovergangen, D depletionzonen og B bulkzonen	24
2.4	Det reducerede system	25
2.5	Strømme ved randen	26
5.1	Ligningens domæne opdelt i $N \times T$ punkter	48
5.2	Approximation af punktet x	49
7.1	Ladningsfordelingen i en perfekt isolator	87
7.2	Beregnet intern spænding for den perfekte isolator . . .	88
7.3	Logaritmen til admittansen for den perfekte isolator som funktion af logaritmen til frekvensen ω	89
7.4	Ladningsfordelingen for den blandede kontakt som funktion af frekvensen ω	90

8.1	Skema over klassifikation af partielle differentiaalligninger	100
9.1	Skitse over de dele, som skal undersøges	112
12.1	Funktionsværdien i punktet (i, j) afhænger af funktionsværdien i de øvrige gitterpunkter.	142
13.1	Skæring mellem linien og parabolen	163
14.1	Diagram over samspillet mellem de enkelte programdele. Dobbeltstregerne indikerer direkte nedarvning og linierne symboliserer dataoverførsel.	196
14.2	Korutiner	205
15.1	En typisk kommentar i programmet	215
15.2	En typisk kommentar i class problem	216
16.1	Den numeriske og analytiske løsning af problem 1 . . .	222
16.2	Differencen mellem de to løsninger af problem 1	223
16.3	Den numeriske og analytiske løsning af problem 2 . . .	225
16.4	Differencen mellem de to løsninger af problem 2	226
17.1	Det samme problem betragtet gennem forskellige fagsbriller	234

Indledning

Den stigende anvendelse af digitalelektronik stiller til stadighed større krav til halvlederteknologien og dermed til faststoffysikken.

I forsøget på at konstruere hurtigere, mindre, billigere og mere driftsikre komponenter er jagten på nye halvledermaterialer lige så aktuel idag, som da den første transistor så dagens lys. Derfor er det vigtigt at udvikle enkle og sikre metoder til at bestemme halvlederens materialegenskaber.

Lektor Petr Višcor ved Roskilde Universitetscenter udvikler for tiden en eksperimentel metode til måling af den indre modstand i halvledermaterialer - dette kaldes også bulk-resistiviteten af stoffet. Vi har i samarbejde med Petr Višcor opstillet en matematisk model, som beskriver elektrontransport i halvledermateriale.

Et vigtigt aspekt i forbindelse med opstillingen af denne model, har været at specificere passende rand- og begyndelsesbetingelser. Deri ligger der et såkaldt inverst problem, idet målet er at opstille et ligningssystem hvortil de kendte måleresultater er løsning. De ukendte størrelser er især systemets randbetingelser.

Løsning af dette inverse problem involverer gentagne numeriske beregninger af den opstillede differentialligning, idet flere forskellige rand og begyndelsesbetingelser skal afprøves.

Til dette formål har vi udviklet et stykke programmel, der kan udregne en løsning for et givet ligningssystem af den pågældende type.

Det er hensigten, at programmet skal kunne bruges i andre lignende problemstillinger. Derfor er det mere omfattende, end det strengt taget er nødvendigt for dette konkrete problem.

Denne opgave har ledt os frem til følgende problemstilling, som efter vores valg falder i to dele.

1. Vi vil undersøge under hvilke rand og begyndelsesbetingelser, modellen er egnet til at beskrive den eksperimentelle opstilling.
2. Hvorledes opnår vi den fornødne baggrund og forståelse til at kunne producere et kvalificeret bidrag til fagfolk fra andre fagområder (i dette tilfælde Petr Višcor). Dette bidrag skal bestå i en rapport over vores arbejde samt i et program, der skal kunne bruges i arbejdet med modellen, efter at vi har forladt arenaen.

Læsevejledning - målgrupper - struktur

Projektrapporten består af 4 dele:

1. Elektrondiffusion i silicium

En selvstændig rapport, der er tænkt som en rapport over vores arbejde med modellen. Den er primært henvendt til Petr Višcor, men kan læses af andre med samme baggrund.

2. Matematisk baggrund

Her gennemgås den matematiske viden, som har været nødvendig for at vi har kunnet opstille og forstå den matematiske model. Denne del er henvendt til læsere, som ikke har den fornødne matematiske viden til at læse projektets første del.

3. Numerisk metode

En uddybning af den numeriske metode, som anvendes i del 1, som blandt andet henvender sig til personer, der vil udvide det medfølgende program med andre numeriske metoder.

4. Datalogisk metode

Information om, hvorledes den numeriske metode er realiseret i praksis, findes i denne del. Den er primært henvendt til personer, som skal vedligeholde og videreudvikle programmet.

Problemformuleringens første del vedrører således kun del 1 af projektet, mens anden halvdel hører til hele projektet.

Vi anbefaler at læsere fra de forskellige faggrupper prioriterer projektet som følger

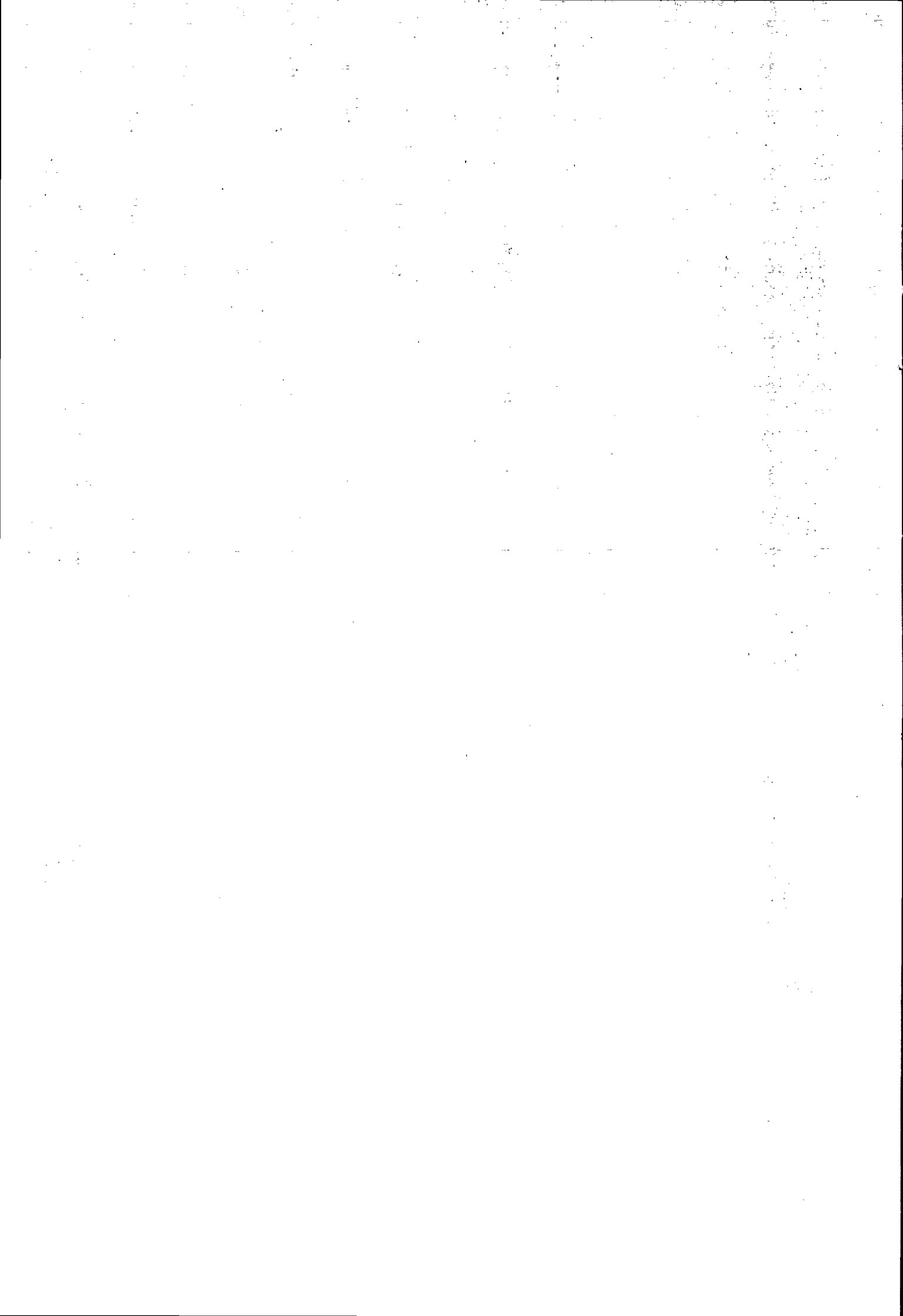
<i>Faggruppe</i>	<i>Del</i>			
	1	2	3	4
Matematikere	+	+	+	
Dataloger	(+)		+	+
Fysikere	+		(+)	

Symbolet + betyder at delen bør læses.

Personer der kun er interesserede i de matematiske aspekter kan således undlade at læse del 4, medens personer der kun er datalogisk interesserede kan overspringe del 2.

Del I

**Elektrondiffusion i
halvledere**



Indledning til Del 1

Petr Višćor har udviklet en eksperimentel metode, hvor man ved elektrisk impedansspektroskopi (EIS) kan bestemme et givet materiales indre specifikke modstand også kaldet bulk-resistiviteten.

I denne sammenhæng er målemetoden først afprøvet på en kendt halvleder, nemlig krystalinsk N-silicium, hvori den indre specifikke modstand er velkendt. Da resultatet af disse målinger stemmer overens med de kendte værdier, er der grund til at mene, at modellen er rigtig.

I samarbejde med Petr Višćor har vi opstillet en teoretisk/matematisk model for det fysiske eksperiment, for på baggrund af denne verificere den fysiske model. Dette er, hvad sker i de første kapitler.

Derefter løser vi problemet dels analytisk i et simplificeret tilfælde og dels numerisk i et mere realistisk tilfælde. Den numeriske løsning sker ved hjælp af det program, vi har udviklet til formålet. De numeriske metoder, der benyttes, bliver kort forklaret for at give et indblik i tankegangen.

Endelig vil vi sammenligne de eksperimentielt målte værdier med de på baggrund af den matematiske model beregnede værdier. Vi tager her udgangspunkt i en bestemt prøve, der er målt på; nemlig prøve nr. N-Si 94.

Bagest i denne del findes en brugervejledning til programmet (side 59) samt en symbolliste over de benyttede parametre, deres eventuelle værdi i overensstemmelse med prøve nr. N-Si 94 og parametrenes dimensioner (side 83).

Vi henviser til denne symbolliste for, at godtgøre de foretagne dimensionsbetragtninger.

Kapitel 1

Elektrondiffusion i silicium

I dette kapitel vil vi først beskrive den fysiske model for elektrondiffusion i en halvleder. Derefter vil vi udlede diffusionsligningen for modellen, ved brug af to af Maxwell's ligninger (Gauss lov for elektrisk felt og Ampere-Maxwell's lov).

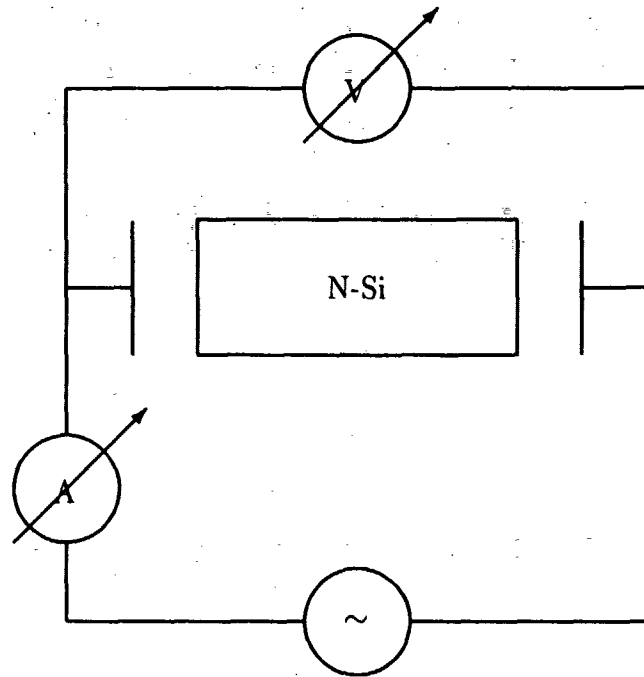
Den eksperimentelle måleopstilling består af en halvleder - i dette tilfælde krystallinsk N-silicium - med pådampede guldelektroder, der er tilsluttet en vekselspændingskilde, se figur 1.1.

1.1 Metal-halvleder overgang

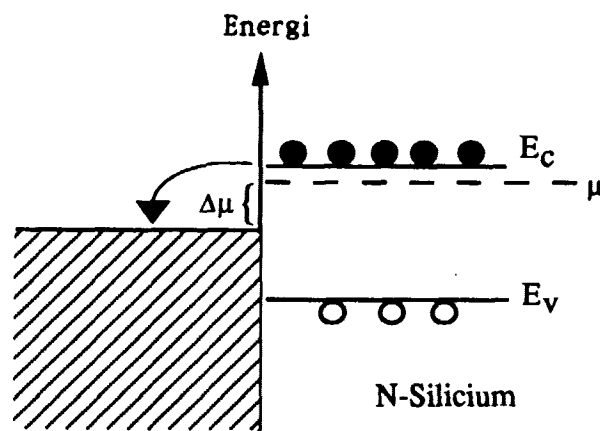
Vi ser først på, hvad der sker i halvlederen (N-Si) i det øjeblik guldet pådampes, altså før prøven indsættes i et elektrisk kredsløb.

Når guldelektroderne pådampes halvlederen, vil kontakten mellem materialerne skabe en ladningstransport mellem disse, se figur 1.2.

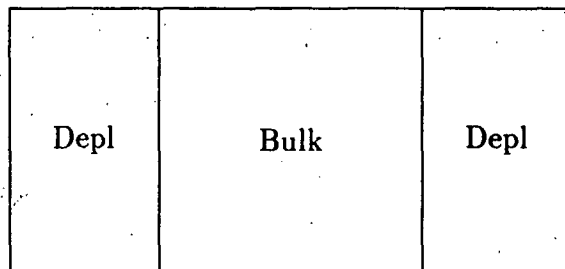
Elektronerne fra halvlederens ledningsbånd vil hoppe over i lavere ubesatte energiniveauer i guldet, da de herved opnår en energigevinst. Denne udtømning af elektroner i halvlederen vil forårsage et elektrisk felt $E(x, t)$, som bevirker at strømmen af elektroner fra halvlederen til guld bremses. Når den energi, der vindes ved, at elektronerne vandrer fra N-silicium til guld, svarer til den energi $eV(x, t)$, der tabes på grund af det elektriske felt, standser udtømningen af elektroner, og der opstår en ligevægt.



Figur 1.1: Prøven indsat i et elektrisk kredsløb



Figur 1.2: Metal-Halvlederovergang



Figur 1.3: Inddeling af zoner i halvlederen

Kemisk potentiale

Kemisk potentiale $\mu^{ch}(x, t)$ er et udtryk for, hvor meget energi en ekstra elektron skal have for at blive tilført et givet materiale, ved en given temperatur og et givet tryk.

Hvis man ønsker at tilføre et metal en ekstra ladningsbærer, skal denne have en energi svarende til energien af elektronerne i det sidst besatte energiniveau i metallets øverste valensbånd. Energien af den sidste elektron i det yderste bånd er således et direkte udtryk for det kemiske potentiale i metallet.

Normalt, når man regner med kemiske potentialer, ser man på forskelle i kemiske potentialer $\Delta\mu^{ch}(x, t)$, se figur 1.2.

$\Delta\mu^{ch}(x, t)$ er således et udtryk for den energi der frigøres når en elektron hopper fra halvleder til guld.

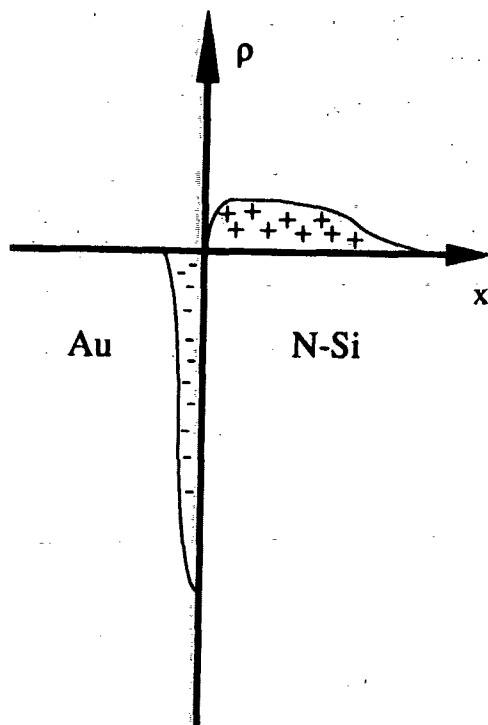
Ovenstående beskrivelse af elektronvandringen defineres nu ved det elektrokemiske potentiale:

$$\mu^{elch}(x, t) = \mu^{ch}(x, t) + eV(x, t)$$

Når $\Delta\mu^{ch}(x, t) = -eV(x, t)$, er der ligevægt.

1.1.1 Ladningsfordeling i prøven

De områder, som delvis udtømmes for elektroner, kaldes for depletion-områderne, og det uberørte område i midten af halvlederen, kaldes for bulkzonen, se figur 1.3.

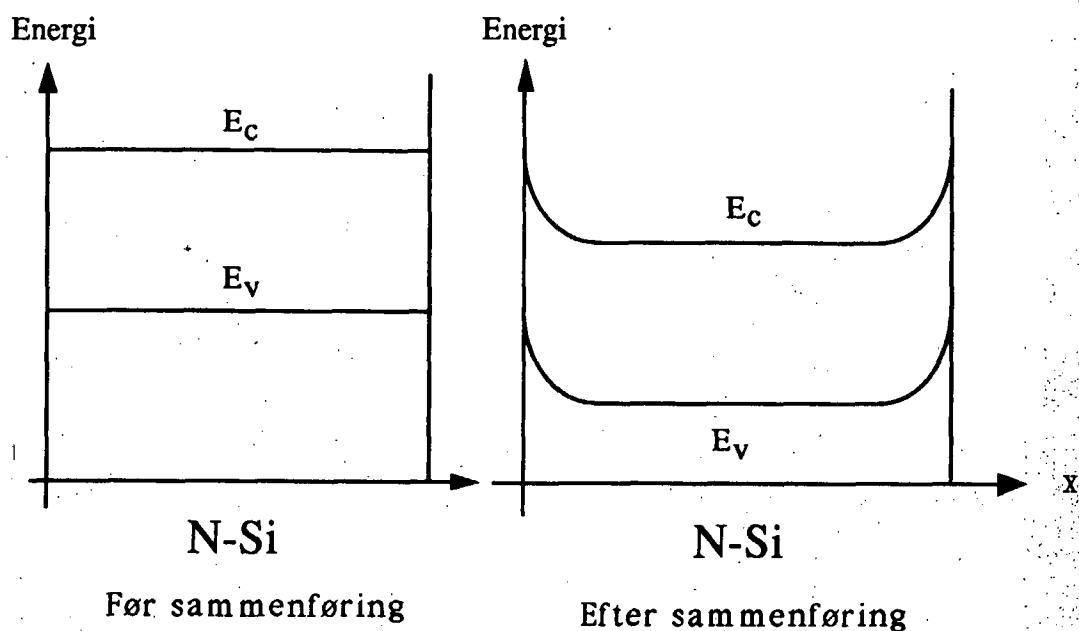


Figur 1.4: Ladningsforskydning i Metal/halvleder-overgangen

Udtømningen af elektroner i halvlederen medfører, at der opstår en ladningsforskydning igennem systemet. Denne er asymmetrisk, da densiteten af ladningsbærere er større i metal end i halvledere, se figur 1.4.

I N-silicium betyder den lave ladningsdensitet, at de elektroner, der bliver flyttet til guldelektroderne, skal hentes relativt langt inde i halvlederen. Dette har en stor indflydelse på ladningsdensiteten.

De elektroner der tilføjes guldlaget øger derimod ikke ladningsdensiteten mærkbart i guldet, idet mængden af dem er forsvindende lille i forhold til dem, der er der i forvejen.



Figur 1.5: Energibånd før og efter udtømming

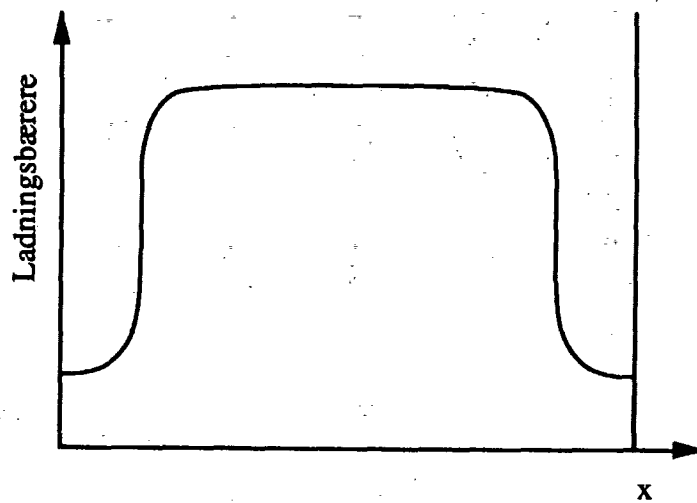
Da elektronerne bliver tiltrukket af det positive felt i N-silicium, og da guld er ledende, stiger elektrondensiteten forholdsvis meget til venstre for kontaktpunktet.

Efter pådampning af guld på halvlederen vil de enkelte energiniveauer i henholdsvis guld og N-silicium ændres på grund af den ekstra fremkomne potentielle energi, se figur 1.5

1.2 Prøven indsættes i et eksternt felt

Hensigten med den fysiske model er at bestemme bulk-resistiviteten i N-silicium. På grund af den ladningsudtømming, der sker ved metal-halvleder overgangen, vil ladningsfordelingen i prøven være inhomogen. Udtømmningen medfører, at der vil være færre frie ladningsbærere og dermed en større specifik modstand på halvlederens overflade, se figur 1.6. Det betyder, at man må tage højde for overflade-effekterne.

Indsættes prøven i et elektrisk kredsløb, kan systemet betragtes som en pladekondensator (guldelektroderne) med et dielektrikum (N-silicium),



Figur 1.6: Fordelingen af frie ladningsbærere i prøven

der har en indre modstand. Som model for en kondensator med en indre modstand kan man da bruge en parallelforbindelse bestående af en ideel kondensator og en modstand, et såkaldt RC-led. Men da ladningsfordelingen ikke er homogen gennem hele prøven på grund af ladningsforskydningen, må vi betragte systemet som en serieforbindelse af parallelkoblede RC-led, hver med en homogen ladningsfordeling. Vi deler prøven op i tre områder:

- Depletion
- Bulk
- Depletion

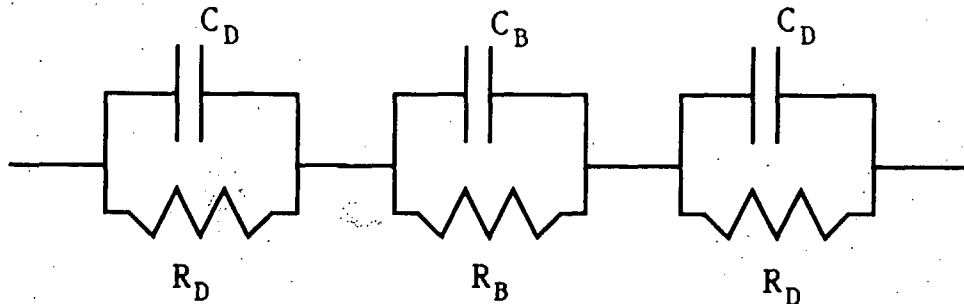
Dette illustreres på figur 1.7

Kapaciteten C af en ideel kondensator afhænger udelukkende af dielektricitetskonstanten ϵ og geometrien af kondensatoren:

$$C = \frac{A\epsilon}{d}$$

hvor

d er afstanden mellem pladerne



Figur 1.7: Serie af tre parallelkoblede RC-led

A er arealet af pladerne.

Når prøven påtrykkes et eksternt elektrisk felt $\mathbf{E}_{\text{ext}}(t)$, vil elektronerne bevæge sig mod den positive elektrode og hullerne mod den negative elektrode. Denne transport af ladninger inducerer et internt elektrisk felt $\mathbf{E}_{\text{int}}(x, t)$. Det totale felt over prøven er således givet ved:

$$\mathbf{E}_{\text{tot}}(x, t) = \mathbf{E}_{\text{ext}}(t) + \mathbf{E}_{\text{int}}(x, t)$$

Det interne felt giver anledning til et spændingsfald over prøven, men dette kompenserer den eksperimentelle opstilling for, således at forsøget foregår ved konstant spænding se figur 1.1.

Vores interesse begrænser sig til den interne spænding $V_{\text{int}}(x, t)$, da det er denne, der giver information om ladningsfordelingen i prøven og dermed om bulk-resistiviteten. Fremover vil $V(x, t)$ og $\mathbf{E}(x, t)$ betegne de interne spændinger og felter, hvis ikke andet angives.

For en ideel pladekondensator gælder, at sammenhængen mellem spændingsfaldet over kondensatoren og ladningen er:

$$Q(x, t) = CV(x, t) \quad (1.1)$$

I det fysiske eksperiment måles den førnævnte kompensationsstrøm, og da

$$I(x, t) = \frac{d}{dt}Q(x, t) \quad (1.2)$$

kan man ved (1.1) og (1.2) finde spændingsfaldet i prøven $V(x, t)$.

I vores matematiske model findes denne spænding på en anden måde, og det er derfor muligt at vurdere hvor godt teori og virkelighed stemmer overens.

En af Maxwell's ligninger (Gauss lov for elektrisk felt) siger, at divergensen af det elektriske felt er lig ladningsdensiteten divideret med dielektricitetskonstanten. Idet vi antager, at der kun sker ladningstransport i x-aksens retning, bliver Maxwell's ligning defineret ved:

$$\frac{\partial E(x, t)}{\partial x} = \frac{\rho(x, t)}{\epsilon} \Leftrightarrow$$

$$E(x, t) = \int_0^x \frac{\rho(\tilde{x}, t)}{\epsilon} d\tilde{x}$$

Den interne spænding over hele prøven fås da ved:

$$V(L, t) = - \int_0^L E(x, t) dx = - \int_0^L \int_0^x \frac{\rho(\tilde{x}, t)}{\epsilon} d\tilde{x} dx \quad (1.3)$$

Ved størrelsen $\rho(x, t)$ forstås den totale ladningsdensitet i prøven. Den er givet ved summen af mobile ladninger $\rho^{mob}(x, t)$ og lokaliserede ladninger (donorer) ρ^{lok} , dvs

$$\rho(x, t) = \rho^{mob}(x, t) + \rho^{lok} \quad (1.4)$$

Vi kan antage at ρ^{lok} er konstant i hele prøven, idet donorerne er bundet til bestemte pladser. Det er derfor kun størrelsen $\rho^{mob}(x, t)$ der udtrykker bevægelse af ladningsbærere (strøm). Denne størrelse er givet ved

$$\rho^{mob} = \rho^{bulk} + \Delta\rho(x, t) \quad (1.5)$$

hvor ρ^{bulk} udtrykker de mobile ladninger i bulkzonen. Disse ladninger influeres ikke af aktiviteten på overfladen, hvorved også ρ^{bulk} kan antages at være konstant.

Man kan endelig argumentere for, at antallet af donorer og antallet af mobile ladninger i bulkzonen er lige store, dvs

$$\rho^{bulk} + \rho^{lok} = 0 \quad (1.6)$$

idet donorer og mobile ladninger har modsat fortegn.

Dermed er den interessante størrelse ændringen i mobile ladninger i prøvens overflade, og $\rho(x, t)$ kan derfor reduceres til

$$\begin{aligned}\rho(x, t) &= \rho^{mob}(x, t) + \rho^{lok} \\ &= \rho^{bulk} + \Delta\rho(x, t) + \rho^{lok} \\ &= \Delta\rho(x, t)\end{aligned}\tag{1.7}$$

Ladningsdensiteten er imidlertid ikke en kendt størrelse, men ved hjælp af to af Maxwell's ligninger samt ovenstående udtryk, er det muligt at udlede en partiel differentialligning i $\rho(x, t)$.

I modellen findes den inducerede spænding V altså på baggrund af den beregnede ladningsdensitet $\rho(x, t)$. I det eksperimentelle tilfælde findes $V(x, t)$ på baggrund af den målte kompensationsstrøm $I(x, t)$.

Kapitel 2

Udledningen af diffusionsligningen

Vi vil nu udlede en ligning for ladningsdensiteten i prøven på baggrund af to af Maxwell's ligninger, så vi kan få et udtryk for den interne spænding. Undervejs vil der blive foretaget nogle approximationer således, at vi ender med en lineær partiel differentiaalligning, som vi kan løse.

De to Maxwell-ligninger der benyttes er:

$$\nabla \cdot \mathbf{E}(x, t) = \frac{\rho(x, t)}{\epsilon} \quad (2.1)$$

$$\nabla \times \mathbf{B}(x, t) = \mu \mathbf{j}(x, t) + \mu \epsilon \frac{\partial \mathbf{E}(x, t)}{\partial t} \quad (2.2)$$

Hvor

- \mathbf{E} er det elektriske felt
- ρ er den totale ladningsdensitet
- ϵ er en dielektricitetskonstant
- \mathbf{B} er det magnetiske felt
- μ magnetisk permeabilitet
- \mathbf{j} er strømdensiteten, dvs antallet af ladninger som strømmer igennem en flade pr. tidsenhed.

Strømdensiteten \mathbf{j} er givet ved

$$\mathbf{j}(x, t) = \frac{\sigma}{e} \mathbf{F}(x, t)$$

Hvor

e er elementarladningen

σ er ledningsevnen i prøven

Den totale kraft der indgår i $\mathbf{j}(x,t)$, afhænger af ændringen i det elektrokemiske potentiale .

$$\begin{aligned}\mathbf{F}(x,t) &= \nabla \mu^{elch}(x,t) \\ &= \nabla(eV(x,t) + \mu^{ch}(x,t)) \\ &= -|e| \mathbf{E}(x,t) + \nabla \mu^{ch}(x,t)\end{aligned}$$

I alt er strømdensiteten udtrykt ved,

$$\mathbf{j}(x,t) = \frac{\sigma}{|e|} (|e| \mathbf{E}(x,t) - \nabla \mu^{ch}(x,t)) \quad (2.3)$$

idet e er negativ (vi beskæftiger os med N-silicium).

For at komme frem til en ligning i $\rho(x,t)$ skal $\mu^{ch}(x,t)$ udtrykkes som funktion af $\rho^{mob}(x,t)$. Af udtrykket ¹

$$\rho^{mob}(x,t) = \rho^{bulk} e^{-\frac{E_c(x,t) - \mu^{elch}(x,t)}{kT}} \quad (2.4)$$

$$= \rho^{bulk} e^{-\frac{E_c - \mu^{ch}(x,t)}{kT}} \quad (2.5)$$

hvor

ρ^{bulk} er laddensdensiteten af mobile ladninger i bulkzonen, ved energiniveauet E_c .

E_c er energien i laddensbåndet i N-silicium.

k er Boltzmanns konstant.

T er temperaturen i prøven.

¹Dette udtryk kommer af Boltzmanns statistik for halvledere samt $E_c(x,t) = E_c + eV(x,t)$ og $\mu^{elch}(x,t) = \mu^{ch}(x,t) + eV(x,t)$

Heraf fås:

$$\begin{aligned}\rho^{mob}(x, t) &= \rho^{bulk} e^{-\frac{E_c - \mu^{ch}(x, t)}{kT}} \Leftrightarrow \\ \log \rho^{mob}(x, t) &= \log \rho^{bulk} - \frac{E_c - \mu^{ch}(x, t)}{kT} \Leftrightarrow \\ \log \frac{\rho^{mob}(x, t)}{\rho^{bulk}} + \frac{E_c}{kT} &= \frac{\mu^{ch}(x, t)}{kT} \Leftrightarrow \\ \mu^{ch}(x, t) &= kT \log \frac{\rho^{mob}(x, t)}{\rho^{bulk}} + E_c\end{aligned}$$

Gradienten af $\mu^{ch}(x, t)$ bliver ifølge kæderegele

$$\begin{aligned}\nabla \mu^{ch}(x, t) &= kT \frac{\rho^{bulk}}{\rho^{mob}(x, t)} \nabla \frac{\rho^{mob}(x, t)}{\rho^{bulk}} \\ &= kT \frac{1}{\rho^{mob}(x, t)} \nabla \rho^{mob}(x, t)\end{aligned}$$

Indsættes dette i ligning (2.3) fås:

$$\mathbf{j}(x, t) = \frac{\sigma}{|e|} (|e| \mathbf{E}(x, t) - kT \frac{1}{\rho^{mob}(x, t)} \nabla \rho^{mob}(x, t)) \quad (2.6)$$

Den elektriske ledningsevne σ afhænger af både stedet og tiden, og den er givet ved den mobile ladningsdensitet gange mobiliteten af de mobile ladninger μ :

$$\sigma = \rho^{mob}(x, t) \mu \quad (2.7)$$

Indsætter vi (2.7) i ligning (2.6) får vi ligningen

$$\begin{aligned}\mathbf{j}(x, t) &= \sigma \mathbf{E}(x, t) - \frac{\rho^{mob}(x, t) \mu kT}{\rho^{mob}(x, t) |e|} \nabla \rho^{mob}(x, t) \\ &= \sigma \mathbf{E}(x, t) - \frac{\mu kT}{|e|} \nabla \rho^{mob}(x, t)\end{aligned} \quad (2.8)$$

Udtrykket for σ er kun indsat i det ene led i $\mathbf{j}(x, t)$, da vi ønsker at opstille en lineær diffusionsligning.

Hvis vi ser på den anden Maxwell-ligning (2.2) og udnytter at et rotationsfelt er divergensfrit vil:

$$\begin{aligned}\nabla \cdot (\nabla \times \mathbf{B}) &= 0 \Leftrightarrow \\ \nabla \cdot \mu \mathbf{j}(x, t) + \nabla \cdot \mu \varepsilon \frac{\partial \mathbf{E}(x, t)}{\partial t} &= 0 \Leftrightarrow \\ -\nabla \cdot \mathbf{j}(x, t) &= \varepsilon \nabla \cdot \frac{\partial \mathbf{E}(x, t)}{\partial t} \Leftrightarrow \\ -\nabla \cdot \mathbf{j}(x, t) &= \varepsilon \frac{\partial}{\partial t} \nabla \cdot \mathbf{E}(x, t)\end{aligned}$$

Idet vi antager, at $\mathbf{E}(x, t)$ tilhører C^2 .

Ved at bruge den første Maxwell-ligning (2.1) fås følgende ligning for divergensen af $\mathbf{j}(x, t)$:

$$-\nabla \cdot \mathbf{j}(x, t) = \varepsilon \frac{\partial \rho(x, t)}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial t} [\rho^{mob}(x, t) + \rho^{lok}] = \frac{\partial \rho^{mob}(x, t)}{\partial t} \quad (2.9)$$

idet vi har anvendt ligning eq:ny antagelse 1, samt at ρ^{lok} er konstant i tiden.

Vi har nu to ligninger, (2.8) som udtrykker strømdensiteten $\mathbf{j}(x, t)$, og (2.9) som udtrykker minus divergensen til $\mathbf{j}(x, t)$. Når ligning (2.8) indsættes i ligning (2.9), fås diffusionsligningen, idet vi her laver en første approximation.

Vi antager fremover, at σ er konstant. Denne simplifikation er nødvendig for at opstille en *lineær* differentialligning.

Hvis $\Delta \rho(x, t)$ i ligning (2.7) er meget lille i forhold til ρ^{bulk} , er det i orden at antage at σ er konstant lig med $\rho^{bulk} \cdot \mu$. Det skal her nævnes at det godt kan lade sig gøre at fremstille degenererede halvledere, hvor dette er opfyldt.

Ligningerne (2.8) og (2.9) giver

$$\begin{aligned}-\nabla \cdot (\sigma \mathbf{E}(x, t) - \frac{\mu k T}{|e|} \nabla \rho^{mob}(x, t)) &= \frac{\partial \rho^{mob}(x, t)}{\partial t} \Leftrightarrow \\ -\sigma \nabla \cdot \mathbf{E}(x, t) + \frac{\mu k T}{|e|} \nabla \cdot \nabla \rho^{mob}(x, t) &= \frac{\partial \rho^{mob}(x, t)}{\partial t}\end{aligned}$$

Da vi kun regner i en dimension, og benytter Maxwell's ligning (2.1), kan ovenstående udtryk omskrives til:

$$-\sigma \frac{\rho(x,t)}{\epsilon} + \frac{\mu k T}{|e|} \frac{\partial^2 \rho^{mob}(x,t)}{\partial x^2} = \frac{\partial \rho^{mob}(x,t)}{\partial t} \Leftrightarrow$$

$$\frac{\partial \rho^{mob}(x,t)}{\partial t} - \frac{\mu k T}{|e|} \frac{\partial^2 \rho^{mob}(x,t)}{\partial x^2} + \frac{\sigma}{\epsilon} \rho(x,t) = 0$$

Ved brug af udtrykket (1.5) kan dette omskrives som følger

$$\frac{\partial(\rho^{bulk}(x,t) + \Delta\rho(x,t))}{\partial t} - \frac{\mu k T}{|e|} \frac{\partial^2(\rho^{bulk}(x,t) + \Delta\rho(x,t))}{\partial x^2} + \frac{\sigma}{\epsilon} \Delta\rho(x,t) = 0 \Leftrightarrow$$

$$\frac{\partial \Delta\rho(x,t)}{\partial t} - \frac{\mu k T}{|e|} \frac{\partial^2 \Delta\rho(x,t)}{\partial x^2} + \frac{\sigma}{\epsilon} \Delta\rho(x,t) = 0$$

Anvendes endelig identiteten (1.7) fås

$$\frac{\partial \rho(x,t)}{\partial t} - D \frac{\partial^2 \rho(x,t)}{\partial x^2} + \frac{\sigma}{\epsilon} \rho(x,t) = 0 \quad (2.10)$$

hvor $D := \frac{\mu k T}{|e|}$ (Dette udtryk er kendt som Einsteins relation).

Ligning (2.10) er en lineær parabolisk differentilligning i $\rho(x,t)$, som beskriver vores approximation til elektrondiffusionsproblemet.

For at løse denne skal vi modellere nogle passende begyndelses- og randbetingelser.

2.1 Begyndelses- og randbetingelser

I dette afsnit skal vi se på nogle passende begyndelses og randbetingelser til den partielle differentilligning, som vi har opstillet. Dette har udmøntet sig i en del diskussion, som her vil blive opsummeret. Først præsenteres en begyndelsesbetingelse for modellen, dernæst ser vi på nogle randbetingelser i idealiserede tilfælde, hvorefter vi giver et endeligt bud på randbetingelserne.

2.2 Begyndelsesbetingelsen

Ved systemets begyndelsestilstand forstår vi den ladningsfordeling, som er i prøven til tiden $t = 0$, med andre ord: ladningsfordelingen i det øjeblik et eksternt elektrisk felt påtrykkes prøven.

Ifølge figur 1.6 side 10 er fordelingen af frie ladninger inhomogen, derfor vil det være oplagt at vælge denne fordeling som startbetingelse. Nu er det imidlertid tilfældet, at depletionområdets bredde er lille i forhold til hele prøvens udstrækning. Betragter vi derfor systemet rent makroskopisk, vil prøven i praksis udvise elektrisk neutralitet, hvilket implicerer, at ladningsfordelingen $\rho(x, t)$ er konstant 0 igennem hele prøven.

Dette skyldes, at de positive ladninger, som er modelleret ved "huller" ikke kan bevæge sig. Disse kaldes for **ioniserede donorer**. Tilsvarende er de negative ladninger repræsenteret ved elektroner, som *kan* bevæge sig. Disse betegnes **mobile ladninger**. Ladningstætheden kan derfor beskrives ved:

$$\rho = |e| [-\rho^{mob} + \rho^{lok}] \quad (2.11)$$

som også er opstillet i ligning (1.4).

Som en approximation vælger vi hermed begyndelsesbetingelsen

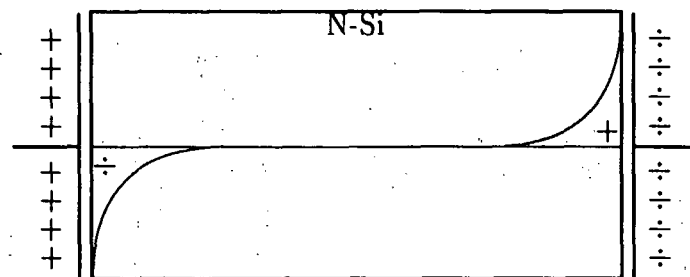
$$\rho(x, 0) = 0$$

2.3 Randbetingelser

Ved randbetingelserne forstås to matematiske funktionsudtryk, der angiver, hvorledes ladningsfordelingen ρ eller dennes afledede udvikler sig i tiden ved prøvens venstre kontakt ($x = 0$) henholdsvis højre kontakt ($x = L$). Til at beskrive randbetingelserne matematisk vil vi benytte kontinuitetsligningen for $\rho(x, t)$ i de to kontaktpunkter:

$$\frac{\partial \rho(x, t)}{\partial t} = -\nabla \mathbf{j}(x, t) \text{ for } x = 0, L$$

Da ladningsfordelingens tidlige udvikling hænger nøje sammen med strømdensiteten, vil vi i det følgende se på de implicerede strømme omkring kontaktheden.



Figur 2.1: Perfekt isolerende kontakter

2.3.1 Perfekt isolerende kontakt

Ved en perfekt isolerende kontakt løber der ingen strøm over randen, derfor ophobes de ladninger, der er påvirket af det eksterne felt ved endepunkterne, se figur 2.1

Randbetingelserne kan nu formuleres på mindst to forskellige måder: Enten er *ændringen* i ladningstæthed proportional med det eksterne felt, eller også er selve ladningstætheden proportional med feltet. Dette kaldes henholdsvis **Neumann**² eller **Dirichlet** randbetingelser.

Neumann randbetingelser

Vi har på side 17 udledt et udtryk for strømdensiteten i prøven på grundlag af Maxwell's ligninger:

$$\mathbf{j}(x, t) = \sigma \mathbf{E}(x, t) - D \nabla \rho(x, t)$$

Idet vi kun ser på strømme i x-aksens retning, og hvor $D = \frac{\mu k T}{|e|}$.

Da vi ser på perfekt isolerende kontakter, hvor der hverken løber strøm fra venstre eller højre over randen, må

$$j(0, t) = 0$$

²Disse kaldes normalt Cauchy randbetingelser

hvilket giver, at

$$\frac{\partial \rho}{\partial x}(0, t) = \frac{\sigma}{D} E(0, t)$$

Af symmetri Grunde er hældningen for ladningsdensiteten den samme i henholdsvis venstre- og højre endepunkt for prøven (se figur 2.1). Derfor vil den samme randbetingelse gøre sig gældende i højre randpunkt

$$\frac{\partial \rho}{\partial x}(L, t) = \frac{\sigma}{D} E(L, t)$$

hvor E er det eksterne felt.

Dette er givet ved:

$$E(t) = E_0 e^{i(\omega t + \phi)} = \cos(\omega t + \phi) + i \sin(\omega t + \phi)$$

Det virkelige felt som sættes på prøven er naturligvis reelt, det vil sige

$$E(t) = E_0 \cos(\omega t + \phi)$$

Da begyndelsesbetingelsen er identisk 0 for alle x , må den afledede med hensyn til x ligeledes være 0 for $t = 0$. Dette betyder at $\phi = \frac{\pi}{2} + p\pi$, hvor p er helt tal. Vi kan derfor vælge E som:

$$E(t) = E_0 \sin(\omega t)$$

Dirichlet randbetingelsen

Betragter man figur 2.1, kan man med god ret hævde, at ladningstætheden $\rho(x, t)$ i randpunkterne er direkte proportional med det eksterne felt på nær en faseforskel. Dog vil det gælde, at ladningsdensiteten i venstre randpunkt er lig minus ladningstætheden i højre randpunkt

$$\rho(0, t) = -\rho(L, t) = kE(x, t) \quad \text{hvor } E \text{ er det eksterne felt}$$

2.3.2 Perfekt ledende kontakt

Ved en perfekt ledende kontakt vil der ikke være nogen ophobning af ladninger, og ladningstætheden $\rho(x, t)$ vil derfor være ens på begge sider af kontakten. Strømmen er dermed konstant i kontaktpunkterne og vi får

$$\begin{aligned} \mathbf{j}(x, t) &= \text{konstant, for } x = 0, L \Leftrightarrow \\ -\nabla \rho(x, t) &= 0 \text{ for } x = 0, L \end{aligned}$$

Dette giver randbetingelsen

$$\frac{\partial \rho}{\partial x}(0, t) = \frac{\partial \rho}{\partial x}(L, t) = 0$$

Vi mener, at der er et problem ved denne randbetingelse - idet det elektriske felt slet ikke optræder her. Hvis begyndelsesbetingelsen er 0, har dette system den trivielle løsning 0. Vi har derfor valgt ikke at arbejde videre med denne randbetingelse.

2.3.3 Et realistisk bud på den blandede kontakt

I det virkelige forsøg er kontakten hverken perfekt ledende eller perfekt isolerende, men en blanding af disse yderligheder.

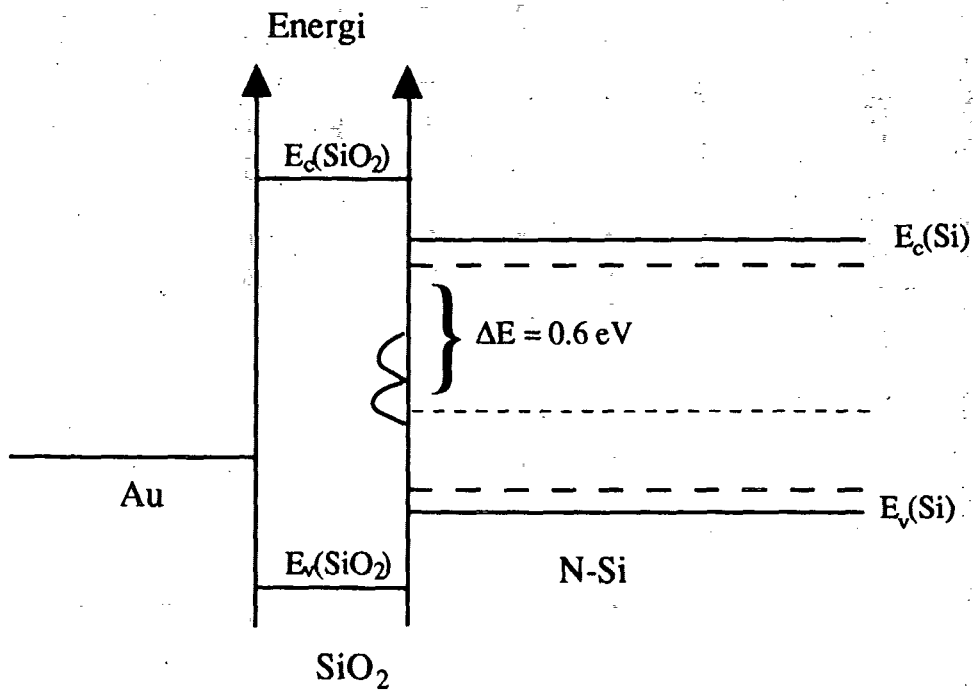
Det er en erfarings sag, at der før pådampning af for eksempel guld på N-silicium dannes et lag siliciumdioxid (SiO_2) på randen, idet rensningen af krystallens overflade ikke sker i vakuum.

Ser vi på kontaktfladen mellem guld og N-silicium, forestiller vi os, at der er et lag siliciumdioxid med en vis udstrækning Δx , se figur 2.2.

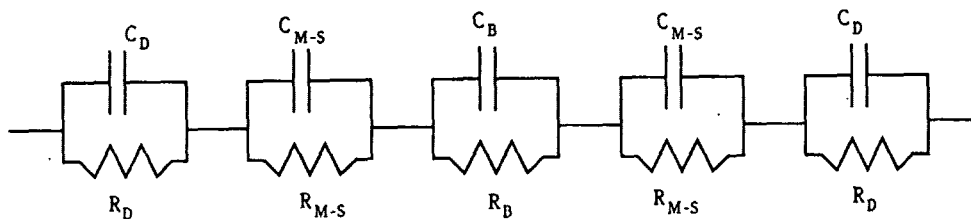
Δx skal bestemmes, hvilket gøres som tidligere beskrevet, side 10, hvor vi deler prøven op i et antal parallelkoblede RC-led, der er serieforbundne. Disse led udvides nu til fem serieforbundne led, se figur 2.3

De fem serieforbundne RC-led kan reduceres til et system bestående af tre led, idet de to led, der symboliserer metal-halvlederovergangen, slås sammen og de to led, der symboliserer depletionzonerne, slås sammen, se figur 2.4.

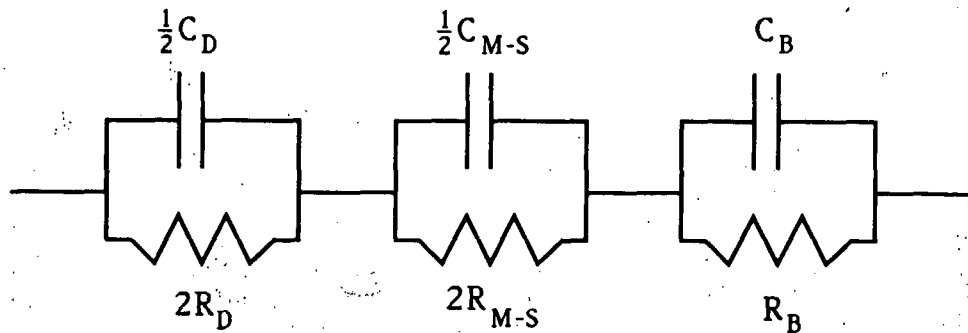
I forbindelse med randbetingelsen hviler interessen udelukkende på metal-halvleder overgangen. Vi ser i modellen for det indre af prøven bort fra depletionzonerne, hvilket er en approximation vi gør, fordi vi lineariserer modellen. Vi kan tillade os dette, da vi tager hensyn til depletionzonerne i randbetingelserne, idet σ antages at være konstant.



Figur 2.2: Metal-halvlederovergangen med et lag SiO_2 i overgangen



Figur 2.3: Parallelkoblede RC-led i serieforbindelse. M-S betegner metal-halvlederovergangen, D depletionzonen og B bulkzonen



Figur 2.4: Det reducerede system

Siliciumdioxidlaget kan altså betragtes som en parallelforbindelse af en modstand og en ideel kondensator med en veldefineret kapacitet

$$C_{M-S} = \frac{\epsilon(SiO_2)A}{\Delta x} \Leftrightarrow$$

$$\Delta x = \frac{\epsilon(SiO_2)A}{C_{M-S}} \Leftrightarrow$$

$$\Delta x = \frac{\epsilon(SiO_2)A}{2C_{exp}}$$

Hvor

$\epsilon(SiO_2)$ er dielektricitetskonstanten for siliciumdioxid.

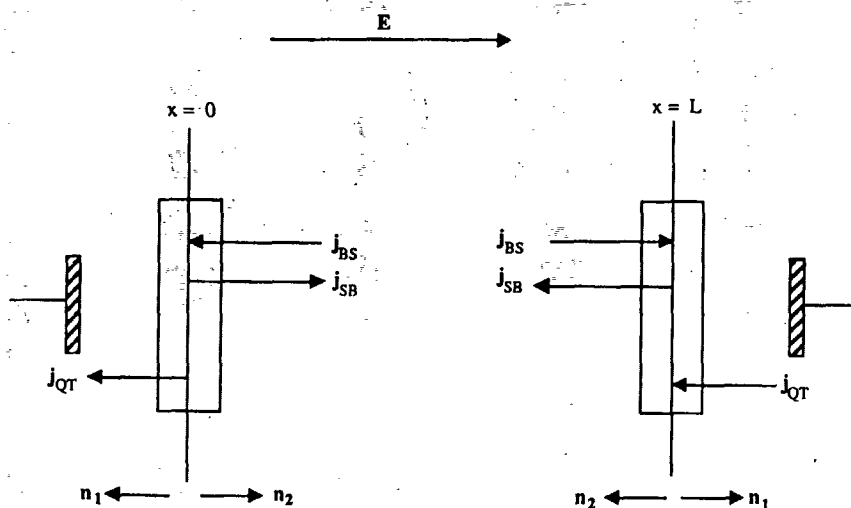
A er kontaktfladens tværsnitsareal.

Δx er bredden af siliciumdioxidlaget, den er anslået til 11,3 Å.

C_{exp} er den målte kapacitet, som er givet ved $C_{exp} = \frac{1}{2}C_{M-S}$. Det skyldes, at vi måler kapaciteten over hele prøven, hvilket involverer begge kontaktflader.

Betragt nu de ladningsstrømme, der foregår i metal-halvleder overgangen, se figur 2.5

Den samlede ladningsstrøm opdeles i tre forskellige bidrag:



Figur 2.5: Strømme ved randen

$j_{QT}(x, t)$ - Kvantemekanisk tunneleringsstrømdensitet.

$j_{BS}(x, t)$ - Strømdensitet som følge af forskelle i kemisk potentiale.

$j_{SB}(x, t)$ - Termisk eksitationsstrømdensitet fra overfladen ind i N-siliciumoverfladen.

I metal-halvleder overgangen sker ladningstransporten mellem guld og N-siliciumoverfladen dels ved kvantemekanisk tunnelling gennem oxidlaget og dels ved termisk emission fra overfladetilstanden til bulk-siliciumtilstanden, se figur 2.2. Den sidste skyldes de elektroner, der eksiteres så meget, at de kommer over energibarrieren i kontakten. Vi ser dog bort fra denne, da tunnelleringsstrømmen er den dominerende.

Idet Δx kendes og, da barrierens højde er veldefineret, er det muligt at udlede et udtryk for den kvantemekaniske tunnelleringsstrømdensitet $j_{QT}(x, t)$. Vi vil ikke udlede dette her, men blot angive resultatet, som ifølge Petr er givet ved:

$$j_{QT}(x, t) = -\frac{KE(x, t)\Delta x}{A}$$

hvor A er prøvens tværsnitsareal, og K er en konstant.

Da tunneleringsstrømmen kun foregår i metal-halvlederovergangen gennem oxidlaget, vil udtrykket kun give mening for $x = 0$ og $x = L$.

Det viser sig imidlertid at K netop antager den reciprokke værdi af R_{M-S} . Dette verificerer hypotesen om, at der er et lag siliciumdioxid mellem guld og N-silicium. Tunneleringsstrømdensiteten udtrykkes således ved

$$\mathbf{j}_{QT}(x, t) = -\frac{\mathbf{E}_{ext}(x, t)\Delta x}{AR_{M-S}} \quad (2.12)$$

Det negative fortegn skyldes, at tunneleringsstrømmen for elektroner er modsat rettet det elektriske felt se, figur (2.5).

I overgangen fra N-silicium til siliciumoverfladen (BS) løber en strøm drevet af forskellen i kemisk potentiale. Den kan som tidligere (side 17) udtrykkes ved

$$\mathbf{j}_{BS}(x, t) = \sigma \mathbf{E}(x, t) - D\nabla\rho(x, t)$$

Idet $\sigma = \rho\mu$, kan \mathbf{j}_{BS} skrives som:

$$\mathbf{j}_{BS}(x, t) = \rho(x, t)\mu\mathbf{E}(x, t) - D\nabla\rho(x, t) \quad (2.13)$$

I overgangen fra siliciumoverfladen til N-silicium (SB) løber der en termisk eksitationsstrøm. Den fremkommer ved at nogle elektroner i siliciumoverfladen opnår så stor termisk energi, at de overvinder energigabet ΔE , se figur 2.2 side 24. Denne strøm betegnes med \mathbf{j}_{SB} , og er ifølge Petr Višcor givet ved:

$$\mathbf{j}_{SB}(x, t) = N_c |e| e^{\frac{\Delta E}{kT}} \mathbf{v}_T \quad (2.14)$$

hvor N_c er den effektive tæthed af elektrontilstande i N-siliciums ledningsbånd, og den termiske hastighed v_T er ifølge equipartition teoremet givet ved proportionaliteten $v_T \propto \sqrt{\frac{kT}{m}}$.

Vi har nu udtryk for de tre delstrømme, som den totale ladningsstrøm er opdelt i. Disse skal så sammensættes til et endeligt udtryk for, hvad der sker på kontaktfladerne ($x = 0$) og ($x = L$).

Af Maxwell's ligninger, se side 18 ligning (2.9) fås:

$$\nabla \cdot \mathbf{j}(x, t) = -\frac{\partial \rho_s}{\partial t}(x, t)$$

hvor $\rho_s(x, t)$ er laddningsdensiteten på randen. Ved at integrere og benytte divergensteoremet fås

$$\int_V \nabla \cdot \mathbf{j}(x, t) dv = - \int_V \frac{\partial \rho_s}{\partial t}(x, t) dv \Leftrightarrow$$

$$\int_S \mathbf{j}(x, t) \cdot \mathbf{n} ds = - \int_V \frac{\partial \rho_s}{\partial t}(x, t) dv$$

Hvis prøven er i ligevægt, vil $\rho_s(x, t)$ være konstant i forhold til tiden, hvorfor:

$$\frac{\partial \rho_s(x, t)}{\partial t} = 0 \Rightarrow \int_V \frac{\partial \rho_s(x, t)}{\partial t} = 0$$

Vi kan således opstille et udtryk for den totale laddingsstrømdensitet på randen, idet:

$$\int_S \mathbf{j}(x, t) \cdot \mathbf{n} ds = 0 \Leftrightarrow$$

$$(\mathbf{j}_{QT}(x, t) \cdot \mathbf{n}_1 + \mathbf{j}_{BS}(x, t) \cdot \mathbf{n}_2 + \mathbf{j}_{SB}(x, t) \cdot \mathbf{n}_2) A = 0$$

Fortegnene af de enkelte delstrømme, vil ifølge figur 2.5 være forskellige i de to kontaktpunkter.

For ($x = 0$) fås:

$$j_{QT}(x, t) - j_{BS}(x, t) + j_{SB}(x, t) = 0$$

For ($x = L$) fås:

$$-j_{QT}(x, t) - j_{BS}(x, t) + j_{SB}(x, t) = 0$$

Indsættes udtrykkene for ligning (2.12), (2.13) og (2.14) i ovenstående formler fås:

$$-\frac{E_{ext}(t)\Delta x}{AR_{M-S}} - \left(\rho(0, t)\mu E(0, t) - D \frac{\partial \rho(0, t)}{\partial x} \right) \quad (2.15)$$

$$+ N_c |e| e^{\frac{\Delta E}{kT}} v_T = 0$$

i kontaktpunktet ved $x = 0$, og

$$\frac{E_{ext}(t)\Delta x}{AR_{M-S}} - \left(\rho(0,t)\mu E(0,t) - D \frac{\partial \rho(0,t)}{\partial x} \right) + N_c |e| e^{\frac{A\Phi}{kT}} v_T = 0 \quad (2.16)$$

i kontaktpunktet ved $x = L$.

Først skal vi dog definere en størrelse for $Q_s(t)$, som er den totale ladning på overfladen.

Når prøven påtrykkes et eksternt elektrisk felt, vil ladninger fra N-siliciums ledningsbånd blive transporteret over i siliciumdioxid overfladen. Det antal ladninger, der således kommer fra N-silicium til N-siliciumoverfladen er defineret ved størrelsen af $Q_s(t)$. Denne transport af ladninger giver anledning til et lokalt felt over randen, som er givet ved

$$E_{lok}(0,t) = E_{lok}(L,t) = -\frac{Q_s(t)}{A\epsilon} \quad (2.17)$$

her antages dielektricitetskonstanten at være et gennemsnit af dielektricitetskonstanten for henholdsvis N-silicium og siliciumdioxid

$$\epsilon = \frac{1}{2}(\epsilon(Si) + \epsilon(SiO_2))$$

Vi kan nu opstille et udtryk for randbetingelserne, som vi mener, de ser ud i det realistiske tilfælde.

$E(x,t)$ er her givet ved

$$\begin{aligned} E(x,t) &= E_{ext}(t) + E_{lok}(x,t) \\ &= E_{ext}(t) - \frac{Q_s(t)}{A \frac{1}{2}(\epsilon(Si) + \epsilon(SiO_2))} \end{aligned}$$

Idet x kun kan antage værdierne 0 og L .

Ligning 2.15 kan reduceres til følgende:

For ($x = 0$) fås

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho(0,t)}{\partial x} &= \frac{|e|}{kT} \rho(0,t) \left(E_{ext}(t) - \frac{Q_s(t)}{A \frac{1}{2}(\epsilon(Si) + \epsilon(SiO_2))} \right) \\ &\quad - \frac{1}{D} (-E_{ext}(t)C_1 + C_2) \end{aligned} \quad (2.18)$$

og for ($x = L$) ligning (2.16) fås

$$\frac{\partial \rho(L, t)}{\partial x} = \frac{|e|}{kT} \rho(L, t) \left(E_{ext}(t) - \frac{Q_s(t)}{A \frac{1}{2}(\epsilon(Si) + \epsilon(SiO_2))} \right) - \frac{1}{D} (E_{ext}(t) C_1 + C_2) \quad (2.19)$$

Hvor

$$C_1 = \frac{\Delta x}{AR_{M-S}}$$

og

$$C_2 = N_c |e| v_T e^{-\frac{\Delta E}{kT}}$$

I de to beregninger er udtrykkene for $E(x, t)$ og $\mu = \frac{D|e|}{kT}$ ifølge Einsteins relation indsat.

Kapitel 3

Ligningen bringes på dimensionsløs form

I kapitel 2 har vi opstillet den lineære paraboliske partielle differential-ligning:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t'}(x', t') - D \frac{\partial^2 \rho}{\partial (x')^2}(x', t') + \frac{\sigma}{\epsilon} \rho(x', t') = 0 \quad (3.1)$$

Hvor $x' \in [0, L]$ og $t' \in [0, \infty[$.

For lettere at kunne arbejde med denne ligning, skal den bringes på dimensionsløs form. Enhederne for de enkelte parametre er angivet i symbollisten side 83.

Vi indfører de dimensionsløse størrelser:

$$\begin{aligned} x &= \frac{x'}{L}, & \text{hvor } x &\in [0, 1] \\ t &= \frac{\sigma}{\epsilon} t' & \text{hvor } t &\in [0, \infty[\\ U(x, t) &= \frac{\rho(x', t')}{\rho_0} \end{aligned} \quad (3.2)$$

Hvor

L er prøvens længde

ρ_0 er en fast størrelse for ρ , det kan for eksempel være en formodning om, ρ 's maksimale eller minimale størrelse til en given tid. Vi benytter her ladningsdensiteten i bulk, ρ^{bulk} .

At de indførte parametre er dimensionsløse indses ved følgende dimensionsbetragtninger af de enkelte parametre:

$$\dim[x] = \dim\left[\frac{x'}{L}\right] = \frac{m}{m} = 1$$

$$\dim[t] = \dim\left[\frac{\sigma}{\varepsilon} t'\right] = \frac{m^{-3}kg^{-1}sC^2}{m^{-3}kg^{-1}s^2C^2}s = 1$$

$$\dim[U] = \dim\left[\frac{\rho}{\rho_0}\right] = \frac{Cm^{-3}}{Cm^{-3}} = 1$$

Transformationen af diffusionsligningen bliver med disse parametre følgende:

Den første stedafledede

$$\frac{\partial \rho}{\partial x'} = \frac{\partial \rho}{\partial x} \frac{\partial x}{\partial x'} = \frac{1}{L} \frac{\partial \rho}{\partial x} = \frac{1}{L} \frac{\partial U \rho_0}{\partial x} = \frac{\rho_0}{L} \frac{\partial U}{\partial x}$$

Den anden stedafledede

$$\frac{\partial^2 \rho}{\partial (x')^2} = \frac{\partial}{\partial x'} \frac{\partial \rho}{\partial x'} = \frac{\partial}{\partial x'} \frac{1}{L} \frac{\partial \rho}{\partial x} = \frac{1}{L^2} \frac{\partial^2 \rho_0 U}{\partial x^2} = \frac{\rho_0}{L^2} \frac{\partial^2 U}{\partial x^2}$$

Den tidsafledede

$$\frac{\partial \rho}{\partial t'} = \frac{\partial \rho}{\partial t} \frac{\partial t}{\partial t'} = \frac{\sigma}{\varepsilon} \frac{\partial \rho_0 U}{\partial t} = \frac{\sigma \rho_0}{\varepsilon} \frac{\partial U}{\partial t}$$

Indsættes dette i ligning (3.1) fås:

$$\frac{\sigma \rho_0}{\varepsilon} \frac{\partial U}{\partial t}(x, t) - \frac{D \rho_0}{L^2} \frac{\partial^2 U}{\partial x^2}(x, t) + \frac{\sigma \rho_0}{\varepsilon} U(x, t) = 0 \Leftrightarrow$$

$$\frac{\partial U}{\partial t}(x, t) - \frac{D \varepsilon}{L^2 \sigma} \frac{\partial^2 U}{\partial x^2}(x, t) + U(x, t) = 0 \Leftrightarrow$$

$$\frac{\partial U}{\partial t}(x, t) - \alpha \frac{\partial^2 U}{\partial x^2}(x, t) + U(x, t) = 0$$

$$\text{Hvor } \alpha = \frac{D\varepsilon}{L^2\sigma}$$

Ligningen er dimensionsløs, hvis α er dimensionsløs, hvilket ses ved

$$\dim[\alpha] = \dim\left[\frac{D\varepsilon}{L^2\sigma}\right] = \frac{m^2s^{-1}m^{-3}kg^{-1}s^2C^2}{m^2m^{-3}kg^{-1}sC^2} = 1$$

3.1 Randbetingelserne bringes på dimensionsløs form

Vi skal i dette afsnit bringe de opstillede randbetingelser på dimensionsløs form. Det er dels de randbetingelser, som vi opstillede i ligningen for den perfekte isolator - side 21, og dels de randbetingelser, som vi opstillede i den mere realistiske ligning - side 29.

3.1.1 Den perfekte isolator

I dette tilfælde er de opstillede randbetingelser Neumann betingelser. Disse bringes på dimensionsløs form ved at benytte den samme variabeltransformation som i selve ligningen. Desuden indføres den dimensionsløse parameter

$$\omega = \frac{\varepsilon}{\sigma}\omega'$$

Vi får således følgende dimensionsløse randbetingelser for den perfekte isolator:

$$\begin{aligned}\frac{\partial \rho}{\partial x}(x', t') &= \frac{\sigma}{D} E_0 \sin(\omega' t') \Leftrightarrow \\ \frac{1}{L} \frac{\partial \rho_0 U(x, t)}{\partial x} &= \frac{\sigma}{D} E_0 \sin(\omega t) \Leftrightarrow \\ \frac{\partial U(x, t)}{\partial x} &= \frac{L\sigma E_0}{\rho_0 D} \sin(\omega t) \Leftrightarrow \\ \frac{\partial U(x, t)}{\partial x} &= \gamma \sin(\omega t)\end{aligned}$$

idet x antager værdierne 0 og 1.

E_{ext} er givet ved $E_0 \sin(\omega t)$ som vist på side 22.

Konstanten $\gamma = \frac{L\sigma E_0}{\rho_0 D}$ er dimensionsløs, hvilket fremgår af:

$$\begin{aligned} \dim \left[\frac{L\sigma E_0}{\rho_0 D} \right] &= \frac{mm^{-3}kg^{-1}sC^2Vm^{-1}}{Cm^{-3}m^2s^{-1}} \\ &= \frac{s^2CV}{m^2kg} \\ &= \frac{s^2Ckgm^2s^{-2}C^{-1}}{m^2kg} = 1 \end{aligned}$$

3.1.2 Den realistiske randbetingelse

I dette tilfælde er randbetingelserne også Neumann betingelser, disse kan ligeledes bringes på dimensionsløs form ved at benytte variabeltransformationen $x = x'/L$ og $t = \frac{\sigma}{\epsilon}t'$. Som før sættes $\omega = \frac{\epsilon}{\sigma}\omega'$ og $E_{ext} = E_0 \sin(\omega t)$

Randbetingelse for den mere realistiske ligning, se side 29,

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho}{\partial x'}(0, t') &= \frac{|e|}{kT} \rho(0, t') \left(E_0 \sin(\omega' t') - \frac{Q_s}{A_{\frac{1}{2}}(\epsilon(Si) + \epsilon(SiO_2))} \right) + \\ &\quad \frac{1}{D} (E_0 \sin(\omega' t') C_1 - C_2) \Leftrightarrow \\ \frac{1}{L} \frac{\partial \rho_0 U}{\partial x}(0, t) &= \frac{|e|}{kT} \rho_0 U(0, t) \left(E_0 \sin(\omega t) - \frac{Q_s}{A_{\frac{1}{2}}(\epsilon(Si) + \epsilon(SiO_2))} \right) + \\ &\quad \frac{1}{D} (E_0 \sin(\omega t) C_1 - C_2) \Leftrightarrow \\ \frac{\partial U}{\partial x}(0, t) &= \frac{L|e|}{kT} \left(E_0 \sin(\omega t) - \frac{Q_s}{A_{\frac{1}{2}}(\epsilon(Si) + \epsilon(SiO_2))} \right) U(0, t) + \\ &\quad \frac{L}{\rho_0 D} (E_0 \sin(\omega t) C_1 - C_2) \Leftrightarrow \\ \frac{\partial U}{\partial x}(0, t) &= \xi(t) U(0, t) + \eta(t) \end{aligned}$$

er dimensionsløs, da $\xi(t)$ og $\eta(t)$ er dimensionsløse. Ovenstående randbetingelse er for tilfældet $x = 0$. Udregningerne for $x = L$ er tilsvarende.

$\xi(t)$ er dimensionsløs da:

$$\begin{aligned} \dim[\xi(t)] &= \dim \left[\frac{L|e|}{kT} \left(E_0 \sin(\omega t) - \frac{Q_s}{A \frac{1}{2}(\varepsilon(\text{Si}) + \varepsilon(\text{SiO}_2))} \right) \right] \\ &= \frac{mC}{kgm^2s^{-2}K^{-1}K} \left(mkg s^{-2} C^{-1} - \frac{Cm^2}{m^2kg^{-1}m^{-1}s^2C^2} \right) \\ &= \frac{s^2C}{kgm} \left(\frac{mkg}{s^2C} - \frac{mkg}{s^2C} \right) = 1 \end{aligned}$$

$\eta(t)$ er dimensionsløs da:

$$\begin{aligned} \dim[\eta(t)] &= \dim \left[\frac{L}{D\rho_0} (E_0 \sin(\omega t) C_1 - C_2) \right] \\ &= \dim \left[\frac{L}{D\rho_0} \left(E_0 \sin(\omega t) \frac{\Delta x}{AR_{M-s}} - N_c |e| V_{Te} \frac{\Delta E}{kT} \right) \right] \\ &= \frac{m}{m^2s^{-1}Cm^{-3}} \left(\frac{mkg}{s^{-2}C} \frac{m}{m^2m^2kgs^{-1}C^{-2}} - m^{-3}Cms^{-1} \right) \\ &= \frac{sm^2}{C} \left(\frac{C}{sm^2} - \frac{C}{m^2s} \right) = 1 \end{aligned}$$

Dimensionerne for de enkelte symboler er stillet op i samme rækkefølge, som selve symbolerne i de pågældende udtryk.

3.2 Dimensionsløs begyndelsesbetingelse

I de tilfælde, hvor vi har gjort ligningen og dens randbetingelser dimensionsløse, er begyndelsesbetingelsen den samme. Den skal ligeledes gøres dimensionsløs, og vi får herved:

$$\begin{aligned}\rho_0 U(x, 0) &= 0 \Leftrightarrow \\ U(x, 0) &= 0 \text{ for } 0 \leq x \leq 1\end{aligned}$$

Kapitel 4

Analytisk løsning

I dette kapitel vil vi angive en analytisk løsning til diffusionsligningen for den perfekte isolator - se afsnit 2.3.1.

Generelt vil vi løse ligningerne numerisk, men for at undersøge korrektheden af de numeriske metoder, som vi har anvendt, benytter vi sammenligning med en kendt analytisk løsning; I dette tilfælde løsningen for den perfekte isolator .

4.1 Opdeling af diffusionsligningen i to delligninger

Det er følgende diffusionsligning, som vi ønsker at løse:

$$\begin{aligned}\frac{\partial U}{\partial t}(x, t) - \alpha \frac{\partial^2 U}{\partial x^2}(x, t) + U(x, t) &= 0 \\ U(x, 0) &= 0 \\ \frac{\partial U}{\partial x}(0, t) = \frac{\partial U}{\partial x}(\pi, t) &= \gamma \sin(\omega t)\end{aligned}\quad (4.1)$$

Vi har skaleret ligningen så $x \in [0, \pi]$.

Vi benytter superpositionsprincippet, til at dele ligningen op i to simple problemer, som hver især opfylder en lidt simple partiel differentiaalligning. Det kan vi tillade os, da ligningssystemet (4.1) er lineært med lineære begyndelses- og randbetingelser i $U(x, t)$. Lader vi nu

$V(x, t)$ og $W(x, t)$ være valgt således at $U(x, t) = (V + W)(x, t)$, kan vi løse ligningssystemet (4.1). Dette giver følgende ligningssystem:

$$\begin{aligned} \frac{\partial(V+W)}{\partial t}(x, t) - \alpha \frac{\partial^2(V+W)}{\partial x^2}(x, t) + (V+W)(x, t) &= 0 \\ (V+W)(x, 0) &= 0 \\ \frac{\partial(V+W)}{\partial x}(0, t) = \frac{\partial(V+W)}{\partial x}(\pi, t) &= \gamma \sin(\omega t) \end{aligned}$$

$V(x, t)$ vælges, således at den opfylder randbetingelsen. Det betyder at:

$$V(x, t) = x\gamma \sin(\omega t) \quad (4.2)$$

hvilket giver

$$\begin{aligned} \frac{\partial V}{\partial t}(x, t) - \alpha \frac{\partial^2 V}{\partial x^2}(x, t) + V(x, t) &= x\gamma\omega \cos(\omega t) + x\gamma \sin(\omega t) \\ &= \gamma(\sin(\omega t) + \omega \cos(\omega t))x \\ V(x, 0) &= 0 \\ \frac{\partial V}{\partial x}(0, t) = \frac{\partial V}{\partial x}(\pi, t) &= \gamma \sin(\omega t) \end{aligned}$$

For at kompensere for det heterogene led, som opstod i ligningen for $V(x, t)$ vil vi vælge at opstille $W(x, t)$, så dette sker:

$$\begin{aligned} \frac{\partial W}{\partial t}(x, t) - \alpha \frac{\partial^2 W}{\partial x^2}(x, t) + W(x, t) &= -\gamma(\sin(\omega t) + \omega \cos(\omega t))x \\ W(x, 0) &= 0 \\ \frac{\partial W}{\partial x}(0, t) = \frac{\partial W}{\partial x}(\pi, t) &= 0 \end{aligned} \quad (4.3)$$

Da funktionen $V(x, t)$ er eksplicit givet i ligning (4.2), får vi således reduceret problemet til at finde et funktionsudtryk for $W(x, t)$.

4.1.1 Funktionen $W(x, t)$ bestemmes

Antag at $W(x, t)$ kan skrives som en generel cosinusrække. Randbetingelsen giver da at $W(x, t)$ må have formen

$$W(x, t) = \frac{a_0(t)}{2} + \sum_{n=1}^{\infty} a_n(t) \cos(nx) \quad (4.4)$$

hvor rækken og dens afledede konvergerer uniformt. Regner vi formelt, vil:

$$\frac{\partial W}{\partial x}(x, t) = - \sum_{n=1}^{\infty} n a_n(t) \sin(nx)$$

hvorved randbetingelsen i (4.3) opfyldes.

Desuden vil:

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 W(x, t)}{\partial x^2} &= - \sum_{n=1}^{\infty} n^2 a_n(t) \cos(nx) \\ \frac{\partial W(x, t)}{\partial t} &= \frac{a'_0(t)}{2} + \sum_{n=1}^{\infty} a'_n(t) \cos(nx) \end{aligned}$$

Venstresiden af differentiaalligningen i (4.3) kan nu skrives som

$$\begin{aligned} &\frac{a'_0(t)}{2} + \sum_{n=1}^{\infty} (a'_n(t) \cos(nx)) + \alpha \sum_{n=1}^{\infty} (n^2 a_n(t) \cos(nx)) + \\ &\frac{a_0(t)}{2} + \sum_{n=1}^{\infty} (a_n(t) \cos(nx)) = \\ &\frac{a'_0(t)}{2} + \frac{a_0(t)}{2} + \sum_{n=1}^{\infty} (a'_n(t) + (\alpha n^2 + 1) a_n(t)) \cos(nx) \end{aligned} \quad (4.5)$$

Højresiden af differentiaalligningen i (4.3) kan fourierudvikles efter cosinus, idet fourierrækken for x indsættes - se lemma 4.1 side 44 .

$$\begin{aligned}
& -\gamma(\sin(\omega t) + \omega \cos(\omega t))x \\
&= -\gamma(\sin(\omega t) + \omega \cos(\omega t)) \left(\frac{\pi}{2} - \frac{4}{\pi} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\cos(mx)}{m^2} \right) \\
&= -\frac{\pi\gamma}{2} (\sin(\omega t) + \omega \cos(\omega t)) + \\
& \quad \sum_{n=1}^{\infty} \frac{4\gamma(\sin(\omega t) + \omega \cos(\omega t))}{\pi m^2} \cos(mx)
\end{aligned} \tag{4.6}$$

Hvor $m = 2n - 1$

For ulige $m > 0$ kan man nu opstille en ordinær heterogen differentiaalligning af første orden, som består af fourierkoefficienterne fra ligning (4.5) og (4.6).

$$a'_m(t) + (\alpha m^2 + 1)a_m(t) = \frac{4\gamma}{\pi m^2} (\sin(\omega t) + \omega \cos(\omega t))$$

Lad nu $\kappa = \frac{4\gamma}{\pi m^2}$.

Da vil

$$a'_m(t) + (\alpha m^2 + 1)a_m(t) = \kappa(\sin(\omega t) + \omega \cos(\omega t))$$

Løsningsformlen for førsteordens differentiaalligninger giver nu følgende, idet begyndelsesbetingelsen sammen med ligning (4.4) giver at $a_m(0) = 0$:

$$\begin{aligned}
& a_m(t) \\
&= e^{-(\alpha m^2 + 1)t} \kappa \int_0^t e^{(\alpha m^2 + 1)\tau} (\sin(\omega\tau) + \omega \cos(\omega\tau)) d\tau \\
&= e^{-(\alpha m^2 + 1)t} \kappa \left(\int_0^t e^{(\alpha m^2 + 1)\tau} \sin(\omega\tau) d\tau + \omega \int_0^t e^{(\alpha m^2 + 1)\tau} \cos(\omega\tau) d\tau \right) \\
&= e^{-(\alpha m^2 + 1)t} \kappa \left[e^{(\alpha m^2 + 1)\tau} \frac{((\alpha m^2 + 1) \sin(\omega\tau) - \omega \cos(\omega\tau))}{(\alpha m^2 + 1)^2 + \omega^2} \right]_0^t +
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& e^{-(\alpha m^2 + 1)t} \kappa \omega \left[e^{(\alpha m^2 + 1)\tau} \frac{((\alpha m^2 + 1) \cos(\omega\tau) + \omega \sin(\omega\tau))}{(\alpha m^2 + 1)^2 + \omega^2} \right]_0^t \\
&= \frac{\kappa}{(\alpha m^2 + 1)^2 + \omega^2} \\
& \left((\alpha m^2 + \omega^2 + 1) \sin(\omega t) + \alpha m^2 \omega \cos(\omega t) - e^{-(\alpha m^2 + 1)t} \alpha m^2 \omega \right)
\end{aligned}$$

For lige $m > 0$ kan man på tilsvarende vis opstille en ordinær differentiaalligning af første orden, i dette tilfælde vil den dog være homogen idet fourierkoefficienten i ligning (4.6) er nul for lige m . Dette giver derfor

$$\begin{aligned}
a'_m(t) + (\alpha m^2 + 1)a_m(t) &= 0 \Leftrightarrow & (4.7) \\
a_m(t) &= ce^{(\alpha m^2 + 1)t}
\end{aligned}$$

Begyndelsesbetingelsen giver at $a_m(0) = 0 \Rightarrow c = 0$. Ligning (4.8) har derfor den trivielle løsning $a_m(t) = 0$.

For $m = 0$ fås ligningen:

$$\frac{a'_0(t)}{2} + \frac{a_0(t)}{2} = -\frac{\pi}{2} \gamma (\sin(\omega t) + \omega \cos(\omega t))$$

Løsningen til denne differentiaalligning er

$$\frac{a_0(t)}{2} = -\frac{\pi}{2} \gamma \sin(\omega t)$$

Funktionen $W(x, t)$ bliver derfor:

$$\begin{aligned}
W(x, t) &= -\frac{\pi}{2} \gamma \sin(\omega t) + \\
& \frac{4\gamma}{\pi} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{m^2((\alpha m^2 + 1)^2 + \omega^2)} \\
& \left((\alpha m^2 + \omega^2 + 1) \sin(\omega t) + \alpha m^2 \omega (\cos(\omega t) - e^{-(\alpha m^2 + 1)t}) \right) \cos(mx)
\end{aligned} \tag{4.8}$$

hvor $m = 2n - 1$.

Hvis rækken og dens relevante afledede konvergerer uniformt, vil antagelsen på side 39 være opfyldt, hvilket betyder at $W(x, t)$ i (4.8) er løsning til ligning (4.3)

Uniform konvergens af rækken for $W(x, t)$

Rækken

$$\sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{m^2((\alpha m^2 + 1)^2 + \omega^2)} \left(\sin(\omega t)(\alpha m^2 + \omega^2 + 1) + \alpha m^2 \omega (\cos(\omega t) - e^{-(\alpha m^2 + 1)t}) \right) \cos(mx)$$

konvergerer uniformt, hvis rækkerne

$$\left| \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\alpha m^2 + \omega^2 + 1}{m^2((\alpha m^2 + 1)^2 + \omega^2)} \sin(\omega t) \cos(mx) \right| \quad (4.9)$$

$$\left| \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\alpha m^2 \omega}{m^2((\alpha m^2 + 1)^2 + \omega^2)} \cos(\omega t) \cos(mx) \right| \quad (4.10)$$

$$\left| \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\alpha m^2 \omega}{m^2((\alpha m^2 + 1)^2 + \omega^2)} e^{-(\alpha m^2 + 1)t} \cos(mx) \right| \quad (4.11)$$

hver især konvergerer uniformt. Vi vil nu vise uniform konvergens af disse tre rækker. Da det er de samme beregninger, der skal gennemføres for alle tre summer, vil vi her kun beskrive konvergens af (4.9) detaljeret.

Rækken (4.9) har den konvergente majorantrække.

$$\begin{aligned} & \left| \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\alpha m^2 + \omega^2 + 1}{m^2(\alpha^2 m^4 + 1 + 2\alpha m^2 + \omega^2)} \sin(\omega t) \cos(mx) \right| \leq \\ & \sum_{n=1}^{\infty} \left| \frac{\alpha + \frac{\omega^2}{m^2} + \frac{1}{m^2}}{\alpha^2 m^4 + 1 + 2\alpha m^2 + \omega^2} \right| |\sin(\omega t)| |\cos(mx)| \leq \\ & \sum_{n=1}^{\infty} \frac{c_1}{c_2 m^4} \end{aligned}$$

Vi skal også vise at de ledvist differentierede rækker i funktionen for $W(x, t)$ konvergerer uniformt.

De afledede med hensyn til stedet.

I dette tilfælde vil vi ligeledes benytte rækken (4.9). Vi vil her kun vise beregningerne for den anden stedafledede, idet de er tilsvarende for den første afledede. I dette tilfælde vil vi ligeledes vurdere rækken for den anden stedafledede med en konvergent majorantrække idet

$$\left| \sum_{n=1}^{\infty} \frac{m^2 \alpha + \omega^2 + 1}{m^2 (\alpha^2 m^4 + 1 + 2\alpha m^2 + \omega^2)} \sin(\omega t) m^2 \cos(mx) \right| \leq$$

$$\sum_{n=1}^{\infty} \left| \frac{\alpha + \frac{\omega^2}{m^2} + \frac{1}{m^2}}{\alpha^2 m^2 + \frac{1}{m^2} + 2\alpha + \frac{\omega^2}{m^2}} \right| |\sin(\omega t)| |\cos(mx)| \leq$$

$$\sum_{n=1}^{\infty} \frac{c_1}{c_2 m^2}$$

Uniform konvergens af de øvrige rækker (4.10) og (4.11) vises på tilsvarende måde.

Den afledede med hensyn til tiden.

Når vi skal vurdere konvergens af rækken for den afledede med hensyn til tiden, vil der i rækkerne (4.9) og (4.10) ikke være nogen ændring i forhold til vurderingen af konvergens for selve rækken. Det skyldes at vi kun får multipliceret den oprindelige række med en konstant.

Rækken for den tidsafledede af (4.11) kan, hvis $\alpha \geq 0$, vurderes med en konvergent majorantrække, idet:

$$\left| \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\alpha m^2 \omega}{m^2 (\alpha^2 m^4 + 1 + 2\alpha m^2 + \omega^2)} (-(\alpha m^2 + 1)) e^{-(\alpha m^2 + 1)t} \cos(mx) \right| \leq$$

$$\sum_{n=1}^{\infty} \left| \frac{(\alpha m^2 + 1)(\alpha m^2 \omega)}{m^2 (\alpha^2 m^4 + 1 + 2\alpha m^2 + \omega^2)} \right| e^{-(\alpha m^2 + 1)t} |\cos(mx)| \leq$$

$$\sum_{n=1}^{\infty} \frac{c_3}{c_4 m^2}$$

Da vi hermed kan vise uniform konvergens af de tre delrækker, vil rækken og rækkerne af afledede i funktionen for $W(x, t)$ også konvergere uniformt, hvorved antagelsen på side 39 er opfyldt.

Lemma 4.1 x har cosinusrækken

$$x = \frac{\pi}{2} - \frac{4}{\pi} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\cos(mx)}{m^2} \quad \text{hvor } m = 2n - 1$$

der er uniformt konvergent.

Bevis :

Ved fourierudvikling kan x skrives som :

$$x = \frac{a_0}{2} + \sum_{n=1}^{\infty} a_n \cos(nx)$$

hvor

$$\begin{aligned} a_n &= \frac{2}{\pi} \int_0^{\pi} x \cos(nx) dx \\ &= \frac{2}{\pi} \left(\frac{1}{n} [x \sin(nx)]_0^{\pi} - \frac{1}{n} \int_0^{\pi} \sin(nx) dx \right) \\ &= \frac{2}{\pi} \left(\frac{1}{n^2} [\cos(nx)]_0^{\pi} \right) \\ &= \frac{2}{\pi n^2} (\cos(n\pi) - 1) \\ &= \frac{2}{\pi n^2} ((-1)^n - 1) \\ &= \begin{cases} \frac{4}{\pi n^2} & \text{for } n \text{ ulige} \\ 0 & \text{for } n \text{ lige} \end{cases} \end{aligned}$$

og

$$\begin{aligned} a_0 &= \frac{2}{\pi} \int_0^{\pi} x dx \\ &= \frac{2}{\pi} \left[\frac{1}{2} x^2 \right]_0^{\pi} \\ &= \pi \end{aligned}$$

□

4.1.2 Løsning $U(x, t)$ til differentiallygnings-systemet

Ligning (4.1) side 37 kan nu løses, idet vi af ovenstående beregninger får:

$$\begin{aligned}
 U(x, t) &= V(x, t) + W(x, t) = & (4.12) \\
 &x\gamma \sin(\omega t) - \frac{\pi}{2}\gamma \sin(\omega t) + \\
 &\frac{4\gamma}{\pi} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{(\alpha m^2 + 1)^2 + \omega^2} \frac{\cos(mx)}{m^2} \\
 &\left((\alpha m^2 + \omega^2 + 1) \sin(\omega t) + \alpha m^2 \omega (\cos(\omega t) - e^{-(\alpha m^2 + 1)t}) \right)
 \end{aligned}$$

Idet vi sætter

$$\begin{aligned}
 q &= \frac{4\gamma}{\pi} \\
 r &= (\alpha m^2 + 1)^2 + \omega^2 \\
 k &= \alpha m^2 + \omega^2 + 1 \\
 s &= \alpha m^2 \omega \\
 l &= \alpha m^2 + 1
 \end{aligned}$$

kan (4.13) skrives som

$$\begin{aligned}
 U(x, t) &= \gamma \left(x - \frac{\pi}{2} \right) \sin(\omega t) + & (4.13) \\
 &q \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{r} \left(k \sin(\omega t) + s (\cos(\omega t) - e^{-lt}) \right) \frac{\cos(mx)}{m^2}
 \end{aligned}$$

Dette kan eftervises ved indsættelse i (4.1).

4.1.3 Skalering af intervallet

For direkte at kunne sammenligne den analytiske løsning med en tilsvarende numerisk, skal x -intervallet ændres så $x \in [0, 1]$ istedet for $x' \in [0, \pi]$.

Vi betragter det problem, der er løst analytisk

$$\frac{\partial U}{\partial t'}(x', t') - \alpha \frac{\partial^2 U}{\partial x'^2}(x', t') + U(x', t') = 0 \quad (4.14)$$

hvor $x' \in [0, \pi]$ og $t' \in [0, \infty[$.

Vi definerer nu variabeltransformationerne

$$\begin{aligned} x &= \frac{x'}{\pi} \\ t &= t' \end{aligned}$$

Ifølge kædereglens fås den x -afledede af første orden

$$\begin{aligned} \frac{\partial U(x', t')}{\partial x'} &= \frac{\partial U(x, t)}{\partial x} \frac{\partial x}{\partial x'} = \frac{1}{\pi} \frac{\partial U(x, t)}{\partial x} \Leftrightarrow \\ \frac{\partial U(x, t)}{\partial x} &= \pi \frac{\partial U(x', t')}{\partial x'} \end{aligned}$$

Den x -afledede af anden orden bliver derfor

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 U(x', t')}{\partial x'^2} &= \frac{\partial U(x', t')}{\partial x'} \left(\frac{1}{\pi} \frac{\partial U(x, t)}{\partial x} \right) = \frac{1}{\pi^2} \frac{\partial U(x, t)}{\partial x} \frac{\partial U(x, t)}{\partial x} \Leftrightarrow \\ \frac{\partial^2 U(x, t)}{\partial x^2} &= \pi^2 \frac{\partial^2 U(x', t')}{\partial x'^2} \end{aligned}$$

Tilsvarende er

$$\frac{\partial U(x', t')}{\partial t'} = \frac{\partial U(x, t)}{\partial t}$$

Ligning (4.14) kan nu opstilles for $x \in [0, 1]$:

$$\frac{\partial U}{\partial t}(\pi x, t) - \alpha \pi^2 \frac{\partial^2 U}{\partial x^2}(\pi x, t) + U(\pi x, t) = 0 \quad (4.15)$$

Kapitel 5

Numerisk udregning

Vi har i kapitel 2 opstillet en differentiaalligning af følgende type

$$\frac{\partial U}{\partial t}(x, t) - \alpha \frac{\partial^2 U}{\partial x^2}(x, t) + \beta U(x, t) = 0 \quad (5.1)$$

hvor

$$x \in [0, 1] \text{ og } t \in [0, \infty[$$

Vi har endvidere angivet en analytisk løsning i et enkelt specialtilfælde.

For at kunne løse ligningen for den mere realistiske randbetingelse opstillet i afsnit 2.3.3 vil vi anvende numeriske metoder. For en grundigere gennemgang henvises til [10, del 3].

Betingelsen for at behandle en differentiaalligning numerisk er, at den er repræsenteret på diskret form hvilket betyder, at løsningen til den kun skal beregnes i et endeligt antal punkter.

Denne diskretisering består ganske simpelt i, at hver dimension i ligningens domæne opdeles i et antal punkter som vist på figur 5.1.

Således udvælges fra intervallerne

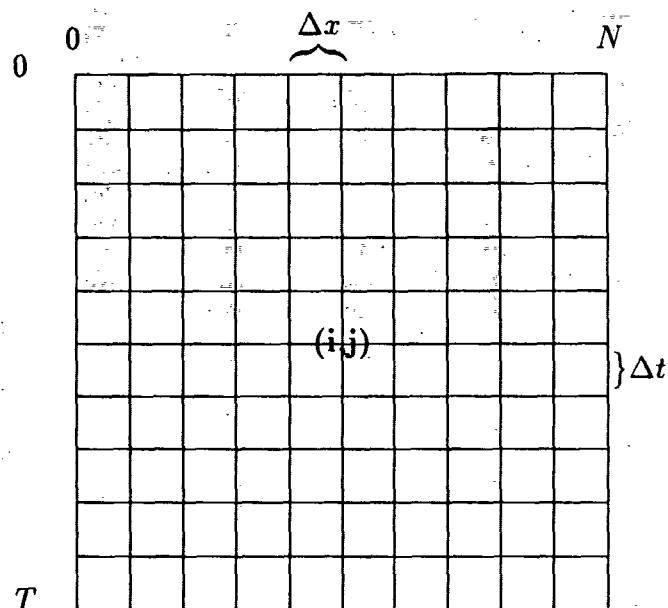
$[0, 1]$ N punkter med den indbyrdes afstand Δx .

$[0, \infty[$ T punkter med afstanden Δt , men det gøres på en sådan måde, at der findes en endelig sluttid $t_1 = T\Delta t$.

Vi definerer nu den numerisk beregnede værdi for $U(i\Delta x, j\Delta t)$:

$$u_{i,j} = u(i\Delta x, j\Delta t) := \tilde{U}(i\Delta x, j\Delta t)$$

for $i = 0, \dots, N \in \mathbb{N}$ og $j = 0, \dots, T \in \mathbb{N}$



Figur 5.1: Ligningens domæne opdelt i $N \times T$ punkter

5.1 Crank Nicholson

Nu betragter vi ligning (5.1) lokalt omkring et punkt

$$U(i\Delta x, (j - 1/2)\Delta t) \approx u_{i,j-1/2}.$$

Ved brug af Taylorudvikling fås:

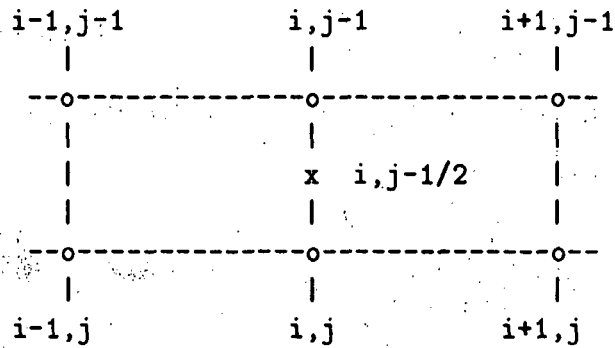
$$\frac{\partial U}{\partial t}(i\Delta x, (j - 1/2)\Delta t) = \frac{u_{i,j} - u_{i,j-1}}{\Delta t} + \mathcal{O}(\Delta t^2) \quad (5.2)$$

$$\frac{\partial^2 U}{\partial x^2}(i\Delta x, (j - 1/2)\Delta t) = \quad (5.3)$$

$$\frac{1}{2} \left(\frac{\partial^2 U}{\partial x^2}(i\Delta x, (j - 1)\Delta t) + \frac{\partial^2 U}{\partial x^2}(i\Delta x, j\Delta t) \right) + \mathcal{O}(\Delta x^4) =$$

$$\frac{1}{2} \left(\frac{u_{i-1,j-1} - 2u_{i,j-1} + u_{i+1,j-1}}{\Delta x^2} + \frac{u_{i-1,j} - 2u_{i,j} + u_{i+1,j}}{\Delta x^2} \right) + \mathcal{O}(\Delta x^4)$$

Af figur 5.2 ses det, at

Figur 5.2: Approximation af punktet x

$$U(i\Delta x, (j-1/2)\Delta t) = \frac{u_{i,j-1} + u_{i,j}}{2} + \mathcal{O}(\Delta t) \quad (5.4)$$

Vi kan nu omskrive ligningsystemet (5.1) ved at indsætte ligningerne (5.2), (5.3) og (5.4), idet vi ser bort fra $\mathcal{O}(\Delta t^2)$ og $\mathcal{O}(\Delta x^4)$.

$$\begin{aligned} \frac{u_{i,j} - u_{i,j-1}}{\Delta t} = & \\ \frac{\alpha}{2} \left(\frac{u_{i-1,j-1} - 2u_{i,j-1} + u_{i+1,j-1} + u_{i-1,j} - 2u_{i,j} + u_{i+1,j}}{\Delta x^2} \right) & \\ - \beta \left(\frac{u_{i,j-1} + u_{i,j}}{2} \right) & \end{aligned} \quad (5.5)$$

Dette kaldes Crank-Nicholson skemaet for ligning (5.1). Ved at samle alle $u_{i,j}$ på venstre side og $u_{i,j-1}$ på højre, fås:

$$\begin{aligned} \frac{u_{i,j}}{\Delta t} - \frac{\alpha}{2} \left(\frac{u_{i-1,j} - 2u_{i,j} + u_{i+1,j}}{\Delta x^2} \right) + \frac{\beta u_{i,j}}{2} = & \\ \frac{u_{i,j-1}}{\Delta t} + \frac{\alpha}{2} \left(\frac{u_{i-1,j-1} - 2u_{i,j-1} + u_{i+1,j-1}}{\Delta x^2} \right) - \frac{\beta u_{i,j-1}}{2} & \end{aligned}$$

Lad nu

$$C_1 = \frac{(\Delta x)^2}{\alpha} \left(\frac{1}{\Delta t} + \frac{\beta}{2} \right) + 1$$

og

$$C_2 = \frac{(\Delta x)^2}{\alpha} \left(\frac{1}{\Delta t} - \frac{\beta}{2} \right) - 1$$

Da fås:

$$\begin{aligned} -u_{i-1,j} + 2C_1 u_{i,j} - u_{i+1,j} = \\ u_{i-1,j-1} + 2C_2 u_{i,j-1} + u_{i+1,j-1} \end{aligned} \quad (5.6)$$

Det er denne ligning den numeriske metode bygger på. Som det ses kan man ikke udregne $u_{i,j}$ eksplicit ud fra u værdierne til tidsskridtet før, det afhænger også af nabopunkterne $u_{i-1,j}$ og $u_{i+1,j}$. Derfor må man for hvert tidsskridt opstille og løse $N - 1$ ligninger med $N - 1$ ubekendte, hvor N er antallet af stedsskridt. På matrix form kan ligning (5.6) skrives som

$$\begin{bmatrix} 2C_1 & -1 & & & \\ -1 & 2C_1 & -1 & & \\ & & \ddots & & \\ & & & -1 & 2C_1 & -1 \\ & & & -1 & 2C_1 & \end{bmatrix} \times \begin{bmatrix} u_{1,j} \\ u_{2,j} \\ \vdots \\ u_{N-2,j} \\ u_{N-1,j} \end{bmatrix} =$$

$$\begin{bmatrix} 2C_2 & 1 & & & \\ 1 & 2C_2 & 1 & & \\ & & \ddots & & \\ & & & 1 & 2C_2 & 1 \\ & & & 1 & 2C_2 & \end{bmatrix} \times \begin{bmatrix} u_{1,j-1} \\ u_{2,j-1} \\ \vdots \\ u_{N-2,j-1} \\ u_{N-1,j-1} \end{bmatrix}$$

For hvert tidsskridt der tages, skal der således løses et ligningssystem som det ovenstående.

Til dette formål kan der benyttes forskellige metoder. Det er umiddelbart oplagt at benytte almindelig Gauss elimination.

Vi har dog valgt at benytte en iterativ metode kaldet SOR (Successive Over Relaxation). Den primære fordel ved denne metode er, at den

kan generaliseres så det er muligt at løse ikke lineære partielle differentiaalligninger [3, side 260]. Dette er ikke muligt ved brug af almindelig Gauss elimination.

En anden fordel ved de iterative metoder er, at man har mere styr på nøjagtigheden, end man har med eliminations metoden. Ved elimination skal matricen omskrives til normalform, hvilket betyder, at man skal foretage en hel del additioner, multiplikationer og divisioner. For hver regneoperation introduceres en lille regnefejl, som muligvis, men ikke nødvendigvis, vokser ved de efterfølgende regneoperationer. Det er derfor lidt vanskeligt at sige, hvor stor den totale fejl er, når man er færdig med at eliminere [11, side III,1,1].

Ved de iterative metoder udnyttes at iterationsformlen har løsninger som tiltrækkende fixpunkt i det $(N - 1)$ -dimensionale rum. Dette gælder i vores tilfælde. Ved omskrivning af ligning (5.6) kan derfor opstilles iterationssystemer, som konvergerer mod den ønskede løsning. Nøjagtigheden af resultatet er nu blot et spørgsmål om, hvor mange gange man itererer. Dette betyder, at man selv kan fastsætte, hvor nøjagtigt man ønsker at regne. Stor nøjagtighed betyder mange iterationer, lille nøjagtighed få. Det skal dog nævnes, at nøjagtigheden i datamaten også sætter visse begrænsninger.

Kapitel 6

Løsningen konverteres til fysiske størrelser

Den numeriske løsning $u(x, t)$ til den lineære partielle differentiaalligning med de realistiske rand- og begyndelsesbetingelser består af en masse ufysiske tal, der dog har noget at gøre med ladningsdensiteten $\rho(x, t)$.

I den eksperimentelle metode forefindes måleresultater i form af de fysiske størrelser impedans \tilde{Z} og admittans \tilde{Y} .

For at sammenligne de matematiske resultater med de eksperimentielt målte, skal vi først omsætte $u(x, t)$ til fysisk ladningsdensitet $\rho(x, t)$, derefter skal vi på baggrund af $\rho(x, t)$ finde udtryk for henholdsvis impedans \tilde{Z} og admittans \tilde{Y} .

Grunden til at vi dimensionerer de numeriske løsninger nu, fremfor først at gøre det når vi har udtryk for impedans og admittans, er at vi kan forestille os, at en del af mellemresultaterne som for eksempel $\rho(x, t)$ og $V_{int}(L, t)$ også kan have en fysisk interesse.

6.1 Fra løsningen $u(x, t)$ til ladningsdensiteten $\rho(x', t')$

Da den numeriske udregning af løsningen er fundet på baggrund af et dimensionsløst problem, skal løsningen $u(x, t)$ dimensioneres før en sammenligning er mulig.

Vi tager fat i de variabeltransformationer, som er blevet benyttet til at gøre problemet dimensionsløst og benytter deres inverse udtryk.

Vi har fra ligning (3.2) variabeltransformationerne

$$\begin{aligned} x &= \frac{x'}{L} \\ t &= \frac{\sigma}{\epsilon} t' \\ U(x, t) &= \frac{\rho(x', t')}{\rho_0} \end{aligned} \quad (6.1)$$

hvor

$$\begin{aligned} x' \in [0, L] & \quad x \in [0, 1] \\ t' \in [0, \infty] & \quad t \in [0, \infty] \\ \rho_0 = \rho^{bulk}, & \quad \text{En typisk konstantværdi,} \\ & \quad \text{her ladningsdensiteten i bulk} \end{aligned}$$

Ladningsdensiteten $\rho(x', t')$ er således givet ved

$$\rho(x', t') = \rho_0 U(x, t) \quad (6.2)$$

Da nu værdierne findes som de diskrete punkter $u_{i,j} := U(i\Delta x, j\Delta t)$ defineres $u_{i,j} = u(i\Delta x, j\Delta t)$. $\rho(x', t')$ kan da findes direkte ved beregningen

$$\begin{aligned} \rho(x', t') &= \rho(i\Delta x', j\Delta t') \\ &= \rho(i\Delta x L, j\Delta t \frac{\epsilon}{\sigma}) \\ &= \rho_0 u(i\Delta x, j\Delta t) \\ &= \rho_0 u_{i,j} \end{aligned}$$

6.2 Fra ladningsdensiteten $\rho(x, t)$ til impedansen $\tilde{Z}(\omega)$

Da måleresultaterne er angivet i impedans $\tilde{Z}(\omega)$ skal de udregnede værdier for ladningsdensiteten $\rho(x, t)$ omregnes til dette.

Af ligning (1.3) side 12 fandt vi, hvordan det totale interne spændingsfald over prøven kan findes på baggrund af ladningsdensiteten $\rho(x, t)$.

$$V_{int}(L, t) = - \int_0^L \int_0^x \frac{\rho(\tilde{x}, t)}{\epsilon} d\tilde{x} dx$$

på samme måde, som det er gjort i formel (1.3) i kapitel 1

Efter samme formel opstilles et udtryk for sammenhængen mellem det eksterne felt og den eksterne spænding. Det antages, at $E_{ext}(\omega, t) = E_0 e^{i\omega t}$ er konstant med hensyn til x , hvilket er rimeligt så længe frekvensen ω ikke bliver alt for stor.

$$\begin{aligned} V_{ext}(\omega, t) &= V_0 e^{i\omega t} \\ &= - \int_0^L E_0 e^{i\omega t} dx \\ &= -E_0 e^{i\omega t} L \Rightarrow \\ E_0 &= -V_0/L \end{aligned} \quad (6.3)$$

Det eksterne felt kan udtrykkes som tilførsel af ladninger til prøven. Denne størrelse kaldes $Q_{ext}(\omega, t)$ og udledes på følgende måde idet $q_{ext}(\omega, t)$ er et udtryk for overfladeladningsdensiteten med dimensionen $\left[\frac{C}{m^2} \right]$

$$\begin{aligned} Q_{ext}(\omega, t) &= A q_{ext}(\omega, t) \\ q_{ext}(\omega, t) &= q_0^{ext} e^{i\omega t} \\ q_0^{ext} &= E_0 \epsilon \end{aligned} \quad (6.4)$$

Tilsammen giver (6.4) og (6.3) udtrykket

$$Q_{ext}(\omega, t) = -\frac{AV_0\epsilon e^{i\omega t}}{L} \quad (6.5)$$

Når systemets input Q_{ext} er periodisk varierende med frekvensen ω , vil det totale interne spændingsfald over prøven variere med samme frekvens når $t \rightarrow \infty$.

Da dette totale interne spændingsfald $V_{int}(\omega, t)$ er opstået som reaktion på den eksterne tilførsel af ladninger $Q_{ext}(\omega, t)$, kan vi opstille responsfunktionen [9, side 102ff].

$$\tilde{G}(\omega, t) = \frac{V_{int}(\omega, t)}{Q_{ext}(\omega, t)}$$

hvor $Q_{ext}(\omega, t)$ er input og $V_{int}(\omega, t)$ er output.

Da disse to størrelser ikke nødvendigvis svinger i fase, introducerer vi nu den frekvensafhængige faseforskel $\phi(\omega)$ til udtrykket for $V_{int}(\omega, t)$ og lader ω optræde som fri variabel:

$$V_{int}(\omega, t) = V_0^{int}(\omega) e^{i(\omega t + \phi(\omega))} \quad (6.6)$$

Responsfunktionen kan nu skrives som en funktion $\tilde{G} : \mathbb{R}_+^2 \rightarrow \mathbb{C}$:

$$\begin{aligned} \tilde{G}(\omega, t) &= \frac{V_{int}(\omega, t)}{Q_{ext}(\omega, t)} \\ &= -\frac{V_0^{int}(\omega) e^{i(\omega t + \phi(\omega))} L}{AV_0\epsilon e^{i\omega t}} \\ &= -\frac{V_0^{int}(\omega) e^{i\omega t} e^{i\phi(\omega)} L}{AV_0\epsilon e^{i\omega t}} \\ &= -\frac{V_0^{int}(\omega) e^{i\phi(\omega)} L}{AV_0\epsilon} \end{aligned} \quad (6.7)$$

Responsfunktionen er dermed en funktion af ω alene.

Impedansen er da givet ved

$$\tilde{Z}(\omega) = \frac{\tilde{G}(\omega)}{i\omega}$$

og admittansen ved

$$\tilde{Y}(\omega) = \frac{1}{\tilde{Z}(\omega)}$$

6.2.1 Opdeling i realdel og imaginærdel

Da det ofte er interessant, at plotte realdel og imaginærdel af $\tilde{Z}(\omega)$ og $\tilde{Y}(\omega)$ hver for sig eller mod hinanden, vil vi opstille formler for disse.

Impedansen

Indsættes responsfunktionen i udtrykket for impedansen fås ved hjælp af eulers formel

$$\begin{aligned}\tilde{Z}(\omega) &= -\frac{V_0^{int}(\omega)L(\cos(\phi(\omega)) + i \sin(\phi(\omega)))}{AV_0\epsilon i\omega} \\ &= -\frac{V_0^{int}(\omega)L(i \cos(\phi(\omega)) - \sin(\phi(\omega)))}{-AV_0\epsilon\omega} \Rightarrow \\ \operatorname{Re}\tilde{Z}(\omega) &= -\frac{V_0^{int}(\omega)L \sin(\phi(\omega))}{AV_0\epsilon\omega} \\ &= \frac{V_0^{int}(\omega) \sin(\phi(\omega))}{AE_0\epsilon\omega} \quad \text{idet } V_0 = -E_0L \quad (6.8)\end{aligned}$$

Admittansen

På tilsvarende måde findes imaginærdelen af admittansen :

$$\begin{aligned}\tilde{Y}(\omega) &= \frac{iAV_0\epsilon\omega}{V_0^{int}(\omega) \cos(\phi(\omega))L + iV_0^{int}(\omega) \sin(\phi(\omega))L} \\ &= \frac{iAV_0\epsilon\omega(V_0^{int}(\omega) \cos(\phi(\omega))L - iV_0^{int}(\omega) \sin(\phi(\omega))L)}{(V_0^{int}(\omega) \cos(\phi(\omega))L)^2 + (V_0^{int}(\omega) \sin(\phi(\omega))L)^2} \\ &= \frac{iAV_0\epsilon\omega V_0^{int}(\omega) \cos(\phi(\omega))L + AV_0\epsilon\omega V_0^{int}(\omega) \sin(\phi(\omega))L}{(V_0^{int}(\omega)L)^2} \\ &= \frac{iAV_0\epsilon\omega \cos(\phi(\omega)) + AV_0\epsilon\omega \sin(\phi(\omega))}{V_0^{int}(\omega)L} \Rightarrow \\ \operatorname{Im}\tilde{Y}(\omega) &= -\frac{AV_0\epsilon\omega \cos(\phi(\omega))}{V_0^{int}(\omega)L} \\ &= \frac{E_0A\epsilon\omega \cos(\phi(\omega))}{V_0^{int}(\omega)} \quad \text{idet } V_0 = -E_0L \quad (6.9)\end{aligned}$$

Kapitel 7

Brugervejledning

I dette kapitel giver vi de oplysninger, der er nødvendige for at kunne anvende det medfølgende system til løsning af diffusionsproblemer - "DIFFUSYSTM".

DIFFUSYSTM er installeret på SUN arbejdsstationen ved navn "euler", der p.t. har til huse i bygning 3.1.5 på instituttet for kognitionsforskning.

I det følgende antager vi derfor at DIFFUSYSTM anvendes på maskinen "euler". Brugervejledningen fremtræder derfor eksemplificerende.

DIFFUSYSTM er beregnet til at løse homogene lineære paraboliske andenordens differentiaalligninger af typen

$$\begin{aligned}\frac{\partial u}{\partial t}(x,t) - \alpha \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}(x,t) + \beta u(x,t) &= 0 \quad x \in [0,1] \quad t \geq 0 \\ u(x,0) &= h(x)\end{aligned}$$

Randbetingelserne for $x = 0$ kan enten være af typen

$$u(0,t) = f_0(t)$$

eller

$$\frac{\partial u}{\partial x}(0,t) = f_0(t)u(0,t) + g_0(t)$$

På samme måde kan randbetingelserne for $x = 1$ være enten

$$u(1, t) = f_1(t)$$

eller

$$\frac{\partial u}{\partial x}(1, t) = f_1(t)u(1, t) + g_1(t)$$

Givet konstanterne α og β , randfunktionerne $f_0(t)$, $g_0(t)$, $f_1(t)$, $g_1(t)$ og begyndelsesfunktionen $h(x)$ kan programmet danne en tabel med funktionen $u(x, t)$ i et forudbestemt antal punkter.

Det forudsættes her, at både ligning samt begyndelses- og randbetingelser er bragt på dimensionsløs form.

7.1 En typisk arbejdsgang

Dette afsnit giver et eksempel på løsningen af et givet problem uden at gå i alle detaljer.

7.1.1 Problemet

Vi forestiller os, at du er stillet overfor problemet

$$\frac{\partial u}{\partial t}(x, t) - 0.7 \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}(x, t) = 0$$

$$u(x, 0) = 1$$

$$u(0, t) = E_0 \sin(\omega t)$$

$$\frac{\partial u}{\partial x}(1, t) = u(1, t) + 2t \sin(\omega t)$$

det vil sige, at

$$\begin{aligned}\alpha &= 0.7 \\ \beta &= 0 \\ h(x) &= 1 \\ f_0(t) &= E_0 \sin(\omega t) \\ g_0(t) &= 0 \text{ bruges ikke} \\ f_1(t) &= 1 \\ g_1(t) &= 2tE_0 \sin(\omega t) \\ E_0 &= 25 \\ \omega &= 2\pi\nu, \tag{7.1}\end{aligned}$$

hvor ν er en variabel, du skal definere når programmet udføres.

7.1.2 Løsningen

For at finde funktionsværdier for $u(x, t)$ skal du nu beslutte dig for, hvilke punkter (x, t) , du vil beregne. Dette gøres ved hjælp af følgende størrelser:

- **spacesteps:**

Antal opdelinger af x -intervallet (for eksempel 100).

- **timesteps:**

Antal opdelinger af t -intervallet (for eksempel 100).

- **final_time:**

Den tid, hvor beregningen skal slutte (for eksempel 1).

Alle disse parametre skal nu indtastes i programmet, så det kan udregne den konkrete løsning.

Start af datamaskinen

For at komme i kontakt med "euler" gøres følgende.

Tekst skrevet med denne type er det som euler skriver til dig. Tekst skrevet med denne type skal du indtaste efterfulgt af returknappen.

- Tænd skærmen foran. Euler vil nu skrive
- euler login:

diffu (dit brugernavn, indtastes)

- password:
???????? (et hemmeligt kodeord, som fås ved henvendelse til forfatterne. Du kan ikke se det mens du taster.)

Du er nu i kontakt med euler og er kendt under brugernavnet diffu.

Der vil gå et lille stykke tid, mens euler åbner sine vinduer for dig.

Du vil nu se en blå skærm med to vinduer i. Vinduet til venstre er en tekst editor, hvori du senere skal specificere problemet og vinduet til højre kaldes kommandovinduet og bruges til at skrive ordrer til DIFFUSYSTM.

Hver gang du vil skrive i et vindue, skal du placere musens markør i det pågældende vindue og klikke med musens venstre knap. Dette fortæller systemet hvilket vindue, der skal acceptere de tegn, du taster.

Du klikker med musen i højre vindue og prøver at skrive kommandoen help. Du får nu alle de mulige kommandoer at se. Dette omfatter generelle kommandoer, til at arbejde med systemet DIFFUSYSTM samt de specielle kommandoer, som eventuelt er tilføjet systemet i en konkret anvendelse af dette.

Euler vil nu udskrive følgende

Følgende kommandoer benyttes til at køre diffusionsligningsprogrammet.

- | | |
|-----------|---|
| numcalc | - Løser det problem, som er sat i problem.sim numerisk. |
| graphmake | - Genererer grafer, fra løsningsfiler. |

- graphdraw** - Tegner genererede grafer.
view - Viser løsninger paa skærmen i form af tal.

Følgende kommandoer benyttes til at arbejde med systemet.

- list** - Viser de filer, som er genereret samt problem.sim.
print - Printer en graf ud.
clearproblem - Genetablerer filen problem.sim, hvis den er blevet slettet.
reset - Genetablerer systemet, hvis det er blevet slettet.
erase - Sletter en fil.
clear - Sletter filerne *.num, *.ana, *.dif, *.graph og *.ps.
help - Viser dette dokument.

Følgende kommandoer benyttes til at behandle impedans og admittans.

- eis** - Løser diffusionsligningen for de forskellige frekvenser og gemmer henholdsvis impedansen og admittansen på fil.
impadm - Genererer grafer for henholdsvis impedansen og admittansen. Disse kan tegnes med graphdraw.

Dette giver en oversigt over kommandoerne i DIFFUSYSTM. Det konkrete problem specificeres nu ved at skrive i filen PROBLEM.SIM. Dette er en lille del af programmet, hvor de størrelser, som du skal angive findes. Du henter PROBLEM.SIM ind i teksteditoren ved at klikke i feltet file i øverste venstre hjørne af editorvinduet med musens højre knap. Herefter skal du angive filnavnet PROBLEM.SIM i det dertil indrettede felt. Du får som sædvanlig adgang til dette felt, ved at klikke i det med musens venstre knap.

Tekstfilen PROBLEM.SIM indeholder dels eksempler og vejledning og dels de programlinier, som du skal kode. Indrammet tekst er kommentarer og vejledning til dig og som sådan ignoreres det af selve programmet. De steder, hvor du skal skrive er linierne efter kommentarerne.

Du kan bevæge teksten op og ned i vinduet ved at bevæge pilen i højre side af tekstvinduet. Dette gøres ved at pege på pilen med musen, holde venstre knap nedtrykket og flytte musen i den ønskede retning. Du kan også bruge piltasterne til at bevæge teksten.

PROBLEM.SIM ser ud som følger:

Det er i denne programdel, at den konkrete diffusionsligning skal beskrives.

Ligningen har formen :

$$\frac{du}{dt}(x,t) - \alpha \frac{d(du)}{dx}(x,t) + \beta u(x,t) = 0$$

hvor $u(x,t)$ er den ubekendte funktion,
 α tilhører \mathbb{R}^+ og
 β tilhører \mathbb{R} .

Randbetingelserne har formerne :

venstre side ($x=0$) :

$$\frac{du}{dx}(0,t) = f(t)u(0,t) + g(t) \quad (\text{Neumann}) \text{ eller}$$

$$u(0,t) = f(t) \quad (\text{Dirichlet})$$

højre side ($x=1$) :

$$\frac{du}{dx}(1,t) = f(t)u(1,t) + g(t) \quad (\text{Neumann}) \text{ eller}$$

$$u(1,t) = f(t) \quad (\text{Dirichlet})$$

hvor $f(t)$ og $g(t)$ er vilkaarlige kontinuerte funktioner.

Begyndelsesbetingelsen har formen :

$$u(x,0) = h(x)$$

hvor $h(x)$ er en vilkaarlig kontinuert funktion defineret paa intervallet $[0,1]$.

Programmet loeser ligningen numerisk ved brug af SOR metoden, og skal dertil bruge foelgende stoerrelser :

Final_time: Tidspunktet hvor udregningen af $u(x,t)$, skal stoppe.

```
| Spacesteps: Antal punkter, som x-intervallet opdeles i (f.eks 10).|
| Timesteps : Antal punkter, som t-intervallet opdeles i (f.eks 400).|
|-----|
| Yderligere vejledning kan faas i den medfoelgende brugervejledning.|
|-----|
```

```
class PROBLEM;
begin
```

```
|-----|
| Ligningens koefficienter alpha og beta skal angives efter|
| lighedstegnet, i form af et rationelt tal afsluttet med et|
| semikolon.
```

```
| Eksempel :
```

```
| long real alpha = 1.4738;
| long real beta  = 1/3;
```

```
|-----|
long real alpha = 1;
long real beta  = 1;
```

```
|-----|
| S.O.R. parametrene timesteps, spacesteps og final_time skal|
| angives her, hver efterfulgt af et semikolon, idet
```

```
| - spacesteps, timesteps er hele tal.
| - final_time er et rationelt tal.
```

```
| Eksempel :
```

```
| integer timesteps   = 1000;
| integer spacesteps  =   50;
| long real final_time =   1.5;
```

```
|-----|
integer timesteps   = 1000;
integer spacesteps  =   35;
long real final_time =   100;
```

Begyndelsesbetingelsen ($t=0$) :

Det er kun de i eksemplet nævnte linier, der skal skrives.

Eksempel 1 :

```
h := 0;
```

Eksempel 2 :

```
h := 2 * x;
```

Eksempel 3 :

```
h := if x < 0.5 then 2 * x
      else 2 * (1 - x);
```

```
class Init;
begin
  long real procedure h(x);
  long real x;
  begin
    h := 0;                                !En funktion af x;
  end;
end ** class Init **;
```

Randbetingelserne i venstre side ($x=0$) :

Det er kun de i eksemplerne nævnte linier, der skal skrives.

Eksempel 1 (Neumann - randbetingelse) :

```
boolean Neumann = TRUE;
```

```
f := 0;
```

```
g := 1.3 * cos(anglefreq * t);
```

Eksempel 2 (Dirichlet - randbetingelse) :

```
boolean Neumann = FALSE;
```

```
f := E_0 * sin(anglefreq * t);
```

```
|
| (g's vaerdi er ligegyldig i Dirichlet tilfaeldet.)
+-----+
class Left;
begin
  boolean Neumann = true;           !Typen;

  long real procedure f(t);
  long real t;
  begin
    f := 0;
  end;

  long real procedure g(t);
  long real t;
  begin
    g := E_0 * sin(anglefreq * t);
  end;
end ** class Left **;

+-----+
| Randbetingelserne i hoejre side (x=1) :
| Det er kun de i eksemplerne naevnte linier, der skal skrives.
| Eksempel 1 (Neumann - randbetingelse) :
|   boolean Neumann = TRUE;
|   f := 0;
|   g := cos(anglefreq * t);
| Eksempel 2 (Dirichlet - randbetingelse) :
|   boolean Neumann = FALSE;
|   f := 5 * exp(10 * t);
| (g's vaerdi er ligegyldig i Dirichlet tilfaeldet.)
+-----+

class Right;
begin
  boolean Neumann = true;           !Typen;

  long real procedure f(t);
```

```

long real t;
begin
  f := 0;
end;

long real procedure g(t);
long real t;
begin
  g := E_0 * sin(anglefreq * t);
end;

end ** class Right **;

```

| Definition af konstanter :

| De konstanter, som benyttes i ligningen, samt i dens randbetin- |
 | gelser beskrives her. Det er konstanter af typen: |

long real	- reelle tal med stor praecision.
real	- reelle tal.
integer	- heltal.

-9

| Tal angivet paa eksponenatform for eksempel $3 \cdot 10^{-9}$ skrives som : |

| $3\&-9$

| Eksempel

| I randbetingelserne defineret ovenfor benyttes konstanterne E_0 |
 | og pi, de defineres som foelger: |

```

| long real pi = 3.1415926538979;
| long real E_0 = 22.22;

```

```

long real pi      = 3.1415926538979;
long real E_0    = 22.22;

```

| Definition af variable :

| De variable, som benyttes i ligningen, samt i dens randbetin- |
 | gelser beskrives her. med variable menes de symboler, som skal |
 | indlases i programmet fra tastatur eller fil. |

Eksempel:

I definitionen af randbetingelserne i ovenstående kommentarer er benyttet variabelen "anglefreq", som er et tal, som skal indlæses fra tastatur eller fil. Denne defineres som følger:

```
long real anglefreq;
```

Derefter indlæses den fra tastatur eller fil når programmet udfoeres, idet følgende skal gøres:

```
anglefreq := inreal * 2 * pi;
```

Skal variablene indlæses fra tastaturet, kan man eventuelt før indlæsningen meddele brugeren, hvad der sker. Dette kan gøres ved at skrive:

```
outtext("Frekvens (Hz) : ");  
breakoutimage;
```

Det er teksten mellem citationstegnene i linien med outtext, som giver den ønskede meddelelse til brugeren.

```
-----  
long real anglefreq;
```

```
outtext("Frekvens (Hz) : ");  
breakoutimage;  
anglefreq := inreal * 2 * pi;
```

```
end * class PROBLEM *;
```

Du skal nu gå ned og rette i linien, hvor konstanten alpha er defineret:

```
long real alpha = 1;
```

Den bliver herefter til:

```
long real alpha = 0.7;
```

Dette svarer således til den værdi for α , som er defineret i skemaet (7.1). Når konstanten defineres er det vigtigt at huske semicolonnet efter tallet.

På denne måde rettes alle de implicerede konstanter α , β , `spacesteps`, `timesteps` og `final_time` sættes til den tid i programteksten.

Begyndelsesbetingelsen skal specificeres efter linien

```
class Left;
```

Dette gøres ved at rette linien for `h` til

```
h := 1;
```

Bemærk at lighedstegnet her er `:=`. Dette skyldes at begyndelsesbetingelsen kan være et funktionsudtryk i modsætning til konstanter som for eksempel α .

Venstre sides randbetingelse angives i linierne efter sætningen

```
class left;
```

Her skal skrives to ting

- `Neumann := FALSE;`

Dette betyder, at det drejer sig som en Dirichlet randbetingelse. Her må kun skrives enten `TRUE` eller `FALSE`.

- `f := E_0 * sin(anglefreq * t);`

Her angives så selve randbetingelsen $E_0 \sin(\omega t)$ ($\omega = \text{anglefreq}$).

Højre sides randbetingelse angives nu i linierne efter

```
class right;
```

Her skal skrives tre størrelser

- `Neumann := TRUE;`

Det er en afledet randbetingelse og der skal specificeres to funktioner:

- `f := 1;`

Her angives så funktionen $f_1(t)$, der skal multipliceres med den ukendte funktion $u(1,t)$.

```
• g := 2 * t * sin(anglefreq * t);
```

og funktionen $g_1(t)$.

Efter dette defineres de implicerede konstanter, det er i dette tilfælde konstanterne E_0 og π . de defineres nu som følger :

```
long real E_0 = 25
```

```
long real pi = 3.1415926538979
```

Til sidst skal variabelen ω defineres, den skal indlæses fra tastaturet, og er givet ved $\omega = \nu * 2\pi$, hvor ν er frekvensen, som skal indlæses.

Dette gøres ved først at definere variabelen :

```
long real omega;
```

Nu skal værdien indlæses, det gøres som følger:

```
outtext(Indtast variabelen  $\nu$  : );
```

```
breakoutimage;
```

```
omega := 2 * pi * inreal;
```

Efter at det konkrete problem, som skal løses er blevet beskrevet skal PROBLEM.SIM gemmes igen. Dette gøres ved igen at klikke i feltet file med musens højre knap og vælge punktet "save current file".

Nu er DIFFUSYSTM klar til at arbejde med dit problem når du beder om det. Her beskrives de kommandoer, som benyttes når selve systemet DIFFUSYSTM benyttes, efter denne beskrivelse kan der være yderligere vejledning i konkrete anvendelser af systemet.

Det opstillede ligningssystem løses, ved at klikke i kommandovinduet med musens venstre knap og skrive

```
numcalc
```

Hvis du ellers har tastet rigtigt, vil dette starte ligningsløseren. Som det første vil DIFFUSYSTM bede om et navn, som filen med løsningerne skal have. Du kan selv vælge dette navn, men hvis du bare trykker på returknappen, får løsningerne navnet "diffusion".

Herefter vil du se følgende udskrift:

```
alpha = 0.7000      Delta x = 0.01
beta  = 0.0000      Delta t = 0.01
```

```
Spacesteps = 100
Timesteps  = 100
Finaltime  = 1
```

Indtast frekvensen :

Her indtastes så den ønskede værdi, for eksempel 100, og når dette er gjort kører programmet videre som følger :

Et punktum = 10 tidsskridt

Regner Faerdig !

Løsningerne gemmes, det tager et øjeblik.

Løsningerne er nu gemt på filen diffusion.num

Det filnavn, du har valgt, har fået suffixet .num, for at DIFFUSYSTM kan se, at det er en fil med numeriske løsninger.

Nu vil du gerne se nogle grafer for den nyligt udregnede løsning, men først skal du udvælge hvilke typer grafer du vil se:

Dette gøres med kommandoen

graphmake

som beder dig om det filnavn, som indeholder løsningen. Når du har angivet dette, ses følgende:

```
u(x=k, t)  - tryk t
u(x,t=k)   - tryk x
>
```

Hvis du taster x vil du få plottet x på førsteaksen og u på andenaksen for fastholdte t værdier. Taster du t vil graferne udtrykke u som funktion af t for fastholdte x værdier.

Prøv at taste x efterfulgt af retur.

Du vil nu blive bedt om at angive for hvilke fastholdte tidsværdier, du vil generere grafer.

```
angiv t værdier i intervallet [0,1]
```

```
>
```

Her kan du prøve at taste 0.1 0.3 0.5 efterfulgt af retur. Graferne vil nu bliver gemt på en ny fil ved navn

```
diffusion.graph
```

Nu kan du vælge at se disse ved at give kommandoen

```
graphdraw
```

Du vil igen blive bedt om filnavnet (her diffusion) hvorefter de tre grafer præsenteres i et nyt vindue.

Klik nu i feltet *hardcopy*.

Her kan du vælge at danne en fil ved navn *diffusion.ps*. Du kan også vælge at printe grafen direkte ved at angive printernavnet *mac*.

Filen *diffusion.ps* kan senere printes med kommandoen

```
print diffusion.ps
```

For at afslutte arbejdet placeres musens markør et sted "i det blå" og der klikkes med højre knap. Her kan punktet *exit* vælges, hvilket afslutter systemet. Når du herefter får en hvid skærm skrives *logout* og du kan slukke for terminalen og gå fra datamaskinen.

Dette eksempel skulle kunne give en ide om gangen i systemet. For at producere et sæt grafer over løsningen gøres i nævnte rækkefølge

1. Skriv de konkrete parametre i programfilen *PROBLEM.SIM* og gem den.
2. udfør kommandoen *numcalc* for at finde løsningen.
3. udfør *graphmake* for at udvælge nogle grafdata.
4. udfør *graphdraw* for at se graferne.

7.2 Syntaksfejl

Hvis du i PROBLEM.SIM har indtastet noget, som programmet ikke forstår, vil du se en fejlmeddelelse når du forsøger at udføre numcalc. Fejlmeddelelsen giver oplysning om fejlens art samt i hvilken linie den findes.

For at rette fejlen skal du gå til editorvinduet og finde linien med fejlen. Dette gøres ved at klikke med musens højre knap i editorens hvide felt. Dette giver en menu hvor du kan vælge punktet `select line at number`. Her indtastes linienummeret fra fejlmeddelelsen og markøren hopper til den pågældende linie. Der er det så op til dig at indtaste den korrekte kode.

Hvis alt går galt, kan du give ordren `clearproblem` som kopierer en frisk PROBLEM.SIM ind, hvorefter du kan begynde forfra.

7.3 Strukturen i DIFFUSYSTM

Den centrale del af systemet er programdelen PROBLEM.SIM, som er den del af hele programmet, hvor den konkrete diffusionsligning skal specificeres. Dette foregår i programmeringssproget SIMULA, hvorfor det er nødvendigt at overholde visse syntaksregler, når man retter i PROBLEM.SIM. Dette er beskrevet i afsnit 7.3.1.

DIFFUSYSTM består derudover af følgende kommandoer :

`help` Giver en kommandooversigt.

`numcalc` Udregner løsningen til det i PROBLEM.SIM specificerede problem.

`anacalc` Udregner *både* en analytisk og en numerisk løsning til problemet så de kan sammenlignes. Det kan for eksempel være at man ønsker at få en ide om de optimale x-t opdelinger og således kalibrere den numeriske ligningsløser i forhold til en kendt analytisk løsning. NB ! Denne kommando forudsætter at man har programmeret en analytisk løsning i programdelen `anacalc.sim`. Dette kræver kendskab til programmering i SIMULA, og kommandoen er derfor ikke inkluderet i kommandooversigten `help`.

`graphmake` udvælger og genererer grafer fra løsningsfilen.

graphdraw Tegner graferne på skærmen.

view giver mulighed for at se matricen med løsningsværdierne.

list Viser en oversigt over alle filer med følgende suffixer:

.num Numeriske løsninger

.ana Analytiske løsninger

.dif Differencen mellem analytiske og numeriske løsninger.

.graph Grafdata genereret af graphmake.

.ps Grafer i printbart format (postscript).

print Printer grafer ud, hvis de findes som .ps filer.

clean Sletter alle filer med ovenstående suffixer, samt andet overflødigt. Dette bør gøres hvis man ikke længere kan overskue alle sine filer, eller hvis man løber ind i pladsproblemer.

erase <filnavn> Sletter en fil.

clearproblem Henter en ny kopi af PROBLEM.SIM. Denne kommando skal bruges, hvis man har lavet utilsigtede rettelser i PROBLEM.SIM og ikke kan rekonstruere dens oprindelige form. Den kan også bruges, hvis man er kommet til at slette den.

reset Det samme som clearproblem, men henter samtlige systemfiler ind igen.

help Udskriver en oversigt over disse kommandoer.

7.3.1 PROBLEM.SIM

Filen PROBLEM.SIM er en del af programmet _numcalc og er som sådan skrevet i programmeringssproget SIMULA. Det er imidlertid ordnet således, at det kun kræver et yderst begrænset kendskab til SIMULA, for at kunne angive nye parametre i denne programdel.

Tekst der er omsluttet af ! og ; tjener som kommentarer og har ingen indflydelse på selve programmet.

Disse kommentarer har til formål, at udpege de steder, hvor der skal skrives. Endvidere giver de eksempler på lovlige indtastninger.

Der er fem konstanter, som skal specificeres. En konstantspecifikation kan foreksempel se ud som følger:

```
integer spacesteps = 100;
```

Her angives den aktuelle værdi i stedet for 100. Det almindelige lighedstegn angiver, at der er tale om en konstant værdi, der må således ikke skrives funktionsudtryk her. Ordet `integer` betyder at konstanten skal tilhøre de hele tal \mathbb{Z} . Hvis der for eksempel står `long real` foran navnet, betyder at den gerne må være et decimaltal, eksempelvis 1.23.

Konstanterne `alpha`, `beta` og `final_time` er således af typen `long real`, hvor `spacesteps` og `timesteps` er af typen `integer`.

Begyndelsesbetingelsen $h(x)$ kan derimod meget vel være et funktionsudtryk, og optræder derfor som en `procedure` i SIMULA. Dette behøver man ikke at bekymre sig om, man observerer blot at lighedstegnet nu er et `:=` (tildelings lighedstegn) og at den frie variabel, der må anvendes er `x`.

```
long real procedure h(x); long real x;
begin
  h := 7 * x;      ! Her maa der ændres;
end;
```

Reglerne for funktionsudtryk er gennemgået i næste afsnit.

Randbetingelserne er også funktionsudtryk, og har den ekstra komplikation, at de kan være enten Dirichlet eller Neumann randbetingelser. Dette skal vælges eksplicit for både venstre og højre side ved at sætte den logiske konstant Neumann lig `TRUE` eller `FALSE` (sand eller falsk).

Alt hvad der vedrører venstre sides randbetingelser foregår i følgende omgivelse:

```
class left;
begin
  boolean neumann = FALSE;

  long real procedure f(t); long real t;
  begin
    f := t**2 + t;
  end;

  long real procedure g(t); long real t;
  begin
    g := 0;
  end;
end;
```

```
end;
```

```
end;
```

Hvis den logiske konstant `neumann` er `FALSE` benyttes kun funktionsudtrykket for `f`. Er den `TRUE` benyttes både `f` og `g`. Funktionerne må afhænge af `t`, samt de parametre, som indlæses i programmet under kørslen.

Højre sides randbetingelser angives på tilsvarende måde i omgivelsen

```
class right;
begin
  boolean neumann = TRUE;

  long real procedure f(t); long real t;
  begin
    f := 8.4 * (cos(5*t) - 1) ;
  end;

  long real procedure g(t); long real t;
  begin
    g := exp(18.01 * t) + t**(-1) ;
  end;
end;
```

Om det er højre eller venstre side, der er tale om kan ses af ordet efter `class`.

I henholdsvis begyndelses- og randbetingelserne kan der også være anvendt konstanter og variable, som skal defineres sidst i `PROBLEM.SIM`. Konstanterne defineres på formen :

```
long real pi = 3.14159265358979
```

Variablene defineres på formen :

```
long real x;
```

Herefter skal de indlæses i `PROBLEM.SIM` dette gøres ved at skrive nogle sætninger som de, der er vist i eksemplet på side 71.

De angivne funktionsværdier, konstanter, variable og logiske konstanter er kun eksempler.

7.3.2 Syntaks af funktionsudtryk

Funktionsudtryk angives på en meget naturlig måde i SIMULA:

tal angives med cifrene 0 1 2 3 4 5 6 7 8 9 samt . (komma) og evt fortegnet -

plus angives med +

minus angives med -

gange angives med *

division angives med /

potens angives med **

e^x angives med exp(x)

cos(x) angives med cos(x)

π angives med pi

\sqrt{x} angives med sqrt(x)

etc..

Der gælder de sædvanlige prioritetsregler således at

$$a * b + c = (a * b) + c$$

og

$$a * (b + c) = a * b + a * c$$

endvidere kan man bruge parenteser som normalt. regneudtrykket

$$\frac{\cos((2n-1)\pi)}{2n-1} e^{d(2n-1)^2}$$

skrives således i SIMULA notation

$$\cos((2*n-1)*pi) / (2 * n - 1) * \exp(d * (2*n-1)**2);$$

Derudover kender SIMULA de fleste almindelige matematiske funktioner, som for eksempel

$$\cos \sin \exp \cosh \sinh \arccos \arcsin \tan \arctan \tanh \sqrt{}.$$

For en grundig indføring i dette henviser vi til [6] og [7].

7.3.3 Gaffelfunktioner

En speciel type funktioner, de såkaldte gaffelfunktioner kræver en lille smule mere SIMULA.

Ønsker man at opstille følgende begyndelsesbetingelse

$$h(x) = \begin{cases} 2x & \text{for } x \in [0, \frac{1}{2}] \\ 2(1-x) & \text{for } x \in]\frac{1}{2}, 1] \end{cases}$$

gøres det således i SIMULA:

```
h(x) := if x <= 0.5 then 2 * x
        else 2 * (1 - x);
```

Her behøver man ikke at spørge om x er uden for intervallet $[0, 1]$, idet det ligger implicit i det dimensionsløse problem.

Den samme funktion kunne have været udtrykt som følger

```
h(x) := if x > 0.5 then 2 * (1 - x)
        else 2 * x;
```

hvoraf det ses at $>=$ svarer til \geq mens $<$ svarer til $<$. På tilsvarende vis skrives \leq som $<=$.

7.4 Editering

Editoren i venstre vindue bruger piltaster som normalt. Man kan slette et tegn med DEL tasten og få ny linie med retur. Man henter en fil ved at klikke i feltet `file` med den højre knap på musen, klikke i det fremkomne vindue i feltet `load`, herefter klikkes i det fremkomne vindue og i dette skrives det ønskede filnavn. Til sidst tastes retur og filen hentes.

Man gemmer filen igen ved at klikke med den højre knap på musen i feltet `file`, herefter klikkes der i feltet `save current file` eller `store as new file` afhængigt af om den editerede tekst skal gemmes under det samme navn eller have et nyt.

Vi henviser her til den medfølgende editormanual for en fuldstændig gennemgang af editoren.

7.5 Musen

Med musen kan man hele tiden placere en markør forskellige steder på skærmen. Denne bruges normalt til at vælge hvilket vindue, man vil skrive i, idet man klikker en gang på musens venstre knap for at tænde markøren i det pågældende vindue.

Musens højre knap fremkalder forskellige menuer afhængigt af hvor markøren er placeret når man trykker.

I feltet file vil menuen for eksempel bestå af punkterne

- Load File...
- Save Current File
- Store as New File...
- Include File...
- Empty Document

Prikkerne betyder, at man skal angive et filnavn.

I det blå område fås en del generelle muligheder, som for eksempel at afslutte.

I teksteditoren's hvide område giver menuknappen adgang til faciliteter som for eksempel søgning af et linienummer.

7.6 Beregning af fysiske størrelser

Da selve løsningen på diffusionsligningen ikke umiddelbart kan sammenlignes med måleresultater fra det fysiske problem, har vi implementeret en konkret applikation til dette formål.

Dette program skalerer først og fremmest løsningen, så den er et udtryk for den faktiske ladningsdensitet - $\rho(x, t)$.

Dernæst udregnes den inducerede spænding på baggrund af ladningsdensiteten, dennes amplitude og faseforskel i forhold til den eksterne spænding.

Endelig beregnes Impedans og Admittans af prøven, som funktion af vinkelfrekvensen ω .

Da disse størrelser er funktioner af frekvensen, må hele problemet udregnes mange gange med forskellige værdier af ω .

Derfor skal du skrive en fil med de værdier, som skal udregnes. Den kan for eksempel hedde **frekvenser**. Dette gøres ved at danne et nyt tekst-dokument, og i dette skrive de relevante frekvenser under hinanden. De skal være af typen integer - heltal.

Dernæst skriver du kommandoen **EIS**, som vil spørge om to ting dels navnet på filen, hvori de enkelte frekvenser er gemt - det kan for eksempel være **frekvenser**, og dels navnet på den fil, som resultatet skal gemmes i - det kan for eksempel være **diffusion**. Når dette er gjort beregnes hele problemet for hvert eneste ω i filen **frekvenser**.

Når **EIS** er færdig (og det kan godt tage sin tid), har den gemt værdier for impedans og admittans på fil. Grafer for disse kan fås ved at bruge kommandoen **impadm**, som genererer grafer for disse størrelser. Disse grafer hedder, hvis der er valgt navnet **diffusion**

diffusion.num.imp og **diffusion.num.adm**.

Endelig kan graferne plottes ved at benytte kommandoen **graphdraw**.

7.7 Symbolliste

SYMBOL	BETYDNING	TALVÆRDI	ENHED
N_b	densiteten af mobile ladninger i bulk	$4.22 \cdot 10^{17}$	m^{-3}
N_c	effektiv densitet af elektrontilstande i N-siliciums ledningsbånd	$3.2 \cdot 10^{25}$	m^{-3}
$\mu^{elch}(x, t)$	elektrokemisk potentiale		eV
$\mu^{ch}(x, t)$	kemisk potentiale		eV
μ	elektrisk mobilitet af mobile ladninger	0.15	$m^2V^{-1}s^{-1}$
$\epsilon(Si)$	dielektricitetskonstant for Silicium	$1.062 \cdot 10^{-10}$	$N^{-1}m^{-2}C^2$
$\epsilon(SiO_2)$	dielektricitetskonstant for Siliciumdioxid	$3.43 \cdot 10^{-11}$	$N^{-1}m^{-2}C^2$
σ	elektrisk ledningsevne	0.01	$\Omega^{-1}m^{-1}$
$E_{int}(x, t)$	internt elektrisk felt		Vm^{-1}
$E_{ext}(x, t)$	eksternt elektrisk felt		Vm^{-1}
E_0	amplituden af det eksterne elektriske felt.	22.22	Vm^{-1}
$V_{int}(x, t)$	intern spænding		V
$V_{ext}(x, t)$	ekstern spænding		V
$(V_0)_{int}$	amplituden af den interne spænding	0.05	V

SYMBOL	BETYDNING	TALVÆRDI	ENHED
$j(x, t)$	elektrisk strømdensitet		Am^{-2}
$j_{Q,T}(x, t)$	tunnelleringsstrømdensitet ved randen		Am^{-2}
$j_{B-S}(x, t)$	strømdensitet fra bulk randen		Am^{-2}
$j_{S-B}(x, t)$	strømdensitet fra randen til bulk		Am^{-2}
$\rho(x, t)$	total ladningsdensitet		Cm^{-3}
$\Delta\rho(x, t)$	ændring i ladningsdensitet		Cm^{-3}
ρ^{bulk}	ladningsdensitet i bulk	0.0676	Cm^{-3}
ρ^{mob}	densitet af mobile ladninger		Cm^{-3}
ρ^{lok}	densitet af lokaliserede ladninger		Cm^{-3}
C	kapacitet		F
C_{M-S}	SiO_2 -lagets kapacitet	$1.93 \cdot 10^{-6}$	F
C_D	kapacitet i depletion		F
C_B	kapacitet i bulk		F
R	modstand		Ω
R_{M-S}	modstand i SiO_2 -laget	1417.12	Ω
R_D	modstand i depletion		Ω
R_B	modstand i bulk		Ω

SYMBOL	BETYDNING	TALVÆRDI	ENHED
T	temperatur hvorunder forsøget foregår	300	K
k	Boltzmanns konstant	$1.38 \cdot 10^{-23}$	JK^{-1}
e	elementarladningen	$1.60 \cdot 10^{-19}$	C
D	diffusionskonstanten	$3.88 \cdot 10^{-3}$	m^2s^{-1}
L	længden af prøven	$2.25 \cdot 10^{-3}$	m
A	tværsnitsarealet af prøven	$6.35 \cdot 10^{-5}$	m^2
Δx	udtrækningen af SiO_2 -laget	$11.3 \cdot 10^{-10}$	m
ΔE	energiforskellen mellem ledningsbåndet og kemisk potentiale i N-silicium ved 300K	0.6	eV
E_c	Energien i ledningsbåndet		eV
E_v	Energien i valensbåndet		eV
Q_s	total ladning på randen	$7.61 \cdot 10^{-11}$	Cm^2
V_T	termisk hastighed af mobile ladninger	$6.74 \cdot 10^4$	ms^{-1}
ω	frekvens som ligger i intervallet [5Hz - 13MHz]		Hz

Hertil tilføjes nogle væsentlige enheder som en hjælp til brug i dimensionsbetragtninger:

$$\begin{aligned}
 V &= kgm^2s^{-2}C^{-1} & N &= kgms^{-1} \\
 C &= As & J &= Nm \\
 \Omega &= VA^{-1} & F &= N^{-1}m^{-1}C^2
 \end{aligned}$$

7.8 Fortolkning af resultater

Måleresultaterne fra den eksperimentelle opstilling fremstilles først og fremmest i grafer, hvor $\log(\omega)$ er plottet mod henholdsvis $\log(\operatorname{Re}Z)$ og $\log(\operatorname{Im}Y)$.

Derfor er det nødvendigt, at også de teoretiske resultater fremstilles på samme måde.

Vi har derfor skrevet et program, der på baggrund af den dimensionsløse løsning udregner

- den interne spænding i tabelform
- amplituden af den interne spænding
- faseforskellen mellem ekstern og intern spænding
- realdelen af impedansen og imaginærdelen af admittansen

Vi har gjort dette for to forskellige randbetingelser:

Den perfekte isolator

Ligningssystemet for den perfekte isolator (se side 21) giver anledning til en ladningsfordeling som vist på figur 7.1

Den beregnede interne spænding bliver som vist på figur 7.2 hvilket svarer til vores forventning.

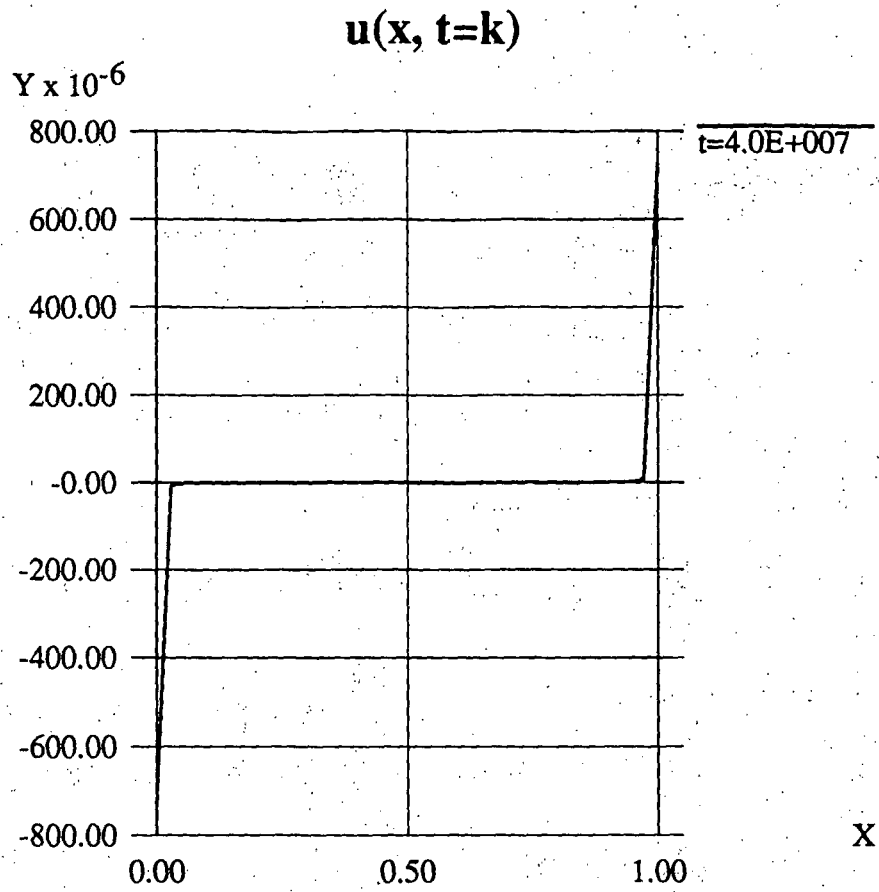
Fasen ligger i intervallet $[-\frac{\pi}{2}, \frac{\pi}{2}]$ og er i dette tilfælde negativ. Dette giver negative værdier for realdelen af impedansen, da det er sinus der indgår i denne. Derfor er det umuligt at fremstille de ønskede grafer, hvor logaritmen til $\operatorname{Re}Z$ optræder¹.

Vi har ikke forfulgt dette nærmere.

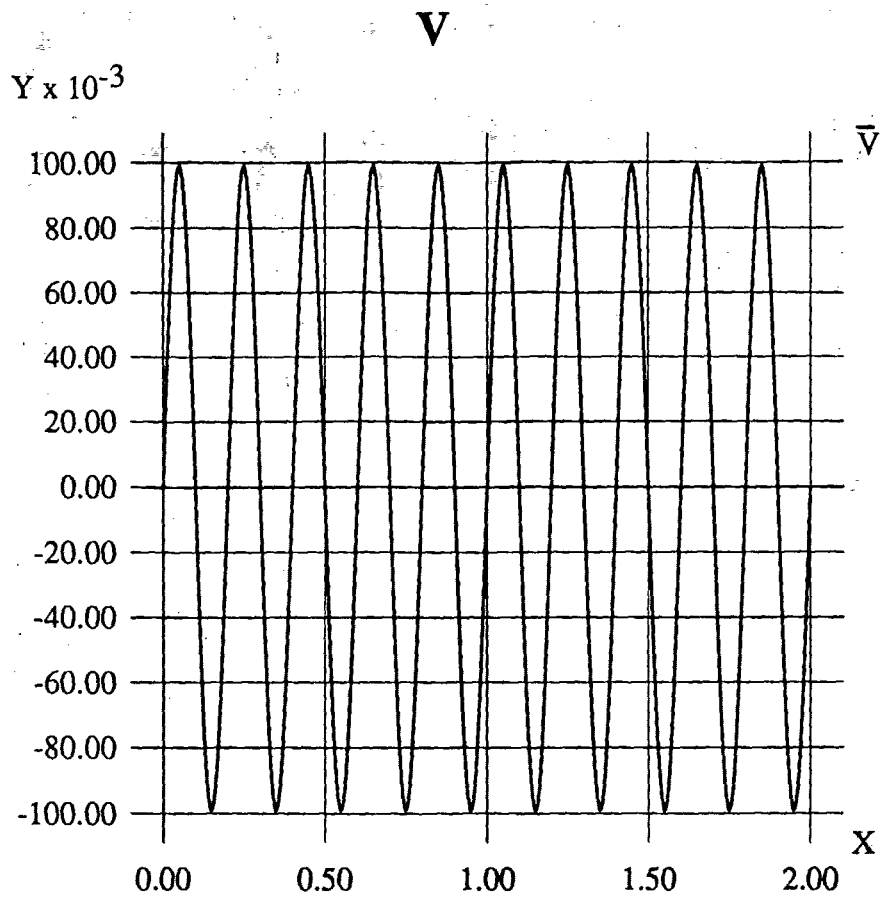
Grafen for admittansen ser ud som på figur 7.3.

Da der ikke foreligger nogle eksperimentelle resultater for den perfekte isolator, kan vi ikke vurdere dette resultat.

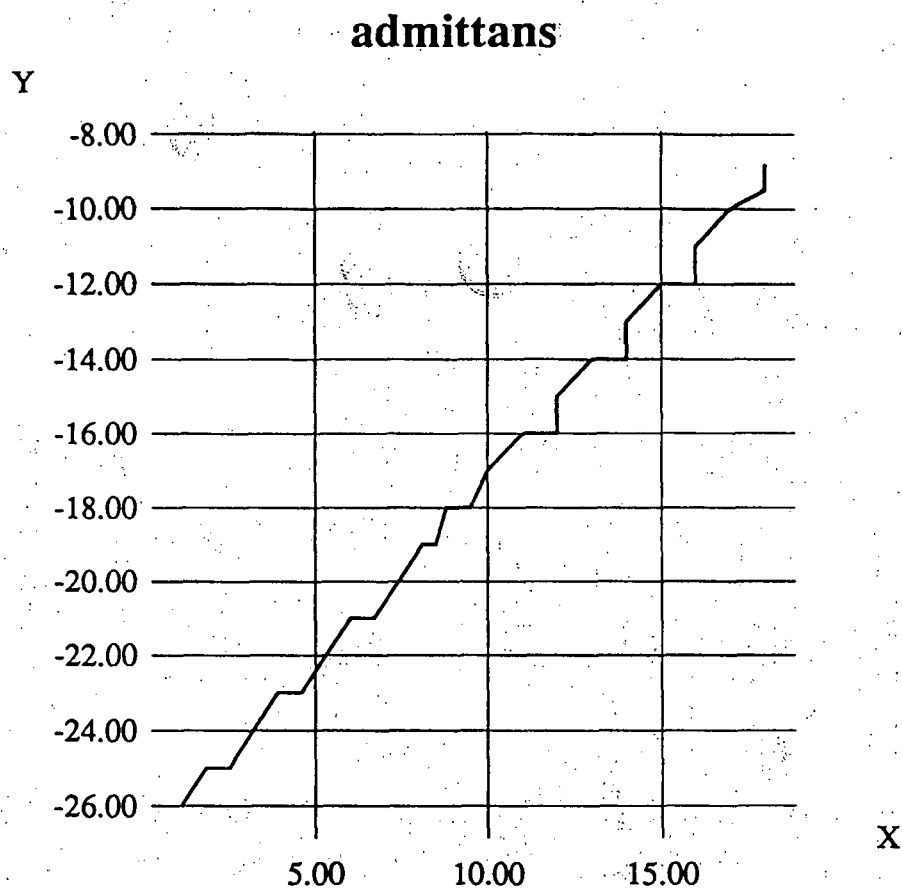
¹Da fasen i praksis altid ligger i intervallet $[0, \frac{\pi}{2}]$ vil det anførte problem med negative værdier for impedansen forsvinde.



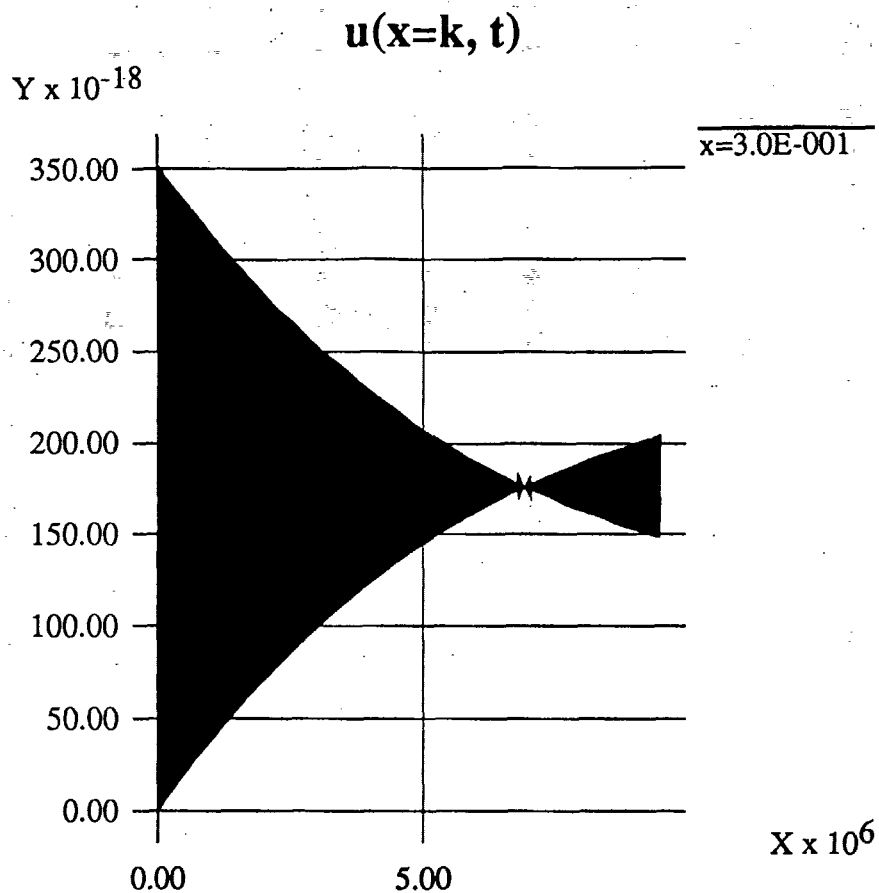
Figur 7.1: Ladningsfordelingen i en perfekt isolator



Figur 7.2: Beregnet intern spænding for den perfekte isolator



Figur 7.3: Logaritmen til admittansen for den perfekte isolator som funktion af logaritmen til frekvensen ω .



Figur 7.4: Ladningsfordelingen for den blandede kontakt som funktion af frekvensen ω

Randbetingelsen for den blandede kontakt

Ligningssystemet med den realistiske randbetingelse (se side 23) giver anledning til en ladningsfordeling som vist på figur 7.4

Vi ser os ikke i stand til at forklare denne graf, men vi mener ikke denne ladningsfordeling giver os nogen anledning til en rimelig udregning af Impedans og admittans.

Her har vi stadig problemet med at fasen kan give anledning til at negative værdier for realdelen af impedansen. Vi observerer nu følgende:

Sammenfatning

Programmet kan løse diffusionsligningen for forskellige randbetingelser. Vi har på behørig vis testet den del af programmet, der har med løsning af diffusionsligningen at gøre. Endvidere er resultaterne for den perfekte isolator i overensstemmelse med vores forventninger.

Generelt er der dog et problem med at beregne realdelen af Impedansen, hvis den skal forudsættes at være positiv. Dette skyldes dog ikke programmeringsfejl, men et problem med hvorledes vi bør fortolke resultaterne.

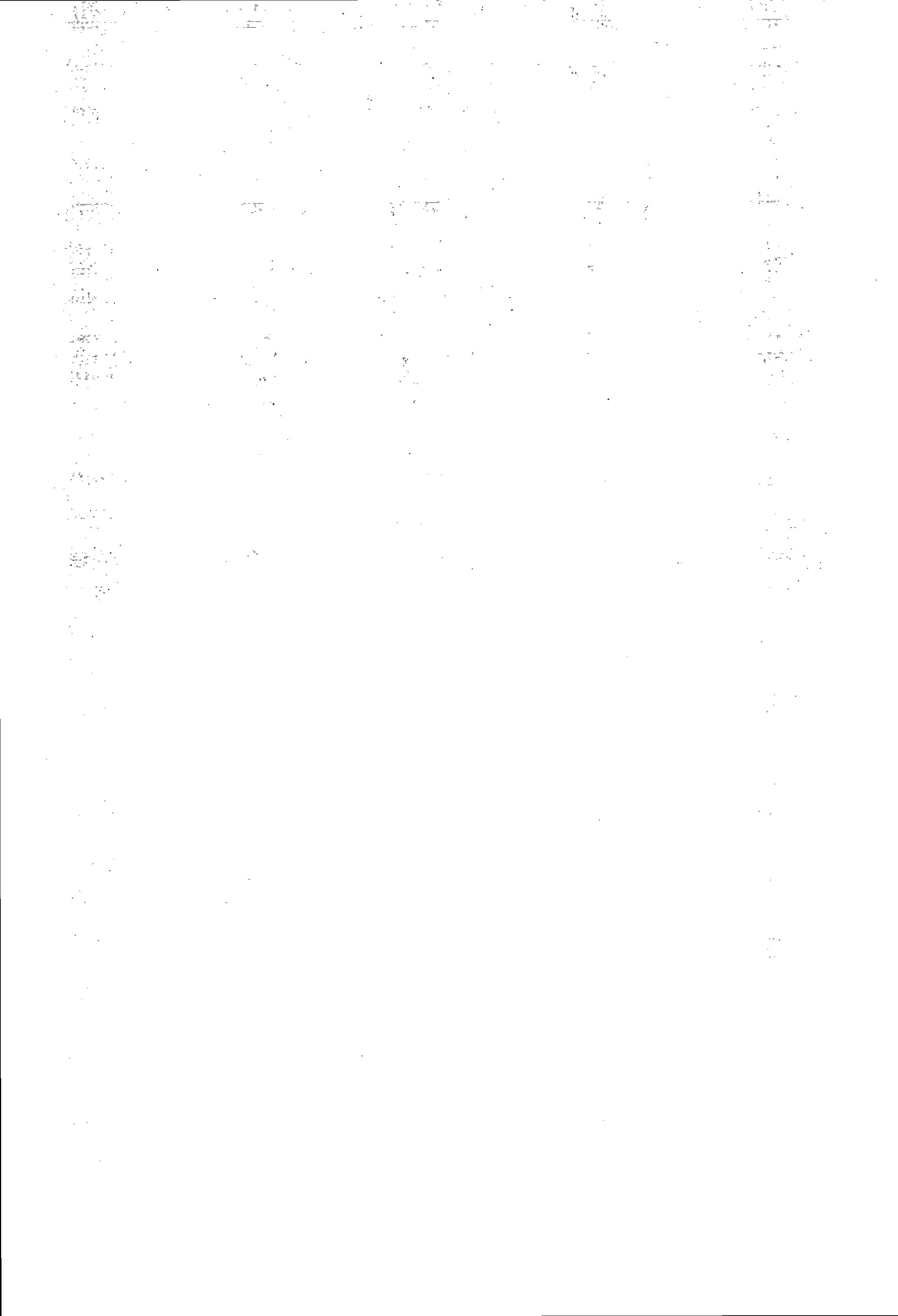
Endelig mener vi at kunne sige, at den opstillede såkaldt realistiske randbetingelse ikke svarer til det system, den skal modellere. Den beregnede ladningsfordeling svarer ikke til noget, som modellen beskriver og vi mener at randbetingelsens mangel på symmetri er i uoverensstemmelse med vores intuitive billede af situationen. Der er imidlertid ikke grund til at tro at den model, der ligger til grund for selve diffusionsligningen er forkert.

Skulle fremtidige forsøg med programmet antyde noget sådant, må man tage de forskellige antagelser op til revision. Det drejer sig først og fremmest om lineariseringen af ligningen (side 18). Her antager vi at σ er konstant, hvilket den faktisk ikke er. Tages der højde herfor vil diffusionsligningen blive ikke-lineær.

Vi konkluderer endelig, at man bør fortsætte arbejdet med at opstille randbetingelser, og at man med fordel kan anvende vores program til at bestyrke eller afkræfte tiltroen til disse.

Del II

Matematisk baggrund



Denne del er baggrunden for den teori, der blev anvendt i Del 1, hvor differentiaalligningen for den perfekte isolerende kontakt blev løst analytisk. Vi vil i det følgende beskrive, hvorledes homogene partielle differentiaalligninger af anden orden, med konstante koefficienter klassificeres, linearitet, superpositionsprincippet samt entydighed og kontinuitet af løsninger til lineære partielle differentiaalligninger. Partielle differentiaalligninger af anden orden er ligninger med funktioner af flere variable, hvori der indgår mindst en afledt af anden orden. De afledede kan være taget med hensyn til en eller flere, af de variable, der indgår i funktionen.

Vi vil gennemgå en del af teorien generelt, med et par sidebemærkninger med den aktuelle ligning. Afsnittet om maksimumsprincippet tager dog direkte udgangspunkt i denne ligning, da dette ikke umiddelbart lader sig generalisere. Udfra dette vises også eksistens og entydighed for den aktuelle ligning. Sidst i delen findes de sætninger vi undervejs refererer til.

Kapitel 8

Klassifikation af partielle differentialligninger af anden orden med konstante koefficienter.

Andenordens partielle differentialligninger klassificeres i tre forskellige grupper.

- Parabolske ligninger
- Hyperbolske ligninger
- Elliptiske ligninger

Vi ser på den partielle differentialligning af anden orden:

$$A \frac{\partial^2 u}{\partial t^2}(x, t) + B \frac{\partial^2 u}{\partial t \partial x}(x, t) + C \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}(x, t) = 0 \quad (8.1)$$

hvor A, B og C er konstanter. I det følgende er underforstået at u er en funktion af x og t .

I denne ligning laver vi variabeltransformationen:

$$\begin{aligned} \xi(x, t) &= \alpha x + \beta t \\ \eta(x, t) &= \gamma x + \delta t \end{aligned} \quad (8.2)$$

Ved kæderegel fås de afledede med hensyn til ξ og η :

$$\begin{aligned}\frac{\partial u}{\partial t} &= \frac{\partial u}{\partial \xi} \frac{\partial \xi}{\partial t} + \frac{\partial u}{\partial \eta} \frac{\partial \eta}{\partial t} \\ &= \beta \frac{\partial u}{\partial \xi} + \delta \frac{\partial u}{\partial \eta}\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\frac{\partial u}{\partial x} &= \frac{\partial u}{\partial \xi} \frac{\partial \xi}{\partial x} + \frac{\partial u}{\partial \eta} \frac{\partial \eta}{\partial x} \\ &= \alpha \frac{\partial u}{\partial \xi} + \gamma \frac{\partial u}{\partial \eta}\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\frac{\partial^2 u}{\partial t^2} &= \left(\frac{\partial}{\partial \xi} \frac{\partial \xi}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial \eta} \frac{\partial \eta}{\partial t} \right) \left(\beta \frac{\partial u}{\partial \xi} + \delta \frac{\partial u}{\partial \eta} \right) \\ &= \beta \frac{\partial^2 u}{\partial \xi^2} \frac{\partial \xi}{\partial t} + \delta \frac{\partial^2 u}{\partial \eta^2} \frac{\partial \eta}{\partial t} + \beta \frac{\partial^2 u}{\partial \xi \partial \eta} \frac{\partial \eta}{\partial t} + \delta \frac{\partial^2 u}{\partial \eta \partial \xi} \frac{\partial \xi}{\partial t} \\ &= \beta^2 \frac{\partial^2 u}{\partial \xi^2} + 2\beta\delta \frac{\partial^2 u}{\partial \xi \partial \eta} + \delta^2 \frac{\partial^2 u}{\partial \eta^2}\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} &= \left(\frac{\partial}{\partial \xi} \frac{\partial \xi}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial \eta} \frac{\partial \eta}{\partial x} \right) \left(\alpha \frac{\partial u}{\partial \xi} + \gamma \frac{\partial u}{\partial \eta} \right) \\ &= \alpha \frac{\partial^2 u}{\partial \xi^2} \frac{\partial \xi}{\partial x} + \gamma \frac{\partial^2 u}{\partial \eta^2} \frac{\partial \eta}{\partial x} + \alpha \frac{\partial^2 u}{\partial \xi \partial \eta} \frac{\partial \eta}{\partial x} + \gamma \frac{\partial^2 u}{\partial \eta \partial \xi} \frac{\partial \xi}{\partial x} \\ &= \alpha^2 \frac{\partial^2 u}{\partial \xi^2} + 2\alpha\gamma \frac{\partial^2 u}{\partial \xi \partial \eta} + \gamma^2 \frac{\partial^2 u}{\partial \eta^2}\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\frac{\partial^2 u}{\partial x \partial t} &= \left(\frac{\partial}{\partial \xi} \frac{\partial \xi}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial \eta} \frac{\partial \eta}{\partial x} \right) \left(\beta \frac{\partial u}{\partial \xi} + \delta \frac{\partial u}{\partial \eta} \right) \\ &= \beta \frac{\partial^2 u}{\partial \xi^2} \frac{\partial \xi}{\partial x} + \beta \frac{\partial^2 u}{\partial \eta \partial \xi} \frac{\partial \eta}{\partial x} + \delta \frac{\partial^2 u}{\partial \eta^2} \frac{\partial \eta}{\partial x} + \delta \frac{\partial^2 u}{\partial \xi \partial \eta} \frac{\partial \xi}{\partial x} \\ &= \beta\alpha \frac{\partial^2 u}{\partial \xi^2} + \beta\gamma \frac{\partial^2 u}{\partial \eta \partial \xi} + \delta\alpha \frac{\partial^2 u}{\partial \xi \partial \eta} + \delta\gamma \frac{\partial^2 u}{\partial \eta^2}\end{aligned}$$

Nu kan følgende udtryk opstilles for ligning (8.1) :

$$\begin{aligned}
 & A\left(\beta^2 \frac{\partial^2 u}{\partial \xi^2} + 2\beta\delta \frac{\partial^2 u}{\partial \xi \partial \eta} + \delta^2 \frac{\partial^2 u}{\partial \eta^2}\right) + \\
 & B\left(\beta\alpha \frac{\partial^2 u}{\partial \xi^2} + (\beta\gamma + \delta\alpha) \frac{\partial^2 u}{\partial \xi \partial \eta} + \delta\gamma \frac{\partial^2 u}{\partial \eta^2}\right) + \\
 & C\left(\alpha^2 \frac{\partial^2 u}{\partial \xi^2} + 2\alpha\gamma \frac{\partial^2 u}{\partial \xi \partial \eta} + \gamma^2 \frac{\partial^2 u}{\partial \eta^2}\right) = \\
 & (A\beta^2 + B\beta\alpha + C\alpha^2) \frac{\partial^2 u}{\partial \xi^2} + \\
 & (2A\beta\delta + B(\beta\gamma + \delta\alpha) + 2C\alpha\gamma) \frac{\partial^2 u}{\partial \xi \partial \eta} + \\
 & (A\delta^2 + B\delta\gamma + C\gamma^2) \frac{\partial^2 u}{\partial \eta^2} = 0 \tag{8.3}
 \end{aligned}$$

Man kan nu spørge om der findes en passende koordinattransformation så ligning (8.3), kan omskrives til den simple form

$$k \frac{\partial^2 u}{\partial \xi \partial \eta} = 0 \tag{8.4}$$

Denne form kan kun opnås, hvis :

$$A\beta^2 + B\beta\alpha + C\alpha^2 = 0 \tag{8.5}$$

$$A\delta^2 + B\delta\gamma + C\gamma^2 = 0 \tag{8.6}$$

sættes $A = C = 0$ kan ligning (8.1) omskrives til:

$$B \frac{\partial^2 u}{\partial x \partial t} = 0$$

som ved variabelskiftet $\xi = x$ og $\eta = t$ giver den ønskede form i (8.4).

Antag nu $A \neq 0$, da skal $\alpha \neq 0$ og $\gamma \neq 0$. Når dette er opfyldt, kan ligningerne (8.5) og (8.6) divideres med henholdsvis α^2 og γ^2 . Herved fås to andengradsligninger i $\frac{\beta}{\alpha}$ og $\frac{\delta}{\gamma}$:

	Hyperbolsk	Parabolsk	Elliptisk
Fortegn for $B^2 - 4AC$	+	0	-
Standardform	$\frac{\partial^2 u}{\partial \xi \partial \eta}$	$\frac{\partial^2 u}{\partial \eta^2}$	$\frac{\partial^2 u}{\partial \eta^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial \xi^2}$

Figur 8.1: Skema over klassifikation af partielle differentiaalligninger

$$A \frac{\beta^2}{\alpha^2} + B \frac{\beta}{\alpha} + C = 0$$

$$A \frac{\delta^2}{\gamma^2} + B \frac{\delta}{\gamma} + C = 0$$

Løsningerne til disse er givet ved:

$$\begin{aligned} \frac{\beta}{\alpha} &= \frac{-B \pm \sqrt{D}}{2A} \\ \frac{\delta}{\gamma} &= \frac{-B \mp \sqrt{D}}{2A} \end{aligned} \quad (8.7)$$

hvor diskriminanten er:

$$D = B^2 - 4AC$$

Klassifikationen af den partielle differentiaalligning (8.1) bestemmes ud fra diskriminanten D i ligning (8.7). Hvis D er positiv, kaldes ligningen for hyperbolsk, hvis D er nul kaldes den for parabolsk og hvis D er negativ kaldes den for elliptisk. På figur 8 ses et skema over klassifikationen.

$D > 0$: Det hyperbolske tilfælde. Variabeltransformationen, som giver den ønskede form i ligning (8.4) opnås ved direkte at aflæse α, β, γ og δ i ligning (8.7), vi får herved at :

$$\begin{aligned}\alpha &= 2A \\ \beta &= -B \pm \sqrt{D} \\ \gamma &= 2A \\ \delta &= -B \mp \sqrt{D}\end{aligned}$$

som er et valg, der opfylder ligning (8.7)

Variabeltransformationen i (8.2) bliver således:

$$\begin{aligned}\xi &= 2Ax + (-B + \sqrt{D})t \\ \eta &= 2Ax + (-B - \sqrt{D})t\end{aligned}$$

For at det skal være muligt at transformere tilbage til de oprindelige variable, skal $\eta \neq \xi$, hvilket betyder at $\beta \neq \delta$. Derfor er β valgt til plus-løsningen og δ til minus-løsningen.

Ved denne transformation, bliver det hyperbolske tilfælde, ved indsættelse i ligning (8.3) :

$$\begin{aligned}(2A\beta\delta + B(\beta\gamma + \delta\alpha) + 2C\alpha\gamma) \frac{\partial^2 u}{\partial \xi \partial \eta} = \\ (2A(B^2 - (\sqrt{B^2 - 4AC})^2) + \\ B(2A(-B + \sqrt{B^2 - 4AC}) + \\ 2A(-B - \sqrt{B^2 - 4AC})) + 2C4A^2) \frac{\partial^2 u}{\partial \xi \partial \eta} = \\ (2A(B^2 - B^2 + 4AC) + B(-4AB) + 8CA^2) \frac{\partial^2 u}{\partial \xi \partial \eta} = \\ -4A(B^2 - 4AC) \frac{\partial^2 u}{\partial \xi \partial \eta} = 0\end{aligned}$$

$D = 0$: Det paraboliske tilfælde.

$$D = B^2 - 4AC = 0 \Leftrightarrow \frac{B}{2A} = \frac{2C}{B}$$

Løsningen til andengradsligningen (8.7) i $\frac{\beta}{\alpha}$, er i dette tilfælde givet ved:

$$A \frac{\beta^2}{\alpha^2} + B \frac{\beta}{\alpha} + C = 0 \Rightarrow$$

$$\frac{\beta}{\alpha} = -\frac{B}{2A} = -\frac{2C}{B}$$

Transformationen bliver således:

$$\xi = 2Ax - Bt$$

$$\eta = t$$

hvor $\eta = \gamma x + \delta t$ kan vælges for vilkårlige γ og δ , så længe $\frac{\delta}{\gamma} \neq \frac{-B}{2A}$.

I dette tilfælde kan vi ikke opnå formen i ligning (8.4), da transformationen ikke kan blive entydig. Den paraboliske ligning (8.3), er i dette tilfælde givet ved:

$$(2A\beta\delta + B(\beta\gamma + \delta\alpha) + 2C\alpha\gamma) \frac{\partial^2 U}{\partial \xi \partial \eta} +$$

$$(A\delta^2 + B\delta\gamma + C\gamma^2) \frac{\partial^2 u}{\partial \eta^2} =$$

$$0 + (A + B \cdot 0 + C \cdot 0) \frac{\partial^2 u}{\partial \eta^2} =$$

$$A \frac{\partial^2 u}{\partial \eta^2} = 0$$

$D < 0$: Det **elliptiske** tilfælde. I dette tilfælde findes der heller ingen variabeltransformation, således at formen i ligning (8.4) kan opnås. Derimod viser det sig, at transformationen:

$$\xi = \frac{2Ax - Bt}{\sqrt{4AC - B^2}}$$

$$\eta = t$$

giver den elliptiske ligning

$$A \left(\frac{\partial^2 u}{\partial \xi^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial \eta^2} \right) = 0$$

Dette fås ved indsættelse af $\alpha = \frac{2A}{\sqrt{4AC-B^2}}$, $\beta = -\frac{B}{\sqrt{4AC-B^2}}$, $\gamma = 0$ og $\delta = 1$ i ligning (8.3).

BEMÆRKNING 8.1

De tre klasser, som ligning (8.1) kan henføres til, er navngivet på baggrund af, hvorvidt formen på den kvadratiske form

$$Ax^2 + Bxt + Ct^2 = Cx + At + A$$

repræsenterer en hyperbel, parabel eller ellipse.

Enhver ligning af formen (8.1) kan omformes til en af tre mulige standardformer, som vist på figur 8.

8.1 Generalisering til alle partielle differentilligninger af anden orden med konstante koefficienter

Generelle andenordens lineære partielle differentilligninger på formen:

$$\begin{aligned} A \frac{\partial^2 u}{\partial t^2}(x, t) + B \frac{\partial^2 u}{\partial x \partial t}(x, t) + C \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}(x, t) + \\ D \frac{\partial u}{\partial t}(x, t) + E \frac{\partial u}{\partial x}(x, t) + Fu(x, t) = 0 \end{aligned} \quad (8.8)$$

klassificeres afhængigt af om principaldelen, det vil sige

$$A \frac{\partial^2 u(x, t)}{\partial t^2} + B \frac{\partial^2 u(x, t)}{\partial x \partial t} + C \frac{\partial^2 u(x, t)}{\partial x^2} \quad (8.9)$$

er hyperbolsk, parabolisk eller elliptisk og dette bestemmes udelukkende af om diskriminanten $B^2 - 4AC$ er større end, mindre end eller lig med 0.

BEMÆRKNING 8.2

Den aktuelle diffusionsligning

$$\frac{\partial u}{\partial t}(x, t) - \alpha \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}(x, t) + u(x, t) = 0$$

er parabolisk, da:

$$B^2 - 4AC = 0^2 - 4 \cdot 0 \cdot (-\alpha) = 0$$

Kapitel 9

Linearitet

Lineære partielle differentiaalligninger udmærker sig ved, at summen af et antal løsninger altid selv er en løsning.

9.1 Linearitet af diffusionsligningen

Vi betragter en andenordens partiel differentialoperator L , der virker på en funktion u :

$$\begin{aligned}L[u] &= \frac{\partial u}{\partial t} - \alpha \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \beta u \\ &= \left(\frac{\partial}{\partial t} - \alpha \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \beta \right) u\end{aligned}$$

Hvis $u(x, t)$ og $v(x, t)$ er vilkårlige funktioner der er to gange differentiable så vil funktionen $au(x, t) + bv(x, t)$, hvor a, b er konstanter, også være to gange differentiable. Hvis operatoren L virker på funktionen $au(x, t) + bv(x, t)$ fås følgende:

$$\begin{aligned}L[au + bv] &= \left(\frac{\partial}{\partial t} - \alpha \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \beta \right) (au + bv) \\ &= a \left(\frac{\partial}{\partial t} - \alpha \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \beta \right) (u) + b \left(\frac{\partial}{\partial t} - \alpha \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \beta \right) (v) \\ &= aL[u] + bL[v]\end{aligned}$$

Dette er netop betingelsen for linearitet.

Sættes operatoren L virkende på $u(x, t)$ lig med en funktion $F(x, t)$, fås en **lineær partiel differentialligning** :

$$L[u] = F(x, t)$$

Den ubekendte funktion $u(x, t)$ er som regel ikke bestemt ved differentialligningen alene, men også ved et sæt af begyndelses- og randbetingelser. Hvis disse betingelser også er lineære i $u(x, t)$, fås det lineære system,

$$\begin{aligned} L[u] &= F \\ L_1[u] &= f_1 \\ L_2[u] &= f_2 \\ &\vdots \\ L_k[u] &= f_k \end{aligned} \tag{9.1}$$

hvor L_i , $i \in \{1, 2, \dots, k\}$ angiver begyndelses og randbetingelserne.

9.2 Superposition

Eksistensen af superpositionsprincippet betyder, at en søgen efter en løsning $u(x, t)$ til (9.1), kan deles op i søgen efter funktioner, som hver især er løsninger til en del af problemet.

Antag at der findes en løsning $v(x, t)$, som kun løser problemet

$$L[v] = F$$

men, ikke tilfredsstillende begyndelses- og randbetingelserne i ligning (9.1).

Da kan vi definere en funktion

$$w = u - v$$

som i følge lineariteten af L , er løsning til den homogene partielle differentiaalligning

$$L[w] = L[u] - L[v] = F - F = 0$$

Derfor kan løsningen u til den heterogene partielle differentiaalligning skrives som summen af den partikulære løsning v og den homogene løsning w

Løsningsfunktionen w , skal derfor opfylde ligningssystemet:

$$\begin{aligned} L[w] &= 0 \\ L_1[w] &= f_1 - L_1[v] \\ L_2[w] &= f_2 - L_2[v] \\ &\vdots \\ L_k[w] &= f_k - L_k[v] \end{aligned}$$

På nøjagtig samme måde kan dette system erstattes med andre systemer, hvor en eller flere af funktionerne f_i er nul. Dette gøres ved at finde en funktion v_i , der tilfredsstiller nogle af restriktionerne for $L[u]$ og subtrahere den fra u .

Problemet i ligning (9.1) kan således splittes op i k simple problemer, hvor hvert problem kun har een betingelse, der ikke er homogen:

Antag for eksempel at u_0 er løsning til systemet:

$$\begin{aligned} L\{u_0\} &= F \\ L_1\{u_0\} &= 0 \\ L_2\{u_0\} &= 0 \\ &\vdots \\ L_k\{u_0\} &= 0 \end{aligned}$$

og, at u_1 er løsning til systemet:

$$\begin{aligned}
 L[u_1] &= 0 \\
 L_1[u_1] &= f_1 \\
 L_2[u_1] &= 0 \\
 &\vdots \\
 L_k[u_1] &= 0
 \end{aligned}
 \tag{9.2}$$

På nøjagtig samme måde defineres nu løsningerne til u_2, \dots, u_k .

Heraf fås at funktionen

$$u = \sum_{i=1}^k u_i$$

er løsning til det oprindelige heterogene problem i ligning (9.1).

Dette princip kan også anvendes på hver enkelt delproblem. Hvis vi har en hel mængde funktioner $\{v^{(1)}, v^{(2)}, \dots\}$, hvor

$$\begin{aligned}
 L[v^{(i)}] &= 0 \\
 L_2[v^{(i)}] &= 0 \\
 &\vdots \\
 L_k[v^{(i)}] &= 0
 \end{aligned}$$

og såfremt f_1 kan udtrykkes som en linearkombination af $L_i[v^{(i)}]$:

$$f_1 = a_1 L_1[v^{(1)}] + a_2 L_1[v^{(2)}] + \dots + a_n L_1[v^{(n)}]$$

vil funktionen

$$u_1 = \sum_i^n a_i v^{(i)}$$

være løsning til problemet (9.2).

Dette kaldes **superpositionsprincippet** og kan generaliseres til en uendelig sum som følger:

Hvis f_j kan udtrykkes ved en uniformt konvergent sum

$$f_j = \sum_{i=1}^{\infty} a_i L_j [v^{(i)}]$$

så er

$$u_j = \sum_{i=1}^{\infty} a_i v^{(i)}$$

løsning, idet L_j virker ledvis i summen.

9.3 Konsekvenser af superposition

9.3.1 Entydighed af heterogene differentiaalligninger

En konsekvens af superposition er, at spørgsmålet om entydighed af løsninger til heterogene lineære problemer reduceres til at undersøge entydighed af løsninger til homogene problemer.

Antag at både u og \tilde{u} er løsninger til den lineære heterogene differentiaalligning (9.1). Da vil funktionen $v = u - \tilde{u}$ være løsning til den homogene differentiaalligning, det vil sige, at

$$\begin{aligned} L[v] &= 0 \\ L_1[v] &= 0 \\ L_2[v] &= 0 \\ &\vdots \\ L_k[v] &= 0 \end{aligned} \tag{9.3}$$

Systemet (9.3) har den trivielle løsning $v \equiv 0$. Hvis løsningen til differentiaalligningen er entydig, vil $u - \tilde{u} = 0$ og ligning (9.1) har *højst* en løsning. Hvis v derimod *ikke* er identisk nul, vil $u + av$ være løsning til ligning (9.1) for enhver konstant a .

9.3.2 Kontinuitet af heterogene differentiaalligninger

Spørgsmålet om kontinuitet kan reduceres ved hjælp af superpositionsprincippet. Lad u være løsning til ligning (9.1) og \bar{u} være løsning til det beslægtede problem

$$\begin{aligned} L[\bar{u}] &= \bar{F} \\ L_1[\bar{u}] &= \bar{f}_1 \\ L_2[\bar{u}] &= \bar{f}_2 \\ &\vdots \\ L_k[\bar{u}] &= \bar{f}_k \end{aligned}$$

Vi kan da betragte løsningsoperatoren \mathbf{L} , som afbildningen:

$$\mathbf{L} : (F, f_1, f_2, \dots, f_k) \rightarrow u$$

Hvis ovenstående system er kontinuert skal der da gælde, at

$$\forall \epsilon \in \mathbb{R} \quad \exists \delta \in \mathbb{R} :$$

$$\max(\|F - \bar{F}\|, \|f_1 - \bar{f}_1\|, \dots, \|f_k - \bar{f}_k\|) \leq \delta \Rightarrow \|u - \bar{u}\| \leq \epsilon \quad (9.4)$$

Sættes nu

$$\begin{aligned} v &= u - \bar{u} \\ G &= F - \bar{F} \\ g_1 &= f_1 - \bar{f}_1 \\ &\dots \\ g_k &= f_k - \bar{f}_k \end{aligned}$$

ses det, at v er løsning til problemet

$$\begin{aligned}
 L[v] &= G \\
 L_1[v] &= g_1 \\
 L_2[v] &= g_2 \\
 &\vdots \\
 L_k[v] &= g_k
 \end{aligned} \tag{9.5}$$

Spørgsmålet om kontinuitet i ligning (9.4) kan derfor formuleres til

$$\forall \epsilon \in \mathbb{R} \exists \delta \in \mathbb{R} : \max(\|G\|, \|g_1\|, \dots, \|g_k\|) \leq \delta \Rightarrow \|v\| \leq \epsilon \tag{9.6}$$

Konklusionen på dette er, at spørgsmålet om kontinuitet af lineære heterogene differentiaalligninger kan reduceres til at undersøge kontinuitet af lineære homogene differentiaalligninger med homogene begyndelses og randbetingelser.

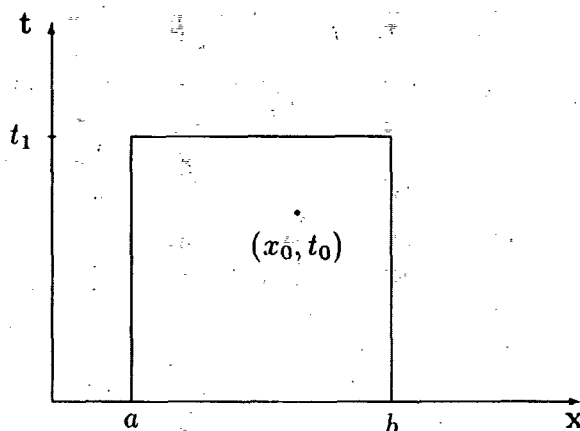
9.4 Kontinuitet og entydighed af løsninger til partielle differentiaalligninger

I dette afsnit, vil vi undersøge om den lineære partielle differentiaalligning

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial u}{\partial t}(x, t) - \alpha \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}(x, t) + \beta u(x, t) &= 0 \\
 u(a, t) &= f_1(t) \\
 u(b, t) &= f_2(t) \\
 u(x, 0) &= g(t)
 \end{aligned} \tag{9.7}$$

af anden orden med konstante koefficienter, er kontinuert og har en entydig løsning.

Da ligning (9.7) er lineær, gælder superpositionsprincippet, hvorfor spørgsmålet om kontinuitet og entydighed kan besvares, ved at undersøge den homogene ligning. Til dette formål, udleder vi et maksimumsprincip for ligningen.



Figur 9.1: Skitse over de dele, som skal undersøges

9.4.1 Maksimumsprincippet

Sætning 9.1 Lad $u(x, t) \in C^2$ opfylde systemet

$$\begin{aligned} \frac{\partial u}{\partial t}(x, t) - \alpha \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}(x, t) + \beta u(x, t) &\leq M \quad x \in]a, b[, t \in]0, t_1[\\ u(a, t), u(b, t), u(x, 0) &\leq M, \quad M \geq 0 \end{aligned} \quad (9.8)$$

α, β er positive konstanter.

Hvis funktionen $u(x, t)$ er løsning til diffusionsligningen og hvis rand og begyndelsesbetingelserne er begrænsede, så kan $u(x, t)$ ikke antage sit maksimum i noget indre punkt:

$$\forall (x, t) \in [a, b] \times [0, t_1] : u(x, t) \leq M$$

Bevis :

Da $u(x, t)$ er kontinuert og defineret på en kompakt mængde, vil den antage sin størsteværdi (maksimum) i et eller flere punkter. Det kan enten være på randen eller i et indre punkt.

Da u er kendt for $t = 0$ og $x = a, b$, skal maksimumsundersøgelsen kun foretages i to tilfælde:

1. De indre punkter.
2. Randpunkter hvor $t = t_1$.

1. Antag at $u(x, t)$ har et positivt maximum $> M$ i det indre punkt $(x_0, t_0) \in]a, b[\times]0, t_1[$ se figur 9.1

I dette punkt vil

$$u(x_0, t_0) > M$$

$$\frac{\partial u}{\partial t}(x_0, t_0) = 0$$

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}(x_0, t_0) \leq 0$$

Derfor vil

$$\frac{\partial u}{\partial t}(x, t) - \alpha \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}(x, t) + \beta u(x, t) > M$$

hvilket er i modstrid med den homogene ligning (9.8). Derfor må $u(x, t) \leq M \quad \forall (x, t) \in]a, b[\times]0, t_1[$

2. Antag nu at $u(x, t)$ har det positive maximum $> M$ i randpunktet $(x_0, t_0) \in]a, b[\times t_1$ se figur 9.1.

I dette punkt vil $\frac{\partial u}{\partial t} \geq 0$ da funktionen i følge antagelsen umuligt kan være aftagende i grænsen til t_1 .

Derfor er

$$u(x_0, t_0) > M$$

$$\frac{\partial u}{\partial t}(x_0, t_0) \geq 0$$

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}(x_0, t_0) \leq 0$$

Her får vi så meget desto mere at:

$$\frac{\partial u(x, t)}{\partial t} - \alpha \frac{\partial^2 u(x, t)}{\partial x^2} + \beta u(x, t) > M$$

hvilket igen giver modstrid med ligning (9.8), hvorfor $u(x, t) \leq M \quad \forall (x, t) \in]a, b[\times t_1$

□

På samme måde kan det vises, at $u(x, t)$ antager sit *minimum* på randen.

9.4.2 Entydighed og kontinuitet

Entydighed

Entydigheden af løsninger til ligning (9.7) kan findes på følgende måde: Antag at funktionerne $v(x, t)$ og $w(x, t)$ begge er løsninger til ligning (9.7). Da vil $u(x, t) = (v - w)(x, t)$ på grund af lineariteten være løsning til ligning (9.8), hvor $M = 0$.

Maksimumsprincippet og minimumsprincippet giver herefter, at

$$u(x, t) = v(x, t) - w(x, t) = 0$$

$\forall x, t$ i hele domænet.

At $u(x, t) \equiv 0$ betyder da, at løsningen $v(x, t)$ er entydig - se side 109

Denne entydighed sikrer dog *ikke* at der faktisk findes en løsning !

Kontinuitet

Ifølge superpositionsprincippet er det tilstrækkeligt, at undersøge kontinuitet af det homogene problem.

Lad $v(x, t)$ være løsning til systemet (9.7), hvor $F(x, t) = 0$: Ifølge ligning (9.6) er det da nok at undersøge om

$$\forall \epsilon \in \mathbb{R} \exists \delta \in \mathbb{R} : \max(\|F\|, \|f_1\|, \|f_2\|, \|g\|) \leq \delta \Rightarrow \|u\| \leq \epsilon$$

Da $\|F\| = 0$ får vi

$$\max(0, \|f_1\|, \|f_2\|, \|g\|) = \max(\|f_1\|, \|f_2\|, \|g\|)$$

Nu siger maximumsprincippet at

$$\max(\|f_1\|, \|f_2\|, \|g\|) \leq M \Rightarrow u \leq M$$

Sætter vi nu $M = \delta = \epsilon$ fås kontinuiteten.

Kapitel 10

Fourierrækker

Løsninger til partielle differentiaalligninger kan ofte udtrykkes som uendelige summer af funktioner. For at kunne udtrykke disse summer, benytter vi os af, at løsningen til differentiaalligningerne er defineret på et endeligt interval, hvilket medfører at de funktioner, som indgår i løsningen, kan udvides, således at de bliver periodiske.

De rækker som løsningen beskrives ved kaldes fourierrækker, og de er defineret som følger:

10.1 Generelle fourierrækker

Lad \mathcal{H} være et vilkårligt hilbertrum, en generel fourierrække for $x \in \mathcal{H}$ er da defineret ved :

$$x = \sum_n \langle x, e_n \rangle e_n \quad (10.1)$$

Det indre produkt $\langle x, e_n \rangle$ kaldes fourierkoefficienten, og e_n er en maksimal ortonormalbasis i hilbertrummet - se side 129.

Ligning (10.1) er en generel fourierrække, idet den gælder i alle separable Hilbertrum - Hilbertrum med en numerabel ortonormal basis.

10.2 Den trigonometriske fourierrække

Lad $\mathcal{L}^2([a, b])$ være mængden af funktioner, hvor det gælder at

$$\int_a^b (|f(x)|)^2 dx < \infty$$

og lad $\mathbf{L}^2([a, b])$ være kvotientstrukturen, hvori der for to funktioner f og g gælder, at

$$f \sim g \Leftrightarrow \int_a^b (|f(x) - g(x)|)^2 dx = 0 \quad (10.2)$$

Af ligning (10.2) ses det, at funktioner, der er ens næsten overalt identificeres i $\mathbf{L}^2([a, b])$.

Funktionsrummet $\mathbf{L}^2([a, b])$ er et Hilbertrum, med det indre produkt defineret ved

$$\langle f, g \rangle = \frac{1}{b-a} \int_a^b f(x) \overline{g(x)} dx$$

og normen defineret ved

$$\|f\| = \langle f, f \rangle^{\frac{1}{2}}$$

Endvidere har $\mathbf{L}^2([a, b])$ den ortonormale basis

$$e_n = e^{\frac{in\pi}{a-b}(a+b-2x)}$$

Den generelle fourierrække i ligning (10.1) bliver i dette tilfælde defineret ved:

$$f = \sum_n \langle f, e_n \rangle e_n = \sum_n \left(\frac{1}{b-a} \int_a^b f(x) e^{-\frac{in\pi}{a-b}(a+b-2x)} dx \right) e^{\frac{in\pi}{a-b}(a+b-2x)}$$

10.3 Konvergens af fourierrækker

I de følgende afsnit ser vi på, hvilke krav der skal opfyldes for at etablere konvergens af trigonometriske fourierrækker.

I kapitlet behandles der kun fourierrækker for funktionen f , som antages at være periodiske med perioden 2π , det er rækker af typen:

$$\sum_n c_n(f) e^{inx}$$

hvor fourierkoefficienten $c_n(f)$ er givet ved

$$c_n(f) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} f(x) e^{-inx} dx$$

og da e^{-inx} udgør et ortonormalsystem i $\mathbf{L}^2([-\pi, \pi])$ vil Bessels ulighed (sætning 11.4, side 129) gælde for funktioner $f \in \mathbf{L}^2([-\pi, \pi])$.

Det vil sige at

$$\sum_n |c_n(f)|^2 \leq \|f\|_2^2 < \infty$$

hvilket implicerer at $c_n(f) \rightarrow 0$ når $n \rightarrow \infty$.

10.3.1 Punktvis konvergens

I beviset for punktvis konvergens indgår formlen for kvotientrækken, summeret fra $-N$ til N :

Lemma 10.1 *Summen af q^n for $n \in \{-N, \dots, N\}$, hvor $|q| < 1$ er givet ved:*

$$S_N = \sum_{n=-N}^N q^n = \frac{q^{-N} - q^{N+1}}{1 - q}$$

Bevis :

$$\begin{aligned}
 S_N(1-q) &= S_N - S_N q \\
 &= \sum_{n=-N}^N q^n - \sum_{n=-N+1}^{N+1} q^n \\
 &= q^{-N} - q^{N+1} \Leftrightarrow \\
 S_N &= \frac{q^{-N} - q^{N+1}}{1-q}
 \end{aligned}$$

□

$\mathbf{L}^1(-\pi, \pi)$ defineres ved kvotientstrukturen, hvor $f \sim g \Leftrightarrow \int_{-\pi}^{\pi} |f-g| = 0$ og hvor $\int_{-\pi}^{\pi} |f| \leq \infty$. Lad nu f være periodisk og defineret i $\mathbf{L}^1([-\pi, \pi])$. Betragt i denne sammenhæng afsnitsfølgen

$$\begin{aligned}
 S_N(\theta) &= \sum_{n=-N}^N c_n(f) e^{in\theta} \\
 &= \sum_{n=-N}^N \left(\frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} f(\phi) e^{-in\phi} d\phi \right) e^{in\theta} \\
 &= \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} f(\phi) \sum_{n=-N}^N e^{-in(\phi-\theta)} d\phi \\
 &= \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi-\theta}^{\pi-\theta} f(\varphi + \theta) \sum_{n=-N}^N e^{-in\varphi} d\varphi \quad (\varphi = \phi - \theta) \\
 &= \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} f(\varphi + \theta) \sum_{n=-N}^N e^{-in\varphi} d\varphi \\
 &= \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} f(\phi + \theta) D_N(\phi) d\phi \quad (\phi = \varphi)
 \end{aligned}$$

hvor

$$D_N(\phi) = \sum_{n=-N}^N e^{-in\phi}$$

kaldes den N 'te dirichletkerne.

Ifølge lemma 10.1 er summen

$$\begin{aligned} \sum_{n=-N}^N e^{-in\phi} &= \frac{e^{iN\phi} - e^{-(N+1)i\phi}}{1 - e^{-i\phi}} \\ &= \frac{e^{(N+\frac{1}{2})i\phi} - e^{-(N+\frac{1}{2})i\phi}}{e^{\frac{1}{2}i\phi} - e^{-\frac{1}{2}i\phi}} \\ &= \frac{\sin((N + \frac{1}{2})\phi)}{\sin(\frac{1}{2}\phi)} \end{aligned}$$

Tillægges $\frac{\sin((N+\frac{1}{2})\phi)}{\sin(\frac{1}{2}\phi)}$ værdien $2N + 1$ for $\phi = 0$ (grænseværdien for $\phi \rightarrow 0$), gælder formelen for $D_N(\phi)$ i hele intervallet $[-\pi, \pi]$.

$D_N(\phi)$ er en lige funktion, det vil sige

$$D_N(-\phi) = D_N(\phi), \quad \phi \in [-\pi, \pi], \quad N \in \mathbb{N}_0$$

da

$$D_N(\phi) = \sum_{n=-N}^N e^{-in\phi} = \sum_{n=-N}^N (\cos(n\phi) - i \sin(n\phi)) = 1 + 2 \sum_{n=1}^N \cos(n\phi)$$

Desuden observeres at

$$\frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} D_N(\phi) d\phi = \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} \left(1 + 2 \sum_{n=1}^N \cos(n\phi) \right) d\phi = 1 \quad (10.3)$$

Sætning 10.1 Dini's TEST

En tilstrækkelig betingelse for, at Fourierrækken $\sum_{n=-\infty}^{\infty} c_n(f) e^{in\theta}$ for en funktion $f \in \mathbf{L}^1([-\pi, \pi])$ er konvergent i punktet θ med summen $S = \sum_{n=-\infty}^{\infty} c_n(f) e^{in\theta}$ er, at

$$\lim_{\phi \rightarrow 0} \frac{|f(\theta + \phi) + f(\theta - \phi) - 2S|}{\phi} < \infty.$$

Bevis :

Da D_N er en lige funktion gælder det at

$$\begin{aligned} S_N(\theta) &= \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} f(\theta + \phi) D_N(\phi) d\phi \\ &= \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^0 f(\theta + \phi) D_N(\phi) d\phi + \frac{1}{2\pi} \int_0^{\pi} f(\theta + \phi) D_N(\phi) d\phi \\ &= \frac{1}{2\pi} \int_0^{\pi} f(\theta - \phi) D_N(\phi) d\phi + \frac{1}{2\pi} \int_0^{\pi} f(\theta + \phi) D_N(\phi) d\phi \\ &= \frac{1}{2\pi} \int_0^{\pi} (f(\theta + \phi) + f(\theta - \phi)) D_N(\phi) d\phi \end{aligned}$$

Og da

$$\frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} D_N(\phi) d\phi = 1$$

ifølge ligning (10.3) vil

$$S = \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} S D_N(\phi) d\phi = \frac{1}{2\pi} \int_0^{\pi} 2S D_N(\phi) d\phi$$

Beregnes differencen mellem $S_N(\theta)$ og S fås

$$\begin{aligned} S_N(\theta) - S &= \\ &= \frac{1}{2\pi} \int_0^{\pi} (f(\theta + \phi) + f(\theta - \phi)) D_N(\phi) d\phi - \frac{1}{2\pi} \int_0^{\pi} 2S D_N(\phi) d\phi = \\ &= \frac{1}{2\pi} \int_0^{\pi} (f(\theta + \phi) + f(\theta - \phi) - 2S) \frac{\sin((N + \frac{1}{2})\phi)}{\sin(\frac{1}{2}\phi)} d\phi = \\ &= \frac{1}{2\pi} \int_0^{\pi} \frac{(f(\theta + \phi) + f(\theta - \phi) - 2S)}{\phi} \frac{\phi}{\sin(\frac{1}{2}\phi)} \sin((N + \frac{1}{2})\phi) d\phi \end{aligned}$$

Dette giver at udtrykket $S_N(\theta) - S$ er fourierkoefficient for funktionen

$$g(\theta) = \frac{(f(\theta + \phi) + f(\theta - \phi) - 2S)}{\phi} \frac{\phi}{\sin(\frac{1}{2}\phi)}$$

med hensyn til ortonormalbasen $\{1, \cos((n + \frac{1}{2})\phi), \sin((n + \frac{1}{2})\phi)\}$.

I følge Riemann Lebesgue's lemma side 131, vil $c_n(g) = S_N(\theta) - S \rightarrow 0$, hvis $g(\theta) \in \mathbf{L}^1([-\pi, \pi])$. Kravet til punktvis konvergens er derfor transformeret til at vise, at $g(\theta) \in \mathbf{L}^1$

$$\frac{1}{2\pi} \int_0^\pi \left| \frac{(f(\theta + \phi) + f(\theta - \phi) - 2S)}{\phi} \frac{\phi}{\sin(\frac{1}{2}\phi)} \right| d\phi \leq \quad (10.4)$$

$$\frac{1}{2\pi} \int_0^\pi \left| \frac{(f(\theta + \phi) + f(\theta - \phi) - 2S)}{\phi} \right| \left| \frac{\phi}{\sin(\frac{1}{2}\phi)} \right| d\phi \leq$$

$$\frac{1}{2\pi} \int_0^\pi \left| \frac{(f(\theta + \phi) + f(\theta - \phi) - 2S)}{\phi} \right| 2d\phi < \infty \quad (10.5)$$

idet $\sup_{\phi \in]0, \pi[} \left(\frac{\phi}{\sin(\frac{1}{2}\phi)} \right) = 2$.

En tilstrækkelig betingelse for, at integralet i ligning (10.4) skal eksistere, er, at g er begrænset, hvilket betyder at grænseværdien af $g(\phi)$ for $\phi \rightarrow 0$ skal eksistere. \square

Dini's test ses ofte formuleret direkte ved ligning (10.5), som giver den præcise betingelse for punktvis konvergens:

Fourierrækken for $f \in L^1([-\pi, \pi])$ er konvergent i punktet θ med summen $S = \sum_{n=-\infty}^{\infty} c_n(f) e^{in\theta}$ hvis og kun hvis

$$\int_0^\delta \frac{|(f(\theta + \phi) + f(\theta - \phi) - 2S)|}{\phi} d\phi < \infty \quad (10.6)$$

hvor $\delta > 0$.

BEMÆRKNING 10.1

Dinis test er specielt opfyldt, hvis $f \in C^1$ og $S = f(\theta)$ idet

$$\begin{aligned} & \frac{f(\theta + \phi) + f(\theta - \phi) - 2f(\theta)}{\phi} = \\ & \frac{f(\theta + \phi) - f(\theta)}{\phi} + \frac{f(\theta - \phi) - f(\theta)}{\phi} = \\ & \frac{f(\theta + \phi) - f(\theta)}{\phi} - \frac{f(\theta - \phi) - f(\theta)}{-\phi} = \\ & \frac{f(\theta + \phi) - f(\theta)}{\phi} - \frac{f(\theta + \phi) - f(\theta)}{\phi} \rightarrow \\ & f'(\theta) - f'(\theta) = 0 \quad \text{for } \phi \rightarrow 0 \end{aligned}$$

10.3.2 Uniform konvergens

Lad f være en periodisk funktion, med en periode på 2π , det vil sige, at $f(-\pi) = f(\pi)$ samt $f \in C^1([-\pi, \pi])$.

Lemma 10.2 For $f \in C^1([-\pi, \pi])$ gælder der, at

$$c_n(f') = in c_n(f)$$

Bevis :

$$\begin{aligned} c_n(f') &= \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} f'(\theta) e^{-in\theta} d\theta \\ &= \frac{1}{2\pi} [f(\theta) e^{-in\theta}]_{-\pi}^{\pi} - \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} f(\theta) (-in) e^{-in\theta} d\theta \\ &= in c_n(f) \end{aligned}$$

□

Sætning 10.2 Fourierrækken $\sum_{n=-\infty}^{\infty} c_n(f) e^{in\theta}$ for $f \in C^1([-\pi, \pi])$ konvergerer uniformt mod $f(\theta)$.

Bevis :

Da $f \in C^1([-\pi, \pi]) \Rightarrow f' \in L^2([-\pi, \pi])$, kan vi ifølge lemma 10.2 og Bessels ulighed side 129 for f' få, at

$$\sum_{n=-\infty}^{\infty} n^2 |c_n(f)|^2 = \sum_{n=-\infty}^{\infty} |c_n(f')|^2 \leq \|f'\|_2^2$$

Ved brug af Cauchy-Schwarz ulighed for summer side 125 giver dette konvergens af rækken, idet

$$\begin{aligned} \sum_{n=-\infty}^{\infty} |c_n(f)| &= \sum_{n=-\infty}^{\infty} n |c_n(f)| \frac{1}{n} \\ &\leq \left(\sum_{n=-\infty}^{\infty} n^2 |c_n(f)|^2 \right)^{\frac{1}{2}} \left(\sum_{n=-\infty}^{\infty} \frac{1}{n^2} \right)^{\frac{1}{2}} \\ &\leq \frac{\pi}{\sqrt{3}} \|f'\|_2 \quad (\text{hvor } n \neq 0) \end{aligned}$$

Her er benyttet at

$$\sum_{n=-\infty}^{\infty} \frac{1}{n^2} = 2 \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n^2} = 2 \frac{\pi^2}{6} = \frac{\pi^2}{3}$$

Da

$$\sum_{n=-\infty}^{\infty} |c_n(f)|$$

er en konvergent majorantrække for $\sum_{n=-\infty}^{\infty} c_n(f)e^{in\theta}$, konvergerer denne uniformt mod en funktion \tilde{f} , men da $f \in C^1([-\pi, \pi])$ er Fourierrækken punktvis konvergent mod $f(\theta)$ for alle $\theta \in \mathbb{R}$, det vil sige at $f = \tilde{f}$, i følge bemærkning 10.1 side 121. \square

Der er imidlertid flere funktioner end de differentiable, som har en fourierrække, der konvergerer uniformt. Disse funktioner er netop de, der tilhører følgende klasse

$$\mathcal{H}_1([-\pi, \pi]) = \left\{ f(\theta) = \int_{-\pi}^{\theta} g(\theta) d\theta + k \mid g \in L^2([-\pi, \pi]), c_0(g) = 0, k \in \mathbb{C} \right\}$$

Disse funktioner er kontinuerte, periodiske og differentiable næsten overalt med

$$f' = g \in L^2([-\pi, \pi])$$

Her gælder ligeledes at

$$inc_n(f) = c_n(g)$$

og, at fourierrækken for $f \in \mathcal{H}_1([-\pi, \pi])$ konvergerer uniformt.

10.3.3 Oversigt

Fourierrækken for f konvergerer

Punktvis mod S , hvor

$$S = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{f(\theta + \epsilon) + f(\theta - \epsilon)}{2}$$

hvis og kun hvis

$$\int_0^\delta \frac{|f(\theta + \phi) + f(\theta - \phi) - 2S|}{\phi} d\phi < \infty$$

Uniformt mod f , hvis og kun hvis

$$f \in \mathcal{H}_1([-\pi, \pi]) =$$

$$\left\{ f(\theta) = \int_{-\pi}^{\theta} g(\theta) d\theta + k \mid g \in L^2([-\pi, \pi]), c_0(g) = 0, k \in \mathbb{C} \right\}$$

Kapitel 11

Diverse sætninger

I dette kapitel vil de sætninger, lemmaer og definitioner der er blevet benyttet i det foregående, blive præsenteret.

Sætning 11.1 *Cauchy-Schwarz' ulighed*

For alle $x, y \in V$, hvor V er et vektorrum med et indre produkt, gælder der, at

$$|\langle x, y \rangle|^2 \leq \langle x, x \rangle \langle y, y \rangle$$

Bevis :

Uligheden er trivielt opfyldt for $y = 0$. Hvis uligheden derudover skal gælde for alle y , kan vi antage, at $\langle y, y \rangle = 1$. Hvis dette ikke er tilfældet, kan vi definere $y' = \frac{y}{\|y\|}$, hvorefter beviset forløber som nedenstående: For alle $\alpha \in \mathbb{C}$ fås at

$$\begin{aligned} 0 &\leq \langle x - \alpha y, x - \alpha y \rangle \\ &= \langle x, x - \alpha y \rangle - \alpha \langle y, x - \alpha y \rangle \\ &= \overline{\langle x - \alpha y, x \rangle} - \alpha \overline{\langle x - \alpha y, y \rangle} \\ &= \overline{\langle x, x \rangle} - \overline{\alpha \langle y, x \rangle} - \alpha \overline{\langle x, y \rangle} + \alpha \overline{\alpha \langle y, y \rangle} \\ &= \langle x, x \rangle - \overline{\alpha} \langle x, y \rangle - \alpha \langle y, x \rangle + \alpha \overline{\alpha} \langle y, y \rangle \\ &= \langle x, x \rangle - \overline{\alpha} \langle x, y \rangle - \alpha \langle y, x \rangle + \alpha \overline{\alpha} \end{aligned}$$

Den sidste lighed fås, som en konsekvens af antagelsen $\langle y, y \rangle = 1$.
Vælges specielt $\alpha = \langle x, y \rangle$ fås

$$\begin{aligned} 0 &\leq \langle x, x \rangle - \langle y, x \rangle \langle x, y \rangle - \langle x, y \rangle \langle y, x \rangle + \langle x, y \rangle \langle y, x \rangle \\ &= \langle x, x \rangle - \langle y, x \rangle \langle x, y \rangle \\ &= \langle x, x \rangle - |\langle x, y \rangle|^2 \end{aligned}$$

Det skal bemærkes, at der kun gælder lighedstegn i uligheden, hvis $x = \alpha y$, det vil sige hvis x og y er lineært afhængige. Dette ses af følgende

$$\begin{aligned} |\langle x, y \rangle|^2 &= |\langle \alpha y, y \rangle|^2 \\ &= |\alpha|^2 \langle y, y \rangle \langle y, y \rangle \\ &= \langle \alpha y, \alpha y \rangle \langle y, y \rangle \\ &= \langle x, x \rangle \langle y, y \rangle \end{aligned}$$

□

Definition 11.1 *Ortogonal/-normal mængde* To vektorer $x, y \in V$ kaldes *ortogonale*, hvis $\langle x, y \rangle = 0$. En *ortogonal mængde* (eller et *ortogonalsystem*) M , er en mængde af parvist ortogonale vektorer, fra Hilbertrummet \mathcal{H} . Mængden M er *ortonormal* (eller et *ortonormalsystem*), hvis $\|x\| = 1$ for alle $x \in M$.

Sætning 11.2 *Pythagoras sætning*

Lad x_1, \dots, x_n være et ortogonalsystem, da gælder følgende

$$\left\| \sum_{i=1}^n x_i \right\|^2 = \sum_{i=1}^n \|x_i\|^2$$

Bevis :

$$\begin{aligned}
\left\| \sum_{i=1}^n x_i \right\|^2 &= \left\langle \sum_{i=1}^n x_i, \sum_{j=1}^n x_j \right\rangle \\
&= \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n \langle x_i, x_j \rangle \\
&= \sum_{i=1}^n \langle x_i, x_i \rangle \\
&= \sum_{i=1}^n \|x_i\|^2
\end{aligned}$$

□

Definition 11.2 *Underrummet U*

Lad U være et underrum af V . Ved $\text{span}(e_1, \dots, e_n)$ forstås alle endelige linearkombinationer af vektorerne e_1, \dots, e_n som udspænder underrummet U .

Sætning 11.3 *Bessels approksimationssætning*

Lad e_1, \dots, e_n være et endeligt eller tælleligt ortonormalsystem i Hilbertrummet \mathcal{H} . For ethvert $x \in \mathcal{H}$ findes der netop en vektor $u \in \text{span}(e_1, \dots, e_n)$, således, at $(x - u) \perp \text{span}(e_1, \dots, e_n)$, og den er givet ved

$$u = \sum_{i=1}^n \langle x, e_i \rangle e_i \quad (11.1)$$

For en vilkårlig vektor $v = \sum_{i=1}^n \lambda_i e_i \in \text{span}(e_1, \dots, e_n)$ gælder der endvidere at

$$\|x - v\|^2 = \|x - u\|^2 + \sum_{i=1}^n |\langle x, e_i \rangle - \lambda_i|^2 \quad (11.2)$$

u er således x 's orthogonalprojektion på $\text{span}(e_1, \dots, e_n)$.

Bevis :

Ligning (11.1) fås nu af følgende, idet $u \in \text{span}(e_1, \dots, e_n)$. Det vil sige, at $u = \sum_{i=1}^n \mu_i e_i$, men da $(x - u) \perp \text{span}(e_1, \dots, e_n)$ vil

$$0 = \langle x - \sum_{i=1}^n \mu_i e_i, e_j \rangle = \langle x, e_j \rangle - \sum_{i=1}^n \mu_i \langle e_i, e_j \rangle \Leftrightarrow \\ \langle x, e_i \rangle = \mu_i \text{ for } i = 1, 2, \dots, n$$

Ligning (11.2) følger nu af Pythagoras sætning, da $(x - u) \perp (u - v)$

$$\|x - v\|^2 = \|x - u + u - v\|^2 \\ = \|x - u\|^2 + \|u - v\|^2$$

af dette fås ligning (11.2) direkte idet

$$\|u - v\|^2 = \left\| \sum_{i=1}^n \mu_i e_i - \sum_{j=1}^n \lambda_j e_j \right\|^2 \\ = \left\| \sum_{i=1}^n \langle x, e_i \rangle e_i - \sum_{i=1}^n \lambda_i e_i \right\|^2 \\ = \sum_{i=1}^n \|\langle x, e_i \rangle e_i - \lambda_i e_i\|^2 \\ = \sum_{i=1}^n |\langle x, e_i \rangle - \lambda_i|^2 \|e_i\|^2 \\ = \sum_{i=1}^n |\langle x, e_i \rangle - \lambda_i|^2$$

□

BEMÆRKNING 11.1

For $v \in \text{span}(e_1, \dots, e_n)$ gælder der i følge Bessels approximationsætning, at $\|x - v\| \geq \|x - u\|$, hvor der gælder $>$ når $u \neq v$. Vektoren u er altså den vektor i $\text{span}(e_1, \dots, e_n)$, der har den korteste afstand til x . Denne vektor kaldes den ortogonale projektion af x på $\text{span}(e_1, \dots, e_n)$.

Sætning 11.4 Bessels ulighed

Lad igen (e_1, \dots, e_n) være et endeligt eller tælleligt ortonormalsystem i Hilbertrummet \mathcal{H} . Da gælder det for alle $x \in \mathcal{H}$ at

$$\sum_{i=1}^n |\langle x, e_i \rangle|^2 \leq \|x\|^2$$

Bevis :

Følger direkte af Bessels approximationsætning og brug af Parsevals ligning (definition 11.4), sæt blot $v = 0$. \square

Definition 11.3 Ortonormalbasis

Lad \mathcal{H} være et Hilbertrum, og lad U bestå af endelig eller tællelig mange ortonormale vektorer $(e_i)_{i \in I}$. En vektor $x \in \mathcal{H}$, vil da tilhøre det af U frembragte afsluttede underrum W , hvis og kun hvis der findes en følge $(\alpha_i)_{i \in I}$ af skalarer, således at $x = \sum_k \alpha_k e_k$, og hvor $\sum_k |\alpha_k|^2 < +\infty$. $(e_i)_{i \in I}$ vil da kaldes for en ortonormal basis, for Hilbertrummet \mathcal{H} hvis $W = \mathcal{H}$, det betyder, at enhver vektor $x \in \mathcal{H}$ har formen

$$x = \sum_{i=1}^{\infty} \langle x, e_i \rangle e_i$$

Følgen $(e_i)_{i \in I}$ er total, hvis man af $\langle x, e_i \rangle = 0$ for alle $i \in I$ kan slutte at $x = 0$.

Sætning 11.5 Ortonormalbasis

Følgen $(e_i)_{i \in I}$ er en ortonormalbasis i hilbertrummet \mathcal{H} , hvis og kun hvis en af følgende tre betingelser er opfyldt

1.

$$\forall x, y \in \mathcal{H} : \langle x, y \rangle = \sum_{i=1}^{\infty} \langle x, e_i \rangle \langle e_i, y \rangle$$

2.

$$\forall x \in \mathcal{H} : \|x\|^2 = \sum_{i=1}^{\infty} |\langle x, e_i \rangle|^2$$

3.

$(e_i)_{i \in I}$ er en total følge i \mathcal{H}

Bevis :

\Rightarrow :

Beviset for (1) fås af $x = \sum_{i=1}^{\infty} \langle x, e_i \rangle e_i$ og $y = \sum_{i=1}^{\infty} \langle y, e_i \rangle e_i$ da

$$\begin{aligned} \langle x, y \rangle &= \left\langle \sum_{i=1}^{\infty} \langle x, e_i \rangle e_i, \sum_{j=1}^{\infty} \langle y, e_j \rangle e_j \right\rangle \\ &= \sum_{i=1}^{\infty} \langle x, e_i \rangle \langle e_i, \sum_{j=1}^{\infty} \langle y, e_j \rangle e_j \rangle \\ &= \sum_{i=1}^{\infty} \langle x, e_i \rangle \sum_{j=1}^{\infty} \overline{\langle y, e_j \rangle} \langle e_i, e_j \rangle \\ &= \sum_{i=1}^{\infty} \langle x, e_i \rangle \langle e_i, y \rangle \end{aligned}$$

Beviset for (2), er en følge af ovenstående, idet det er et specialtilfælde af dette.

Beviset for (3), ses af definitionen for at være en totalfølge, samt af (2):

Hvis x er ortogonal på alle e_i , fås af (2) at

$$\langle x, e_i \rangle = 0 \text{ for alle } i \Rightarrow \|x\|^2 = 0 \Rightarrow x = 0$$

\Leftarrow :

Da vi har at følgen $(e_i)_{i \in I}$ er total, og sætter vi $y = \sum_{i=1}^{\infty} \langle x, e_i \rangle e_i$, så vil

$$\begin{aligned} \langle x - y, e_j \rangle &= \langle x - \sum_{i=1}^{\infty} \langle x, e_i \rangle e_i, e_j \rangle \\ &= \langle x, e_j \rangle - \sum_{i=1}^{\infty} \langle x, e_i \rangle \langle e_i, e_j \rangle \\ &= \langle x, e_j \rangle - \langle x, e_j \rangle = 0 \end{aligned}$$

Heraf får vi resultatet

$$x - y = 0 \rightarrow x = y$$

Derfor ses det at (e_i) er en basis. □

Definition 11.4 *Fourierrækker og Parsevals ligning* Rækkeudviklingen $x = \sum_k \langle x, e_k \rangle e_k$ kaldes ofte for *Fourierrækkeudviklingen* for x med hensyn til ortonormal basen (e_i) ; tallene $\langle x, e_i \rangle$ kaldes ofte for *Fourierkoefficienterne* for x i ortonormal basen e_i , og ligningen $\|x\|^2 = \sum_{i=1}^{\infty} |\langle x, e_i \rangle|^2$ kaldes for *Parsevals ligning*.

Lemma 11.1 *Riemann - Lebesgue* For funktioner $f \in \mathbf{L}^1([-\pi, \pi])$ er *fourierkoefficienterne* veldefinerede, og der gælder som i \mathbf{L}^2 at $c_n(f) \rightarrow 0, n \rightarrow \infty$

Bevis :

Først bevises det at forierkoefficienterne er veldefinerede for funktioner $f \in \mathbf{L}^1$. Dernæst viser vi at $\mathbf{L}^2([-\pi, \pi])$ ligger tæt i $\mathbf{L}^1([-\pi, \pi])$. Det er beviset for dette, som benyttes til at opfylde sætningens krav.

Fourierkoefficienterne er veldefinerede for $f \in \mathbf{L}^1([-\pi, \pi])$ da

$$\int_{-\pi}^{\pi} |f(x)e^{-inx}| dx = \int_{-\pi}^{\pi} |f(x)| dx = \|f\|_1 < \infty$$

Bevis for, $\mathbf{L}^2([-\pi, \pi])$ ligger tæt i $\mathbf{L}^1([-\pi, \pi])$

Vi definerer funktionen

$$f_A(\theta) = \begin{cases} f(\theta) & \text{for } |f(\theta)| \leq A \\ 0 & \text{for } |f(\theta)| > A \end{cases}$$

hvor $f \in \mathbf{L}^1([-\pi, \pi])$ og $A > 0$.

Funktionen $f_A \in \mathbf{L}^2([-\pi, \pi])$ idet $f_A(\theta) \leq A$ således, at

$$\int_{-\pi}^{\pi} |f(\theta)|^2 d\theta \leq \int_{-\pi}^{\pi} A^2 d\theta = 2\pi A^2 \quad (11.3)$$

Ud fra ligning (11.3) og definitionen af $f_A(\theta)$ kan vi observere at:

1. $|f(\theta) - f_A(\theta)| \rightarrow 0$ for ethvert θ (punktvis) for $A \rightarrow \infty$
2. $|f(\theta) - f_A(\theta)| \leq |f(\theta)|$ for alle θ

Når disse to krav er opfyldt, vil **Lebesques majorantsætning** 11.6 side 133 betyde, at

$$\|f - f_A\|_1 = \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} |f(\theta) - f_A(\theta)| d\theta \rightarrow 0 \quad \text{for } A \rightarrow \infty$$

Til et givet ϵ vælges nu A så stort at:

$$\begin{aligned} |c_n(f - f_A)| &= \left| \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} (f(\theta) - f_A(\theta)) e^{-in\theta} d\theta \right| \\ &\leq \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} |(f(\theta) - f_A(\theta)) e^{-in\theta}| d\theta \\ &= \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} |(f(\theta) - f_A(\theta))| d\theta \\ &= \|f - f_A\| \\ &\leq \frac{\epsilon}{2} \end{aligned}$$

Da $f_A \in \mathbf{L}^2([-\pi, \pi])$, findes der et N således at $|c_n(f_A)| \leq \frac{\epsilon}{2}$ for $|n| > N$.

Herefter kan vi vurdere:

$$\begin{aligned}
 |c_n(f)| &= |c_n(f - f_A + f_A)| \\
 &\leq |c_n(f - f_A)| + |c_n(f_A)| \\
 &\leq \|f - f_A\|_1 + |c_n(f_A)| \\
 &\leq \epsilon.
 \end{aligned}$$

for $|n| \rightarrow \infty$.

Vi kan altså konkludere, at

$$|c_n(f)| \rightarrow 0 \quad \text{for} \quad |n| \rightarrow \infty$$

□

Sætning 11.6 Lebesques majorantsætning

Lad $f_n(x)$ være en følge af lebesque integrable funktioner, der konvergerer punktvis mod f .

Hvis der findes en funktion g med $\int |g| < \infty$ således at

$$\forall n |f_n| \leq g$$

da er f_n og $\lim f_n = f$ integrable og

$$\int f_n d\mu \rightarrow \int f d\mu$$

for $n \rightarrow \infty$.

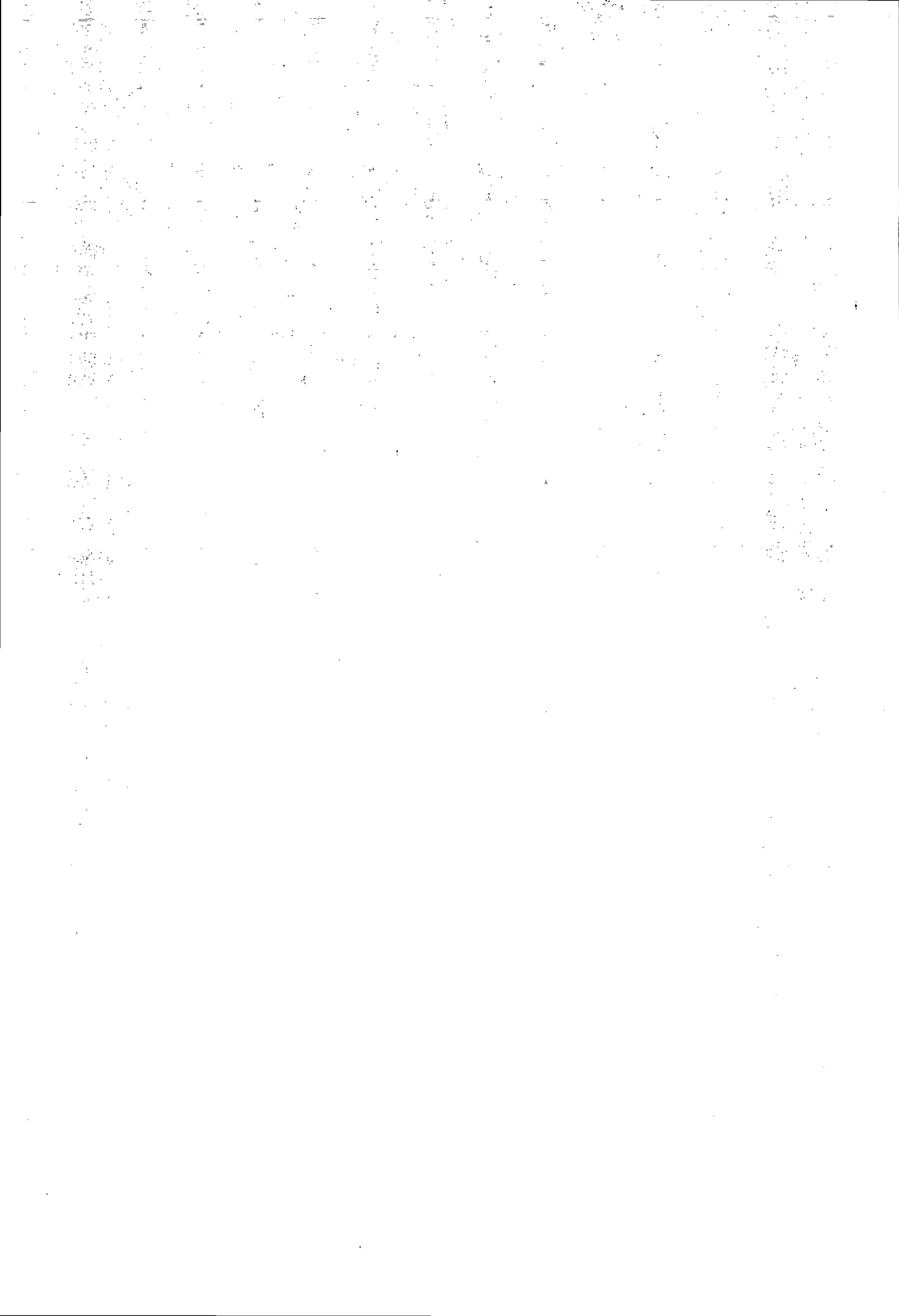
Det der skal undersøges, for at kunne ombytte integration og grænseovergang er følgende:

1. $\forall x : |f_n(x)| \rightarrow f(x)$ (punktvis konvergens)
2. $|f_n(x)| \leq |g(x)|$ for alle x

idet det er forudsat at $|g|$ er integrabel.

Del III

Numerisk metode



Kapitel 12

Numerisk behandling af diffusionsligningen

Vi har tidligere fundet en analytisk løsning til diffusionsligningen med en Neumann randbetingelse. Det er ikke alle tilfælde, hvor en sådan løsning overhovedet lader sig opstille.

Eksempel 12.1.

Betragt systemet

$$\frac{\partial U}{\partial t}(x, t) - \alpha \frac{\partial^2 U}{\partial x^2}(x, t) + \beta U(x, t) = 0$$

$$u(x, 0) = x(\pi - x)e^{-\frac{1}{2}\left(\frac{x-\pi/2}{\pi/2}\right)^2}$$

$$\frac{\partial u}{\partial x}(0, t) = t \log^2(t)$$

$$\frac{\partial u}{\partial x}(\pi, t) = \sqrt{t} \sin(t)$$

Det vil være om end ikke umuligt, så ihvertfald ubehageligt at forsøge at finde en analytisk løsning til dette problem. Det kan imidlertid let løses ved brug af numeriske metoder.

Vi vil derfor i denne del beskrive numeriske metoder til løsning af lineære paraboliske differentialligninger.

En vigtig grund til at anvende numeriske metoder er, at løsninger kan beregnes så hurtigt, at man har mulighed for at kunne eksperimentere med ligningens forskellige parametre, i et forsøg på at tilpasse modellen til det system den modellerer. Det kan for eksempel være, at man ønsker at tilpasse en af de indgående parametre ved at udregne løsningen for en hel skare af værdier, hvorefter man udvælger den, der passer bedst.

En god numerisk metode forenet med en hurtig datamaskine, realiserer muligheden for

1. at løse langt flere problemer, end det er analytisk muligt og
2. at gøre det så hurtigt, at det er praktisk muligt at eksperimentere med parametrene.

Vi vil i dette kapitel uddybe den numeriske metode, som blev beskrevet i kapitel 5 i del 1. Her gælder ligeledes at de sætninger, der refereres til, findes sidst i denne del.

Det forudsættes i det følgende, at systemet er bragt på dimensionsløs form, og at intervallængden er skaleret så $x \in [0, 1]$.

12.1 Crank Nicholson

Betragt ligningen

$$\frac{\partial U}{\partial t}(x, t) - \alpha \frac{\partial^2 U}{\partial x^2}(x, t) + \beta U(x, t) = 0 \quad (12.1)$$

$$u(x, 0) = 0$$

$$u(0, t) = u(1, t) = 0 \quad (12.2)$$

Hvis funktionen $U(x) \in C^\infty$, kan $U(x + \Delta x, t)$ og $U(x - \Delta x, t)$ beregnes ved hjælp af Taylorudvikling i x :

$$U(x + \Delta x, t) =$$

$$U(x, t) + \Delta x U'(x, t) + \frac{1}{2} \Delta x^2 U''(x, t) + \frac{1}{6} \Delta x^3 U'''(x, t) + \dots$$

$$U(x - \Delta x, t) = U(x, t) - \Delta x U'(x, t) + \frac{1}{2} \Delta x^2 U''(x, t) - \frac{1}{6} \Delta x^3 U'''(x, t) + \dots$$

addition af de to taylorrækker giver at

$$U(x - \Delta x, t) + U(x + \Delta x, t) = 2U(x, t) + \Delta x^2 U''(x, t) + \mathcal{O}(\Delta x^4)$$

Hvis blot $U \in C^2$, kan man approximere leddet i ligning (12.1) svarende til $\frac{\partial^2 U}{\partial x^2}$ ved:

$$\frac{\partial^2 U}{\partial x^2}(x, t) \approx \frac{1}{\Delta x^2} \{U(x - \Delta x, t) - 2U(x, t) + U(x + \Delta x, t)\}$$

Ligning (12.1) kan herefter skrives som

$$\begin{aligned} \frac{\partial U}{\partial t}(x, t) &= \alpha \frac{\partial^2 U}{\partial x^2}(x, t) - \beta U(x, t) \\ &\approx \frac{\alpha}{\Delta x^2} (U(x - \Delta x, t) - 2U(x, t) + U(x + \Delta x, t)) - \beta U(x, t) \\ &= \frac{\alpha}{\Delta x^2} \left(U(x - \Delta x, t) - \left(2 + \frac{\beta \Delta x^2}{\alpha} \right) U(x, t) + U(x + \Delta x, t) \right) \end{aligned}$$

Vi opdeler nu intervallet $[0, 1]$ i N delintervaller af længden Δx og identificerer funktionen $U(i\Delta x, t)$ med $V_i(t)$, $i = 1, 2, \dots, N - 1$. Det følger nu at $V_i(t)$ er løsninger til følgende system af ordinære 1. ordens koblede differentialligninger.

$$\frac{dV_i(t)}{dt} = \frac{\alpha}{\Delta x^2} \left(V_{i-1}(t) - \left(2 + \frac{\beta \Delta x^2}{\alpha} \right) V_i(t) + V_{i+1}(t) \right)$$

hvor $V_0 = V_N = 0$ ifølge ligning (12.2).

Dette kan skrives på matrixformen

$$\frac{d\mathbf{V}(t)}{dt} = \mathbf{C} \mathbf{V}(t) \quad (12.3)$$

hvor $\mathbf{V}(t) = [V_1(t), V_2(t), \dots, V_{N-1}(t)]^T$ og

$$\mathbf{C} = \begin{bmatrix} -\left(\frac{2\alpha}{\Delta x^2} + \beta\right) & \frac{\alpha}{(\Delta x)^2} & & & & & & & \\ \frac{\alpha}{\Delta x^2} & -\left(\frac{2\alpha}{\Delta x^2} + \beta\right) & \frac{\alpha}{\Delta x^2} & & & & & & \\ & & \ddots & & & & & & \\ & & \frac{\alpha}{\Delta x^2} & -\left(\frac{2\alpha}{\Delta x^2} + \beta\right) & \frac{\alpha}{\Delta x^2} & & & & \\ & & & \frac{\alpha}{\Delta x^2} & -\left(\frac{2\alpha}{\Delta x^2} + \beta\right) & & & & \\ & & & & & \frac{\alpha}{\Delta x^2} & -\left(\frac{2\alpha}{\Delta x^2} + \beta\right) & & \\ & & & & & & & \frac{\alpha}{\Delta x^2} & -\left(\frac{2\alpha}{\Delta x^2} + \beta\right) \end{bmatrix}$$

idet matricen er multipliceret med faktoren $\frac{\alpha}{\Delta x^2}$.

Løsningen til ligning (12.3) er givet ved

$$\mathbf{V}(t) = c e^{\mathbf{C}t}$$

hvor $c = \mathbf{V}(0)$

Betragter vi denne løsning til tiden $t + \Delta t$ fås

$$\begin{aligned} \mathbf{V}(t + \Delta t) &= c e^{\mathbf{C}(t + \Delta t)} \\ &= c e^{\mathbf{C}t} e^{\mathbf{C}\Delta t} \\ &= e^{\mathbf{C}\Delta t} \mathbf{V}(t) \end{aligned} \tag{12.4}$$

Størrelsen $e^{\mathbf{C}\Delta t}$ kan nu approximeres for eksempel ved Taylorudvikling. Der findes imidlertid en hel familie af approximationer, kaldet Padé-approximationer, hvoraf Taylorudviklingen kun er en mulighed - se [3, side 116]. En af disse Padé-approximationer giver Crank-Nicholsons formel, som ifølge [4, side 251] er den foretrukne, idet den både er enkel og nøjagtig.

Dette giver følgende approximation

$$e^{\mathbf{C}\Delta t} \approx \frac{\mathbf{I} + \frac{1}{2}\Delta t \mathbf{C}}{\mathbf{I} - \frac{1}{2}\Delta t \mathbf{C}}$$

Lad \mathbf{u} approximere \mathbf{V} i punkterne $t = j\Delta t$, $j \in \mathbb{N}$. Ligning (12.4) kan da skrives som

$$\begin{aligned} \mathbf{u}(t + \Delta t) &= (\mathbf{I} - \frac{1}{2}\Delta t \mathbf{C})^{-1}(\mathbf{I} + \frac{1}{2}\Delta t \mathbf{C})\mathbf{u}(t) \\ (\mathbf{I} - \frac{1}{2}\Delta t \mathbf{C})\mathbf{u}(t + \Delta t) &= (\mathbf{I} + \frac{1}{2}\Delta t \mathbf{C})\mathbf{u}(t) \end{aligned} \quad (12.5)$$

Lad nu

$$u_{i,j} = u_i(j\Delta t)$$

Ligning (12.5) kan da skrives ved

$$\begin{aligned} &\begin{bmatrix} \frac{\alpha\Delta t}{\Delta x^2} + \frac{\beta\Delta t}{2} + 1 & -\frac{\alpha\Delta t}{2\Delta x^2} & & \\ & -\frac{\alpha\Delta t}{2\Delta x^2} & \ddots & \\ & & -\frac{\alpha\Delta t}{2\Delta x^2} & \frac{\alpha\Delta t}{\Delta x^2} + \frac{\beta\Delta t}{2} + 1 \end{bmatrix} \times \begin{bmatrix} u_{1,j} \\ \vdots \\ u_{N-1,j} \end{bmatrix} = \\ &\begin{bmatrix} -\frac{\alpha\Delta t}{\Delta x^2} - \frac{\beta\Delta t}{2} + 1 & \frac{\alpha\Delta t}{2\Delta x^2} & & \\ & \frac{\alpha\Delta t}{2\Delta x^2} & \ddots & \\ & & \frac{\alpha\Delta t}{2\Delta x^2} & -\frac{\alpha\Delta t}{(\Delta x)^2} - \frac{\beta\Delta t}{2} + 1 \end{bmatrix} \times \begin{bmatrix} u_{1,j-1} \\ \vdots \\ u_{N-1,j-1} \end{bmatrix} \end{aligned}$$

hvilket er ensbetydende med

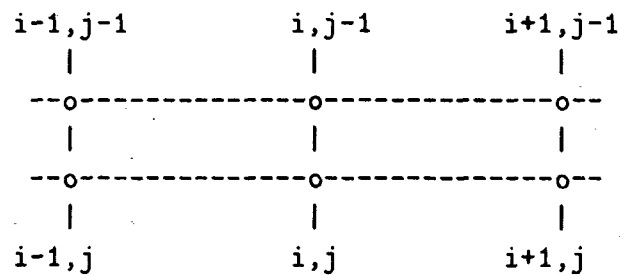
$$\begin{aligned} &\begin{bmatrix} 2\left(\frac{\Delta x^2}{\alpha}\left(\frac{1}{\Delta t} + \frac{\beta}{2}\right) + 1\right) & -1 & & \\ & -1 & \ddots & \\ & & -1 & 2\left(\frac{\Delta x^2}{\alpha}\left(\frac{1}{\Delta t} + \frac{\beta}{2}\right) + 1\right) \end{bmatrix} \times \begin{bmatrix} u_{1,j} \\ \vdots \\ u_{N-1,j} \end{bmatrix} = \\ &\begin{bmatrix} 2\left(\frac{\Delta x^2}{\alpha}\left(\frac{1}{\Delta t} - \frac{\beta}{2}\right) - 1\right) & 1 & & \\ & 1 & \ddots & \\ & & 1 & 2\left(\frac{\Delta x^2}{\alpha}\left(\frac{1}{\Delta t} - \frac{\beta}{2}\right) - 1\right) \end{bmatrix} \times \begin{bmatrix} u_{1,j-1} \\ \vdots \\ u_{N-1,j-1} \end{bmatrix} \end{aligned}$$

Lader vi nu

$$C_1 := \frac{\Delta x^2}{\alpha} \left(\frac{1}{\Delta t} + \frac{\beta}{2} \right) + 1$$

og

$$C_2 := \frac{\Delta x^2}{\alpha} \left(\frac{1}{\Delta t} - \frac{\beta}{2} \right) - 1$$



Figur 12.1: Funktionsværdien i punktet (i, j) afhænger af funktionsværdien i de øvrige gitterpunkter.

Får vi Crank-Nicholson skemaet som vist på side 50

$$-u_{i-1,j} + 2C_1 u_{i,j} - u_{i+1,j} = u_{i-1,j-1} + 2C_2 u_{i,j-1} + u_{i+1,j-1} \quad (12.6)$$

Ligning (12.6) udtrykker en sammenhæng mellem funktionsværdierne $u(x, t)$ i punkterne $(i-1, j)$, (i, j) , $(i+1, j)$ og punkterne $(i-1, j-1)$, $(i, j-1)$, $(i+1, j-1)$ i figur 12.1

Løsningerne til dette lineære ligningssystem vil da approximere løsninger til ligning (12.1)

Kapitel 13

Iterative metoder

Crank Nicholsons formel til løsning af diffusionsligningen er et lineært ligningssystem af formen

$$\mathbf{A}\mathbf{u} = \mathbf{b} \quad (13.1)$$

hvor

$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} 2C_1 & -1 & & & \\ -1 & 2C_1 & -1 & & \\ & & \ddots & & \\ & & & -1 & 2C_1 & -1 \\ & & & & -1 & 2C_1 \end{bmatrix} \quad (13.2)$$

$$\mathbf{u} = (u_{1,j}, u_{2,j}, \dots, u_{N-1,j})^T$$

det vil sige løsningsvektoren til det j 'te tidskridt og

$$\mathbf{b} = \begin{bmatrix} 2C_2 & 1 & & & \\ 1 & 2C_2 & 1 & & \\ & & \ddots & & \\ & & & 1 & 2C_2 & 1 \\ & & & & 1 & 2C_2 \end{bmatrix} \times \begin{bmatrix} u_{1,j-1} \\ u_{2,j-1} \\ \vdots \\ u_{N-2,j-1} \\ u_{N-1,j-1} \end{bmatrix} \quad (13.3)$$

idet \mathbf{b} til et givet tidsskridt kan opfattes som konstant søjle, da den kun afhænger af tidligere tidsskridt.

En iterativ metode til løsning af ligningssystemer er kendetegnet ved, at en første approximation er brugt til at beregne en anden approximation,

som igen bliver brugt til at den tredje således at den $(n+1)$ 'te iteration altid beregnes på baggrund af den n 'te. Den iterative metode siges at være konvergent, hvis forskellen mellem to iterationskridt går mod 0, når iterationsantallet går mod uendeligt.

De følgende afsnit behandler forskellige iterative metoder anvendt på Crank-Nicholson formelen.

For overskuelighedens skyld vil metoderne blive fremstillet i fire dimensioner, de lader sig dog let generalisere til flere dimensioner.

13.1 Jacobiiteration

Betragt ligningssystemet

$$a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + a_{13}x_3 + a_{14}x_4 = b_1$$

$$a_{21}x_1 + a_{22}x_2 + a_{23}x_3 + a_{24}x_4 = b_2$$

$$a_{31}x_1 + a_{32}x_2 + a_{33}x_3 + a_{34}x_4 = b_3$$

$$a_{41}x_1 + a_{42}x_2 + a_{43}x_3 + a_{44}x_4 = b_4$$

hvor vi antager at $a_{ii} \neq 0$.

Dette kan da omskrives til

$$\begin{aligned} x_1 &= \frac{1}{a_{11}}(b_1 - a_{12}x_2 - a_{13}x_3 - a_{14}x_4) \\ x_2 &= \frac{1}{a_{22}}(b_2 - a_{21}x_1 - a_{23}x_3 - a_{24}x_4) \\ x_3 &= \frac{1}{a_{33}}(b_3 - a_{31}x_1 - a_{32}x_2 - a_{34}x_4) \\ x_4 &= \frac{1}{a_{44}}(b_4 - a_{41}x_1 - a_{42}x_2 - a_{43}x_3) \end{aligned} \quad (13.4)$$

Ved hjælp af denne omskrivning kan ethvert x_i beregnes på baggrund af de øvrige x -værdier. Lad $x_i^{(n)}$ betegne den n 'te iteration af den i 'te x -værdi. Værdierne i den $n+1$ 'te iteration opnås da ved iterationskemaet svarende til ligningerne (13.4)

$$x_1^{(n+1)} = \frac{1}{a_{11}}(b_1 - a_{12}x_2^{(n)} - a_{13}x_3^{(n)} - a_{14}x_4^{(n)})$$

$$\begin{aligned}
 x_2^{(n+1)} &= \frac{1}{a_{22}}(b_2 - a_{21}x_1^{(n)} - a_{23}x_3^{(n)} - a_{24}x_4^{(n)}) \\
 x_3^{(n+1)} &= \frac{1}{a_{33}}(b_3 - a_{31}x_1^{(n)} - a_{32}x_2^{(n)} - a_{34}x_4^{(n)}) \\
 x_4^{(n+1)} &= \frac{1}{a_{44}}(b_4 - a_{41}x_1^{(n)} - a_{42}x_2^{(n)} - a_{43}x_3^{(n)})
 \end{aligned} \tag{13.5}$$

13.1.1 Jacobiiterationsmatricen

Man kan udtrykke en vilkårlig matrix A , som en sum af dens diagonal elementer, dens nedre trekant og dens øvre trekant, det vil sige

$$A = D - L - U \tag{13.6}$$

hvor

$$D = \begin{bmatrix} a_{11} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & a_{22} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & a_{33} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & a_{44} \end{bmatrix}$$

$$-L = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ a_{21} & 0 & 0 & 0 \\ a_{31} & a_{32} & 0 & 0 \\ a_{41} & a_{42} & a_{43} & 0 \end{bmatrix}$$

og

$$-U = \begin{bmatrix} 0 & a_{12} & a_{13} & a_{14} \\ 0 & 0 & a_{23} & a_{24} \\ 0 & 0 & 0 & a_{34} \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}$$

Ligningssystemet (13.4) skrevet på matrixform bliver da

$$Ax = b \Leftrightarrow$$

$$(D - L - U)x = b \Leftrightarrow$$

$$Dx = (L + U)x + b \Leftrightarrow$$

$$x = D^{-1}(L + U)x + D^{-1}b$$

og ligningssystemet (13.5) kan skrives som

$$x^{(n+1)} = Bx^{(n)} + D^{-1}b \tag{13.7}$$

hvor $\mathbf{B} = \mathbf{D}^{-1}(\mathbf{L} + \mathbf{U})$ kaldes punkt Jacobi iterationsmatricen (Ordet "punkt" refererer til at den algebraiske ligning approximerer differentiallyningen i et antal punkter).

13.1.2 Jacobiiteration på diffusionsligningen

Vi kan nu opskrive Jacobiiterationsmatricen for ligning (13.1) idet coefficientmatricen (13.2) opsplittes i \mathbf{D} , \mathbf{L} og \mathbf{U} :

$$\mathbf{D} = \begin{bmatrix} 2C_1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 2C_1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 2C_1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 2C_1 \end{bmatrix}$$

$$-\mathbf{L} = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \end{bmatrix}$$

og

$$-\mathbf{U} = \begin{bmatrix} 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}$$

Jacobiiterationsmatricen bliver således

$$\overbrace{\mathbf{D}^{-1}(\mathbf{L} + \mathbf{U})}^{\mathbf{B}} = \begin{bmatrix} 0 & (2C_1)^{-1} & 0 & 0 \\ (2C_1)^{-1} & 0 & (2C_1)^{-1} & 0 \\ 0 & (2C_1)^{-1} & 0 & (2C_1)^{-1} \\ 0 & 0 & (2C_1)^{-1} & 0 \end{bmatrix} \quad (13.8)$$

og den konstante søjle bliver på tilsvarende måde

$$\mathbf{D}^{-1}\mathbf{b} = (2C_1)^{-1} \begin{bmatrix} 2C_2 u_{1,j-1} + u_{2,j-1} \\ u_{1,j-1} + 2C_2 u_{2,j-1} + u_{3,j-1} \\ u_{2,j-1} + 2C_2 u_{3,j-1} + u_{4,j-1} \\ u_{3,j-1} + 2C_2 u_{4,j-1} \end{bmatrix}$$

ved indsættelse af (13.3).

Dette giver iterationskemaet

$$\begin{aligned} \mathbf{u}^{(n+1)} &= \mathbf{B}\mathbf{u}^{(n)} + \mathbf{D}^{-1}\mathbf{b} \Rightarrow \\ u_{i,j}^{(n+1)} &= \frac{u_{i-1,j}^{(n)} + u_{i+1,j}^{(n)} + b_i}{2C_1} \end{aligned}$$

hvor

$$b_i = u_{i-1,j-1} + 2C_2 u_{i,j-1} + u_{i+1,j-1}$$

13.2 Gauss-Seidel iteration

Man kan forbedre jacobiiterationsmetoden, som den er vist i ligning (13.5), ved at udnytte at alle beregninger foregår "fra venstre mod højre" således, at den $n+1$ 'te iteration af en given i -værdi er tilgængelig for alle større i -værdier.

Man benytter således hele tiden den senest mulige iteration i beregningen. Dette giver iterationsformlen

$$\begin{aligned} x_1^{(n+1)} &= \frac{1}{a_{11}}(b_1 - a_{12}x_2^{(n)} - a_{13}x_3^{(n)} - a_{14}x_4^{(n)}) \\ x_2^{(n+1)} &= \frac{1}{a_{22}}(b_2 - a_{21}x_1^{(n+1)} - a_{23}x_3^{(n)} - a_{24}x_4^{(n)}) \\ x_3^{(n+1)} &= \frac{1}{a_{33}}(b_3 - a_{31}x_1^{(n+1)} - a_{32}x_2^{(n+1)} - a_{34}x_4^{(n)}) \\ x_4^{(n+1)} &= \frac{1}{a_{44}}(b_4 - a_{41}x_1^{(n+1)} - a_{42}x_2^{(n+1)} - a_{43}x_3^{(n+1)}) \quad (13.9) \end{aligned}$$

Denne forbedring giver ifølge [3] en hurtigere konvergens af iterationerne:

13.2.1 Gauss-Seidel iterationsmatricen

Vi benytter opsplitningen

$$\mathbf{A} = \mathbf{D} - \mathbf{L} - \mathbf{U}$$

på samme måde som i forrige afsnit om Jacobiiterationsmatricen (13.6) og får hermed at

$$\begin{aligned} \mathbf{x} &= \mathbf{D}^{-1}(\mathbf{L} + \mathbf{U})\mathbf{x} + \mathbf{D}^{-1}\mathbf{b} \Leftrightarrow \\ \mathbf{D}\mathbf{x} &= \mathbf{L}\mathbf{x} + \mathbf{U}\mathbf{x} + \mathbf{b} \end{aligned}$$

Helt analogt kan Gauss-Seidel iterationsformlen på matrixform da skrives

$$\begin{aligned} \mathbf{D}\mathbf{x}^{(n+1)} &= \mathbf{L}\mathbf{x}^{(n+1)} + \mathbf{U}\mathbf{x}^{(n)} + \mathbf{b} \Leftrightarrow \\ (\mathbf{D} - \mathbf{L})\mathbf{x}^{(n+1)} &= \mathbf{U}\mathbf{x}^{(n)} + \mathbf{b} \Leftrightarrow \\ \mathbf{x}^{(n+1)} &= (\mathbf{D} - \mathbf{L})^{-1}\mathbf{U}\mathbf{x}^{(n)} + (\mathbf{D} - \mathbf{L})^{-1}\mathbf{b} \end{aligned}$$

hvor $(\mathbf{D} - \mathbf{L})^{-1}\mathbf{U}$ er punkt Gauss-Seidel iterationsmatricen.

13.2.2 Gauss-Seidel iteration på diffusionsligningen

Gauss-Seidel iterationen for diffusionsligningen giver nu skemaet

$$\begin{aligned} \mathbf{u}^{(n+1)} &= (\mathbf{D} - \mathbf{L})^{-1}\mathbf{U} \mathbf{u}^{(n)} + (\mathbf{D} - \mathbf{L})^{-1}\mathbf{b} \Rightarrow \\ u_{i,j}^{(n+1)} &= \frac{u_{i-1,j}^{(n+1)} + u_{i+1,j}^{(n)} + b_i}{2C_1} \end{aligned} \quad (13.10)$$

hvor

$$b_i = u_{i-1,j-1} + 2C_2 u_{i,j-1} + u_{i+1,j-1}$$

13.2.3 Successive Over Relaxation - SOR

Formlen for Gaus-Seidel iterationen kan skrives som

$$\begin{aligned} \mathbf{D}\mathbf{x}^{(n+1)} &= \mathbf{L}\mathbf{x}^{(n+1)} + \mathbf{U}\mathbf{x}^{(n)} + \mathbf{b} \Leftrightarrow \\ \mathbf{x}^{(n+1)} &= \mathbf{D}^{-1}(\mathbf{L}\mathbf{x}^{(n+1)} + \mathbf{U}\mathbf{x}^{(n)} + \mathbf{b}) \end{aligned}$$

Forskellen mellem to Gauss-Seidel iterationer kan nu skrives som

$$\begin{aligned} \mathbf{x}^{(n+1)} - \mathbf{x}^{(n)} &= \mathbf{D}^{-1} (\mathbf{L}\mathbf{x}^{(n+1)} + \mathbf{U}\mathbf{x}^{(n)} + \mathbf{b}) - \mathbf{x}^{(n)} \Leftrightarrow \\ \mathbf{x}^{(n+1)} - \mathbf{x}^{(n)} &= \mathbf{D}^{-1} (\mathbf{L}\mathbf{x}^{(n+1)} + \mathbf{U}\mathbf{x}^{(n)} + \mathbf{b} - \mathbf{D}\mathbf{x}^{(n)}) \Leftrightarrow \\ \mathbf{x}^{(n+1)} &= \mathbf{x}^{(n)} + \mathbf{D}^{-1} (\mathbf{L}\mathbf{x}^{(n+1)} + \mathbf{U}\mathbf{x}^{(n)} + \mathbf{b} - \mathbf{D}\mathbf{x}^{(n)}) \end{aligned}$$

Dette viser, at den $n+1$ 'te iteration kan skrives som summen af $\mathbf{x}^{(n)}$ og en størrelse, der repræsenterer korrektionen ved dette iterationskridt. Hvis denne korrektion har samme fortegn mellem to iterationskridt, kan man med en vis rimelighed forvente, at iterationerne vil konvergere hurtigere, hvis denne korrektion bliver øget (se [3, side 262]).

Derfor multipliceres korrektionsvektoren med en skalar ω , der, som vi senere skal se, antager værdier i intervallet $[1, 2]$. ω kaldes også **accelerationsparameteren**.

$$\begin{aligned} \mathbf{x}^{(n+1)} &= \mathbf{x}^{(n)} + \omega \mathbf{D}^{-1} (\mathbf{L}\mathbf{x}^{(n+1)} + \mathbf{U}\mathbf{x}^{(n)} + \mathbf{b} - \mathbf{D}\mathbf{x}^{(n)}) \Leftrightarrow \\ (\mathbf{I} - \omega \mathbf{D}^{-1} \mathbf{L}) \mathbf{x}^{(n+1)} &= ((1 - \omega) \mathbf{I} + \omega \mathbf{D}^{-1} \mathbf{U}) \mathbf{x}^{(n)} + \omega \mathbf{D}^{-1} \mathbf{b} \Leftrightarrow \\ \mathbf{x}^{(n+1)} &= (\mathbf{I} - \omega \mathbf{D}^{-1} \mathbf{L})^{-1} ((1 - \omega) \mathbf{I} + \omega \mathbf{D}^{-1} \mathbf{U}) \mathbf{x}^{(n)} \\ &\quad + (\mathbf{I} - \omega \mathbf{D}^{-1} \mathbf{L})^{-1} \omega \mathbf{D}^{-1} \mathbf{b} \end{aligned}$$

Når denne formel anvendes, kaldes metoden **Successive Over Relaxation** - forkortet **SOR**. Ved $\omega = 1$ fås Gauss-Seidel formlen.

13.2.4 SOR iterationsmatricen

SOR iterationsmatricen kaldet $\mathbf{H}(\omega)$ er givet ved

$$\mathbf{H}(\omega) = (\mathbf{I} - \omega \mathbf{D}^{-1} \mathbf{L})^{-1} ((1 - \omega) \mathbf{I} + \omega \mathbf{D}^{-1} \mathbf{U})$$

hvilket giver SOR skemaet

$$\mathbf{x}^{(n+1)} = \mathbf{H}(\omega) \mathbf{x}^{(n)} + (\mathbf{I} - \omega \mathbf{D}^{-1} \mathbf{L})^{-1} \omega \mathbf{D}^{-1} \mathbf{b} \quad (13.11)$$

13.2.5 SOR iteration på diffusionsligningen

Iterationsskemaet for den konkrete version af diffusionsligningen fås lettest ved at tage udgangspunkt i Gauss-Seidel skemaet som følger: adder og subtraher $u_{i,j}^{(n)}$ på højresiden

$$u_{i,j}^{(n+1)} = u_{i,j}^{(n)} + \frac{u_{i-1,j}^{(n+1)} + u_{i+1,j}^{(n)} + b_i}{2C_1} - u_{i,j}^{(n)}$$

Multipliser korrektionsstørrelsen med accelerationsparameteren ω :

$$u_{i,j}^{(n+1)} = u_{i,j}^{(n)} + \omega \left(\frac{u_{i-1,j}^{(n+1)} + u_{i+1,j}^{(n)} + b_i}{2C_1} - u_{i,j}^{(n)} \right)$$

Udtrykket kan nu omskrives til

$$u_{i,j}^{(n+1)} = \omega \left(\frac{u_{i-1,j}^{(n+1)} + u_{i+1,j}^{(n)} + b_i}{2C_1} \right) + (1 - \omega)u_{i,j}^{(n)}$$

hvor

$$b_i = u_{i-1,j-1} + 2C_2u_{i,j-1} + u_{i+1,j-1}$$

13.3 Randbetingelser og iterationsmetoder

Betragt Gauss-Seidel iterationsskemaet i ligning (13.10). For $i = 1$ og $i = N - 1$ ser skemaerne således ud

$$u_{1,j}^{(n+1)} = \frac{u_{0,j}^{(n+1)} + u_{1+1,j}^{(n)} + b_1}{2C_1}$$

$$b_1 = u_{0,j-1} + 2C_2u_{1,j-1} + u_{1+1,j-1}$$

og

$$u_{N-1,j}^{(n+1)} = \frac{u_{N-2,j}^{(n+1)} + u_{N,j}^{(n)} + b_{N-1}}{(2C_1)}$$

$$b_{N-1} = u_{N-2,j-1} + 2C_2u_{N-1,j-1} + u_{N,j-1}$$

hvor størrelserne $u_{0,j}$ og $u_{N,j}$ er givet ved randbetingelserne i problemet. Man kan altså opstille et Gauss-Seidel iterationskema for et problem med ikke-homogene Dirichlet-randbetingelser

$$\frac{\partial U}{\partial t}(x, t) - \alpha \frac{\partial^2 U}{\partial x^2}(x, t) + \beta U(x, t) = 0 \quad (13.12)$$

$$u(x, 0) = 0$$

$$u(0, t) = f(t)$$

$$u(N, t) = g(t)$$

ved at definere

$$u_{0,j} = f(j\Delta t)$$

og

$$u_{N,j} = g(j\Delta t)$$

13.3.1 Neumann randbetingelser

Vi vil nu opskrive et iterationsskema for problemet, hvor randbetingelserne er af Neumann typen.

$$\frac{\partial U}{\partial t}(x, t) - \alpha \frac{\partial^2 U}{\partial x^2}(x, t) + \beta U(x, t) = 0$$

$$u(x, 0) = 0$$

$$\frac{\partial U}{\partial x}(0, t) = f_0(t)U(0, t) + g_0(t)$$

$$\frac{\partial U}{\partial x}(N, t) = f_1(t)U(N, t) + g_1(t) \quad (13.13)$$

Disse randbetingelser kan analogt med opstillingen af Crank-Nicholson skemaet side 138 approximeres ved hjælp af Taylorudvikling.

$$\frac{\partial U}{\partial x}(x, t) \approx \frac{u_{i+1,j} - u_{i-1,j}}{2\Delta x}$$

Lad nu $(f_0)_j = f_0(j\Delta t)$ og $(g_0)_j = g_0(j\Delta t)$.

For $x = 0$, det vil sige $i = 0$, fås da følgende :

$$\begin{aligned} \frac{u_{1,j} - u_{-1,j}}{2\Delta x} &= (f_0)_j u_{0,j} + (g_0)_j \Rightarrow \\ u_{-1,j} &= u_{1,j} - 2\Delta x (f_0)_j u_{0,j} - 2\Delta x (g_0)_j \end{aligned} \quad (13.14)$$

og for $j - 1$

$$u_{-1,j-1} = u_{1,j-1} - 2\Delta x (f_0)_{j-1} u_{0,j-1} - 2\Delta x (g_0)_{j-1} \quad (13.15)$$

Crank-Nicholson formelen for $i = 0$ ser således ud

$$\begin{aligned} u_{0,j} &= \frac{u_{-1,j} + u_{1,j} + b_0}{2C_1} \\ b_0 &= u_{-1,j-1} + 2C_2 u_{0,j-1} + u_{1,j-1} \end{aligned} \quad (13.16)$$

Punkterne $(-1, j)$ og $(-1, j - 1)$ er fiktive, men kan elimineres ved indsættelse af (13.14) og (13.15) i (13.16). Således konstruerer vi funktionsværdien $u_{-1,j}$ (henholdsvis $u_{-1,j-1}$) ved hjælp af gradienten i x for at kunne udtrykke Crank-Nicholsons formel på randen.

Dette svarer ganske til at udvide funktionen kontinuert og differentiablet omkring et intervalendepunkt.

Vi indsætter nu udtrykkene for $u_{-1,j}$ og $u_{-1,j-1}$ i (13.16)

$$\begin{aligned} u_{0,j} &= \frac{1}{2C_1} \left(\overbrace{u_{1,j} - 2\Delta x (f_0)_j u_{0,j} - 2\Delta x (g_0)_j}^{u_{-1,j}} + u_{1,j} + b_0 \right) \\ b_0 &= \underbrace{u_{1,j-1} - 2\Delta x (f_0)_{j-1} u_{0,j-1} - 2\Delta x (g_0)_{j-1}}_{u_{-1,j-1}} + 2C_2 u_{0,j-1} + u_{1,j-1} \end{aligned}$$

Dette giver at

$$\begin{aligned} u_{0,j} &= \frac{1}{C_1} (u_{1,j} - \Delta x (f_0)_j u_{0,j} - \Delta x (g_0)_j + \\ &\quad u_{1,j-1} - \Delta x (f_0)_{j-1} u_{0,j-1} - \Delta x (g_0)_{j-1} + C_2 u_{0,j-1}) \end{aligned}$$

Samles $u_{0,j}$ -leddene på venstre side fås

$$\left(1 + \frac{1}{C_1} \Delta x(f_0)_j\right) u_{0,j} = \frac{1}{C_1} (u_{1,j} + u_{1,j-1} + (C_2 - \Delta x(f_0)_{j-1}) u_{0,j-1} - \Delta x(g_0)_j + \Delta x(g_0)_{j-1})$$

hvilket alt i alt giver Crank-Nicholson skemaet for $i = 0$:

$$\begin{aligned} u_{0,j} &= \frac{1}{C_1 + \Delta x(f_0)_j} (u_{1,j} - \Delta x(g_0)_j + b_0) \\ b_0 &= u_{1,j-1} + (C_2 - \Delta x(f_0)_{j-1}) u_{0,j-1} - \Delta x(g_0)_{j-1} \quad (13.17) \end{aligned}$$

På tilsvarende måde konstrueres skemaet for $i = N$, men hér er det u_{N+1} , der skal elimineres:

Lad nu som før $(f_1)_j = f_1(j\Delta t)$ og $(g_1)_j = g_1(j\Delta t)$.

For $i = N$, fås da følgende :

$$\begin{aligned} \frac{u_{N+1,j} - u_{N-1,j}}{2\Delta x} &= (f_1)_j u_{N,j} + (g_1)_j \Rightarrow \\ u_{N+1,j} &= u_{N-1,j} + 2\Delta x (f_1)_j u_{N,j} + 2\Delta x (g_1)_j \end{aligned}$$

og for $j - 1$

$$u_{N+1,j-1} = u_{N-1,j-1} + 2\Delta x (f_1)_{j-1} u_{N,j-1} + 2\Delta x (g_1)_{j-1}$$

Crank-Nicholson formelen for $i = N$ ser således ud

$$\begin{aligned} u_{N,j} &= \frac{u_{N-1,j} + u_{N+1,j} + b_N}{2C_1} \\ b_N &= u_{N-1,j-1} + 2C_2 u_{N,j-1} + u_{N+1,j-1} \end{aligned}$$

Vi indsætter nu udtrykkene for $u_{N+1,j}$ og $u_{N+1,j-1}$ og får Crank-Nicholson skemaet for $i = N$

$$\begin{aligned} u_{N,j} &= \frac{1}{C_1 - \Delta x(f_1)_j} (u_{N-1,j} + \Delta x(g_1)_j + b_N) \quad (13.18) \\ b_N &= u_{N-1,j-1} + (C_2 + \Delta x(f_1)_{j-1}) u_{N,j-1} + \Delta x(g_1)_{j-1} \end{aligned}$$

Samles alt dette fås matrixligningen

$$\begin{bmatrix} (C_1 + \Delta x(f_0)_j) & -1 & & & \\ -1 & 2C_1 & -1 & & \\ & & \ddots & & \\ & & & -1 & 2C_1 & -1 \\ & & & -1 & (C_1 - \Delta x(f_1)_j) & \end{bmatrix} \times \begin{bmatrix} u_{0,j} \\ u_{1,j} \\ \vdots \\ u_{N-1,j} \\ u_{N,j} \end{bmatrix} =$$

$$\begin{bmatrix} (C_2 - \Delta x(f_0)_{j-1}) & 1 & & & \\ 1 & 2C_2 & 1 & & \\ & & \ddots & & \\ & & & 1 & 2C_2 & 1 \\ & & & 1 & (C_2 + \Delta x(f_1)_{j-1}) & \end{bmatrix} \times$$

$$\begin{bmatrix} u_{0,j-1} \\ u_{1,j-1} \\ \vdots \\ u_{N-1,j-1} \\ u_{N,j-1} \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} -\Delta x((g_0)_{j-1} + (g_0)_j) \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \\ \Delta x((g_1)_{j-1} + (g_1)_j) \end{bmatrix} \quad (13.19)$$

Vi kan nu opskrive SOR formlerne for Neumann problemet

$$x \in]0, 1[$$

$$u_{i,j}^{(n+1)} = \frac{\omega}{2C_1} (u_{i-1,j}^{(n+1)} + u_{i+1,j}^{(n)} + b_i) + (1 - \omega)u_{i,j}^{(n)}$$

$$b_i = u_{i-1,j-1} + 2C_2 u_{i,j-1} + u_{i+1,j-1}$$

$$x = 0$$

$$u_{0,j}^{(n+1)} = \frac{\omega}{C_1 + \Delta x(f_0)_j} (u_{1,j}^{(n)} - \Delta x(g_0)_j + b_0) + (1 - \omega)u_{0,j}^{(n)}$$

$$b_0 = u_{1,j-1} + (C_2 - \Delta x(f_0)_{j-1})u_{0,j-1} - \Delta x(g_0)_{j-1}$$

$$x = 1$$

$$u_{N,j}^{(n+1)} = \frac{\omega}{C_1 - \Delta x(f_1)_j} (u_{N-1,j}^{(n+1)} + \Delta x(g_1)_j + b_N) + (1 - \omega)u_{N,j}^{(n)}$$

$$b_N = u_{N-1,j-1} + (C_2 + \Delta x(f_1)_{j-1})u_{N,j-1} + \Delta x(g_1)_{j-1}$$

hvor

$$C_1 := \frac{\Delta x^2}{\alpha} \left(\frac{1}{\Delta t} + \frac{\beta}{2} \right) + 1$$

og

$$C_2 := \frac{\Delta x^2}{\alpha} \left(\frac{1}{\Delta t} - \frac{\beta}{2} \right) - 1$$

13.4 Accelerationsparameteren ω

Dette afsnit handler om hvorledes ω kan vælges således at SOR iterationen konvergerer hurtigst muligt.

SOR iterationen kan skrives som

$$\mathbf{u}^{(n+1)} = \mathbf{H}(\omega)\mathbf{u}^{(n)} + (\mathbf{I} - \omega\mathbf{D}^{-1}\mathbf{L})^{-1}\omega\mathbf{D}^{-1}\mathbf{b} \quad (13.20)$$

hvor $\mathbf{H}(\omega)$ som sagt er givet ved

$$\mathbf{H}(\omega) = (\mathbf{I} - \omega\mathbf{D}^{-1}\mathbf{L})^{-1}((1 - \omega)\mathbf{I} + \omega\mathbf{D}^{-1}\mathbf{U})$$

(13.20) kan også skrives

$$\begin{aligned} \mathbf{u}^{(n+1)} &= \mathbf{H}(\omega)\mathbf{u}^{(n)} + \mathbf{k} \Leftrightarrow \\ \mathbf{u}^{(n+1)} &= \mathbf{H}(\omega)(\mathbf{H}(\omega)\mathbf{u}^{(n-1)} + \mathbf{k}) + \mathbf{k} \Leftrightarrow \\ &\vdots \\ \mathbf{u}^{(n+1)} &= \mathbf{H}(\omega)^{(n+1)}\mathbf{u}^{(0)} + \mathbf{H}(\omega)^{(n)}\mathbf{k} + \dots + \mathbf{k} \Leftrightarrow \\ \mathbf{u}^{(n+1)} &= \mathbf{H}(\omega)^{(n+1)}\mathbf{u}^{(0)} + \sum_{m=0}^n \mathbf{H}(\omega)^{(m)}\mathbf{k} \end{aligned} \quad (13.21)$$

Lad nu $\lambda_s(\omega)$ være egenverdierne for $\mathbf{H}(\omega)$, det vil sige

$$\mathbf{H}(\omega)\mathbf{v}_s = \lambda_s(\omega)\mathbf{v}_s$$

hvor \mathbf{v}_s er en til $\lambda_s(\omega)$ hørende egenvektor. Da $\mathbf{H}(\omega)$ er injektiv udgør mængden af egenvektorerne en basis for \mathbb{C}^N , og $\mathbf{u}^{(0)}$ kan udtrykkes som en linearkombination af disse

$$\mathbf{u}^{(0)} = \sum_s^N c_s \mathbf{v}_s$$

Iterationsleddet kan derfor skrives som

$$\mathbf{H}(\omega)\mathbf{u}^{(0)} = \mathbf{H}(\omega) \sum_s^N c_s \mathbf{v}_s = \sum_s^N c_s \mathbf{H}(\omega)\mathbf{v}_s = \sum_s^N c_s \lambda_s(\omega) \mathbf{v}_s$$

Vi kan nu lave følgende vurdering af iterationsleddet (13.21) side 155

$$\begin{aligned} |\mathbf{H}^{(n+1)}(\omega)\mathbf{u}^{(0)}| &= \left| \sum_s^N \lambda_s^{n+1}(\omega) c_s \mathbf{v}_s \right| \\ &\leq \sum_s^N |\lambda_s^{n+1}(\omega)| |c_s \mathbf{v}_s| \\ &\leq \sum_s^N \max |\lambda_s^{n+1}(\omega)| |c_s \mathbf{v}_s| \\ &\leq (\max_s |\lambda_s(\omega)|)^{n+1} \sum_s^N |c_s \mathbf{v}_s| \end{aligned}$$

Heraf kan vi se at $\mathbf{H}(\omega)$ er en kontraktion, hvis $\max_s |\lambda_s(\omega)| < 1$, hvorved ligning (13.20) har et fixpunkt [8, side 19]. Den samme betingelse gælder for konvergens af summen $\sum_{m=0}^n \mathbf{H}(\omega)^{(m)} \mathbf{k}$. Iterationen konverger endvidere hurtigere, jo mindre egenverdierne er. Vi søger derfor det ω , der minimaliserer \mathbf{H} 's egenverdier.

Det er ifølge [3, side 277] muligt at udlede en formel for ω , hvis matricen \mathbf{A} er 2-cyklisk.

I bekræftende fald gælder nemlig følgende sammenhæng mellem SOR iterationsmatricen $\mathbf{H}(\omega)$'s egenverdier (λ) og Jacobiiterationsmatricen $\mathbf{B} = \mathbf{D}^{-1}(\mathbf{L} + \mathbf{U})$'s egenverdier μ :

$$(\lambda + \omega - 1)^2 = \lambda \omega^2 \mu^2 \quad (13.22)$$

Fra denne ligning kan det vises, at den værdi ω_b , der optimerer SOR iterationen, er givet ved

$$\omega_b = \frac{2}{1 + \sqrt{1 - \rho^2(\mathbf{B})}} \quad (13.23)$$

hvor $\rho(\mathbf{B}) = \max |\mu|$ er spektralradien af Jacobiiterationsmatricen. Ligningerne (13.22) og (13.23) vises i afsnit 13.4.3

I det følgende definerer vi begreberne 2-cyklisk matrix og konsistent ordning. Vi viser endvidere at matricen \mathbf{A} i Crank-Nicholson formlen opfylder dette. Derefter kan vi vise sammenhængen mellem Jacobi- og SOR- iterationsmatricernes egenverdier, og vi kan udlede formel (13.23), hvoraf det bedste ω bestemmes.

13.4.1 2-cykliske matricer

Definition 13.1 2 cykliske matricer

En $N \times N$ matrix kaldes 2-cyklisk, hvis følgende to betingelser er opfyldt:

1. der eksisterer 2 disjunkte mængder S og T fra mængden $W = [1, 2, \dots, N]$, således at $S \cup T = W$.
2. hvis $a_{i,j} \neq 0$ skal en af følgende tre tilfælde gælde: $i = j$, $(i, j) \in (S, T)$ eller $(i, j) \in (T, S)$.

Dette illustreres bedst gennem et eksempel. Vi tager her udgangspunkt i matricen \mathbf{A} i Crank-Nicholson formlen (13.2) side 143.

Eksempel 13.1. En 2-cyklisk matrix

Se på tridiagonalmatricen

$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} 2C_1 & -1 & 0 & 0 & 0 \\ -1 & 2C_1 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 2C_1 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 2C_1 & -1 \\ 0 & 0 & 0 & -1 & 2C_1 \end{bmatrix}$$

Idet vi ser bort fra diagonalen og placerer de øvrige indices (i, j) , hvor $a_{ij} \neq 0$ i henholdsvis S og T vil:

S	T
$i = 1$	$j = 2$
$j = 1, 3$	$i = 2$
$i = 3$	$j = 2, 4$
$j = 3, 5$	$i = 4$
$i = 5$	$j = 4$

hvor i og j angiver henholdsvis række nummer og søjle nummer. Mængderne er nu givet ved

$$S = \{1, 3, 5\}, \quad T = \{2, 4\}$$

hvilket giver at $S \cup T = \{1, 2, 3, 4, 5\}$.

Da $N = 5$ har vi således vist at tridiagonalmatricen er 2-cyklisk.

Der gælder følgende sætning om 2-cykliske matricer

Sætning 13.1 En matrix A er 2-cyklisk hvis og kun hvis, der findes en rækkevektor $\gamma = (\gamma_1, \gamma_2, \dots, \gamma_N) \in \mathbb{Z}^N$, således at hvis $a_{ij} \neq 0$ og $i \neq j$ så er $|\gamma_i - \gamma_j| = 1$.

Beviset findes i [3, side 290].

En vektor med disse egenskaber kaldes en **ordningsvektor** for matricen A .

Hvis A er 2-cyklisk, kan vi finde to ordningsvektorer $\gamma^{(1)}$ og $\gamma^{(2)}$, med værdier i $\mathbb{N} \pmod{2}$ idet

$$\gamma_i^{(1)} = \begin{cases} 0, & \text{hvis } i \in S \\ 1, & \text{hvis } i \in T \end{cases}$$

og

$$\gamma_i^{(2)} = \begin{cases} 1, & \text{hvis } i \in S \\ 0, & \text{hvis } i \in T \end{cases}$$

Ordningsvektorerne for eksempel 13.1 er da

$$\gamma_i^{(1)} = (0, 1, 0, 1, 0)$$

og

$$\gamma_i^{(2)} = (1, 0, 1, 0, 1)$$

Definition 13.2 *Konsistent ordning*

En 2-cyklisk $N \times N$ matrix er konsistent ordnet, hvis der findes en ordningsvektor $\gamma = (\gamma_1, \gamma_2, \dots, \gamma_N)$, således at hvis $a_{ij} \neq 0$ så er komponenterne i γ stigende ordnet efter komponenternes værdi:

$$i < j \Rightarrow \gamma_j - \gamma_i = 1$$

$$j < i \Rightarrow \gamma_i - \gamma_j = 1$$

Sætning 13.2 Hvis matrixen A er 2-cyklisk, så eksisterer der en permutationsmatrix P således at PAP^T er konsistent ordnet.

Bevis :

Lad γ være en ordningsvektor for A . Ved at ombytte komponenterne kan man opnå ordningsvektoren γ' , hvor komponenterne er ordnet i stigende rækkefølge. P kan nu konstrueres på følgende måde: Når to elementer i og j ombyttes i γ , opskrives den elementære permutationsmatrix $P_{i,j}$ (Enhedsmatrix med søjle i og j ombyttet). Når de næste to elementer m og n ombyttes opskrives permutationsmatrixen $P_{m,n}$, hvorefter den multipliceres ind fra venstre på $P_{i,j}$. Således fortsættes indtil alle ombytninger er foretaget, og vi har matrixen $P = \dots P_{m,n} P_{i,j}$. Vektoren γ' er da en ordningsvektor for den konsistent ordnede matrix PAP^T .

Da matrixproduktet $P_{m,n} P_{i,j}$ ikke kommuterer, vil P ikke være entydigt bestemt. □

Eksempel 13.2.

Ordningsvektoren $\gamma_j^{(1)} = (1, 0, 1, 0, 1)$ fra eksempel 13.1 ordnes ved at ombytte komponent 1 og 4. Dette giver permutationsmatrixen

$$P = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

og matricen

$$\mathbf{PAP}^T = \left[\begin{array}{cc|ccc} 2C_1 & 0 & -1 & 0 & -1 \\ 0 & 2C_1 & -1 & -1 & 0 \\ \hline -1 & -1 & 2C_1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 2C_1 & 0 \\ -1 & 0 & 0 & 0 & 2C_1 \end{array} \right]$$

Denne matrix kaldes *blok-tridiagonal* og er kendetegnet ved at være på formen

$$\begin{bmatrix} \mathbf{D}_1 & \mathbf{A}_1 \\ \mathbf{B}_1 & \mathbf{D}_2 \end{bmatrix}$$

hvor \mathbf{D}_i er diagonalmatricer.

Matricen \mathbf{A} i Crank-Nicholson formlen (13.2) side 143 er altså netop en 2-cyklisk matrix, som kan ordnes konsistent.

13.4.2 Egenverdierne for SOR- og Jacobi - iterationsmatricerne

Sætning 13.3 Hvis en blok tridiagonalmatrix \mathbf{A} opsplittes som

$$\mathbf{A} = \mathbf{D} - \mathbf{L} - \mathbf{U}$$

på samme måde som i ligning (13.6), så er

$$\det(\mathbf{D} - \mathbf{L} - \mathbf{U}) = \det(\mathbf{D} - \alpha\mathbf{L} - \alpha^{-1}\mathbf{U})$$

for $\alpha \neq 0$ vilkårligt valgt.

beviset findes i [3, side 278]

Egenverdier for Jacobi-iterationsmatricen

Egenverdierne for Jacobi-iterationsmatricen $\mathbf{B} = \mathbf{D}^{-1}(\mathbf{L} + \mathbf{U})$ er rødderne i ligningen $\det(\mu\mathbf{I} - \mathbf{B}) = 0$:

$$\begin{aligned}
 \det(\mu \mathbf{I} - \mathbf{D}^{-1}(\mathbf{L} + \mathbf{U})) &= 0 \Leftrightarrow \\
 \det(\mathbf{D}^{-1}(\mu \mathbf{D} - \mathbf{L} - \mathbf{U})) &= 0 \Leftrightarrow \\
 \det(\mathbf{D}^{-1}) \det(\mu \mathbf{D} - \mathbf{L} - \mathbf{U}) &= 0 \Leftrightarrow \\
 \det(\mu \mathbf{D} - \mathbf{L} - \mathbf{U}) &= 0 \tag{13.24}
 \end{aligned}$$

idet $\det \mathbf{D}^{-1} = \frac{1}{\det \mathbf{D}} \neq 0$.

Egenværdier for SOR-iterationsmatricen

Egenværdierne λ for SOR iterationsmatricen

$$\mathbf{H} = (\mathbf{I} - \omega \mathbf{D}^{-1} \mathbf{L})^{-1} ((1 - \omega) \mathbf{I} + \omega \mathbf{D}^{-1} \mathbf{U})$$

er rødderne i $\det[\lambda \mathbf{I} - \mathbf{H}] = 0$:

$$\begin{aligned}
 \det[\lambda \mathbf{I} - \mathbf{H}] &= \det[\lambda(\mathbf{I} - \omega \mathbf{D}^{-1} \mathbf{L})^{-1}(\mathbf{I} - \omega \mathbf{D}^{-1} \mathbf{L}) \\
 &\quad - (\mathbf{I} - \omega \mathbf{D}^{-1} \mathbf{L})^{-1}((1 - \omega) \mathbf{I} + \omega \mathbf{D}^{-1} \mathbf{U})] \\
 &= \det[(\mathbf{I} - \omega \mathbf{D}^{-1} \mathbf{L})^{-1}(\lambda(\mathbf{I} - \omega \mathbf{D}^{-1} \mathbf{L}) - (1 - \omega) \mathbf{I} - \omega \mathbf{D}^{-1} \mathbf{U})] \\
 &= \det[(\mathbf{I} - \omega \mathbf{D}^{-1} \mathbf{L})^{-1} \mathbf{D}^{-1}(\lambda \mathbf{D} - \lambda \omega \mathbf{L} - \omega \mathbf{U} - (1 - \omega) \mathbf{D})] \\
 &= \det[(\mathbf{I} - \omega \mathbf{D}^{-1} \mathbf{L})^{-1} \mathbf{D}^{-1}((\lambda + \omega - 1) \mathbf{D} - \lambda \omega \mathbf{L} - \omega \mathbf{U})] \\
 &= \det[(\lambda + \omega - 1) \mathbf{D} - \lambda \omega \mathbf{L} - \omega \mathbf{U}] / (\det[\mathbf{I} - \omega \mathbf{D}^{-1} \mathbf{L}] \det[\mathbf{D}])
 \end{aligned}$$

men da $(\mathbf{I} - \omega \mathbf{D}^{-1} \mathbf{L})$ er en nedre trekantsmatrix med et-taller i diagonalen, er determinanten af denne lig 1. Endvidere er $\det[\mathbf{D}] \neq 0$. Derfor fås egenværdierne af ligningen

$$\det[(\lambda + \omega - 1) \mathbf{D} - \lambda \omega \mathbf{L} - \omega \mathbf{U}] = 0$$

Da det er givet, at $\mathbf{A} = \mathbf{D} - \mathbf{L} - \mathbf{U}$ er en blok tridiagonal matrix, så gælder ifølge sætning 13.3 at

$$\begin{aligned}
 &\det[(\lambda + \omega - 1) \mathbf{D} - \lambda \omega \mathbf{L} - \omega \mathbf{U}] \\
 &= \det[(\lambda + \omega - 1) \mathbf{D} - \alpha \lambda \omega \mathbf{L} - \alpha^{-1} \omega \mathbf{U}] \\
 &= 0
 \end{aligned}$$

for $\alpha, \omega \neq 0$.

13.4.3 Sammenhængen mellem egenverdier og accelerationsparameter

Nu kan vi vise ligning (13.22) side 156

Bevis :

sæt nu $\alpha^2 = \frac{1}{\lambda}$ og vælg $\alpha = \lambda^{-\frac{1}{2}}$, $\lambda \neq 0$. Da fås

$$\det[(\lambda + \omega - 1)\mathbf{D} - \lambda^{\frac{1}{2}}\omega(\mathbf{L} + \mathbf{U})] = 0 \Leftrightarrow$$

$$\lambda^{\frac{N}{2}}\omega^N \det[\lambda^{-\frac{1}{2}}\omega^{-1}(\lambda + \omega - 1)\mathbf{D} - (\mathbf{L} + \mathbf{U})] = 0 \Leftrightarrow$$

$$\det[\lambda^{-\frac{1}{2}}\omega^{-1}(\lambda + \omega - 1)\mathbf{D} - (\mathbf{L} + \mathbf{U})] = 0$$

Hvor N er dimensionen af matricen. Sammenholder vi dette med ligning (13.24)

$$\det[\mu\mathbf{D} - (\mathbf{L} + \mathbf{U})] = 0$$

får vi

$$\mu = \lambda^{-\frac{1}{2}}\omega^{-1}(\lambda + \omega - 1) \Leftrightarrow$$

$$(\lambda + \omega - 1)^2 = \lambda\omega^2\mu^2$$

□

Vi kan nu vise formelen i ligning (13.23) side 157.

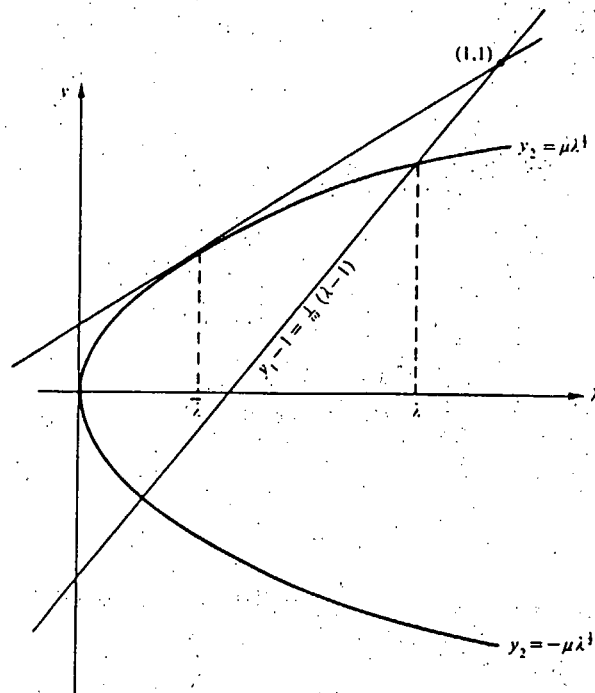
Bevis :

Udgangspunktet er at gøre spektralradius for $\mathbf{H}(\omega)$ så lille som mulig, det vil altså sige at vi vil minimalisere udtrykket $\max |\lambda|$ som funktion af ω , (se eventuel side 156). Denne funktion kan findes ud af sammenhængen

$$(\lambda + \omega - 1)^2 = \lambda\omega^2\mu^2 \quad (13.25)$$

Dette kan omskrives til

$$\begin{aligned} \lambda + \omega - 1 &= \sqrt{\lambda}\omega\mu \Leftrightarrow \\ \frac{1}{\omega}\lambda + 1 - \frac{1}{\omega} &= \sqrt{\lambda}\mu \end{aligned}$$



Figur 13.1: Skæring mellem linien og parabolen

lad nu

$$y_1 - 1 = \frac{1}{\omega}(\lambda - 1)$$

$$y_2 = \sqrt{\lambda}\mu$$

Plottes $y_1 - 1$ og y_2 ind i en $\lambda \times y$ graf, kan løsningerne aflæses som skæringspunkterne mellem linien og parabolen. Vi er ude efter at minimalisere den største egenværdi $|\lambda|$. Dette minimum findes på grafen figur 13.1 fra [3, side 283], hvor linien kun rører parabolen i et punkt.

Vi omskriver nu ligning (13.25) til en andengradslikning i λ :

$$(\lambda + \omega - 1)^2 = \lambda\omega^2\mu^2 \Leftrightarrow$$

$$\lambda^2 + 2\lambda(\omega - 1) + (\omega - 1)^2 = \lambda\omega^2\mu^2 \Leftrightarrow$$

$$\lambda^2 + 2\lambda\left((\omega - 1) - \frac{1}{2}\omega^2\mu^2\right) + (\omega - 1)^2 = 0 \quad (13.26)$$

Diskriminanten for denne andengradsligning er

$$D = 4 \left(\left((\omega - 1) - \frac{1}{2}\omega^2\mu^2 \right)^2 - (\omega - 1)^2 \right) \quad (13.27)$$

Sættes $D = 0$ kan vi finde det ω , der minimaliserer $\max |\lambda|$.

$$\begin{aligned} 4 \left(\left((\omega - 1) - \frac{1}{2}\omega^2\mu^2 \right)^2 - (\omega - 1)^2 \right) &= 0 \Leftrightarrow \\ (\omega - 1)^2 + \frac{1}{4}\omega^4\mu^4 - (\omega - 1)\omega^2\mu^2 - (\omega - 1)^2 &= 0 \Leftrightarrow \\ \frac{1}{4}\omega^4\mu^4 - (\omega - 1)\omega^2\mu^2 &= 0 \Leftrightarrow \\ \frac{1}{4}\omega^2\mu^2 - (\omega - 1) &= 0 \Rightarrow \quad (13.28) \\ \omega &= \frac{1 \pm \sqrt{1 - \mu^2}}{\frac{1}{2}\mu^2} \end{aligned}$$

Plusløsningen vil give en tangent, der rører parabolen i et $\lambda > 1$. Dette vil give en divergent iteration i det en kontraktion, ifølge Banach's fixpunktssætning [8, side 19], jo kræver at $\lambda < 1$. Vi vælger derfor minusløsningen og omskriver den som følger :

$$\begin{aligned} \omega &= \frac{2(1 - \sqrt{1 - \mu^2})}{\mu^2} \\ &= \frac{2(1 - \sqrt{1 - \mu^2})(1 + \sqrt{1 - \mu^2})}{\mu^2(1 + \sqrt{1 - \mu^2})} \\ &= \frac{2(1 - 1 + \mu^2)}{\mu^2(1 + \sqrt{1 - \mu^2})} \\ &= \frac{2}{1 + \sqrt{1 - \mu^2}} \end{aligned}$$

Løses ligning (13.26) nu med $D = 0$ fås

$$\lambda = \frac{-2((\omega - 1) - \frac{1}{2}\omega^2\mu^2) \pm 0}{2} = \frac{1}{2}\omega^2\mu^2 - (\omega - 1)$$

Vi indsætter nu udtrykket for $\frac{1}{2}\omega^2\mu^2$ fra ligning (13.28)

$$\lambda = 2(\omega - 1) - (\omega - 1) = \omega - 1$$

da SOR iterationen kun konvergerer for $|\lambda| < 1$, vil $0 < \omega < 2$. Dette er ingen restriktion i forhold til udtrykket for ω .

Endelig gælder det, at hvis $|\mu| = \rho(\mathbf{B})$ (det vil sige den største egen værdi af Jacobi iterationsmatricen), så vil også $|\lambda|$ være større end for nogle andre μ (se [3, side 284]). Og da konvergens er determineret af minimum af $\max |\lambda|$, erstatter vi μ med $\max |\mu| = \rho(\mathbf{B})$ i formlen for ω og får

$$\omega_b = \frac{2}{1 + \sqrt{1 - \rho^2(\mathbf{B})}}$$

□

Spektralradius af Jacobi iterationsmatricen

Vi skal nu finde $\rho(\mathbf{B})$ og dermed ω_b for Jacobi iterationsmatricen \mathbf{B} , hvor $\mathbf{B} = \mathbf{D}^{-1}(\mathbf{L} + \mathbf{U})$ er givet som i ligning (13.8).

Egen værdierne til en tridiagonalmatrix af formen

$$\mathbf{T} = \begin{bmatrix} a & b & 0 & 0 \\ c & a & b & 0 \\ 0 & c & a & b \\ & & & \ddots \end{bmatrix}$$

findes ved at betragte den til egen værdierne μ hørende egenvektor \mathbf{v} . Der gælder jo

$$\mathbf{T}\mathbf{v} = \mu\mathbf{v} \Leftrightarrow (\mathbf{T} - \mu\mathbf{I})\mathbf{v} = \mathbf{0}$$

Dette giver anledning til ligningssystemet

$$cv_{j-1} + (a - \mu)v_j + bv_{j+1} = 0 \quad (13.29)$$

hvor $j = 1, 2, \dots, (N - 1)$ og $v_0 = v_N = 0$.

Lad nu $v_j = Km^j$ hvor $K \neq 0$ og $m \neq 0$ er konstanter [3, side 153]. Ved substitution af dette i (13.29) fås

$$\begin{aligned} cKm^{j-1} + (a - \mu)Km^j + bKm^{j+1} &= 0 \Leftrightarrow \\ c + (a - \mu)m + bm^2 &= 0 \Rightarrow \\ m &= \begin{cases} m_1 \\ m_2 \end{cases} \end{aligned}$$

Hvis vi således har to løsninger $v_j = Km_1^j$ og $v_j = Lm_2^j$, så vil linearkombinationen af disse give den mere generelle løsning

$$v_j = Km_1^j + Lm_2^j$$

Da $v_0 = v_N = 0$ får vi ligningerne

$$K + L = 0 \quad \text{og} \quad Km_1^N + Lm_2^N = 0$$

Af disse to fås

$$\left. \begin{aligned} L &= -K \\ Lm_2^N &= -Km_1^N \end{aligned} \right\} \Rightarrow$$

$$\frac{-L}{K} = \left(\frac{m_1}{m_2}\right)^N = 1 \Rightarrow$$

$$\left(\frac{m_1}{m_2}\right)^N = e^{i2\pi s} \Leftrightarrow$$

$$\frac{m_1}{m_2} = e^{\frac{i2\pi s}{N}} \tag{13.30}$$

hvor $s = 1, 2, \dots, (N - 1)$.

I en normeret andengradsligning vil produktet af rødderne give konstantleddet, det vil sige at $m_1m_2 = \frac{c}{b}$. Af dette fås $m_1 = \frac{c}{bm_2}$, som kan indsættes i (13.30):

$$\begin{aligned} \frac{c}{bm_2^2} &= e^{\frac{i2\pi s}{N}} \Leftrightarrow \\ \frac{bm_2^2}{c} &= e^{\frac{-i2\pi s}{N}} \Leftrightarrow \\ m_2 &= \left(\frac{c}{b}\right)^{\frac{1}{2}} e^{\frac{-i\pi s}{N}} \end{aligned}$$

På samme måde fås

$$m_1 = \left(\frac{c}{b}\right)^{\frac{1}{2}} e^{\frac{i\pi s}{N}}$$

Summen af rødderne i en normeret andengradslikning er lig minus koefficienten til første-gradsleddet, det vil sige

$$\begin{aligned} m_1 + m_2 &= \frac{-(a - \mu_s)}{b} \Leftrightarrow \\ \left(\frac{c}{b}\right)^{\frac{1}{2}} e^{\frac{i\pi s}{N}} + \left(\frac{c}{b}\right)^{\frac{1}{2}} e^{-\frac{i\pi s}{N}} &= \frac{-(a - \mu_s)}{b} \Leftrightarrow \\ a + b\left(\frac{c}{b}\right)^{\frac{1}{2}}(e^{\frac{i\pi s}{N}} + e^{-\frac{i\pi s}{N}}) &= \mu_s \Leftrightarrow \\ a + 2\sqrt{bc} \cos\left(\frac{\pi s}{N}\right) &= \mu_s \end{aligned} \quad (13.31)$$

I Jacobiiterationsmatricen er $a = 0$ og $b = c = (2C_1)^{-1}$, hvorfor

$$\begin{aligned} \mu_s &= 2\sqrt{\left(\frac{1}{2C_1}\right)^2} \cos\left(\frac{\pi s}{N}\right) \Leftrightarrow \\ \mu_s &= \frac{1}{C_1} \cos\left(\frac{\pi s}{N}\right) \end{aligned}$$

Spektralradius findes nu ved at maksimalisere udtrykket

$$\rho(\mathbf{B}) = \max_s(\mu_s) = \max_s\left(\left|\frac{1}{C_1} \cos\left(\frac{\pi s}{N}\right)\right|\right)$$

Funktionen har ingen stationære punkter i intervallet $s \in [1, N - 1]$, hvilket ses af følgende

$$\begin{aligned} \frac{d}{ds} \frac{1}{C_1} \cos\left(\frac{\pi s}{N}\right) &= -\frac{1}{C_1} \frac{\pi}{N} \sin\left(\frac{\pi s}{N}\right) = 0 \Leftrightarrow \\ \frac{\pi s}{N} &= p\pi \Leftrightarrow \\ \frac{s}{N} &= p \Leftrightarrow \\ s &= pN \end{aligned}$$

hvor $p \in \mathbb{Z}$

Vi skal altså søge maksimum i endepunkterne $s = 1$ eller $s = N - 1$. Da vi regner numerisk er det dog ligegyldigt, idet \cos antager samme numeriske størrelse i de to endepunkter. Vælger vi $s = 1$ fås udtrykket

$$\omega_b = \frac{2}{1 + \sqrt{1 - \left(\frac{1}{C_1} \cos\left(\frac{\pi}{N}\right)\right)^2}} \quad (13.32)$$

13.5 Stabilitet og konvergens

13.5.1 Konvergens af numerisk løsning

Vi vil i dette afsnit undersøge, hvor godt differensligningen

$$F(u) = \frac{u_{i,j} - u_{i,j-1}}{\Delta t} - \frac{\alpha}{2} \left(\frac{u_{i-1,j-1} - 2u_{i,j-1} + u_{i+1,j-1} + u_{i-1,j} - 2u_{i,j} + u_{i+1,j}}{\Delta x^2} \right) + \frac{\beta}{2} (u_{i,j} + u_{i,j-1}) \quad (13.33)$$

approksimerer differentiaalligningen

$$L(U) = \frac{\partial U}{\partial t}(x, t) - \alpha \frac{\partial^2 U}{\partial x^2}(x, t) + \beta U(x, t) \quad (13.34)$$

Vi antager, at begyndelses- og randbetingelser er tilstrækkeligt pæne, det vil sige, at de skal være differentiable med hensyn til x og t samt lineære med hensyn til $U(x, t)$.

Hvis denne approximation skal være rimelig, skal ligningen være stabil og konvergent.

Disse begreber defineres i det følgende:

Konvergens

Lad $U(x, t)$ være den eksakte løsning til differentiallyingningen (13.34), og lad $u_{i,j}$ være den eksakte løsning til differensligningen (13.33), så vil differensligningen konvergere mod differentiallyingningen hvis og kun hvis

$$\forall i, j : (U(i\Delta x, j\Delta t) - u_{i,j}) \rightarrow 0 \text{ for } \Delta x \rightarrow 0, \Delta t \rightarrow 0$$

Differensen $U(i\Delta x, j\Delta t) - u_{i,j}$ kaldes for diskretionsfejlen. Størrelsesordenen af denne afhænger af afstanden mellem de efterfølgende gitterpunkter se figur 5.1 side 48 samt antallet af begyndelsespunkter, der anvendes til at approksimere de afledede, når de beregnes ved brug af taylorudvikling.

Generelt kan diskretionsfejlen mindskes ved at mindske Δx og Δt , men når de mindskes vil antallet af ligninger, som skal løses øges. Ved løsning af konkrete problemer, vil størrelsen af Δx og Δt afhænge af, hvor mange tidsskridt der skal beregnes, samt hvor meget tid der kan anvendes til disse beregninger. Disse faktorer skal tages i betragtning, når størrelsesordenen af diskretionsfejlen skal vurderes.

Til sidst er det vigtigt at nævne, at det er svært at beregne et præcist overslag over konvergens, da det eksplícitte udtryk for denne ofte indeholder ukendte afledede af funktionen $u(x, t)$, som hverken har en øvre eller nedre grænse [2, side 45].

Stabilitet

De ligninger, som rent faktisk løses, er naturligvis endelige differensligninger og de løsninger, som beregnes til de efterfølgende tidsskridt, er alle fremkommet fra de kendte begyndelsesbetingelser. Hvis der undervejs ikke introduceres nogen afrundingsfejl, under beregningen af de enkelte tidsskridt, vil det være muligt, at beregne den eksakte løsning til differensligningen i alle punkter $u_{i,j}$.

Essensen af begrebet stabilitet er, at udviklingen af fejl i beregningen af løsninger i de enkelte tidsskridt, bliver begrænset i forhold til den givne begyndelsesbetingelse. Således at løsningen bliver så eksakt som muligt.

For differentiaalligninger med lineære begyndelses- og randværdibetingelser, har Lax og Richtmeyer [2, side 53] defineret stabilitet, ved at betragte, hvordan perturbationer af begyndelsesbetingelsen forplanter sig, efterhånden som der regnes frem i tiden. Hvis perturbationerne bliver mindre som tiden går, siges metoden at være stabil. Hvis perturbationerne vokser *lineært*, findes der metoder, som kompenserer for denne vækst, hvorved stabilitet alligevel kan opnås (se [1, side 57]). Vokser de derimod *eksponentielt* med tiden, siges metoden at være ustabil.

Kompatibilitet

Det er nogle gange muligt at approximere en differentiaalligning med en differensligning, som er stabil, men hvor løsningen af den konvergerer mod en anden differentiaalligning end den ønskede. Hvis dette er tilfældet, siges differensligningen at være ikke kompatibel eller inkonsistent. [3, side 40]

Kompatibilitet beregnes ved at se på differensen mellem differentiaalligningen og differensligningen.

Lad $U(x, t)$ være løsning til differentiaalligningen (13.34), det vil sige at $L(U) = 0$, og lad $u_{i,j}$ være løsning til differensligningen, (13.33) det vil sige at $F(u) = 0$.

Hvis vi nu lader v være en kontinuert funktion af x og t , med et passende antal kontinuerte afledede, således at $L(v)$ kan evalueres i alle punkter $(i\Delta x, j\Delta t)$ så vil trunckeringsfejlen $T_{i,j}$ være givet ved :

$$T_{i,j}(v) = F_{i,j}(v) - L(v_{i,j})$$

Hvis

$$T_{i,j}(v) \rightarrow 0, \quad \text{når } \Delta x \rightarrow 0, \Delta t \rightarrow 0$$

siges differensligningen at være kompatibel med differentiaalligningen. I dette tilfælde har vi beregnet den fejl, der opstår ved at erstatte $L(v_{i,j})$ med $F_{i,j}(v)$.

Ofte vil man i praksis ikke benytte denne generelle beregning, men istedet for $v_{i,j}$ benytte $U(x, t)$, så kaldes trunckeringsfejlen lokal i forhold til $L(U)$. I dette tilfælde, vil

den lokale trunkeeringsfejl i punktet i, j være givet ved:

$$T_{i,j} = F_{i,j}(U)$$

Hvis differensligningen skal være kompatibel med differenti-
alligningen, skal denne fejl også gå mod nul, når henholdsvis
 Δx , og Δt , går mod 0.

Da den differentiaalligning, som vi skal undersøge er lineær, kan vi be-
nytte os af Lax's sætning [3, side 72], som siger :

Sætning 13.4 Lax's ækvivalens sætning

En lineær differensligning som approksimerer et lineært problem kom-
patibelt konvergerer, hvis og kun hvis den opfylder stabilitetskravet.
Altså

$$\text{linearitet, kompatibilitet, stabilitet} \implies \text{konvergens}$$

Det er altså tilstrækkeligt at undersøge, om ligning (13.34) er kompa-
tibel og stabil med hensyn til differensligningen (13.33).

13.5.2 Kompatibilitet

Lad $U_{i,j} = U(i\Delta x, j\Delta t)$. Ved indsættelse af U i ligning (13.33) fås:

$$F(U) = \frac{U_{i,j} - U_{i,j-1}}{\Delta t} -$$

$$\frac{\alpha}{2} \left(\frac{U_{i-1,j-1} - 2U_{i,j-1} + U_{i+1,j-1} + U_{i-1,j} - 2U_{i,j} + U_{i+1,j}}{\Delta x^2} \right) +$$

$$\frac{\beta}{2}(U_{i,j} + U_{i,j-1}) \quad (13.35)$$

Hvis vi antager, at U kan differentieres tilstrækkeligt mange gange i
både tid og rum, kan vi finde udtryk for størrelserne i (13.35) ved
Taylorudvikling i et enkelt punkt. Vi foretager nu to Taylorudviklinger
i $U_{i,j-1}$ med hensyn til x og en Taylorudvikling i samme punkt med
hensyn til t . Herved fås:

$$\begin{aligned}
 U_{i+1,j-1} &= U_{i,j-1} + \Delta x \frac{\partial U_{i,j-1}}{\partial x} + \frac{1}{2} \Delta x^2 \frac{\partial^2 U_{i,j-1}}{\partial x^2} \\
 &\quad + \frac{1}{6} \Delta x^3 \frac{\partial^3 U_{i,j-1}}{\partial x^3} + \frac{1}{24} \Delta x^4 \frac{\partial^4 U_{i,j-1}}{\partial x^4} \dots \quad (13.36)
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 U_{i-1,j-1} &= U_{i,j-1} - \Delta x \frac{\partial U_{i,j-1}}{\partial x} + \frac{1}{2} \Delta x^2 \frac{\partial^2 U_{i,j-1}}{\partial x^2} \\
 &\quad - \frac{1}{6} \Delta x^3 \frac{\partial^3 U_{i,j-1}}{\partial x^3} + \frac{1}{24} \Delta x^4 \frac{\partial^4 U_{i,j-1}}{\partial x^4} \dots \quad (13.37)
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 U_{i,j} &= U_{i,j-1} + \Delta t \frac{\partial U_{i,j-1}}{\partial t} + \frac{1}{2} \Delta t^2 \frac{\partial^2 U_{i,j-1}}{\partial t^2} \\
 &\quad + \frac{1}{6} \Delta t^3 \frac{\partial^3 U_{i,j-1}}{\partial t^3} + \frac{1}{24} \Delta t^4 \frac{\partial^4 U_{i,j-1}}{\partial t^4} \dots \quad (13.38)
 \end{aligned}$$

Vi definerer nu den centrale differenskvotient operator

$$\delta_x U_{i+\frac{1}{2},j} = \frac{U_{i+1,j} - U_{i,j}}{\Delta x}$$

Det følger da at

$$\begin{aligned}
 \delta_x^2 U_{i,j-1} &= \delta_x (\delta_x U_{i,j-1}) \\
 &= \delta_x \left(\frac{U_{i+\frac{1}{2},j-1} - U_{i-\frac{1}{2},j-1}}{\Delta x} \right) \\
 &= \frac{U_{i+1,j-1} - 2U_{i,j-1} + U_{i-1,j-1}}{\Delta x^2}
 \end{aligned}$$

Indsættes udtrykkene (13.36) og (13.37) i dette fås:

$$\delta_x^2 U_{i,j-1} = \frac{\partial^2 U_{i,j-1}}{\partial x^2} + \frac{1}{12} \Delta x^2 \frac{\partial^4 U_{i,j-1}}{\partial x^4} + \mathcal{O}(\Delta x^4)$$

På samme måde bliver

$$\delta_x^2 U_{i,j} = \frac{U_{i+1,j} - 2U_{i,j} + U_{i-1,j}}{\Delta x^2}$$

Størrelsen $\delta_x^2 U_{i,j}$ kan Taylorudvikles i $\delta_x^2 U_{i,j-1}$ ved brug af ligning (13.38)

$$\delta_x^2 U_{i,j} = \delta_x^2 U_{i,j-1} + \Delta t \frac{\partial}{\partial t} \delta_x^2 U_{i,j-1} + \mathcal{O}(\Delta t^2) \quad (13.39)$$

Vi observerer nu at andenordensleddet (på nær konstanten α) i ligning (13.35) kan udtrykkes ved

$$\frac{1}{2}(\delta_x^2 U_{i,j-1} + \delta_x^2 U_{i,j}) = \frac{1}{2} \left(\frac{U_{i-1,j-1} - 2U_{i,j-1} + U_{i+1,j-1} + U_{i-1,j} - 2U_{i,j} + U_{i+1,j}}{\Delta x^2} \right)$$

Denne størrelse kan derfor udtrykkes ved ligningerne (13.39) og (13.39):

$$\begin{aligned} \frac{1}{2}(\delta_x^2 U_{i,j-1} + \delta_x^2 U_{i,j}) &= \\ \frac{1}{2} \left(2\delta_x^2 U_{i,j-1} + \Delta t \frac{\partial}{\partial t} \frac{\partial^2 U_{i,j-1}}{\partial x^2} + \Delta t \frac{\partial}{\partial t} \frac{1}{12} \Delta x^2 \frac{\partial^4 U_{i,j-1}}{\partial x^4} \right) &= \\ \delta_x^2 U_{i,j-1} + \frac{1}{2} \left(\Delta t \frac{\partial}{\partial t} \frac{\partial^2 U_{i,j-1}}{\partial x^2} + \mathcal{O}(\Delta t \Delta x^2) \right) &= \\ \frac{\partial^2 U_{i,j-1}}{\partial x^2} + \mathcal{O}(\Delta x^2) + \frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial t} \Delta t \frac{\partial^2 U_{i,j-1}}{\partial x^2} + \mathcal{O}(\Delta t \Delta x^2) & \quad (13.40) \end{aligned}$$

Desuden finder vi udtryk for $\frac{\partial U}{\partial t}$ og U i (13.35) ved at bruge (13.38):

$$\begin{aligned} \frac{U_{i,j} - U_{i,j-1}}{\Delta t} &= \frac{\partial U_{i,j-1}}{\partial t} + \frac{1}{2} \Delta t \frac{\partial^2 U_{i,j-1}}{\partial t^2} + \\ &\quad \frac{1}{6} \Delta t^2 \frac{\partial^3 U_{i,j-1}}{\partial t^3} + \frac{1}{24} \Delta t^3 \frac{\partial^4 U_{i,j-1}}{\partial t^4} \dots \\ &= \frac{\partial U_{i,j-1}}{\partial t} + \frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial t} \Delta t \frac{\partial U_{i,j-1}}{\partial t} + \mathcal{O}(\Delta t^2) \quad (13.41) \end{aligned}$$

og

$$\begin{aligned}
\frac{U_{i,j-1} + U_{i,j}}{2} &= U_{i,j-1} + \Delta t \frac{1}{2} \frac{\partial U_{i,j-1}}{\partial t} + \frac{1}{4} \Delta t^2 \frac{\partial^2 U_{i,j-1}}{\partial t^2} + \\
&\quad \frac{1}{12} \Delta t^3 \frac{\partial^3 U_{i,j-1}}{\partial t^3} + \frac{1}{24} \Delta t^4 \frac{\partial^4 U_{i,j-1}}{\partial t^4} \dots \\
&= U_{i,j-1} + \Delta t \frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial t} U_{i,j-1} + \mathcal{O}(\Delta t^2) \quad (13.42)
\end{aligned}$$

Ved indsættelse af (13.40), (13.41) og (13.42) i (13.35) fås:

$$\begin{aligned}
F(U_{i,j-1}) &= \left(\frac{\partial U_{i,j-1}}{\partial t} - \alpha \frac{\partial^2 U_{i,j-1}}{\partial x^2} + \beta U_{i,j-1} \right) \\
&\quad + \frac{\Delta t}{2} \frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{\partial U_{i,j-1}}{\partial t} - \alpha \frac{\partial^2 U_{i,j-1}}{\partial x^2} + \beta U_{i,j-1} \right) \\
&\quad + \mathcal{O}(\Delta x^2) + \mathcal{O}(\Delta t^2) + \mathcal{O}(\Delta t \Delta x^2)
\end{aligned}$$

Men da $L(U_{i,j-1}) = 0$ og da $\mathcal{O}(\Delta t \Delta x^2)$ majoriseres af $\mathcal{O}(\Delta x^2)$ fås

$$F(U_{i,j-1}) = \mathcal{O}(\Delta x^2) + \mathcal{O}(\Delta t^2) \rightarrow 0 \text{ for } \Delta x, \Delta t \rightarrow 0$$

hvorfor løsningssystemet er kompatibelt.

13.5.3 Stabilitet, Dirichlet randbetingelser

Vi betragter nu Crank-Nicholson formelen som opstillet i ligning (12.6) i afsnit 12.1:

$$-u_{i-1,j} + 2C_1 u_{i,j} - u_{i+1,j} = u_{i-1,j-1} + 2C_2 u_{i,j-1} + u_{i+1,j-1}$$

Har ligningssystemet randbetingelserne

$$u_{0,j} = d_{1,j} \quad \text{og} \quad u_{N,j} = d_{N-1,j}$$

kan det på matrixform skrives

$$\begin{bmatrix} 2C_1 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -1 & 2C_1 & -1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 2C_1 & -1 & 0 & 0 \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & 2C_1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u_{1,j} \\ u_{2,j} \\ u_{3,j} \\ \cdot \\ \cdot \\ u_{N-1,j} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 2C_2 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 2C_2 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 2C_2 & 1 & 0 & 0 \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 2C_2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u_{1,j-1} \\ u_{2,j-1} \\ u_{3,j-1} \\ \cdot \\ \cdot \\ u_{N-1,j-1} \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} d_{1,j-1} \\ 0 \\ 0 \\ \cdot \\ \cdot \\ d_{N-1,j-1} \end{bmatrix}$$

eller bare

$$Bu_j = Cu_{j-1} + d_{j-1}$$

Eftersom B er invertibel, kan dette skrives som

$$u_j = B^{-1}Cu_{j-1} + B^{-1}d_{j-1}$$

Lad $A = B^{-1}C$ og $f_j = B^{-1}d_j$. Da vil

$$\begin{aligned} u_j &= Au_{j-1} + f_{j-1} \\ &= A(Au_{j-2} + f_{j-2}) + f_{j-1} \\ &= \dots \\ &= A^j u_0 + A^{j-1} f_0 + A^{j-2} f_1 + A^{j-3} f_2 + f_{j-1} \quad (13.43) \end{aligned}$$

Vi vil nu undersøge, hvorledes en perturbation af begyndelsesbetingelsen forplanter sig, når der regnes frem i tiden. Lad u_0 og u_0^* være begyndelsesbetingelser med den indbyrdes forskel:

$$e_0 = u_0^* - u_0$$

Vi ønsker af beskrive hvordan

$$e_j = u_j^* - u_j$$

udvikles, når j vokser. Ved (13.43) fås:

$$e_j = u_j^* - u_j = A^j e_0$$

hvis u^* og u har samme værdier på randen. Dette giver ifølge ligning (13.47) side 187 at

$$\|e_j\| \leq \|A^j\| \|e_0\|$$

men da

$$\|A^j\| = \|AA^{j-1}\| \leq \|A\| \|A^{j-1}\| \leq \dots \leq \|A\|^j$$

fås

$$\|e_j\| \leq \|A\|^j \|e_0\| \quad (13.44)$$

Den naturlige definition af stabilitet er derfor:

Definition 13.3 *Stabilitet*

Løsningsskemaet er stabilt, hvis $\|A\| \leq 1$.

Ifølge sætning 13.7 side 187 er det endda tilstrækkeligt at vise at:

$$\rho(A) \leq 1$$

Udregning af $\rho(A)$

Da B og C er invertible og kommuterer giver formelen for egenverdierne i ligning (13.31) i det konkrete tilfælde:

$$\begin{aligned} \lambda_s &= \left(2C_1 + 2\sqrt{(-1)(-1)} \cos\left(\frac{s\pi}{N}\right) \right)^{-1} \left(2C_2 + 2\sqrt{1 \cdot 1} \cos\left(\frac{s\pi}{N}\right) \right) \\ &= \frac{\frac{\Delta x^2}{\alpha} \left(\frac{1}{\Delta t} - \frac{\beta}{2} \right) - 1 + \cos\left(\frac{s\pi}{N}\right)}{\frac{\Delta x^2}{\alpha} \left(\frac{1}{\Delta t} + \frac{\beta}{2} \right) + 1 + \cos\left(\frac{s\pi}{N}\right)} \end{aligned}$$

For $\alpha > 0$ og $\beta \geq 0$ vil det gælde at

$$\max_s |\lambda_s| = \rho(A) \leq 1$$

og systemet er dermed stabilt for faste randbetingelser.

13.5.4 Neumann randbetingelser

Er randbetingelserne afledede med konstante funktioner f

$$\begin{aligned}\frac{\partial U}{\partial x}(0,t) &= f_0 U(0,t) + g_0(t) \\ \frac{\partial U}{\partial x}(N,t) &= f_1 U(N,t) + g_1(t)\end{aligned}$$

fås specielle iterationsskemaer i randen. Disse kan samles i en matrixligning

$$\begin{aligned}& \begin{bmatrix} (C_1 + \Delta x f_0) & -1 & & & & \\ & -1 & 2C_1 & -1 & & \\ & & & \ddots & & \\ & & & & -1 & 2C_1 & -1 \\ & & & & & -1 & (C_1 - \Delta x f_1) \end{bmatrix} \times \begin{bmatrix} u_{0,j} \\ u_{1,j} \\ \vdots \\ u_{N-1,j} \\ u_{N,j} \end{bmatrix} = \\ & \begin{bmatrix} (C_2 - \Delta x f_0) & 1 & & & & \\ & 1 & 2C_2 & 1 & & \\ & & & \ddots & & \\ & & & & 1 & 2C_2 & 1 \\ & & & & & 1 & (C_2 + \Delta x f_1) \end{bmatrix} \times \\ & \begin{bmatrix} u_{0,j-1} \\ u_{1,j-1} \\ \vdots \\ u_{N-1,j-1} \\ u_{N,j-1} \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} -\Delta x((g_0)_{j-1} + (g_0)_j) \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \\ \Delta x((g_1)_{j-1} + (g_1)_j) \end{bmatrix} \quad (13.45)\end{aligned}$$

hvor konstanterne C_1 og C_2 er som defineret på side 141. Vi multiplicerer nu dette ligningssystem med $\frac{\Delta t}{\Delta x^2}$. Diagonalelementerne bliver da

$$\begin{aligned}
 \frac{\alpha \Delta t}{\Delta x^2} 2C_1 &= \frac{\alpha \Delta t}{\Delta x^2} 2 \left(\frac{\Delta x^2}{\Delta t \alpha} + \frac{\Delta x^2 \beta}{2\alpha} + 1 \right) \\
 &= 2 \left(1 + \frac{\Delta x^2 \Delta t \beta + 2\alpha \Delta t}{2\Delta x^2} \right) \\
 &= 2 \left(1 + \frac{\Delta x^2 \beta + 2\alpha}{2} \frac{\Delta t}{\Delta x^2} \right) \quad (13.46)
 \end{aligned}$$

Vi omdøber nu størrelserne så

$$q = \frac{\Delta x^2 \beta + 2\alpha}{2}$$

og

$$r = \frac{\Delta t}{\Delta x^2}$$

hvorved ligning (13.46) kan skrives

$$\alpha r 2C_1 = 2(1 + qr)$$

På tilsvarende vis får vi at

$$\frac{\alpha \Delta t}{\Delta x^2} 2C_2 = \alpha r 2C_2 = 2(1 - qr)$$

Vi multiplicerer nu første og sidste række i ligning (13.45) med 2 og får følgende.

Størrelsen $2(C_1 + \Delta x f_0)$ bliver ved multiplikation med αr til $2\alpha r(C_1 + \Delta x f_0)$, hvilket giver at :

$$2(1 + qr) + 2\alpha r \Delta x f_0 = 2 + 2r(q + \alpha \Delta x f_0)$$

og elementet på plads nr. (1,2) og N,N-1 bliver

$$-2 \cdot \alpha r$$

På denne måde kan ligningssystemet skrives

$$\begin{bmatrix} 2 + 2r(q + \alpha\Delta x f_0) & -2\alpha r & & & \\ -\alpha r & 2(1 + qr) & -\alpha r & & \\ & & \ddots & & \\ & & & -\alpha r & 2(1 + qr) & -\alpha r \\ & & & -2\alpha r & 2 + 2r(q - \alpha\Delta x f_1) & \end{bmatrix} \times \begin{bmatrix} u_{0,j} \\ u_{1,j} \\ \vdots \\ u_{N-1,j} \\ u_{N,j} \end{bmatrix} =$$

$$\begin{bmatrix} 2 - 2r(q + \alpha\Delta x f_0) & 2\alpha r & & & \\ \alpha r & 2(1 - qr) & \alpha r & & \\ & & \ddots & & \\ & & & \alpha r & 2(1 - qr) & \alpha r \\ & & & 2\alpha r & 2 - 2r(q - \alpha\Delta x f_1) & \end{bmatrix} \times \begin{bmatrix} u_{0,j-1} \\ u_{1,j-1} \\ \vdots \\ u_{N-1,j-1} \\ u_{N,j-1} \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} -\Delta x((g_0)_{j-1} + (g_0)_j) \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \\ \Delta x((g_1)_{j-1} + (g_1)_j) \end{bmatrix}$$

Dette kan nu skrives på en kort form

$$\begin{aligned} (2\mathbf{I}_{N+1} - r\mathbf{T}_{N+1})\mathbf{u}_j &= (2\mathbf{I}_{N+1} + r\mathbf{T}_{N+1})\mathbf{u}_{j-1} + \mathbf{b}_{j-1} \\ &= (4\mathbf{I}_{N+1} - (2\mathbf{I}_{N+1} - r\mathbf{T}_{N+1}))\mathbf{u}_{j-1} + \mathbf{b}_{j-1}. \end{aligned}$$

hvor vi har skilt 2 gange enhedsmatricen ud af systemet, og hvor \mathbf{T} er givet ved $(N+1) \times (N+1)$ matricen

$$\begin{bmatrix} -2(q + \alpha\Delta x f_0) & 2\alpha & & & \\ \alpha & -2q & \alpha & & \\ & & \ddots & & \\ & & & \alpha & -2q & \alpha \\ & & & 2\alpha & -2(q - \alpha\Delta x f_1) & \end{bmatrix}$$

Dette skrives nu

$$\mathbf{B}u_j = (4\mathbf{I}_{N-1} - \mathbf{B})u_{j-1} + \mathbf{b}_{j-1}.$$

Endelig fås

$$u_j = (4\mathbf{B}^{-1} - \mathbf{I}_{N-1})u_{j-1} + \mathbf{B}^{-1}\mathbf{b}_{j-1}.$$

hvor \mathbf{B} er matricen

$$\mathbf{B} = \begin{bmatrix} 2 + 2r(q + \alpha\Delta x f_0) & -2\alpha r & & & \\ -\alpha r & 2(1 + qr) & -\alpha r & & \\ & & \ddots & & \\ & & & -\alpha r & 2(1 + qr) & -\alpha r \\ & & & & -2\alpha r & 2 + 2r(q - \alpha\Delta x f_1) \end{bmatrix}$$

Systemet er nu stabilt, hvis spektralradius af $4\mathbf{B}^{-1} - \mathbf{I}$ er mindre end eller lig 1. Det vil sige at

$$\left| \frac{4}{\lambda} - 1 \right| \leq 1$$

for alle λ , hvor λ er en egen værdi for \mathbf{B} .

$$-1 \leq \frac{4}{\lambda} - 1 \leq 1 \Leftrightarrow 0 \leq \frac{4}{\lambda} \leq 2$$

hvilket betyder at $\lambda \geq 2$. Vi benytter nu Brauers sætning 13.6 side 185 til at finde ud af, hvornår dette gælder.

Lad a_{ss} være et diagonalelement, hvor $s \neq 1$ og $s \neq N + 1$. Lad P_s være den numeriske række sum fratrukket a_{ss} .

Elementet a_{ss} kan nu antage tre forskellige værdier:

1. $a_{ss} = 2(1 + qr)$ (Det indre af ligningen).
2. $a_{ss} = 2 + 2r(q + \alpha\Delta x f_0)$ (Venstre side).
3. $a_{ss} = 2 + 2r(q - \alpha\Delta x f_1)$ (Højre side).

Tilfælde 1:

$$a_{ss} = 2(1 + qr) \text{ og } P_s = 2\alpha r.$$

Brauers sætning giver da at

$$|\lambda - 2 - 2qr| \leq 2\alpha r \Rightarrow$$

$$-2\alpha r \leq \lambda - 2 - 2qr \leq 2\alpha r \Rightarrow$$

$$2 + 2(q - \alpha)r \leq \lambda \leq 2 + 2(q + \alpha)r$$

For at $\lambda \geq 2$ skal det gælde at

$$q - \alpha = \frac{\Delta x^2 \beta + 2\alpha}{2} - \alpha = \frac{\Delta x^2 \beta}{2} \geq 0$$

hvilket er opfyldt for $\beta \geq 0$.

Tilfælde 2:

Vælges diagonalelementet a_{11} fås $P_1 = 2\alpha r$.

Anvendelse af Brauers sætning giver uligheden

$$|\lambda - 2 - 2r(q + \alpha \Delta x f_0)| \leq 2\alpha r$$

af hvilken vi får

$$-2\alpha r \leq \lambda - 2 - 2r(q + \alpha \Delta x f_0) \Leftrightarrow$$

$$2 + 2r(q + \alpha \Delta x f_0 - \alpha) \leq \lambda$$

Da $\lambda \geq 2$ kræver vi altså at

$$q + \alpha \Delta x f_0 - \alpha \geq 0 \Leftrightarrow$$

$$\frac{\Delta x^2 \beta}{2} + \alpha \Delta x f_0 \geq 0 \Leftrightarrow$$

$$\Delta x \geq -\frac{2\alpha f_0}{\beta}$$

Tilfælde 3;

Vælger vi nu diagonalelementet a_{NN} får vi helt analogt:

$$|\lambda - 2 - 2r(q - \alpha \Delta x f_1)| \leq 2\alpha r$$

hvilket giver uligheden

$$\begin{aligned} -2\alpha r &\leq \lambda - 2 - 2r(q - \alpha \Delta x f_1) \Leftrightarrow \\ 2 + 2r(q - \alpha \Delta x f_1 - \alpha) &\leq \lambda \end{aligned}$$

Da $\lambda \geq 2$ kræver vi altså at

$$\begin{aligned} q - \alpha \Delta x f_1 - \alpha &\geq 0 \Leftrightarrow \\ \frac{\Delta x^2 \beta}{2} - \alpha \Delta x f_1 &\geq 0 \Leftrightarrow \\ \Delta x &\geq \frac{2\alpha f_1}{\beta} \end{aligned}$$

I specieltilfældet $\beta = 0$ fås på samme måde

$$\alpha \Delta x f_0 \geq 0$$

og

$$\alpha \Delta x f_1 \leq 0$$

Brauers sætning siger, at for enhver egen værdi findes der mindst et a_{ss} så uligheden $|\lambda - a_{ss}| \leq P_{ss}$ er opfyldt. Den siger *ikke* hvilke s , der opfylder uligheden. Når vi vil opstille et samlet stabilitetskrav på parametrene, skal det derfor gælde at alle krav er opfyldt samtidigt.

For

$$\alpha > 0$$

$$\beta \geq 0$$

$$f_0 \geq 0$$

$$f_1 \leq 0$$

er ligningen således ubetinget stabil.

13.5.5 Nyttige sætninger

Sætning 13.5 Gerschgorins første sætning

Størrelsen af den største egenværdi i en kvadratisk matrix \mathbf{A} er aldrig større end den største række- eller søjlesum i matricen.

Bevis :

Lad λ_i være en egenværdi i $N \times N$ matricen \mathbf{A} og lad \mathbf{x}_i være den korresponderende egenvektor (v_1, v_2, \dots, v_N) . Da kan ligningen

$$\mathbf{A}\mathbf{x}_i = \lambda_i\mathbf{x}_i$$

skrives

$$\begin{aligned} a_{11}v_1 + a_{12}v_2 + \dots + a_{1n}v_n &= \lambda_i v_1 \\ a_{21}v_1 + a_{22}v_2 + \dots + a_{2n}v_n &= \lambda_i v_2 \\ &\vdots \\ a_{s1}v_1 + a_{s2}v_2 + \dots + a_{sn}v_n &= \lambda_i v_s \\ &\vdots \end{aligned}$$

Lad v_s være den største af (v_1, v_2, \dots, v_n) , udvælg den s 'te ligning og divider med v_s :

$$\lambda_i = a_{s1} \left(\frac{v_1}{v_s} \right) + a_{s2} \left(\frac{v_2}{v_s} \right) + \dots + a_{ss} + \dots + a_{sn} \left(\frac{v_n}{v_s} \right)$$

Derfor er

$$|\lambda_i| \leq |a_{s1}| + |a_{s2}| + \dots + |a_{sn}|$$

fordi

$$\left| \frac{v_i}{v_s} \right| \leq 1 \text{ for alle } i$$

Hvis denne række-sum ikke er den største, vil den største række-sum stadig majorisere $|\lambda_i|$.

Teoremet gælder helt analogt for søjlesummer, da den transponerede har samme egenvektorer.

□

Sætning 13.6 Brauers sætning

Lad P_s være den s 'te række-sum fratrukket diagonalelementet a_{ss} . Alle A 's egenverdier ligger da inden i mindst en af cirklerne

$$|\lambda - a_{ss}| = P_s$$

Denne sætning kaldes også Gerschgorins 2 sætning, eller cirkeltæoret.

Bevis :

Ifølge sætning 13.5 gælder

$$\lambda_i = a_{s1} \left(\frac{v_1}{v_s} \right) + a_{s2} \left(\frac{v_2}{v_s} \right) + \cdots + a_{ss} + \cdots + a_{sn} \left(\frac{v_n}{v_s} \right)$$

Derfor er

$$\begin{aligned} & |\lambda_i - a_{ss}| \\ &= \left| a_{s1} \left(\frac{v_1}{v_s} \right) + \cdots + a_{ss-1} \left(\frac{v_{s-1}}{v_s} \right) + a_{ss+1} \left(\frac{v_{s+1}}{v_s} \right) + \cdots + a_{sn} \left(\frac{v_n}{v_s} \right) \right| \\ &\leq |a_{s1}| + \cdots + |a_{ss-1}| + 0 + |a_{ss+1}| + \cdots + |a_{sn}| = P_s \end{aligned}$$

□

13.5.6 Vektor- og matrixnormer

Normen af en vektor x er defineret ved et tal tilhørende \mathbb{R}_+ . Dette tal angiver et mål for størrelsen af den pågældende vektor, og det skrives, som $\|x\|$. Normen defineres som en afbildning fra vektorrummet ind i \mathbb{R}_+ , der opfylder følgende 3 aksiomer:

1.

$$\|x\| \geq 0, \text{ hvis } x \neq 0 \text{ og } \|x\| = 0, \text{ hvis } x = 0$$

2.

$$\|cx\| = |c| \|x\| \text{ for } c \in \mathbb{C}$$

3.

$$\|\mathbf{x} + \mathbf{y}\| \leq \|\mathbf{x}\| + \|\mathbf{y}\|$$

Hvis \mathbf{x} har koordinatrepræsentationen (x_1, \dots, x_n) , vil de mest brugte normer være defineret som følger :

1 Norm

$$\|\mathbf{x}\|_1 = |x_1| + |x_2| + \dots + |x_n| = \sum_{i=1}^n |x_i|$$

2 Norm

$$\|\mathbf{x}\|_2 = (|x_1|^2 + |x_2|^2 + \dots + |x_n|^2)^{\frac{1}{2}} = \left[\sum_{i=1}^n |x_i|^2 \right]^{\frac{1}{2}}$$

Supremum Norm

$$\|\mathbf{x}\|_{\infty} = \max_i |x_i|$$

Normen af en matrix \mathbf{A} er ligeledes defineret ved et tal $\in \mathbb{R}_+$. Dette tal angiver et mål for størrelsen af den pågældende matrix, og det skrives, som $\|\mathbf{A}\|$.

Der gælder følgende aksiomer for matrixnormer \mathbf{A} .

1.

$$\|\mathbf{A}\| > 0, \text{ hvis } \mathbf{A} \neq \mathbf{0} \quad \text{og} \quad \|\mathbf{A}\| = 0, \text{ hvis } \mathbf{A} = \mathbf{0}$$

2.

$$\|c\mathbf{A}\| = |c|\|\mathbf{A}\| \quad \text{for } c \in \mathbb{C}$$

3.

$$\|\mathbf{A} + \mathbf{B}\| \leq \|\mathbf{A}\| + \|\mathbf{B}\|$$

4.

$$\|\mathbf{AB}\| \leq \|\mathbf{A}\|\|\mathbf{B}\|$$

Vektorer og matricer optræder ofte i de samme udtryk, hvorfor de begge skal opfylde aksiom 4 ovenfor. Hvis vektor- og matrixnormer er kompatible, skal følgende ulighed gælde:

$$\|\mathbf{Ax}\| \leq \|\mathbf{A}\| \|\mathbf{x}\| \quad (13.47)$$

Definition 13.4 Matrixnorm

Lad \mathbf{A} være en $N \times N$ matrix, \mathbf{x} en vektor af dimension N . Hvis $\|\cdot\|$ er en givet vektornorm, da kan vi vælge matrixnormen af \mathbf{A} ved

$$\|\mathbf{A}\| = \max_{\|\mathbf{x}\|=1} \|\mathbf{Ax}\|$$

Eksempel 13.3. Sammenhørende vektor- og matrixnormer

1 Norm

$$\|\mathbf{A}\|_1 = \max_j \sum_{i=1}^N |a_{i,j}|$$

2 Norm

$$\|\mathbf{A}\|_2 = [\rho((\overline{\mathbf{A}})^T \mathbf{A})]^{1/2}$$

Hvis \mathbf{A} er reel og symmetrisk, vil

$$\|\mathbf{A}\|_2 = [\rho(\mathbf{A}^2)]^{1/2} = [\rho^2(\mathbf{A})]^{1/2} = \rho(\mathbf{A})$$

Supremum Norm

$$\|\mathbf{A}\|_\infty = \max_i \sum_{j=1}^N |a_{i,j}|$$

Sætning 13.7 Lad \mathbf{A} være en $N \times N$ matrix. Da vil gælde:

$$\rho(\mathbf{A}) \leq \|\mathbf{A}\|$$

Bevis :

Lad λ_i være egen værdi for \mathbf{A} , med egenvektor \mathbf{x}_i . Da vil

$$|\lambda_i| \|\mathbf{x}_i\| = \|\lambda_i \mathbf{x}_i\| = \|\mathbf{Ax}_i\| \leq \|\mathbf{A}\| \|\mathbf{x}_i\| \Leftrightarrow$$

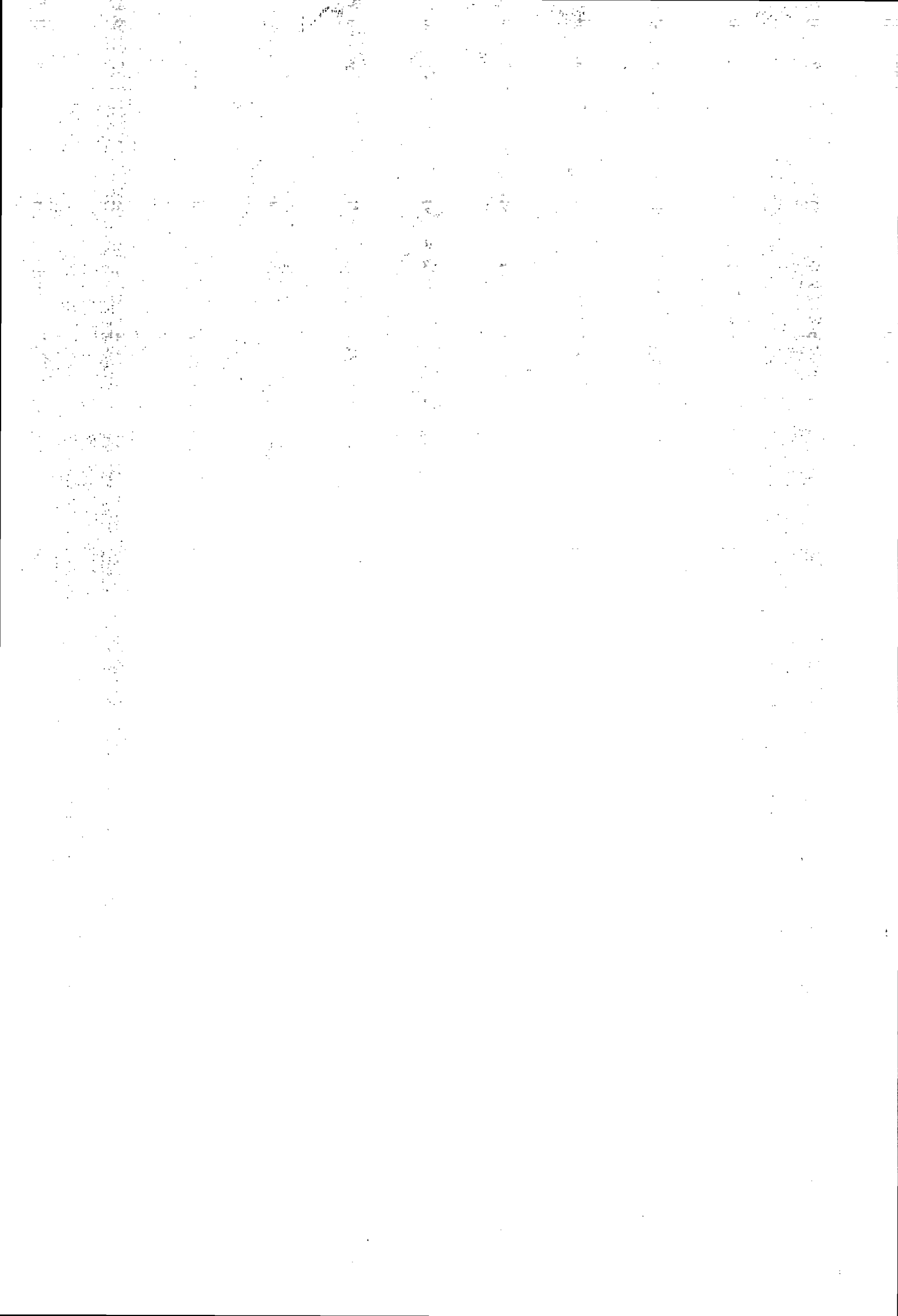
$$|\lambda_i| \leq \|\mathbf{A}\| \Leftrightarrow$$

$$\max_i |\lambda_i| = \rho(\mathbf{A}) \leq \|\mathbf{A}\|$$

□

Del IV

Datalogisk metode



Kapitel 14

Design af en diffusionsligningsløser.

Dette og de følgende kapitler handler om, hvorledes man i praksis, vil løse en diffusionsligning, ved brug af iterationsmetoden Successive Over Relaxation - SOR.

Diffusionsligningen løses ved brug af et SIMULA program, som er designet til formålet. Dette vil blive beskrevet dels ved det overordnede design, og dels ved dokumentation af den konkrete implementering.

I det konkrete system, har vi valgt at begrænse problemet til lineære paraboliske differentialligninger med konstante koefficienter, lineære randbetingelser og med funktioner af x som begyndelsesbetingelser.

Det er ligninger på formen :

$$\frac{\partial u}{\partial t}(x, t) - \alpha \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}(x, t) + \beta u(x, t) = 0 \quad (14.1)$$

hvor u er en funktion af x og t , og koefficienterne $\alpha > 0$ og $\beta \geq 0$.

Med begyndelsesværdier på formen :

$$u(x, 0) = f(x) \quad (14.2)$$

og med randbetingelser på formen :

- Neumann randbetingelser :

$$\frac{\partial u}{\partial x}(x, t) = u(x, t) f(t) + g(t) \quad x = 0, 1 \quad \text{og} \quad \forall t \quad (14.3)$$

- Dirichlet randbetingelser :

$$u(x, t) = f(t) \quad x = 0, 1 \quad \text{og} \quad \forall t \quad (14.4)$$

Ligningen skal da løses for et antal punkter, defineret ved et antal x -værdier - steds-kridt, og et antal t -værdier - tidsskridt (se kapitel 12).

Programmet er primært henvendt til Petr Višcor ved RUC, der arbejder med en konkret elektrondiffusionsligning, hvor randbetingelserne til stadighed modificeres i forsøget på at modellere det fysiske problem (se kapitel 2.1). Ydermere er parametrene α og β udtryk for materialekonstanter, som ikke altid er kendte. Hensigten med programmet er da at afprøve og tilpasse alle disse størrelser.

Denne målsætning har sat rammen for vores design. Det er især meget fleksibelt for forskellige valg af randbetingelser. Programmet er derimod ikke helt så fleksibelt hvad angår selve ligningen, her har vi dels udeladt det såkaldte driftsled $\frac{\partial u}{\partial x}$, og dels kræver vi at ligningens koefficienter α og β ikke må være funktioner af x og t . Endelig har vi begrænset os til en *lineær* ligning. På trods af disse specialiseringer, kan programmet alligevel anvendes til at løse langt flere diffusionsproblemer end det konkrete, se endvidere afsnit 14.6 om muligheder for udvidelse af programmet.

Vi forudsætter at brugeren har et vist kendskab til at arbejde med datamaskiner, her tænker vi specielt på håndtering af editorer samt et minimalt kendskab til programmering - ikke nødvendigvis i SIMULA.

Det skal bemærkes, at algoritmen til at løse disse ligninger ikke tager højde for, om det opstillede problem overhovedet giver mening. Således kan den angive løsninger på inkompatible problemer eller prøve at udregne ikke stabile systemer.

Algoritmen skal således anvendes med en god portion teoretisk baggrund og almindelig omtanke.

Med henblik på denne målgruppe har vi designet diffusionsligningsløseren.

14.1 Det overordnede design.

Vi har lagt stor vægt på, at programmet skal være

- Fleksibelt for udvidelser og ændringer.
- Gennemskueligt for den der skal vedligeholde det.
- Enkelt at anvende for brugeren.
- Driftssikkert, forstået på den måde at det reagerer fornuftigt ved fejl fra brugerens side.

Af hensyn til fleksibiliteten er programmet delt op i flere selvstændige programmoduler, således at man ved andre specifikke anvendelser let kan tilpasse designet til disse formål.

14.1.1 Programmets moduler

I det følgende beskrives det overordnede design af den konkrete implementering. Derefter følger en mere detaljeret argumentation for dette design, samt en præsentation af nogle alternative designmuligheder.

Problemet

I dette modul, som er konstrueret som en klasse - class **PROBLEM**, skal brugeren definere det konkrete matematiske problem. Det består i at specificere de relevante parametre i ligningen.

SOR-faciliteten

Dette modul, der ligeledes er konstrueret som en klasse - **PROBLEM** class **SOLVER**, indeholder faciliteten til at udføre SOR iteration. Det er her algoritmerne til numerisk løsning af de tidligere beskrevne problem er placeret. Klassen erklærer de relevante objekter, procedurer og simple variable men udfører dem ikke.

Da class **SOLVER** skal løse det konkrete problem, som er defineret i class **PROBLEM**, er den præfixet med class **PROBLEM**.

Numerisk problemløser

Problemløseren er et program `_numcalc`, som ved brug af `SOR`-faciliteten løser den ligning, der er defineret i class `PROBLEM`. Resultatet gemmes på fil.

Numerisk-Analytisk testværktøj

Testværktøjet er et program `_anacalc`, som dels løser den konkrete ligning defineret i class `PROBLEM` ved brug af `SOR`-faciliteten, og dels løser det samme problem analytisk i de samme $x - t$ værdier. Den analytiske løsning beregnes direkte i dette program og bør naturligvis svare til den ligning, som er defineret i problemet. Når de to løsninger er beregnet, beregnes differencen mellem dem, hvorefter begge løsninger og fejl gemmes på filer.

Dette program bruges kun til at teste, om de numeriske løsninger er rigtige og har kun relevans, når der foreligger en analytisk løsning.

Databehandling

Når ligningen er løst, er resultaterne gemt på fil. Man skal så kunne vælge, om der skal tegnes grafer af løsningerne, eller om man bare vil have skrevet resultatet ud på skærm eller printer.

Hvis der skal tegnes grafer, benyttes programmerne `_graphmake` og `_graphdraw`. Her skal brugeren først kunne vælge hvilken løsningsfil, der skal tegnes grafer for. Derefter kan man vælge, om graferne skal afbilde løsningerne som snit langs t -aksen $u(x = k, t)$ eller snit langs x -aksen $u(x, t = k)$, hvorefter der vælges til hvilke steder (x) henholdsvis tider (t), graferne skal tegnes.

Hvis man i stedet ønsker at få resultaterne skrevet ud på skærm eller printer, benyttes programmet `_view`, som udskriver de konkrete tal.

Brugergrænseflade

Vi har valgt at brugeren direkte skal kunne benytte denne samling programmer og klasser ved at skrive nogle kommandoer, der er implementeret som styrefiler, der sørger for at de valgte programmer oversættes linkes og køres.

En oversigt over disse styrefiler, kan fås ved at taste kommandoen help.

Samspelet mellem de enkelte programmoduler er vist på figur 14.1. Dobbeltstregerne indikerer direkte nedrivning, medens enkeltstregerne antyder datastrømmen.

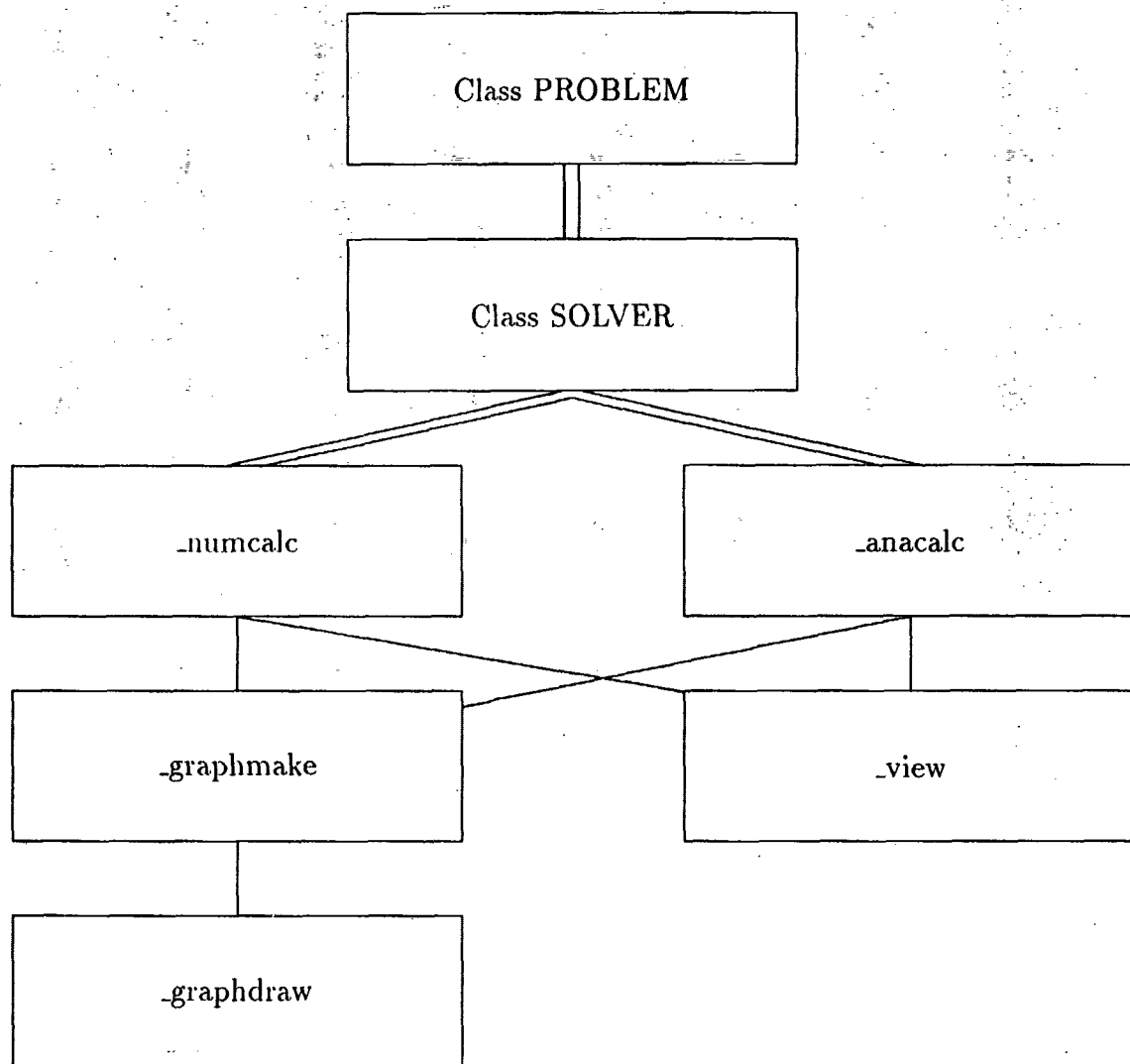
14.2 Opstilling af ligningen - class PROBLEM

Formålet med denne programdel, er at brugeren skal kunne specificere de forskellige parametre, som tilsammen definerer det konkrete matematiske problem.

Disse parametre er:

- Diffusionsligningens koefficienter α og β , se ligning (14.1).
- Begyndelsesbetingelsen - en funktion $f(x)$ se ligning (14.2).
- Hvilken type randbetingelser der anvendes i venstre og højre side - Dirichlet eller Neumann betingelser.
- De valgte randbetingelser for $x = 0, 1$ til alle t .
 - Dirichlet randbetingelser - en funktion $f(t)$, se ligning (14.4).
 - Neumann randbetingelser - to funktioner $f(t)$ og $g(t)$ se ligning (14.3).
- Hvor mange steds-kridt, der skal beregnes.
- Hvor mange tidsskridt, der skal beregnes.
- Sluttiden - til hvilken tid skal beregningen slutte.

Vi har overvejet følgende tre alternative metoder til design af denne programdel.



Figur 14.1: Diagram over samspillet mellem de enkelte programdele. Dobbeltstregene indikerer direkte nedarvning og linierne symboliserer dataoverførsel.

- Et program med en interaktiv dialog med brugeren, således at brugeren definerer ovenstående parametre efterhånden som programmet kører. Disse parametre skal så verificeres inden de videregives til den programdel, hvori den numeriske løsning beregnes.
- En separat klasse, hvori brugeren skal skrive de valgte parametre i SIMULA, som så skal oversættes og derefter linkes sammen med resten af programmet inden det køres.
- En fil, hvori brugeren skriver de valgte parametre. Denne fil skal læses af et program, der kan generere den nødvendige SIMULA-kode og indsætte den i den ovenfor beskrevne klasse.

Det først beskrevne designforslag har vi forkastet, da det vil være meget tidskrævende at opstille grammatikken og konstruere en parser for de af brugeren indtastede udtryk. Derudover skal de indlæste funktionsudtryk kunne evalueres på køretidspunktet, hvilket vi finder uforholdsmæssigt besværligt.

Generaliteten af et interaktivt program vil ikke være særlig høj da det formentlig vil blive ret kompliceret at tilføje nye typer parametre som for eksempel en ny type randbetingelse.

Fordelen ved dette forslag er, at det er meget sikkert at bruge, da brugeren ikke kan lave andre fejl end forkerte indtastninger, som vil blive afvist af den implementerede parser.

Det andet forslag, vil derimod have den ulempe, at brugeren skal editere i selve kildeteksten til klassen. Fejlagtige indtastninger vil i dette tilfælde betyde, at brugeren præsenteres for SIMULA oversætterens fejlmeddelelser. Dette kræver at brugeren ikke forholder sig direkte afvisende over for omgang med datamaskiner og programmeringssprog.

Ydermere kan brugeren let komme til at ændre så meget i kildeteksten, at han ikke kan genoprette en korrekt SIMULA syntaks. Derfor skal der være mulighed for at hente en frisk kopi af PROBLEM.SIM.

Vi har dog alligevel benyttet dette designforslag, hvilket er årsagen til vores krav om et vist minimum af kendskab til programmering.

Til programmet skal følge en brugervejledning, hvori der er beskrevet hvorledes man skal håndtere denne klasse, samt den nødvendige information om, hvordan parametrene skal defineres i SIMULA.

Fordelen ved at definere problemet i en separat klasse er, at det er let at tilføje nye typer parametre, hvis programmet skal udvides til at være mere generelt, eller hvis det skal ændres til at arbejde med en anden variation af problemet.

Det tredje designforslag, ser vi umiddelbart, som en udvidelse, af det andet forslag, idet det vil implicere konstruktionen en præprocessor, som på baggrund af en brugerindtastet fil genererer den nødvendige SIMULA kode til den separate klasse.

14.2.1 Design af class PROBLEM

I designet af class Problem har vi prioriteret hensynet til brugeren meget højt. Vi har således tilstræbt at kildeteksten indeholder så få og så simple programinstruktioner som overhovedet muligt.

De nødvendige kodelinier er blevet kommenteret meget grundigt og på en sådan måde, at brugeren ved hjælp af diverse eksempler kan se, hvorledes de enkelte parametre og funktionsudtryk skal indtastes.

Konstanterne α , β , *spacesteps* (antallet af stedskridt), *timesteps* (antallet af tidsskridt) samt *final_time* (den ønskede sluttid), er alle erklæret som konstanter i SIMULA-forstand. Her skal brugeren kun indtaste de aktuelle talværdier.

Når disse simple parametre er indtastet, skal begyndelses- og randværdifunktionere indtastes. Dette har vi valgt at gøre i nogle objekter, som ligningsløseren direkte kan benytte. Vi har således erklæret klasserne

class Left - den venstre randbetingelse ($x = 0$)

class Right - den højre randbetingelse ($x = 1$) og

class Init - begyndelsesfunktionen ($t = 0$).

I class Left og class Right har vi valgt at erklære en logisk variabel der angiver, hvilken type randbetingelse der er valgt (Neumann eller Dirichlet). Det koncept at vi har benyttet en logisk variabel, skal dog ændres, hvis man ønsker at definere en tredje type randbetingelser. Afhængigt af den logiske variabels værdi, skal brugeren herefter definere de relevante funktioner, der findes som attributprocedurer i klasserne.

I class Init defineres begyndelsesbetingelsen på samme måde som i en attributprocedure.

14.3 SOR-faciliteten - class SOLVER

Formålet med denne programdel er at løse den konkrete ligning ved brug af iterationsmetoden SOR, som er forklaret og gennemgået i del 3, side 154.

Iterationsskemaet for selve diffusionsligningen ser ud som følger :

$$u_{i,j}^{(n+1)} = \frac{\omega}{2C_1} \left(u_{i-1,j}^{(n+1)} + u_{i+1,j}^{(n)} + b_i \right) + (1 - \omega)u_{i,j}^{(n)}$$

$$b_i = u_{i-1,j-1} + 2C_2u_{i,j-1} + u_{i+1,j-1} \text{ for } x \in]0, 1[\quad (14.5)$$

hvor

$$C_1 = \frac{\Delta x^2}{\alpha} \left(\frac{1}{\Delta t} + \frac{\beta}{2} \right) + 1$$

og

$$C_2 = \frac{\Delta x^2}{\alpha} \left(\frac{1}{\Delta t} - \frac{\beta}{2} \right) - 1$$

Hvis randbetingelserne er af Neumann typen, ser de korresponderende iterationsskemaer således ud :

$$\underline{x = 0}$$

$$u_{0,j}^{(n+1)} = \frac{\omega}{C_1 + \Delta x(f_0)_j} \left(u_{1,j}^{(n)} - \Delta x(g_0)_j + b_0 \right) + (1 - \omega)u_{0,j}^{(n)}$$

$$b_0 = u_{1,j-1} + (C_2 - \Delta x(f_0)_{j-1})u_{0,j-1} - \Delta x(g_0)_{j-1}$$

$$\underline{x = 1}$$

$$u_{N,j}^{(n+1)} = \frac{\omega}{C_1 - \Delta x(f_1)_j} \left(u_{N-1,j}^{(n+1)} + \Delta x(g_1)_j + b_N \right) + (1 - \omega)u_{N,j}^{(n)}$$

$$b_N = u_{N-1,j-1} + (C_2 + \Delta x(f_1)_{j-1})u_{N,j-1} + \Delta x(g_1)_{j-1}$$

Randbetingelser af Dirichlet typen skal ikke itereres men kan beregnes direkte - se side 151.

Når ligningen løses i de af brugeren definerede intervaller, sker det efter følgende algoritme:

Størrelsen af et steds-kridt $\Delta x = \frac{1}{\text{spacesteps}}$, og størrelsen af et tidsskridt $\Delta t = \frac{\text{final_time}}{\text{timesteps}}$

Algoritme 14.1 Iteration

1. Først indsættes begyndelsesværdierne for alle $i \in [0, N]$ til $j = 0$.
2. For alle $j > 0$ udføres nu
 - (a) Værdierne fra $j - 1$ 'te række kopieres til j 'te række. Dette giver nogle fornuftige begyndelsesværdier til SOR iteration.
 - (b) Størrelsen b_i beregnes for ethvert $i \in [0, N]$.
 - (c) Så længe forskellen mellem n 'te og $n + 1$ 'te iteration er større end en valgt tolerance gøres følgende:
 - i. Der beregnes en iteration af venstre randværdi, $u_{0,j}$.
 - ii. Herefter beregnes en iteration af de indre punkter, $u_{i,j}$ for $i := 1$ til $i := N - 1$.
 - iii. Endelig beregnes en iteration af højre randværdi, $u_{N,j}$.

14.3.1 Strukturen i SOR faciliteten

Da formålet med dette modul er at stille SOR algoritmen til rådighed for forskellige programmer og med forskellige varianter af diffusionsligningen har vi lavet SOR faciliteten som en generel klasse - class SOLVER, der er præfixet med class PROBLEM. Programmer, der skal anvende SOR algoritmen præfixes da med SOLVER.

Til at håndtere værdierne af løsningen på en fornuftig måde, har vi defineret en klasse - class matrix, der varetager disse behov. Et objekt af class matrix indeholder matricens dimensioner, et todimensionalt array, en procedure til beregning af differensen mellem to matricer, samt en procedure til at gemme værdierne på fil.

De eneste sætninger, som er i klassen, er beregninger af de generelle parametre, som er specifikke for SOR metoden.

I vores forsøg på at realisere algoritme 14.1 har vi haft flere designforslag oppe til overvejelse. I næste afsnit viser vi udviklingen af et af disse forkastede designforslag. Dette gør vi primært for at begrunde det endelige design, men også fordi vi finder, at det belyser den vigtige problematik, der ligger i, at designet både skal være funktionelt og generelt. Den læser, der kun ønsker at se det færdige design, kan springe frem til afsnit 14.3.3 side 204.

14.3.2 Et første designforslag

I vores første forsøg på at designe class SOLVER forestillede vi os, at der skulle defineres nogle klasser af følgende type:

```
class Rand;
virtual : long real procedure function;

Rand class Neumann;
begin
  long real procedure function;
  ..
end;

Rand class Dirichlet;
begin
  long real procedure function;
  ..
end;

ref(Rand) randNe, randDi;

randNe :- new Neumann;  !I dette eksempel vælges
                        Neumann randbetingelser.
```

Ifølge denne struktur kan objekterne af de forskellige randbetingelser erklæres med den fælles kvalifikation, `ref(Rand)` hvorved virtualspecifikation sikrer at den rigtige randværdi beregnes. Dette gør det muligt at programmere selve iterationsskemaet uafhængigt af randbetingelsestypen.

Denne enkle struktur opfylder imidlertid ikke vores mål for, hvad programmet skal kunne, idet det skal være muligt at vælge forskellige randbetingelser i venstre og højre side.

Derudover skal designet opfylde, at der i Neumann randbetingelsen ligning (14.3) defineres to funktioner, som optræder uafhængigt af hinanden i SOR-iterationsskemaet.

Med respekt for disse krav kan class PROBLEM se således ud.

```
class Rand;  
virtuel : long real procedure function;
```

```
Rand class Neumann_f_left;  
begin  
  long real procedure function;  
  ..  
end;
```

```
Rand class Neumann_g_left;  
begin  
  long real procedure function;  
  ..  
end;
```

```
Rand class Neumann_f_right;  
begin  
  long real procedure function;  
  ..  
end;
```

```
Rand class Neumann_g_right;  
begin  
  long real procedure function;  
  ..  
end;
```

```
Rand class Dirichlet_left;  
begin  
  long real procedure function;  
  ..  
end;
```

```
Rand class Dirichlet_right;  
begin  
  long real procedure function;  
  ..
```

```
end;
```

```
ref(Rand) NefL, NegL, DL, DR;
```

```
NefL :- new Neumann_f_left;    !I dette eksempel vælges;  
NegL :- new Neumann_g_left;    !Neumann randbetingelser;  
                                     !i venstre side. ;  
DL   :- new Dirichlet_left;    !Dirichlet i højre side. ;  
DR   :- new Dirichlet_right;
```

Det ville ikke være helt så overskueligt for brugeren med disse 6 forskellige klasser, da han udover definitionen af de enkelte funktioner, skal definere op til fire objekter rigtigt. Dog vil det være enkelt at introducere en helt ny type randbetingelse.

Selve SOR iterationen havde vi på baggrund af ovenstående klassehierarki udtænkt på følgende måde.

```
procedure leftboundary:
```

```
  Hvis <objektet Dirichlet_left /= NONE> så  
    <udfør dirichlet randbetingelse> ellers  
    <udfør en Neuman iteration>
```

```
procedure rightboundary:
```

```
  Hvis <objektet Dirichlet_right /= NONE> så  
    <udfør dirichlet randbetingelse> ellers  
    <udfør en Neuman iteration>
```

```
procedure interior
```

```
  <udfør en iteration i de indre værdier>
```

```
procedure calculus
```

```
  for alle <tidsskridt> gør  
    sålænge der skal itereres gør  
      <leftboundary>
```

```

<interior>
<rightboundary>

```

Procedure calculus fungerer som den kontrolstruktur, der udfører den generelle SOR iteration med de valgte randbetingelser.

Der er i dette design det problem, at hver procedure selv udfører sin del af iterationen helt færdigt inden kontrollen overlades til det næste objekt. Dette er imidlertid ikke matematisk forsvarligt idet konvergen af funktionen i et randpunkt i Neumann tilfældet afhænger af funktionsværdien i indre punkter og omvendt (se kapitel 12).

En løsning på dette er at lade alle de involverede procedurer foretage et enkelt iterationsskridt af gangen. Problemet i dette er imidlertid at parameteren b_i kun skal beregnes en gang for hvert tidsskridt (se ligning (14.5)). Det vil derfor være spild af tid at beregne den i hver eneste iterationsskridt.

Beregningen af b_i vil derfor nødvendigvis skulle placeres i procedure calculus udenfor iterationsløkken. Dette ødelægger naturligvis hele generaliteten, og giver et rodet og aldeles uigennemskueligt program.

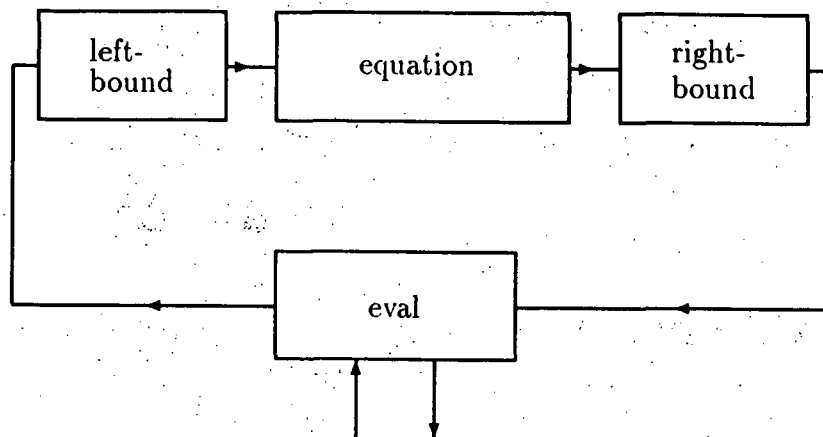
Vi ønsker os derfor en mulighed for at få begge fordele samtidigt, det vil sige at

1. De enkelte procedurer i leftboundary, interior og rightboundary udfører kun *et* iterationsskridt af gangen.
2. Parameteren b_i beregnes kun *en* gang for hvert tidsskridt og denne beregning foregår, der hvor den hører hjemme, nemlig i leftboundary, interior og rightboundary.

Den præcise formuleringen af dette krav ledte os frem mod det endelige design.

14.3.3 Det endelige design

Strukturen i algoritme 14.1 kan implementeres ved hjælp af korutiner. Dette er specielt et argument for at bruge programmeringssproget SIMULA, idet faciliteten her er indbygget i sproget.



Figur 14.2: Korutiner

Det elegante i dette design er, at det reflekterer det matematiske problem, idet iteration i randen og iteration af det indre kan spille sammen, da de forskellige objekter skiftes til at iterere.

Vi har i lighed med [6, side 6.10] i denne model defineret en generel klasse - `class coroutine`, der fungerer som præfix for alle de objekter, der skal virke som korutiner.

De mulige randbetingelser :

- Neumann left
- Neumann right
- Dirichlet left
- Dirichlet right

samt begyndelsesbetingelsen og selve ligningen bliver således defineret som korutiner. Fordelen ved dette er tre ting:

1. Det er uhyre simpelt at lave om på, eller tilføje nye begyndelses og randbetingelser.

2. Konstanten b_i kan beregnes inde i de enkelte korutiner samtidigt med, at den kun udregnes en gang for hvert tidsskridt.
3. Styringen af iterationen samt kontrollen med optælling af tiden kan overlades til en selvstændig "kontrol" korutine - eval, som vist på figur 14.2:

Procedure calculus, som skal sørge for at beregningerne sker, består således kun af to instruktioner:

- `resume initbound` - Sæt den korutine i gang, der beregner begyndelsesbetingelser.
- `resume eval` - Sæt kontrol-korutinen i gang

Når ligningen således er løst til alle tidsskridt, sørger eval for at overlade kontrollen til sit aktiveringspunkt.

14.4 Problemløseren - program `_numcalc`

Opgaven for denne programdel er, at udføre beregningen ved hjælp af SOR-faciliteten, samt at sørge for at resultatet gemmes på en fil, således at brugeren senere kan behandle de beregnede data.

Dette er implementeret i programmet `_numcalc`. Vi har valgt at lade programmet virke interaktivt, således at brugeren på køretidspunktet vælger et filnavn, hvorefter resultatet af beregningerne gemmes under navnet `<filnavn>.num`.

Som en lille, men ikke ubetydelig detalje, har vi lagt vægt på at brugeren kan se, at der sker noget mens computeren står og regner. Det sker ved, at der tegnes et antal prikker på skærmen, mens der regnes løsninger ud. Da løsningerne ofte vil bestå af mange tal, tager det ligeledes et stykke tid at få resultatet gemt på fil, hvilket vi også fortæller.

Dette er nok detaljer, men man skal ikke undervurdere den psykologiske betydning af, at brugeren informeres om, at alt forløber planmæssigt, mens en langvarig proces forløber.

14.5 Hjælpe faciliteter

Her følger en række faciliteter til afprøvning af den numeriske metode, præsentation af talmaterialet, håndtering af fejlsituationer med videre.

14.5.1 Sammenligning med analytisk løsning

Formålet med denne programdel er, at kunne teste om de iterations-skemaer, som vi har implementeret er rigtige. Selve testen skal foregå, ved at sammenligne nogle analytiske løsninger, med de tilsvarende numeriske løsninger.

Vi har valgt at gøre dette, ved at lave et program `_anacalc`, som er præfixet med class `SOLVER`.

Denne programdel virker på omtrent samme måde som selve problemløseren, da det gør systemet mere ensartet.

Først vælger brugeren et filnavn, som er udgangspunkt for de navne som systemet skal bruge til at gemme de forskellige data.

Når dette er gjort udregnes den numeriske løsning til den ligning, som er defineret i class `PROBLEM`. Dette gøres ved at benytte class `SOLVER`, nøjagtigt som i programmet `_numcalc`. Resultatet af beregningerne gemmes på filen `<filnavn>.num`.

Derefter beregnes den analytiske løsning af ligningen i de samme punkter, som den numeriske løsning blev beregnet. Ofte er en analytisk løsning defineret ved en konvergent uendelig sum. I disse tilfælde beregnes et passende antal led i summen, indtil fejlen mellem den beregnede og den rigtige løsning er mindre end en given tolerance.

Resultatet af den analytiske løsning, gemmes på filen `<filnavn>.ana`.

Til sidst beregnes differensen mellem de to løsninger, og dette resultat gemmes i `<filnavn>.dif`.

Det er en forudsætning for meningsfulde resultater, at der er overensstemmelse mellem den ligning som er defineret i class `PROBLEM` og den ligning som løses af det analytiske udtryk.

Denne programdel er primært skrevet med henblik på afprøvning af class `SOLVER`.

14.5.2 Databehandling

De filer, som er blevet genereret af programmerne `_numcalc` og `_anacalc`, skal behandles således at resultaterne kan præsenteres på en passende måde. Vi har valgt at lade brugeren vælge mellem to muligheder. Enten kan han få genereret grafer for løsningerne, eller også kan han få udskrevet de konkrete tal.

Vi ønsker at kunne behandle data fra alle de relevante programdele samtidigt, se figur 14.1 - det vil sige både for den numeriske og den analytiske løsning af ligningen. Vi har valgt at gøre dette på en sådan måde, at brugeren interaktivt vælger hvilke filer, der skal behandles.

I denne forbindelse har vi lagt vægt på, at almindelige brugere af programmet kun har interesse i den numeriske løsning, hvorimod brugere, der vil teste program/programændringer har behov for at kunne behandle alle de beregnede data fra den analytiske løsning. Vi mener derfor, at brugeren kun skal spørges om, hvilke filer der skal behandles i de tilfælde, hvor der eksisterer flere muligheder.

14.5.3 Grafer

Til grafbehandling har vi valgt at bruge et c-program ved navn `xgraph`. Dette er meget simpelt at anvende, da det som inddata skal have nogle talpar svarende til punkter i planen. Vi har foreløbigt valgt kun at udskrive todimensionale grafer, snit langs t-aksen $u(x = k, t)$ eller snit langs x-aksen $u(x, t = k)$, da det er den type, som skal anvendes af brugeren. Viser det sig, at der er brug for grafer i tre dimensioner, er dette en oplagt udvidelsesmulighed.

Selve grafbehandlingen foregår i to tempi. Først genereres graferne ved brug af programmet `_graphmake`, derefter tegnes de ved brug af styrefilen `graphdraw`. Grunden til denne opdeling er, at brugeren har behov for at generere flere forskellige grafer fra samme løsningsmatrix. Skal disse for eksempel præsenteres for udenforstående er det praktisk at alle de nødvendige graffiler er genereret på forhånd således at løsningerne uden videre kan fremstilles.

Generering af grafer foregår interaktivt med brugeren. Under kørslen, skal følgende valg gøres:

- Filnavn.

- Graftype - $u(x = k, t)$ eller $u(x, t = k)$.
- Hvilke grafer - til hvilke sted/tidsskridt.
- Hvilke løsninger - hvis der eksisterer flere filer med navnet <filnavn>, skal der vælges mellem <filnavn>.num, <filnavn>.ana og <filnavn>.dif.

Det er dog vigtigt i selve programmet at teste, om det valgte filnavn eksisterer.

På baggrund af de valgte informationer, kan der nu genereres fil(er) til de ønskede grafer. Disse tegnes så ved at sende den genererede fil til programmet xgraph. Når grafen er tegnet på skærmen, er det muligt at gemme den på fil for derefter at kunne printe den. Dette foregår direkte i xgraph.

14.5.4 Direkte udskrivning af resultaterne

Der er to formål med dette program: Dels test af programmet op mod i forvejen kendte værdier - for eksempel fra en bog. Dels at brugeren, skal kunne vælge, at få alle de beregnede tal ud.

Denne programdel virker også interaktivt med brugeren, der skal dog kun vælges en ting, nemlig hvilken/hvilke filer, der skal behandles. Indholdet af disse udskrives derefter rækkevis.

14.5.5 Brugergrenseflade

Selve betjeningen af systemet skal foregå via et overskueligt antal kommandoer, der er realiseret som styrefiler i det pågældende operativsystem - i dette tilfælde UNIX. Se i brugervejledningen side 74 for en oversigt over disse.

Som omgivelse forestiller vi os X-Windows, som er den korrekte omgivelse for programmet X-graph. Her har vi lavet en opsætning så brugeren får to vinduer: Et til kommandoer og et som teksteditor.

14.6 Udvidelsesmuligheder.

Undervejs i designet har vi berørt en del muligheder for ændringer og udvidelser af programmet. I dette afsnit, vil vi prøve at give en oversigt over de mest oplagte udvidelsesmuligheder.

14.6.1 Selve ligningen :

Her er der to udvidelser, som umiddelbart kan laves for at generalisere programmet til at arbejde med en større klasse af *lineære* paraboliske differentiaalligninger.

Dels kan det såkaldte driftsled $\frac{\partial u}{\partial x}$ rimelig let medtages i iterationskemaet, og dels kan man udvide class PROBLEM således at ligningens koefficienter α og β bliver funktioner af x og t .

Ønsker man at udvide programmet til at håndtere *ikke lineære* ligninger, kan et sådant led ifølge [3, side 260] (for eksempel $(\frac{\partial u}{\partial x})^2$) medtages i iterationskemaerne.

Kan man opstille iterationskemaer for dette, lader de sig implementere i vores struktur.

14.6.2 Randbetingelserne :

Vi har implementeret to forskellige typer randbetingelser, man kunne dog sagtens forestille sig andre, for eksempel randbetingelser af typen :

$$u(0, t) = \int_0^t f(\tau) d\tau + k, \quad u(0, 0) = k$$

Vi har ikke lavet denne udvidelse af programmet, da en ligning med randbetingelser af denne type kan transformeres til en anden ligning, med randbetingelser svarende til de som er beskrevet i programmet.

Det er alligevel en udvidelse af programmet, som er relativt nem at overskue, måske bortset fra designet med de logiske variable, som er defineret i class PROBLEM.

14.6.3 De enkelte moduler :

Da programmet er opdelt i så mange enkelte moduler, kan man let ændre for eksempel den brugergrænseflade vi har lavet, således at den bliver mere avanceret.

Ligeledes vil det være oplagt at udvide grafhåndteringen til også at tegne tredimensionale grafer, eller man kan tilføje et ekstra modul, som behandler de udregnede data på en anden måde.

Kapitel 15

Implementering og dokumentation

15.1 Generelt om programmets implementering

Vi har valgt at implementere programmet i SIMULA, på grund af det objektorienterede design, hvori vi blandt andet udnytter de indbyggede korutiner. Programmet er udviklet og kører på en SUN4 sparc station under operativsystemet UNIX, men vi har prøvet at flytte det til en Data General Eclipse MV20000, hvor det uden ændringer kan oversættes og køre under operativsystemet AOS/VS. Programmet kan desuden med meget få ændringer oversættes af PC-Simula og køre under MS-DOS.

Dog kræver vores udformning af selve grafpræsentationen adgang til OPENWINDOWS på en SUN maskine, X-WINDOWS eller lignende.

Opdelingen i selvstændige programmer, betyder imidlertid at udregning, grafgenerering og graftegning kan foregå på forskellige maskiner og at andre grafpræsentationsprogrammer kan træde i stedet for vores `_graphdraw`.

15.2 Dokumentation

Generelt har vi lagt stor vægt på at programmets kommentering samt at beskrivelsen af dets design (se kapitel 14), er lavet således, at det er

let at vedligeholde, for en udenforstående der kender lidt til problemet og til SIMULA, men som ikke tidligere har haft kendskab til dette program.

Da denne del primært er henvendt til en person, der skal vedligeholde programmet, har vi valgt at ledsage alle klasser, procedurer og hovedprogrammer med et kommentarhoved som vist på figur 15.1. Dette skulle indeholde alle relevante oplysninger så som modulets funktion, modulets kontekst, inddata, uddata og så videre. I selve programdelene tjener dette som dokumentation, mens det i class PROBLEM tjener som vejledning til den bruger, der skal specificere den konkrete ligning se figur 15.2. Derfor er der også forskel på kommentarernes struktur. I class problem beskriver de problemet i detaljer, mens de i de øvrige moduler er mere programmeringsorienterede.

I andre dele af programmet end class PROBLEM rummer et kommentarhoved således information om følgende punkter:

- Programdelens navn og art
- Hvilke inddata, der kræves
- Hvilken omgivelse der er, herunder kendskab til globale variable.
- Hvilke uddata programdelen giver
- Funktionen af koden - hvilken algoritme benyttes.
- Hvilke andre procedurer benyttes
- Hvem kalder denne programdel.

Således er det hensigten at kildeteksten skal kunne supplere forrige kapitels principielle oplysninger med mere programmeringstekniske detaljer.

15.3 Håndtering af fejl.

Dette afsnit omhandler håndtering af fejl. Det er vigtigt, at programmet kan udskrive brugbare fejlmeddelelse, når en fejl detekteres. Til det formål har vi skrevet en lille procedure, som kan udskrive eventuelle fejlmeddelelser, og hvis fejlen er alvorlig, stoppe programmet. Procedure

Navn	: Coroutine class initial_value
Inddata	: ref(Init) initfunc.
Omgivelser:	Matrixobjektet u, som oprettes af saetningerne i class SOLVER. integer spacesteps - global variabel i SOLVER. long real delta_x - global variabel i SOLVER.
Uddata	: Begyndelsesvaerdierne indsaettes i u's element-array i foerste soejele, dvs for t = 0
Funktion	: Paa baggrund af inputparameteren Initfunc, som er det objekt, hvori den konkrete begyndelsesfunktion er defineret (i class PROBLEM), indsaettes begyndelsesvaerdien til alle stedskridt (Fra 0 til spacesteps) i matricen u.elm
Kalder	: Initfunc's h(x), her har brugeren programmeret begyndelsesbetingelsen til den konkrete diffusionsligning.
Kaldes af	: saetningerne i class SOLVER, men da det er en coroutine class, vil objektet detachere med det samme. Selve kroppen i klassen udfoeres, naar procedure calculus udfoerer saetningen resume(initbound)

Figur 15.1: En typisk kommentar i programmet

```
+-----+
| Randbetingelserne i venstre side (x=0) :
|
| Det er kun de i eksemplerne naevnte linier, der skal skrives.
|
| Eksempel 1 (Neumann - randbetingelse) :
|
|   boolean Neumann = TRUE;
|
|   f := 0;
|   g := cos(0.2*t);
|
| Eksempel 2 (Dirichlet - randbetingelse) :
|
|   boolean Neumann = FALSE;
|
|   f := 1.3 * sin(0.7*t);
|
|   (g's vaerdi er ligegyldig i Dirichlet tilfaeldet.)
+-----+
```

Figur 15.2: En typisk kommentar i class problem

"diffu_error" tager som argumenter en fejlmeddelelse og fejlniveauet (**errorlevel**). Afhængigt af værdien af fejlniveauet kan følgende ske

- **errorlevel = 2**
Meddelelsen udskrives, og programmet standses.
- **errorlevel = 1**
Meddelelsen udskrives, og programmet afbrydes hvis brugeren ønsker det.
- **errorlevel \neq 1, 2** eksempelvis 0
Dette er blot en advarsel, hvor meddelelsen udskrives, og programmet derefter fortsætter.

Procedure "diffu_error" er ekstern, og kan benyttes hvor det findes be-
lejligt.

Der er en række bånd på de brugerspecificerede parametre og hvis de brydes bliver de numeriske beregninger meningsløse - se også kapitel 12. Hvis brugeren for eksempel sætter antallet af tidsskridt til -10 , giver det ingen mening at udføre SOR algoritmen.

Den numeriske metode er beregnet til at virke for bestemte typer af inddata, og kan derfor ikke forventes at virke for data uden for sit definitionsområde.

Vi har derfor valgt at indsætte en række betingelsessætninger i begyndelsen af class solver's programkrop, som undersøger om de kritiske parametre er acceptable. Hvis ikke udskrives en relevant fejlmeddelelse, og programmet stoppes.

De parameterkrav som stilles er:

1. $\alpha > 0$.
Ellers bliver systemet ustabil, og man risikerer at SOR iterationen ikke konvergerer, hvilket betyder at programmet går i uendelig løkke.
I tilfældet $\alpha = 0$ kan C_1 og C_2 end ikke udregnes, da α optræder som divisor.
2. $\beta \geq 0$.
Hvis dette ikke opfyldes, bliver systemet ligeledes ustabil, og som før risikerer man ubrydelig løkke.

3. $final_time > 0$.
Der kan ikke regnes tilbage i tiden.
4. $timesteps > 0$.
Der skal udføres mindst et tidsskridt.
5. $spacesteps > 0$.
Der skal udføres mindst et stedskridt.

Der kan undertiden opstå fejl ved filbehandling. Ofte kan det skyldes pladmangel eller forkerte rettigheder. Det er svært at afhjælpe sådanne fejl i et program, men de kan registreres, og man kan udskrive fejlmeddelelser. Vores program gør dette hvis:

1. Resultaterne eller graffilerne ikke kan gemmes på fil. Dette kan for eksempel forekomme, hvis der ikke er plads nok på filsystemet, eller hvis brugeren ikke har rettighed til at gemme på pladelageret. For os er det kun sket, når vi har ønsket det - ved afprøvning af programmet.
2. Der er fejl i en fil som læses. Dette er ligeledes kun sket ved afprøvning.

Kapitel 16

Afprøvning

Dette kapitel omhandler afprøvning af programmet. Formålet med en afprøvning er at sikre at programmet virker efter hensigten - også i forskellige specialtilfælde. En af de ting man hurtigt opdager når man arbejder med datamaskiner er, at programmeringsfejl ikke kan undgås. Kun ved en systematisk test af programmet kan man gøre sig håb om at bringe disse ned på et minimum.

Vi har opdelt teststrategien som følger:

- Ekstern test, hvor selve programmet betragtes som en black box, idet vi kun betragter forholdet mellem inddata og uddata. Den eksterne test er igen opdelt i følgende
 - Funktionstest, som er en afprøvning med forskellige problemer, hvor vi på forhånd kender de ønskede uddata. Når programmet opfylder denne test går vi videre til
 - Grænsetest, som er en systematisk afprøvning, hvor inddata inddeles i ækvivalensklasser, for hvilke programmet forventes at reagere ens. Programmet skal afprøves for alle kombinationer af data fra disse ækvivalensklasser.
- Intern test. Den interne afprøvning er en detaljeret gennemgang af alle forgreninger i programmet, hvor man sikrer sig, at der ikke er logiske fejl eller overflødige sætninger.

Programmet er deterministisk, hvilket vil sige at man til ethvert sæt inddata i teorien kan forudsige uddata, tilfældighed spiller ikke ind. To

programkørsler med samme inddata giver samme uddata. Dette betyder desværre ikke, at resultaterne er lette at gennemskue. Løsningerne til problemer som vores program skal finde, kan ikke umiddelbart verificeres, da de er ret komplekse. Eftersom vi ikke kan opstille analytiske løsninger for alle de forskellige typer problemer, som programmet kan løse, må vi nøjes med at analysere dem, hvor løsningen er kendt. Dette er den første del af den eksterne afprøvning - funktionstesten.

Den systematiske grænsetest og intern afprøvning er gjort hierarkisk ud fra den strategi, at vi først afprøver de moduler, der ikke afhænger af andre moduler. Når disse underliggende dele er afprøvet, kan de antages at fungere korrekt, og man kan bevæge sig et skridt op i hierarkiet, og afprøve de overliggende moduler. Med "moduler" menes her klasser, procedurer og programmer. Som eksempel på grænsetest, har vi valgt at gennemgå class SOLVER. En udskrift af denne findes i den vedlagte kildetekst, lige efter class PROBLEM. Dette modul er systemets hjerte, hvor regnearbejdet sker, og den er derfor det mest oplagte afprøvningseksempel.

16.1 Funktionstest - sammenligning af programresultater med kendte løsninger

Vi har, i funktionstesten af programmet primært interesseret os for, om det regner rigtigt. Til at undersøge dette, har vi lavet nogle mindre test-programmer, som begge kan udregne analytiske løsninger til forholdsvis simple systemer, det vil sige ligningssystemer som lader sig løse analytisk. I det ene tilfælde har vi brugt en analytisk løsning, til et bestemt system angivet i [3, side 33]. I de andre tilfælde har vi brugt de løsninger, som vi har fundet for elektrondiffusionsligningen med Neumann randbetingelser - se side 45.

Dette testprogram er gennemgået i design afsnittet. Ved at sammenligne resultaterne, kan vi undersøge, om programmet opfører sig som det bør for disse tilfælde.

16.1.1 Problem 1

Test programmet "anacall.sim" udregner analytisk og numerisk løsning af følgende ligningssystem:

$$\frac{\partial U}{\partial t}(x, t) - \frac{\partial^2 U}{\partial x^2}(x, t) = 0$$

med randbetingelse:

$$\frac{\partial U}{\partial x}(0, t) = U(0, t)$$

$$\frac{\partial U}{\partial x}(1, t) = -U(1, t)$$

og begyndelsesbetingelse:

$$U(x, 0) = 1$$

Den analytiske løsning til dette system er ifølge [3, side 33]

$$U = 4 \sum_{n=1}^{\infty} \left\{ \frac{\sec \alpha_n}{(3 + 4\alpha_n^2)} e^{-4\alpha_n^2 t} \cos(2\alpha_n(x - \frac{1}{2})) \right\} \quad (0 < x < 1)$$

hvor α_n er de positive rødder i ligningen

$$\alpha \tan \alpha = \frac{1}{2}$$

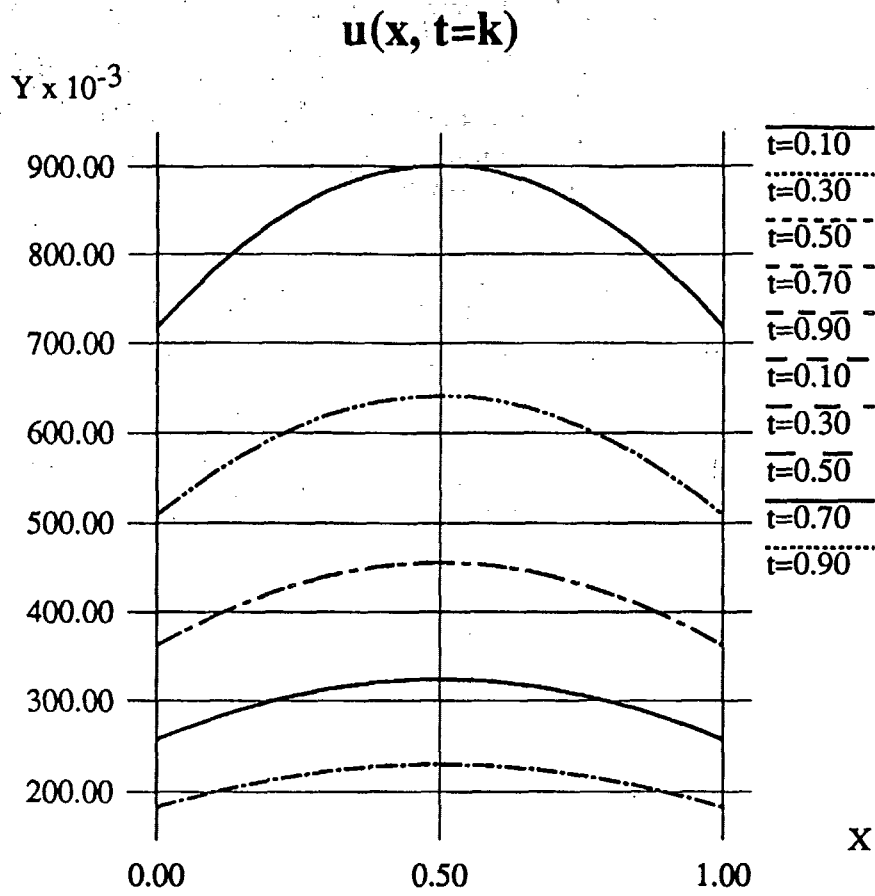
Vi satte

$$\text{spacesteps} = 20$$

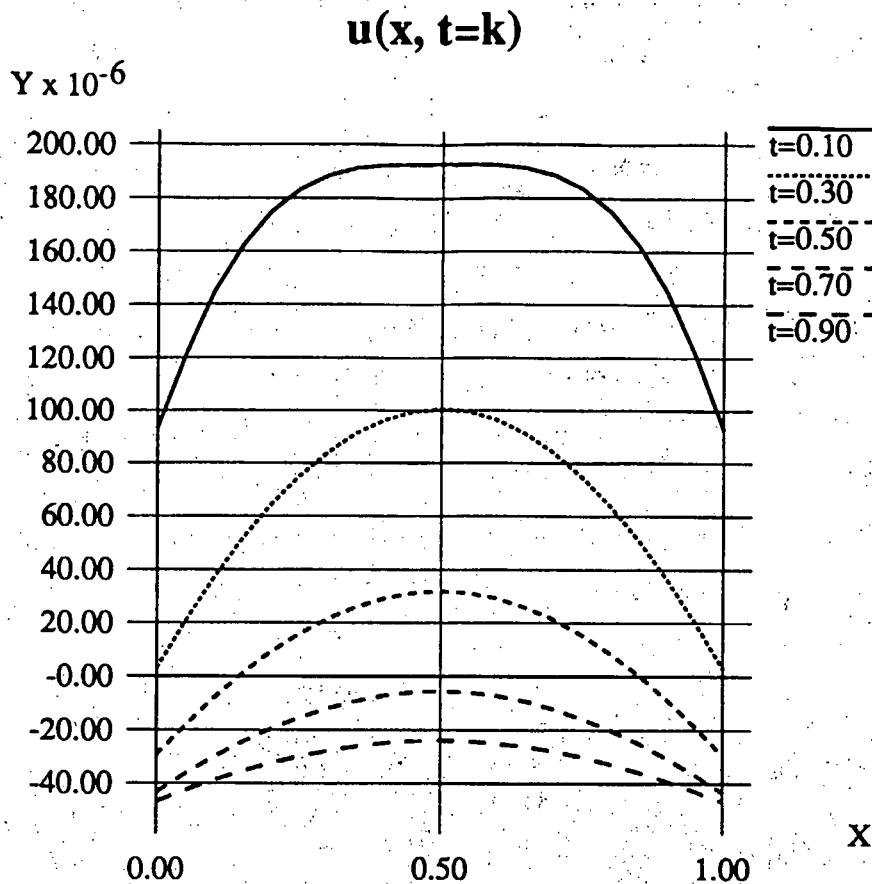
$$\text{timesteps} = 200$$

$$\text{final_time} = 1$$

I figur 16.1 er graferne for både den numeriske og den analytiske løsning vist i samme koordinatsystem. U afbildes som funktion af x , set til 5 forskellige fastholdte tider. Graferne til de forskellige tider, er stiplede på hver deres måde. Øverst i højre hjørne kan ses hvilke markeringer,



Figur 16.1: Den numeriske og analytiske løsning af problem 1



Figur 16.2: Differencen mellem de to løsninger af problem 1

der hører til hvilke grafer. De øverste fem angiver den *numeriske* løsning til tiderne $t = 0.1, 0.3, 0.5, 0.7$ og 0.9 . De nederste fem angiver den tilsvarende *analytiske* løsning. At man kun kan se fem grafer i alt, i stedet for 10 (fem for analytisk løsning og fem for numerisk) skyldes, at den analytiske og numeriske løsning ligger oven i hinanden.

Ser man på differencen mellem analytisk og numerisk løsning, kan man få figur 16.2.

Denne er igen vist for de samme t værdier som før. Graferne markerer differencen mellem den analytiske og numeriske løsning. Differencen starter højt, men falder så stødt, ned til den anden side af nul. Den flader en del ud på vejen. Den maksimale difference findes til tiden $t = 0.1$ og er ikke mere end 2×10^{-4} . Det konkluderes derfor, at programmet i dette tilfælde har regnet rigtigt.

16.1.2 Problem 2

I det andet testprogram har vi brugt de løsninger, som vi har fundet for elektrondiffusionsligningen med Neumann randbetingelser. Programdesignet er gennemgået i kapitel 14, og den analytiske udregning er gennemgået i kapitel 4 Del 1. Ligningssystemet er givet ved:

$$\frac{\partial U}{\partial t}(x, t) - \alpha \frac{\partial^2 U}{\partial x^2}(x, t) + U(x, t) = 0$$

med randbetingelser:

$$\frac{\partial U}{\partial x}(0, t) = \frac{\partial U}{\partial x}(1, t) = A_0 \sin(\omega t)$$

og begyndelsesbetingelse:

$$U(x, 0) = 0$$

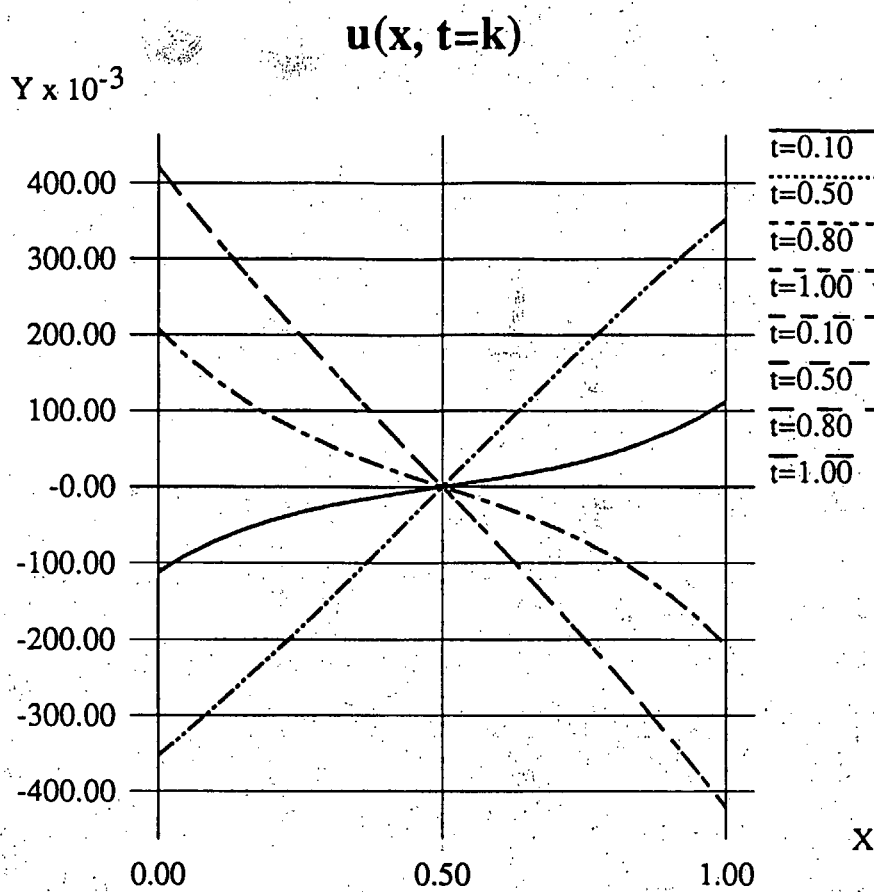
Hvis man sætter

$$\begin{aligned} \alpha &= 1 \\ A_0 &= 1 \\ \omega &= 5 \\ \text{spacsteps} &= 20 \\ \text{timesteps} &= 200 \\ \text{final_time} &= 1 \end{aligned}$$

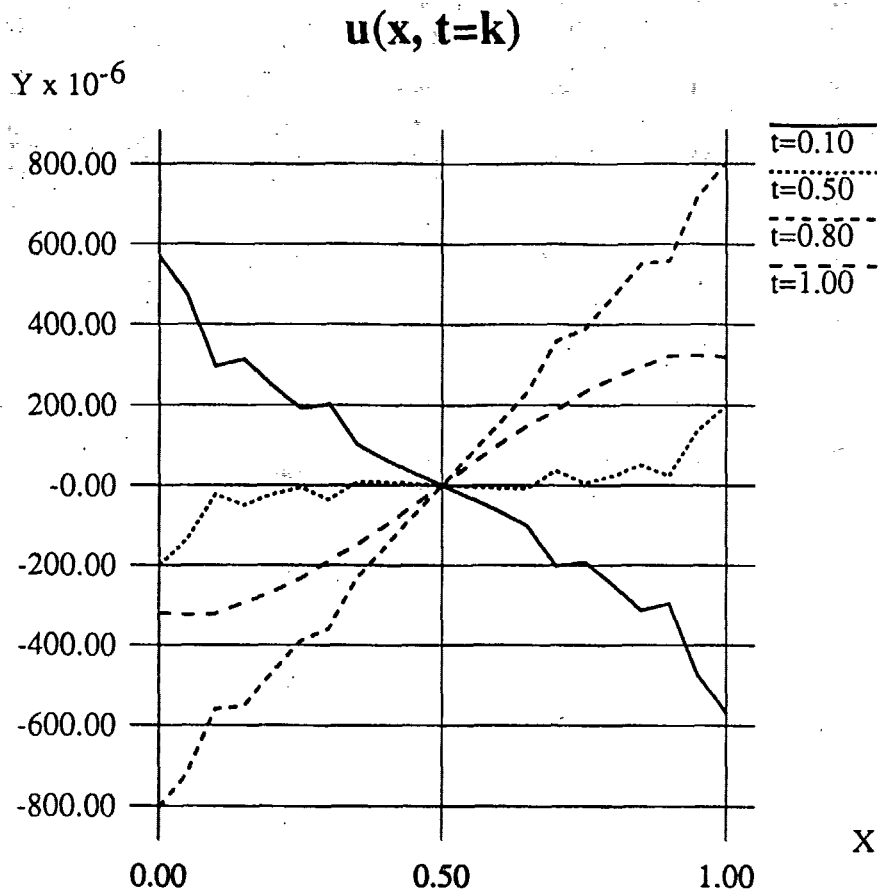
får man følgende grafer.

Figur 16.3 viser den numeriske og analytiske løsning til fastholdte tider i samme koordinatsystem.

Som før er de forskellige grafer angivet med hver sin signatur angivet i øverste højre hjørne. De øverste fire angiver graferne til den numeriske løsning til tiderne $t = 0.1, 0.5, 0.8, 1$. De nederste angiver den analytiske løsning til samme tider. Som det ses, ligger graferne pænt oven i hinanden. Graferne over differencerne ser ud som på figur 16.4.



Figur 16.3: Den numeriske og analytiske løsning af problem 2



Figur 16.4: Differencen mellem de to løsninger af problem 2

Som det ses er den maksimale afvigelse meget lille. Vi konkluderer at graferne ser rimelige ud, og at programmet derfor også i dette tilfælde opfører sig som forventet.

16.1.3 Andre problemer

- Vi har desuden afprøvet programmet på et eksempel gennemregnet i [3, side 33], og fået overensstemmende resultater, dog med enkelte og små afvigelser på 4. decimal. (en maksimal relativ fejl på 0.1 promille).
- Endelig har vi prøvet det trivielle tilfælde, hvor begge randbetingelser og begyndelsesbetingelsen alle er sat til 0. Vi fik, ikke overraskende, nul som resultat, for alle x og alle t .

16.2 Grænsetest af class SOLVER

Formålet med grænsetest er at undersøge, om programmet reagerer fornuftigt på alle typer af inddata. Da der er uendeligt mange forskellige kombinationer af inddata, opdeles de derfor i ækvivalensklasser. Hvis for eksempel en bruger sætter alpha til nul, må det forventes, at programmet finder fejlen, og stopper uanset andre inddata. En stor ækvivalensklasse af inddata er den, hvor programmet forventes at regne rigtigt. På denne måde er funktionstesten blot den del af den eksterne afprøvning, hvor inddata tilhører en ækvivalensklasse, hvor der kan siges noget fornuftigt om resultaterne.

Class SOLVER's inddata specificeres i class PROBLEM. Der er tale om nogle parameterværdier, nogle flag og funktioner - se 7. Inddata skal naturligvis skrives på god SIMULA facon, semikolon med videre må ikke udlades. Ellers kan programmet ikke oversættes.

Vi har testet eksplicit på følgende:

- $\alpha \leq 0$. Fejlen fanges.
- $\alpha > 0$. Programmet kører som det skal.
- $\beta < 0$. Fejlen fanges.

- $\text{beta} \geq 0$. Programmet kører som det skal.
- $\text{spacesteps} = 0$. Fejlen fanges.
- $\text{spacesteps} = 1$. Programmet kører som det skal.
- $\text{spacesteps} > 1$. Programmet kører som det skal.
- Tilsvarende for timesteps .
- $\text{final_time} \leq 0$. Fejlen fanges.
- $\text{final_time} > 0$. Programmet kører som det skal.
- Programmet er prøvet for både Neumann og Dirichlet randbetingelser, og resultaterne ser fornuftige ud.
- Randværdifunktionerne er prøvet sat til:
 1. funktioner af x
 2. konstanter $\neq 0$
 3. funktionen 0

og det ser ud til at virke.

Vi har desuden prøvet følgende funktionstyper:

- Begyndelsesfunktionen er prøvet sat til:
 1. en funktion af t
 2. konstanter $\neq 0$
 3. funktionen 0

16.3 Intern afprøvning

Den interne afprøvnings hovedformål er at finde logiske fejl i programmet. Alle muligheder for forgreninger skal udtømmes ved at alle logiske grænser (**for**, **if** og **while**) skal være besøgt af instruktionspegeren. Dette gøres ved at alle løkker skal (**for** og **while**) tjekkes for 0, 1 og flere gennemløb. Alle **if**-sætninger skal prøves for begge forgreninger. Således skal den interne afprøvning sikre, at alle programlinier er blevet afprøvet. Ofte er der i programmer faciliteter som ikke benyttes under

normale omstændigheder. Disse faciliteter kan derfor ikke dækkes af den eksterne afprøvning, men må afprøves specielt. Endelig kan man med intern afprøvning finde overflødige sætninger, som skal slettes.

Vi har udført de interne afprøvninger ved hjælp af SIMULA-systemets debugger.

class SOLVER giver følgende interne tests (se eventuelt programudskrift):

1. linie 98. Tilfældet hvor filen kan åbnes dækkes af ekstern test. Det andet tilfælde afprøves ved at lade en bruger som ikke har skriverrettigheder til lageret afprøve programmet.
2. linie 106. Den eksterne test sikre, at løkken kører mindst en gang.
3. linie 108. Ligeledes her. Løkken kører mindst en gang.
4. linie 149. Samme her.
5. linie 150. Samme her.
6. linie 208. Samme her.
7. linie 275. Programmet kommer ind i korutinen. **while TRUE do**. Kan ikke gå galt.
8. linie 280. Tilfælde $\text{endpoint}=0$ og $\text{endpoint}>1$ dækkes af den eksterne test. Tilfældet $\text{endpoint}=1$ afprøves specielt.
9. linie 283. Hvis man kommer ind i **for**-løkken linie 280, kommer man også ind i **while** løkken. Se linie 278.
10. linie 285. Som linie 280.
11. linie 291. Denne sætning er testet grundigt med debuggeren. Begge tilfælde ($\text{err} > \text{eval.err}$ og $\text{err} \leq \text{eval.err}$) forekommer i de eksterne afprøvninger, og sætningen virker efter hensigten.
12. linie 363. Programmet kommer ind i korutinen, hvis der regnes på Neumann randbetingelser. **while TRUE do**.
13. Man kommer altid ind i **while** løkken. Se linie 376.

14. linie 383. Her fandt vi en fejl. Før den interne test, var denne linie præcis som linie 291 og linie 477. Ved intern test viste det sig imidlertid, at betingelsen i linien altid er sand medmindre både `err` og `eval.err` er nul. Betingelsessætningen blev derfor ændret til en ubetinget tildelingssætning.
15. linie 457. Programmet kommer ind i korutinen hvis der regnes på Neumann randbetingelser. `while TRUE do`. Kan ikke gå galt.
16. Man kommer altid ind i `while` løkken. Se linie 470.
17. linie 477. Er ikke dækket af ekstern test. Det er langt fra ofte at betingelsen opfyldes, men det sker. Vi afprøvede på følgende ligningssystem:

$$\frac{\partial U}{\partial t}(x, t) - 76.54 \frac{\partial^2 U}{\partial x^2}(x, t) + U(x, t) = 0$$

med randbetingelser:

$$\frac{\partial U}{\partial x}(0, t) = 0$$

$$\frac{\partial U}{\partial x}(1, t) = 65.367 \cos(2000t)$$

og begyndelsesbetingelse:

$$U(x, 0) = 0$$

Det vil sig en rolig begyndelsesbetingelse og venstre rand, sammen med en hurtigt skiftende højre rand. Fejlen bliver derfor naturligt størst på højre rand.

18. linie 535. Programmet kommer ind i korutinen for Dirichlet rand. `while TRUE do`. Kan ikke gå galt.
19. linie 542. Man kommer altid ind i løkken. Se linie 538.
20. linie 601. Programmet kommer ind i korutinen for Dirichlet rand. `while TRUE do`. Kan ikke gå galt.
21. linie 608. Man kommer altid ind i løkken. Se linie 604.

22. linie 669. Man kommer altid ind i løkken. j har begyndelsesværdien nul.
23. linie 672. for løkken kører mindst en gang.
24. linie 675. Ved eksternt test har vi set, at prikkerne virker som de skal. Både for $1 \leq \text{spacesteps} \leq 10$, og $\text{spacesteps} > 10$.
25. linie 683. Man kommer altid ind i løkken. Se linie 681.
26. linie 771-780. Dækket af ekstern test.
27. linie 782. Denne sætning sikrer blot, at `noof_waitpoints` bliver sat til 10, hvis `timesteps` er større end eller lig med 10. Ellers sættes den til `timesteps`. Da `timesteps` ikke kan blive nul, ved `noof_waitpoints` heller ikke blive nul. Denne er brugt som divisor i linien efter.
28. linie 792. Dækket af ekstern test.
29. linie 794. Dækket af ekstern test.

BEMÆRKNING 16.1 G

runden til at vi i linie 771 ikke har skrevet

```
if alpha <= 0 then
    diffu_error("Alpha skal vaere > 0", 2);
```

er, at programmet i dette tilfælde ikke kan finde fejlen $\alpha = 0$. På trods af at α er erklæret som *konstanten* 0. Vi kan ikke forklare dette, og skyder derfor foreløbigt skylden på vores UNIX SIMULA oversætter. Vi har prøvet det ovenstående også på Datalogis Eclipse-maskine, og der kan fejlen $\alpha = 0$ godt findes. Vi har ikke undersøgt det nærmere.

Kapitel 17

Konklusion

17.1 Processen

Vi har i løbet af dette projekt gjort følgende:

- Beskæftiget os med partielle differentiaalligninger.
- Medvirket til at opstille modellen af det fysiske problem.
- Udviklet programmel til løsning af problemet.

Vi har gennem hele forløbet haft mange konfrontationsmøder med Petr Višcor, hvor vi specielt har diskuteret opstillingen af de bedst mulige randbetingelser. Det faglige udbytte heraf har været stort, da vi har fået et indblik i hvor kompliceret modellering af eksisterende fænomener kan være. Derudover har vi høstet nogle værdifulde erfaringer, gennem denne tværfaglige kommunikation.

Disse erfaringer kan opridses som følger:

Det er vigtigt at etablere en fælles synsvinkel på det problem, man vil løse. Dette kan være vanskeligt da fagenes sprogbrug og referenceramme er forskellig. Groft sagt er fysikerens verden kontinuert, datalogens diskret, mens matematikerens ikke behøver at eksistere.

Da vi så at sige har kombineret tre fagområder, har vi på nærmeste hold oplevet hvorledes det samme problem tager sig meget forskelligt ud afhængigt af, hvilke briller man tager på. Dette er illustreret i figur 17.1.

Den fysiske diffusionsligning:

$$-\sigma \nabla \cdot \mathbf{E}(\mathbf{r}, t) + \frac{\mu k T}{|e|} \nabla \cdot \nabla \rho(\mathbf{r}, t) = \frac{\partial \rho(\mathbf{r}, t)}{\partial t}$$

$$\nabla \rho(x=0, t) = \rho(x=L, t) = E_{ext}$$

Den datalogiske / numeriske diffusionsligning:

$$u_{i,j}^{n+1} = \frac{\omega}{2C_1} (u_{i-1,j}^{n+1} + u_{i+1,j}^n + b_i) + (1 - \omega) u_{i,j}^n$$

$$b_i = u_{i-1,j-1} + 2C_2 u_{i,j-1} + u_{i+1,j-1} \quad \text{for } x \in]0, 1[$$

$x = 0$

$$u_{0,j}^{n+1} = \frac{\omega}{C_1 + \Delta x f 0_j} (u_{1,j} - \Delta x g 0_j + b_0) + (1 - \omega) u_{0,j}^n$$

$$b_0 = u_{1,j-1} + (C_2 - \Delta x f 0_{j-1}) u_{0,j-1} - \Delta x g 0_{j-1}$$

$x = 1$

$$u_{N,j}^{n+1} = \frac{\omega}{C_1 - \Delta x f 1_j} (u_{N-1,j} + \Delta x g 1_j + b_N) + (1 - \omega) u_{N,j}^n$$

$$b_N = u_{N-1,j-1} + (C_2 + \Delta x f 1_{j-1}) u_{N,j-1} + \Delta x g 1_{j-1}$$

Den matematiske diffusionsligning:

$$L[u] = \frac{\partial u}{\partial t}(x, t) - \alpha \frac{\partial^2 u}{\partial t^2}(x, t) + \beta u(x, t) = 0$$

$$\frac{\partial u}{\partial x}(0, t) = \frac{\partial u}{\partial x}(L, t) = \gamma \sin(\omega t)$$

Figur 17.1: Det samme problem betraget gennem forskellige fags briller

Processen har hovedsageligt forløbet ved, at vi gennem møder med repræsentanter for alle tre fagområder efterhånden har dannet vores egen synsvinkel og forståelse for problemet.

17.2 Problemet

På baggrund af denne proces har vi skrevet en rapport, der er tænkt som et feedback til Petr Višcor og andre fysikere med tilsvarende interesser og som udgør projektrapportens første del.

Konklusionen på denne første del er,

- at programmet lever op til vores designkrav,
- at vi har tiltro til den matematiske model,
- at vi er usikre på rigtigheden af de randbetingelser, vi har opstillet for den blandede kontakt.

Vi forestiller os, at de uforklarlige resultater, som fås af disse randbetingelser, eventuelt skyldes ustabilitet i iterationsformlerne. Resultaterne i kapitel 12 antyder nemlig, at de funktioner der optræder som koefficienter til funktionen selv, skal have modsat fortegn og det har de *ikke* i de opstillede randbetingelser.

Som nævnt i konklusionen på del 1, finder vi det betænkeligt, at randbetingelserne i Neumann tilfældet ikke har en symmetri mellem venstre og højre side af prøven. Dette er et resultat af at det kun er to af de tre strømme som optræder i udledningen, der er afhængige af det eksterne felt.

At vi alligevel tror på den matematiske model skyldes, at den alene er udledt på baggrund af Maxwells ligninger. Men hvorvidt den dermed repræsenterer den eksperimentelle fysiske opstilling, er svær for os at vurdere.

17.3 Sammenfatning

For at besvare hele projektets problemformulering, må vi sige, at vi har sat os ind i problematikken på en sådan måde, at vi nu ville kunne fortsætte samarbejdet med Petr Višcor og assistere ham i udvikling og vurdering af modellen.

Litteratur

- [1] G. D. Smith, Numerical solution of partial differential equations, First edition, Oxford university press, Oxford 1965, 1969
- [2] G. D. Smith, Numerical solution of partial differential equations, Second edition, Oxford university press, Oxford 1978
- [3] G. D. Smith, Numerical solution of partial differential equations: Finite difference methods, Third edition, Clarendon press, Oxford 1985
- [4] Donald Greenspan, Vincenzo Casulli, Numerical analysis for applied mathematics, science and engineering, Addison-Wesley 1988
- [5] Hans F Weinberger, Partial differential equations - a first course, Xerox Corp 1965
- [6] H. B. Hansen, Kompendium til modul 1, Objektorienteret programmering i SIMULA, Roskilde Universitetscenter, datalogi, 1 udgave, august 1989
- [7] Yngve Sundblad et al, Fortsat programmering i Simula, Teknisk Högskole litteratur i Stockholm, Ab (THS) Fock, 100 44 Stockholm, 2. oplag, 1984
- [8] Ole Groth Jørsboe, Funktionalanalyse, (MAT-noter nr.214), 7. udgave, maj 1989, Danmarks Tekniske Højskole
- [9] Peder Voetmann Christiansen, Dynamik og diagrammer. Introduktion til energy-bond-graph formalismen, tekst nr. 8, 1978, IM-FUFA, Roskilde Universitetscenter

- [10] Mette Olufsen, Ole Møller Nielsen, Jesper Voetmann Christiansen og Karen Birkelund, Elektrondiffusion i krystallinsk silicium – en matematisk model, tekst nr 231, 1992, IMFUFA, Roskilde Universitetscenter
- [11] Mogens Esrom Larsen, Forelæsninger i numerisk analyse, Matnoter 226 NA 1980, notetryk 1980, København
- [12] Petr Višcor, Application of electrical impedance spectroscopy (EIS) in experimental determination of mobile electrical charge carrier density and its electrical mobility, IMFUFA-tekst (til internt brug)
- [13] Anja Boisen m.fl., Hatmodellen–Impedansspektroskopi i ultrarent en-krystallinsk silicium, NAT-BAS projekt, 4. semester, Roskilde Universitetscenter 1989
- [14] William H Press et al., Numerical recipes in Pascal–The art of scientific computing, Cambridge University Press 1986, 1989
- [15] Tage Gutmann Madsen, Matematik 1 MA, Københavns Universitets Matematiske Institut 1984, (Notetryk juli 1988)
- [16] Lars Erik Lundberg, Matematik 2 MA, Notetryk 1984-1985 København
- [17] Lars Erik Lundberg, Matematik F, Notetryk 1990/91, København

Stikordsregister

- 1 norm, 186
- 2 cykliske matricer, 157
- 2 norm, 186

- accelerationsparameter, 149, 155, 162
- admittans, 53, 57
- afrundingsfejl, 170
- alpha, 69
- anacalc, 74
- analytisk løsning, 37, 223

- begyndelsesbetingelse, 19, 20, 35
- Bessel
 - approximationssætning, 127
 - ulighed, 129
- beta, 70
- Boltzmanns konstant, 16
- Brauers sætning, 185
- brugergrænseflade, 194
- bulk-resistiviteten, 9
- bulkzonen, 7

- Cauchy-Schwarz' ulighed, 125
- class
 - coroutine, 205
 - Init, 198
 - Left, 70, 198
 - PROBLEM, 195, 198
 - SOLVER, 199
- clean, 75
- clearproblem, 75
- coroutine, class, 205
- cosinusrække, 44
- Crank Nicholson, 48, 138

- skema, 49

- databehandling, 194
- depletionzoner, 7, 23
- dielektrikum, 9
- differenskvotient operator, 173
- differentialligninger
 - elliptiske, 100, 102
 - hyperbolske, 100
 - klassifikation, 97, 100
 - løsning af, 45, 59
 - parabolske, 100, 101
 - partielle, 95
 - principaldel, 103
- differentialoperator, 105
- diffusionsligning, 37
 - linearitet, 105
- DIFFUSYS, 59
- dimensionsbetragtninger, 32
- dimensionsløse randbetingelser, 33
- dimensionsløse størrelser, 31
- Dini's test, 119
- Dirichlet randbetingelser, 21, 22, 199
 - stabilitet, 175
- dirichletkerne, 119
- diskretionsfejlen, 170
- diskretisering, 47
- divergensteoremet, 28

- editering, 62, 79
- editorvindue, 62, 63
- egenværdier for SOR- og Jacobi-iterationsmatricerne, 160
- egenværdierne for $H(\omega)$, 155

- egenvektor, 155
- eksperimentel måleopstilling, 5
- ekstern test, 219
- elektrisk felt, 11
- elektrokemisk potentiale, 7, 16
- elliptiske differentiallyigninger, 100, 102
- energiniveauer, 5
- entydighed, 109, 111, 114
- erase, 75
- felt
 - elektrisk, 11
 - lokalt, 29
- final time, 61
- fourierkoefficienter, 40, 41, 115
- fourirrækker, 39, 115, 131
- funktions-test, 219, 220
- gaffelfunktioner, 79
- Gauss elimination, 50
- Gauss lov for elektrisk felt, 12
- Gauss-Seidel iteration, 147
 - matrix, 147, 148
 - på diffusionsligningen, 148
- Gerschgorins første sætning, 184
- grænsetest, 219, 227
- graphdraw, 73, 75
- graphmake, 72, 74
- help, 62, 74, 75
- hilbertrum, 115
- hyperbolske differentiallyigninger, 100
- ideel kondensator, 10, 25
- impedans, 53, 55, 57
- Init, class, 198
- integer, 76
- intern spænding, 11
- intern test, 219, 228
- ioniserede donorer, 20
- isolator
 - perfekt, 37
- iteration, 200
- Iterative metoder, 143
- Iterative metoder og konvergens, 144
- Jacobi
 - iteration, 144
 - matrix, 146
 - på diffusionsligningen, 146
 - iterationsmatrix, 145
 - egenværdier, 160
 - spektralradius, 165
- kæderegel, 98
- kapacitet, 10, 25
- kemisk potentiale, 7
- klassifikation, 100
- kommandovindue, 62
- kompatibilitet, 171, 172
- kondensator, 10
- konsistent ordning, 159
- kontinuitet, 110, 111, 114
- kontraktion, 156
- konvergens, 170
 - af fourirrækker, 117
 - af numerisk løsning, 169
 - af SOR, 149, 155
 - punktvis, 117, 120, 124
 - uniform, 39, 42, 122, 124
- konvergens og iterative metoder, 144
- korutiner, 213
- kvantemekanisk tunnelering, 26
- ladninger
 - donorer, 20
 - mobile, 20
- ladningsdensitet, 8, 53
- ladningsfordeling, 7
- ladningstransport, 5
- Lax's ækvivalens sætning, 172
- Lebesque-Riemann, 131
- Lebesques majorantsætning, 133

- ledende kontakt, 23
 ledningsbånd, 5
 ledningsevne, 16
 Left, class, 70, 198
 ligevægt, 5
 linearitet af diffusionsligningen, 105
 list, 75
 lokalt felt, 29
- majorantrække, 42
 maksimumsprincip, 111
 matrixnorm, 185, 187
 Maxwell's ligninger, 15
 metal-halvleder overgang, 5, 23, 25
 mobile ladninger, 20
 mobilitet, 17
- Neumann randbetingelser, 21, 151, 178, 199
 opstilling, 21
 norm
 1, 186
 2, 186
 matrix, 187
 supremum, 186
 vektor, 185
 numcalc, 71, 74
 numerisk løsning, 223
 konvergens, 169
 numerisk metode, 47, 50, 138
 numerisk problemløser, 193
 numerisk-analytisk testværktøj, 194
- ordningsvektor, 158
 ortogonal mængde, 126
 ortonormal mængde, 126
 ortonormalbasis, 115, 129
 ortonormalsystem, 117
- Padé-approximationer, 140
- paraboliske differentiaalligninger, 100, 101
 Parsevals ligning, 131
 partielle differentiaalligninger
 klassifikation, 97
 perfekt isolator, 33, 37
 permutationsmatrix, 159
 perturbationer af begyndelsesbetingelsen, 171
 pladekondensator, 9
 potentiale
 elektrokemisk, 7, 16
 kemisk, 7
 principaldel, 103
 print, 73, 75
 PROBLEM, class, 195, 198
 problem.sim, 63
 procedure, 76
 punktvis konvergens, 120, 124
 Pythagoras sætning, 126
- randbetingelser, 19, 21
 dimensionsløse, 33
 Dirichlet, 21, 22
 Neumann, 21, 34
 realistiske, 34
 RC-led, 10, 23
 realistisk randbetingelse, 34
 reset, 75
 responsfunktion, 56
 Riemann - Lebesgue, 131
- siliciumdioxid, 23
 SIMULA, 191
 SOLVER, class, 199
 SOR, 50, 148
 iteration, 148
 konvergens, 155
 optimering, 157
 på diffusionsligning, 150
 iterationsmatrix, 149
 egenværdier, 161
 konvergens, 149

- Neumann problemet, 154
- programdel, 193
- spænding
 - intern, 11, 55
- spacesteps, 61
- spektralradius, 157, 162, 167
 - af Jacobiiterationsmatricen, 165
- stabilitet, 170, 175, 177
- stabilitetskrav, 183
- start af datamaskinen, 62
- strømdensitet, 15
 - kvantemekanisk, 26
 - termisk, 26
- styrefiler, 194
- Successive Over Relaxation, 50, 148, 191
- superpositionsprincippet, 37, 106, 108
- supremum norm, 186
- symbolliste, 83

- taylorudvikling, 138
- termisk eksitationsstrøm, 27
- termisk emission, 26
- termisk energi, 27
- test
 - ekstern, 219
 - funktions, 219, 220
 - grænse, 219, 227
 - intern, 219, 228
- timesteps, 61
- trunkeringsfejl, 171

- udtømning af elektroner, 5
- uniform konvergens, 39, 42, 122, 124

- valensbånd, 7
- variabeltransformation, 46, 53
- vektornorm, 185
- view, 75

- 1/78 "TANKER OM EN PRAKSIS" - et matematikprojekt. Projektrapport af: Anne Jensen, Lena Lindenskov, Marianne Kesselhahn og Nicolai Lomholt. Vejleder: Anders Madsen.
- 2/78 "OPTIMERING" - Menneskets forøgede beherskelsermuligheder af natur og samfund. Projektrapport af: Tom J. Andersen, Tommy R. Andersen, Gert Krenøe og Peter H. Lassen. Vejleder: Bernhelm Boss.
- 3/78 "OPCAVESAMLING", breddekursus i fysik. Af: Lasse Rasmussen, Aage Bonde Kræmmer og Jens Højgaard Jensen.
- 4/78 "TRE ESSAYS" - om matematikundervisning, matematiklæreruddannelsen og videnskabsrindalismen. Af: Mogens Niss. Nr. 4 er p.t. udgået.
- 5/78 "BIBLIOGRAFISK VEJLEDNING til studiet af DEN MODERNE FYSIKS HISTORIE". Af: Helge Kragh. Nr. 5 er p.t. udgået.
- 6/78 "NOGLE ARTIKLER OG DEBATINDLÆG OM - læreruddannelse og undervisning i fysik, og - de naturvidenskabelige fags situation efter studenteroprøret". Af: Karin Beyer, Jens Højgaard Jensen og Bent C. Jørgensen.
- 7/78 "MATEMATIKKENS FORHOLD TIL SAMFUNDSØKONOMIEN". Af: B.V. Gnedenko. Nr. 7 er udgået.
- 8/78 "DYNAMIK OG DIAGRAMMER". Introduktion til energy-bond-graph formalismen. Af: Peder Voetmann Christiansen.
- 9/78 "OM PRAKSIS' INDFLYDELSE PÅ MATEMATIKKENS UDVIKLING". - Motiver til Kepler's: "Nova Stereometria Doliorum Vinariorum". Projektrapport af: Lasse Rasmussen. Vejleder: Anders Madsen.
-
- 10/79 "TERMODYNAMIK I GYMNASIET". Projektrapport af: Jan Christensen og Jeanne Mortensen. Vejledere: Karin Beyer og Peder Voetmann Christiansen.
- 11/79 "STATISTISKE MATERIALER". Af: Jørgen Larsen.
- 12/79 "LINEÆRE DIFFERENTIALLIGNINGER OG DIFFERENTIALLIGNINGSSYSTEMER". Af: Mogens Brun Heefelt. Nr. 12 er udgået.
- 13/79 "CAVENDISH'S FORSØG I GYMNASIET". Projektrapport af: Gert Kreinøe. Vejleder: Albert Chr. Paulsen.
- 14/79 "BOOKS ABOUT MATHEMATICS: History, Philosophy, Education, Models, System Theory, and Works of". Af: Else Høyrup. Nr. 14 er p.t. udgået.
- 15/79 "STRUKTUREL STABILITET OG KATASTROFER i systemer i og udenfor termodynamisk ligevægt". Specialeopgave af: Leif S. Striegler. Vejleder: Peder Voetmann Christiansen.
- 16/79 "STATISTIK I KREFTFORSKNINGEN". Projektrapport af: Michael Olsen og Jørn Jensen. Vejleder: Jørgen Larsen.
- 17/79 "AT SPØRGE OG AT SVARE i fysikundervisningen". Af: Albert Christian Paulsen.
- 18/79 "MATHEMATICS AND THE REAL WORLD", Proceedings of an International Workshop, Roskilde University Centre, Denmark, 1978. Preprint. Af: Bernhelm Booss og Mogens Niss (eds.)
- 19/79 "GEOMETRI, SKOLE OG VIRKELIGHED". Projektrapport af: Tom J. Andersen, Tommy R. Andersen og Per H.H. Larsen. Vejleder: Mogens Niss.
- 20/79 "STATISTISKE MODELLER TIL BESTEMMELSE AF SIKRE DOSER FOR CARCINOGENE STOFFER". Projektrapport af: Michael Olsen og Jørn Jensen. Vejleder: Jørgen Larsen.
- 21/79 "KONTROL I GYMNASIET-FORMÅL OG KONSEKVENSER". Projektrapport af: Crilles Bacher, Per S. Jensen, Preben Jensen og Torben Nysteen.
- 22/79 "SEMIOTIK OG SYSTEMEGENSKABER (1)". I-port lineært response og støj i fysikken. Af: Peder Voetmann Christiansen.
- 23/79 "ON THE HISTORY OF EARLY WAVE MECHANICS - with special emphasis on the role of reality". Af: Helge Kragh.
-
- 24/80 "MATEMATIKOPFATTELSE HOS 2.G'ERE". a+b 1. En analyse. 2. Interviewmateriale. Projektrapport af: Jan Christensen og Knud Lindhardt Rasmussen. Vejleder: Mogens Niss.
- 25/80 "EKSAMENSOPGAVER", Dybdemodul/fysik 1974-79.
- 26/80 "OM MATEMATISKE MODELLER". En projektrapport og to artikler. Af: Jens Højgaard Jensen m.fl.
- 27/80 "METHODOLOGY AND PHILOSOPHY OF SCIENCE IN PAUL DIRAC'S PHYSICS". Af: Helge Kragh.
- 28/80 "DILETTENTISK RELAXATION - et forslag til en ny model bygget på væskernes viscoelastiske egenskaber". Projektrapport af: Gert Kreinøe. Vejleder: Niels Boye Olsen.
- 29/80 "ODIN - undervisningsmateriale til et kursus i differentiaalligningsmodeller". Projektrapport af: Tommy R. Andersen, Per H.H. Larsen og Peter H. Lassen. Vejleder: Mogens Brun Heefelt.
- 30/80 "FUSIONSENERGIEN - - - ATOMSAMFUNDETS ENDESTATION". Af: Oluf Danielsen. Nr. 30 er udgået.
- 31/80 "VIDENSKABSTEORETISKE PROBLEMER VED UNDERVISNINGSSYSTEMER BASERET PÅ MENDELÆRE". Projektrapport af: Troels Lange og Jørgen Karrebæk. Vejleder: Stig Andur Pedersen. Nr. 31 er p.t. udgået.
- 32/80 "POLYMERE STOFFERS VISCOELASTISKE EGENSKABER - BELYST VED HJÆLP AF MEKANISKE IMPEDANSMÅLINGER MØSSBAUEREFFEKTMÅLINGER". Projektrapport af: Crilles Bacher og Preben Jensen. Vejledere: Niels Boye Olsen og Peder Voetmann Christiansen.
- 33/80 "KONSTITUERING AF FAG INDEN FOR TEKNISK - NATURVIDENSKABELIGE UDDANNELSER. I-II". Af: Arne Jakobsen.
- 34/80 "ENVIRONMENTAL IMPACT OF WIND ENERGY UTILIZATION". ENERGY SERIES NO. I. Af: Bent Sørensen. Nr. 34 er udgået.

- 35/80 "HISTORISKE STUDIER I DEN NYERE ATOMFYSIKS UDVIKLING".
Af: Helge Kragh.
- 36/80 "HVAD ER MENINGEN MED MATEMATIKUNDERVISNINGEN?".
Fire artikler.
Af: Mogens Niss.
- 37/80 "RENEWABLE ENERGY AND ENERGY STORAGE".
ENERGY SERIES NO. 2.
Af: Bent Sørensen.
-
- 38/81 "TIL EN HISTORIETEORI OM NATURERKENDELSE, TEKNOLOGI OG SAMFUND".
Projekt rapport af: Erik Gade, Hans Hedal, Henrik Lau og Finn Physant.
Vejledere: Stig Andur Pedersen, Helge Kragh og Ib Thiersen.
Nr. 38 er p.t. udgået.
- 39/81 "TIL KRITIKKEN AF VÆKSTØKONOMIEN".
Af: Jens Højgaard Jensen.
- 40/81 "TELEKOMMUNIKATION I DANMARK - oplæg til en teknologivurdering".
Projekt rapport af: Arne Jørgensen, Bruno Petersen og Jan Vedde.
Vejleder: Per Nørgaard.
- 41/81 "PLANNING AND POLICY CONSIDERATIONS RELATED TO THE INTRODUCTION OF RENEWABLE ENERGY SOURCES INTO ENERGY SUPPLY SYSTEMS".
ENERGY SERIES NO. 3.
Af: Bent Sørensen.
- 42/81 "VIDENSKAB TEORI SAMFUND - En introduktion til materialistiske videnskabsopfattelser".
Af: Helge Kragh og Stig Andur Pedersen.
- 43/81 1. "COMPARATIVE RISK ASSESSMENT OF TOTAL ENERGY SYSTEMS".
2. "ADVANTAGES AND DISADVANTAGES OF DECENTRALIZATION".
ENERGY SERIES NO. 4.
Af: Bent Sørensen.
- 44/81 "HISTORISKE UNDERSØGELSER AF DE EKSPERIMENTELLE FORUDSÆNINGER FOR RUTHERFORDS ATOMMODEL".
Projekt rapport af: Niels Thor Nielsen.
Vejleder: Bent C. Jørgensen.
-
- 45/82 Er aldrig udkommet.
- 46/82 "EKSEMPLARISK UNDERVISNING OG FYSISK ERKENDELSE-1+1 ILLUSTRERET VED TO EKSEMPLER".
Projekt rapport af: Torben O. Olsen, Lasse Rasmussen og Niels Dreyer Sørensen.
Vejleder: Bent C. Jørgensen.
- 47/82 "BARSEBÄCK OG DET VÆRST OFFICIELT-TÆNKELIGE UHELD".
ENERGY SERIES NO. 5.
Af: Bent Sørensen.
- 48/82 "EN UNDERSØGELSE AF MATEMATIKUNDERVISNINGEN PÅ ADGANCS-KURSUS TIL KØBENHAVNS TEKNIKUM".
Projekt rapport af: Lis Eilertzen, Jørgen Karrebæk, Troels Lange, Preben Nørregaard, Lissi Pedersen, Laust Rishøj, Lill Røn og Isac Showlki.
Vejleder: Mogens Niss.
- 49/82 "ANALYSE AF MULTISPEKTRALE SATELLITBILLEDER".
Projekt rapport af: Preben Nørregaard.
Vejledere: Jørgen Larsen og Rasmus Ole Rasmussen.
- 50/82 "HERSLEV - MULIGHEDER FOR VEDVARENDE ENERGI I EN LANDSBY".
ENERGY SERIES NO. 6.
Rapport af: Bent Christensen, Bent Hove Jensen, Dennis B. Møller, Bjarne Laursen, Bjarne Lillethorup og Jacob Mørch Pedersen.
Vejleder: Bent Sørensen.
- 51/82 "HVAD KAN DER GØRES FOR AT AFHJÆLPE PIGERS BLOKERING OVERFOR MATEMATIK?".
Projekt rapport af: Lis Eilertzen, Lissi Pedersen, Lill Røn og Susanne Stender.
- 52/82 "DESUSPENSION OF SPLITTING ELLIPTIC SYMBOLS".
Af: Bernhelm Booss og Krzysztof Wojciechowski.
- 53/82 "THE CONSTITUTION OF SUBJECTS IN ENGINEERING EDUCATION".
Af: Arne Jacobsen og Stig Andur Pedersen.
- 54/82 "FUTURES RESEARCH" - A Philosophical Analysis of Its Subject-Matter and Methods.
Af: Stig Andur Pedersen og Johannes Witt-Hansen.
- 55/82 "MATEMATISKE MODELLER" - Litteratur på Roskilde Universitetsbibliotek.
En biografi.
Af: Else Høytrup.

Vedr. tekst nr. 55/82 se også tekst nr. 62/83.
- 56/82 "EN - TO - MANGE" -
En undersøgelse af matematisk økologi.
Projekt rapport af: Troels Lange.
Vejleder: Anders Madsen.
-
- 57/83 "ASPECT EKSPERIMENTET"-
Skjulte variable i kvantemekanikken?
Projekt rapport af: Tom Juul Andersen.
Vejleder: Peder Voetmann Christiansen.
Nr. 57 er udgået.
- 58/83 "MATEMATISKE VANDRINGER" - Modelbetragtninger over spredning af dyr mellem småbiotoper i agerlandet.
Projekt rapport af: Per Hammershøj Jensen og Lene Vagn Rasmussen.
Vejleder: Jørgen Larsen.
- 59/83 "THE METHODOLOGY OF ENERGY PLANNING".
ENERGY SERIES NO. 7.
Af: Bent Sørensen.
- 60/83 "MATEMATISK MODEKSPERTISE"- et eksempel.
Projekt rapport af: Erik O. Gade, Jørgen Karrebæk og Preben Nørregaard.
Vejleder: Anders Madsen.
- 61/83 "FYSIKS IDEOLOGISKE FUNKTION, SOM ET EKSEMPEL PÅ EN NATURVIDENSKAB - HISTORISK SET".
Projekt rapport af: Annette Post Nielsen.
Vejledere: Jens Høytrup, Jens Højgaard Jensen og Jørgen Vogelius.
- 62/83 "MATEMATISKE MODELLER" - Litteratur på Roskilde Universitetsbibliotek.
En biografi 2. rev. udgave.
Af: Else Høytrup.
- 63/83 "CREATING ENERGY FUTURES: A SHORT GUIDE TO ENERGY PLANNING".
ENERGY SERIES NO. 8.
Af: David Crossley og Bent Sørensen.
- 64/83 "VON MATEMATIK UND KRIEG".
Af: Bernhelm Booss og Jens Høytrup.
- 65/83 "ANVENDT MATEMATIK - TEORI ELLER PRAKSIS".
Projekt rapport af: Per Hedegård Andersen, Kirsten Habekost, Carsten Holst-Jensen, Annalise von Moos, Else Marie Pedersen og Erling Møller Pedersen.
Vejledere: Bernhelm Booss og Klaus Grünbaum.
- 66/83 "MATEMATISKE MODELLER FOR PERIODISK SELEKTION I ESCHERICHIA COLI".
Projekt rapport af: Hanne Lisbet Andersen, Ole Richard Jensen og Klavs Frisdahl.
Vejledere: Jørgen Larsen og Anders Hede Madsen.
- 67/83 "ELEPSOIDE METODEN - EN NY METODE TIL LINEAR PROGRAMMERING?".
Projekt rapport af: Lone Billmann og Lars Boye.
Vejleder: Mogens Brun Heefelt.
- 68/83 "STOKASTISKE MODELLER I POPULATIONSGENETIK" - til kritikken af teoriladede modeller.
Projekt rapport af: Lise Odgård Gade, Susanna Hansen, Michael Hviid og Frank Mølgård Olsen.
Vejleder: Jørgen Larsen.

- 69/83 "ELEVFORUDSÆTNINGER I FYSIK"
- en test i l.g. med kommentarer.
Af: Albert C. Paulsen.
- 70/83 "INDLÆRINGS - OG FORMIDLINGSPROBLEMER I MATEMATIK PÅ VOKSENUNDERVISNINGSNIVEAU".
Projekt rapport af: Hanne Lisbet Andersen, Torben J. Andreasen, Svend Åge Houmann, Helle Glørup Jensen, Keld Fl. Nielsen, Lene Vagn Rasmussen.
Vejleder: Klaus Grünbaum og Anders Hede Madsen.
- 71/83 "PIGER OG FYSIK"
- et problem og en udfordring for skolen?
Af: Karin Beyer, Sussanne Blegaa, Birthe Olsen, Jette Reich og Mette Vedelsby.
- 72/83 "VERDEN IFØLGE PEIRCE" - to metafysiske essays, om og af C.S. Peirce.
Af: Peder Voetmann Christiansen.
- 73/83 ""EN ENERGIANALYSE AF LANDBRUG"
- økologisk contra traditionelt.
ENERGY SERIES NO. 9
Specialeopgave i fysik af: Bent Hove Jensen.
Vejleder: Bent Sørensen.
-
- 74/84 "MINIATURISERING AF MIKROELEKTRONIK" - om videnskabeliggjort teknologi og nytten af at lære fysik.
Projekt rapport af: Bodil Harder og Linda Szoktak Jensen.
Vejledere: Jens Højgaard Jensen og Bent C. Jørgensen.
- 75/84 "MATEMATIKUNDERVISNINGEN I FREMTIDENS GYMNASIUM"
- Case: Lineær programmering.
Projekt rapport af: Morten Blomhøj, Klavs Frisdahl og Frank Mølgaard Olsen.
Vejledere: Mogens Brun Heefelt og Jens Bjørneboe.
- 76/84 "KERNEKRAFT I DANMARK?" - Et høringsvar indkaldt af miljøministeriet, med kritik af miljøstyrelsens rapporter af 15. marts 1984.
ENERGY SERIES No. 10
Af: Niels Boye Olsen og Bent Sørensen.
- 77/84 "POLITISKE INDEKS - FUP ELLER FAKTA?"
Opinionsundersøgelser belyst ved statistiske modeller.
Projekt rapport af: Svend Åge Houmann, Keld Nielsen og Susanne Stender.
Vejledere: Jørgen Larsen og Jens Bjørneboe.
- 78/84 "JÆVNSTRØMSLEDNINGSEVNE OG GITTERSTRUKTUR I AMORFT GERMANIUM".
Specialrapport af: Hans Hedal, Frank C. Ludvigsen og Finn C. Physant.
Vejleder: Niels Boye Olsen.
- 79/84 "MATEMATIK OG ALMENDANNELSE".
Projekt rapport af: Henrik Coster, Mikael Wennerberg Johansen, Povl Kattler, Birgitte Lydholm og Morten Overgaard Nielsen.
Vejleder: Bernhelm Booss.
- 80/84 "KURSUSMATERIALE TIL MATEMATIK B".
Af: Mogens Brun Heefelt.
- 81/84 "FREKVENSAFHÆNGIG LEDNINGSEVNE I AMORFT GERMANIUM".
Specialrapport af: Jørgen Wind Petersen og Jan Christensen.
Vejleder: Niels Boye Olsen.
- 82/84 "MATEMATIK - OG FYSIKUNDERVISNINGEN I DET AUTO - MATISEREDE SAMFUND".
Rapport fra et seminar afholdt i Hvidovre 25-27 april 1983.
Red.: Jens Højgaard Jensen, Bent C. Jørgensen og Mogens Niss.
- 83/84 "ON THE QUANTIFICATION OF SECURITY":
PEACE RESEARCH SERIES NO. 1
Af: Bent Sørensen
nr. 83 er p.t. udgået
- 84/84 "NOGLE ARTIKLER OM MATEMATIK, FYSIK OG ALMENDANNELSE".
Af: Jens Højgaard Jensen, Mogens Niss m. fl.
- 85/84 "CENTRIFUGALREGULATORER OG MATEMATIK".
Specialrapport af: Per Hedegård Andersen, Carsten Holst-Jensen, Else Marie Pedersen og Erling Møller Pedersen.
Vejleder: Stig Andur Pedersen.
- 86/84 "SECURITY IMPLICATIONS OF ALTERNATIVE DEFENSE OPTIONS FOR WESTERN EUROPE".
PEACE RESEARCH SERIES NO. 2
Af: Bent Sørensen.
- 87/84 "A SIMPLE MODEL OF AC HOPPING CONDUCTIVITY IN DISORDERED SOLIDS".
Af: Jeppe C. Dyre.
- 88/84 "RISE, FALL AND RESURRECTION OF INFINITESIMALS".
Af: Detlef Laugwitz.
- 89/84 "FUERNVARMEOPTIMERING".
Af: Bjarne Lillethorup og Jacob Mørch Pedersen.
- 90/84 "ENERGI I L.G - EN TEORI FOR TILRETTELÆGGELSE".
Af: Albert Chr. Paulsen.
-
- 91/85 "KVANTETEORI FOR GYMNASIET".
1. Lærervejledning
Projekt rapport af: Biger Lundgren, Henning Sten Hansen og John Johansson.
Vejleder: Torsten Meyer.
- 92/85 "KVANTETEORI FOR GYMNASIET".
2. Materiale
Projekt rapport af: Biger Lundgren, Henning Sten Hansen og John Johansson.
Vejleder: Torsten Meyer.
- 93/85 "THE SEMIOTICS OF QUANTUM - NON - LOCALITY".
Af: Peder Voetmann Christiansen.
- 94/85 "TREENIGHEDEN BOURBAKI - generalen, matematikeren og ånden".
Projekt rapport af: Morten Blomhøj, Klavs Frisdahl og Frank M. Olsen.
Vejleder: Mogens Niss.
- 95/85 "AN ALTERNATIV DEFENSE PLAN FOR WESTERN EUROPE".
PEACE RESEARCH SERIES NO. 3
Af: Bent Sørensen.
- 96/85 "ASPEKTER VED KRAFTVARMEFORSYNING".
Af: Bjarne Lillethorup.
Vejleder: Bent Sørensen.
- 97/85 "ON THE PHYSICS OF A.C. HOPPING CONDUCTIVITY".
Af: Jeppe C. Dyre.
- 98/85 "VALGMULIGHEDER I INFORMATIONSSALDEREN".
Af: Bent Sørensen.
- 99/85 "Der er langt fra Q til R".
Projekt rapport af: Niels Jørgensen og Mikael Klintorp.
Vejleder: Stig Andur Pedersen.
- 100/85 "TALSISTEMETS OPBYGNING".
Af: Mogens Niss.
- 101/85 "EXTENDED MOMENTUM THEORY FOR WINDMILLS IN PERTURBATIVE FORM".
Af: Ganesh Sengupta.
- 102/85 OPSTILLING OG ANALYSE AF MATEMATISKE MODELLER, BELYST VED MODELLER OVER KØERS FODEROPTAGELSE OG - OMSÆTNING".
Projekt rapport af: Lis Eilertzen, Kirsten Habekost, Lill Røn og Susanne Stender.
Vejleder: Klaus Grünbaum.

- 103/85 "ØDSLE KOLDKRIGERE OG VIDENSKABENS LYSE IDEER".
 Projekt rapport af: Niels Ole Dam og Kurt Jensen.
 Vejleder: Bent Sørensen.
- 104/85 "ANALOGREGNEMASKINEN OG LORENZLIGNINGER".
 Af: Jens Jäger.
- 105/85 "THE FREQUENCY DEPENDENCE OF THE SPECIFIC HEAT OF THE GLASS REANSITION".
 Af: Tage Christensen.
- "A SIMPLE MODEL OF AC HOPPING CONDUCTIVITY".
 Af: Jeppe C. Dyre.
 Contributions to the Third International Conference on the Structure of Non - Crystalline Materials held in Grenoble July 1985.
- 106/85 "QUANTUM THEORY OF EXTENDED PARTICLES".
 Af: Bent Sørensen.
- 107/85 "EN MYG GØR INGEN EPIDEMI".
 - flodblindhed som eksempel på matematisk modellering af et epidemiologisk problem.
 Projekt rapport af: Per Hedegård Andersen, Lars Boye, Carsten Holst Jensen, Else Marie Pedersen og Erling Møller Pedersen.
 Vejleder: Jesper Larsen.
- 108/85 "APPLICATIONS AND MODELLING IN THE MATHEMATICS CURRICULUM" - state and trends -
 Af: Mogens Niss.
- 109/85 "COX I STUDIETIDEN" - Cox's regressionsmodel anvendt på studenteroplysninger fra RUC.
 Projekt rapport af: Mikael Wønnenberg Johansen, Poul Kattler og Torben J. Andreasen.
 Vejleder: Jørgen Larsen.
- 110/85 "PLANNING FOR SECURITY".
 Af: Bent Sørensen
- 111/85 "JORDEN RUNDT PÅ FLADE KORT".
 Projekt rapport af: Birgit Andresen, Beatriz Quinones og Jimmy Staal.
 Vejleder: Mogens Niss.
- 112/85 "VIDENSKABELIGGØRELSE AF DANSK TEKNOLOGISK INNOVATION FREM TIL 1950 - BELYST VED EKSEMPLER".
 Projekt rapport af: Erik Odgaard Gade, Hans Hedal, Frank C. Ludvigsen, Annette Post Nielsen og Finn Physant.
 Vejleder: Claus Bryld og Bent C. Jørgensen.
- 113/85 "DESUSPENSION OF SPLITTING ELLIPTIC SYMBOLS II".
 Af: Bernhelm Booss og Krzysztof Wojciechowski.
- 114/85 "ANVENDELSE AF GRAFISKE METODER TIL ANALYSE AF KONTINGENSTABELLER".
 Projekt rapport af: Lone Billmann, Ole R. Jensen og Arne-Lise von Moos.
 Vejleder: Jørgen Larsen.
- 115/85 "MATEMATIKKENS UDVIKLING OP TIL RENESSANCEN".
 Af: Mogens Niss.
- 116/85 "A PHENOMENOLOGICAL MODEL FOR THE MEYER-NELDEL RULE".
 Af: Jeppe C. Dyre.
- 117/85 "KRAFT & FJERNVARMEOPTIMERING".
 Af: Jacob Mørch Pedersen.
 Vejleder: Bent Sørensen
- 118/85 "TILFÆLDIGHEDEN OG NØDVENDIGHEDEN IFØLGE PEIRCE OG FYSIKKEN".
 Af: Peder Voetmann Christiansen
- 120/86 "ET ANTAL STATISTISKE STANDARDMODELLER".
 Af: Jørgen Larsen
- 121/86 "SIMULATION I KONTINUERT TID".
 Af: Peder Voetmann Christiansen.
- 122/86 "ON THE MECHANISM OF GLASS IONIC CONDUCTIVITY".
 Af: Jeppe C. Dyre.
- 123/86 "GYMNASIEFYSIKKEN OG DEN STORE VERDEN".
 Fysiklærerforeningen, IMFUFA, RUC.
- 124/86 "OPGAVESAMLING I MATEMATIK".
 Samtlige opgaver stillet i tiden 1974-jan. 1986.
- 125/86 "UVBYG - systemet - en effektiv fotometrisk spektral-klassifikation af B-, A- og F-stjerner".
 Projekt rapport af: Birger Lundgren.
- 126/86 "OM UDVIKLINGEN AF DEN SPECIELLE RELATIVITETSTEORI".
 Projekt rapport af: Lise Odgaard & Linda Szkotak Jensen.
 Vejledere: Karin Beyer & Stig Andur Pedersen.
- 127/86 "GALOIS' BIDRAG TIL UDVIKLINGEN AF DEN ABSTRAKTE ALGEBRA".
 Projekt rapport af: Pernille Sand, Heine Larsen & Lars Frandsen.
 Vejleder: Mogens Niss.
- 128/86 "SMÅKRYB" - om ikke-standard analyse.
 Projekt rapport af: Niels Jørgensen & Mikael Klinton.
 Vejleder: Jeppe Dyre.
- 129/86 "PHYSICS IN SOCIETY"
 Lecture Notes 1983 (1986)
 Af: Bent Sørensen
- 130/86 "Studies in Wind Power"
 Af: Bent Sørensen
- 131/86 "FYSIK OG SAMFUND" - Et integreret fysik/historie-projekt om naturanskuelsens historiske udvikling og dens samfundsmæssige betingethed.
 Projekt rapport af: Jakob Heckscher, Søren Brønd, Andy Wierød.
 Vejledere: Jens Høyrup, Jørgen Vogelius, Jens Højgaard Jensen.
- 132/86 "FYSIK OG DANNEELSE"
 Projekt rapport af: Søren Brønd, Andy Wierød.
 Vejledere: Karin Beyer, Jørgen Vogelius.
- 133/86 "CHERNOBYL ACCIDENT: ASSESSING THE DATA. ENERGY SERIES NO. 15."
 Af: Bent Sørensen.
-
- 134/87 "THE D.C. AND THE A.C. ELECTRICAL TRANSPORT IN As₂Te SYSTEM"
 Authors: M.B.El-Den, N.B.Olsen, Ib Høst Pedersen, Petr Visčor
- 135/87 "INTUITIONISTISK MATEMATIKS METODER OG ERKENDELSESTEORETISKE FORUDSÆTNINGER"
 MATEMATIKSPECIALE: Claus Larsen
 Vejledere: Anton Jensen og Stig Andur Pedersen
- 136/87 "Mystisk og naturlig filosofi: En skitse af kristendens første og andet møde med græsk filosofi"
 Projekt rapport af Frank Colding Ludvigsen
 Vejledere: Historie: Ib Thiersen
 Fysik: Jens Højgaard Jensen
- 137/87 "HOPMODELLER FOR ELEKTRISK LEDNING I UORDNede FASTE STOFFER" - Resume af licentiatforhandling.
 Af: Jeppe Dyre
 Vejledere: Niels Boye Olsen og Peder Voetmann Christiansen.
- 119/86 "DET ER GANSKE VIST - - EUKLIDS FEMTE POSTULAT KUNNE NOK SKABE RØBE I ANDEDAMMEN".
 Af: Iben Maj Christiansen
 Vejleder: Mogens Niss.

- 138/87 "JOSEPHSON EFFECT AND CIRCLE MAP."
Paper presented at The International Workshop on Teaching Nonlinear Phenomena at Universities and Schools, "Chaos in Education". Balaton, Hungary, 26 April-2 May 1987.
By: Peder Voetmann Christiansen
- 139/87 "Machbarkeit nichtbeherrschbarer Technik durch Fortschritte in der Erkennbarkeit der Natur"
Af: Bernhelm Booss-Bavnbek
Martin Bohle-Carbonell
- 140/87 "ON THE TOPOLOGY OF SPACES OF HOLOMORPHIC MAPS"
By: Jens Gravesen
- 141/87 "RADIOMETERS UDVIKLING AF BLODGASAPPARATUR - ET TEKNOLOGIHISTORISK PROJEKT"
Projektrapport af Finn C. Physant
Vejleder: Ib Thiersen
- 142/87 "The Calderón Projektor for Operators With Splitting Elliptic Symbols"
by: Bernhelm Booss-Bavnbek og
Krzysztof P. Wojciechowski
- 143/87 "Kursusmateriale til Matematik på NAT-BAS"
af: Mogens Brun Heefelt
- 144/87 "Context and Non-Locality - A Peircean Approach"
Paper presented at the Symposium on the Foundations of Modern Physics The Copenhagen Interpretation 60 Years after the Como Lecture. Joensuu, Finland, 6 - 8 august 1987.
By: Peder Voetmann Christiansen
- 145/87 "AIMS AND SCOPE OF APPLICATIONS AND MODELLING IN MATHEMATICS CURRICULA"
Manuscript of a plenary lecture delivered at ICMTA '3, Kassel, FRG 8.-11.9.1987
By: Mogens Niss
- 146/87 "BESTEMMELSE AF BULKRESISTIVITETEN I SILICIUM"
- en ny frekvensbaseret målemetode.
Fysikspeciale af Jan Vedde
Vejledere: Niels Boye Olsen & Petr Višćor
- 147/87 "Rapport om BIS på NAT-BAS"
redigeret af: Mogens Brun Heefelt
- 148/87 "Naturvidenskabsundervisning med Samfundsperspektiv"
af: Peter Colding-Jørgensen DLH
Albert Chr. Paulsen
- 149/87 "In-Situ Measurements of the density of amorphous germanium prepared in ultra high vacuum"
by: Petr Višćor
- 150/87 "Structure and the Existence of the first sharp diffraction peak in amorphous germanium prepared in UHV and measured in-situ"
by: Petr Višćor
- 151/87 "DYNAMISK PROGRAMMERING"
Matematikprojekt af:
Birgit Andersen, Keld Nielsen og Jimmy Staal
Vejleder: Mogens Niss
- 152/87 "PSEUDO-DIFFERENTIAL PROJECTIONS AND THE TOPOLOGY OF CERTAIN SPACES OF ELLIPTIC BOUNDARY VALUE PROBLEMS"
by: Bernhelm Booss-Bavnbek
Krzysztof P. Wojciechowski
- 153/88 "HALVLEDERTEKNOLOGIENS UDVIKLING MELLEM MILITÆRE OG CIVILE KRÆFTER"
Et eksempel på humanistisk teknologihistorie. Historiespeciale
Af: Hans Hedal
Vejleder: Ib Thiersen
- 154/88 "MASTER EQUATION APPROACH TO VISCOUS LIQUIDS AND THE GLASS TRANSITION"
By: Jeppe Dyre
- 155/88 "A NOTE ON THE ACTION OF THE POISSON SOLUTION OPERATOR TO THE DIRICHLET PROBLEM FOR A FORMALLY SELFADJOINT DIFFERENTIAL OPERATOR"
by: Michael Pedersen
- 156/88 "THE RANDOM FREE ENERGY BARRIER MODEL FOR AC CONDUCTION IN DISORDERED SOLIDS"
by: Jeppe C. Dyre
- 157/88 "STABILIZATION OF PARTIAL DIFFERENTIAL EQUATIONS BY FINITE DIMENSIONAL BOUNDARY FEEDBACK CONTROL: A pseudo-differential approach."
by: Michael Pedersen
- 158/88 "UNIFIED FORMALISM FOR EXCESS CURRENT NOISE IN RANDOM WALK MODELS"
by: Jeppe Dyre
- 159/88 "STUDIES IN SOLAR ENERGY"
by: Bent Sørensen
- 160/88 "LOOP GROUPS AND INSTANTONS IN DIMENSION TWO"
by: Jens Gravesen
- 161/88 "PSEUDO-DIFFERENTIAL PERTURBATIONS AND STABILIZATION OF DISTRIBUTED PARAMETER SYSTEMS: Dirichlet feedback control problems"
by: Michael Pedersen
- 162/88 "PIGER & FYSIK - OG MEGET MERE"
AF: Karin Beyer, Sussanne Blegaa, Birthe Olsen, Jette Reich, Mette Vedelsby
- 163/88 "EN MATEMATISK MODEL TIL BESTEMMELSE AF PERMEABILITETEN FOR BLOD-NETHINDE-BARRIEREN"
Af: Finn Langberg, Michael Jarden, Lars Frellesen
Vejleder: Jesper Larsen
- 164/88 "Vurdering af matematisk teknologi Technology Assessment Technikfolgenabschätzung"
Af: Bernhelm Booss-Bavnbek, Glen Pate med
Martin Bohle-Carbonell og Jens Højgaard Jensen
- 165/88 "COMPLEX STRUCTURES IN THE NASH-MOSER CATEGORY"
by: Jens Gravesen

- 166/88 "Grundbegreber i Sandsynlighedsregningen"
Af: Jørgen Larsen
- 167a/88 "BASISSTATISTIK 1. Diskrete modeller"
Af: Jørgen Larsen
- 167b/88 "BASISSTATISTIK 2. Kontinuerte modeller"
Af: Jørgen Larsen
- 168/88 "OVERFLADEN AF PLANETEN MARS"
Laboratorie-simulering og MARS-analoger undersøgt ved Mössbauerspektroskopi.
Fysikspeciale af:
Birger Lundgren
Vejleder: Jens Martin Knudsen
Fys.Lab./HCØ
- 169/88 "CHARLES S. PEIRCE: MURSTEN OG MØRTEL TIL EN METAFYSIK."
Fem artikler fra tidsskriftet "The Monist" 1891-93.
Introduktion og oversættelse:
Peder Voetmann Christiansen
- 170/88 "OPGAVESAMLING I MATEMATIK"
Samtlige opgaver stillet i tiden 1974 - juni 1988
- 171/88 "The Dirac Equation with Light-Cone Data"
af: Johnny Tom Ottesen
- 172/88 "FYSIK OG VIRKELIGHED"
Kvantemekanikkens grundlagsproblem i gymnasiet.
Fysikprojekt af:
Erik Lund og Kurt Jensen
Vejledere: Albert Chr. Paulsen og Peder Voetmann Christiansen
-
- 173/89 "NUMERISKE ALGORITMER"
af: Mogens Brun Heefelt
- 174/89 "GRAFISK FREMSTILLING AF FRAKTALER OG KAOS"
af: Peder Voetmann Christiansen
- 175/89 "AN ELEMENTARY ANALYSIS OF THE TIME DEPENDENT SPECTRUM OF THE NON-STATONARY SOLUTION TO THE OPERATOR RICCATI EQUATION"
af: Michael Pedersen
- 176/89 "A MAXIMUM ENTROPY ANSATZ FOR NONLINEAR RESPONSE THEORY"
af: Jeppe Dyre
- 177/89 "HVAD SKAL ADAM STÅ MODEL TIL"
af: Morten Andersen, Ulla Engström, Thomas Gravesen, Nanna Lund, Pia Madsen, Dina Rawat, Peter Torstensen
Vejleder: Mogens Brun Heefelt
- 178/89 "BIOSYNTESSEN AF PENICILLIN - en matematisk model"
af: Ulla Eghave Rasmussen, Hans Oxvang Mortensen, Michael Jarden
vejleder i matematik: Jesper Larsen
biologi: Erling Lauridsen
- 179a/89 "LÆRERVEJLEDNING M.M. til et eksperimentelt forløb om kaos"
af: Andy Wierød, Søren Brønd og Jimmy Staal
Vejledere: Peder Voetmann Christiansen
Karin Beyer
- 179b/89 "ELEVHÆFTE: Noter til et eksperimentelt kursus om kaos"
af: Andy Wierød, Søren Brønd og Jimmy Staal
Vejledere: Peder Voetmann Christiansen
Karin Beyer
- 180/89 "KAOS I FYSISKE SYSTEMER eksemplificeret ved torsions- og dobbeltpendul".
af: Andy Wierød, Søren Brønd og Jimmy Staal
Vejleder: Peder Voetmann Christiansen
- 181/89 "A ZERO-PARAMETER CONSTITUTIVE RELATION FOR PURE SHEAR VISCOELASTICITY"
by: Jeppe Dyre
- 183/89 "MATHEMATICAL PROBLEM SOLVING, MODELLING. APPLICATIONS AND LINKS TO OTHER SUBJECTS - State. trends and issues in mathematics instruction
by: WERNER BLUM, Kassel (FRG) og MOGENS NISS, Roskilde (Denmark)
- 184/89 "En metode til bestemmelse af den frekvensafhængige varmeyfælde af en underafkølet væske ved glasovergangen"
af: Tage Emil Christensen
-
- 185/90 "EN NÆSTEN PERIODISK HISTORIE"
Et matematisk projekt
af: Steen Grode og Thomas Jessen
Vejleder: Jacob Jacobsen
- 186/90 "RITUAL OG RATIONALITET i videnskabens udvikling"
redigeret af Arne Jakobsen og Stig Andur Pedersen
- 187/90 "RSA - et kryptografisk system"
af: Annemette Sofie Olufsen, Lars Frølleken og Ole Møller Nielsen
Vejledere: Michael Pedersen og Finn Munk
- 188/90 "FERMI-CONDENSATION - AN ALMOST IDEAL GLASS BEHAVIOR"
by: Jeppe Dyre
- 189/90 "DATAMATER I MATEMATIKUNDERVISNINGEN I GYMNASIET OG HØJERE LÆREANSTALTER"
af: Finn Langberg

- 190/90 "FIVE REQUIREMENTS FOR AN APPROXIMATE NONLINEAR RESPONSE THEORY"
by: Jeppe Dyre
- 191/90 "MOORE COHOMOLOGY, PRINCIPAL BUNDLES AND ACTIONS OF GROUPS ON C^* -ALGEBRAS"
by: Iain Raeburn and Dana P. Williams
- 192/90 "Age-dependent host mortality in the dynamics of endemic infectious diseases and SIR-models of the epidemiology and natural selection of co-circulating influenza virus with partial cross-immunity"
by: Viggo Andreasen
- 193/90 "Causal and Diagnostic Reasoning"
by: Stig Andur Pedersen
- 194a/90 "DETERMINISTISK KAOS"
Projektrapport af : Frank Olsen
- 194b/90 "DETERMINISTISK KAOS"
Kørselsrapport
Projektrapport af: Frank Olsen
- 195/90 "STADIER PÅ PARADIGMETS VEJ"
Et projekt om den videnskabelige udvikling der førte til dannelse af kvantemekanikken.
Projektrapport for 1. modul på fysikuddannelsen, skrevet af:
Anja Boisen, Thomas Hougård, Anders Gorm Larsen, Nicolai Ryge.
Vejleder: Peder Voetmann Christiansen
- 196/90 "ER KAOS NØDVENDIGT?"
- en projektrapport om kaos' paradigmatisk status i fysikken.
af: Johannes K. Nielsen, Jimmy Staal og Peter Bøggild
Vejleder: Peder Voetmann Christiansen
- 197/90 "Kontrafaktiske konditionaler i HOL"
af: Jesper Voetmann, Hans Oxvang Mortensen og Aleksander Høst-Madsen
Vejleder: Stig Andur Pedersen
- 198/90 "Metal-Isolator-Metal systemer"
Speciale
af: Frank Olsen
- 199/90 "SPREDT FÆGTNING" Artikelsamling
af: Jens Højgaard Jensen
- 200/90 "LINEÆR ALGEBRA OG ANALYSE"
Noter til den naturvidenskabelige basisuddannelse.
af: Mogens Niss
- 201/90 "Undersøgelse af atomare korrelationer i amorfe stoffer ved røntgendiffraktion"
af: Karen Birkelund og Klaus Dahl Jensen
Vejledere: Petr Višcor, Ole Bakander
- 202/90 "TRGN OG KVANTER"
Foredrag og artikler, 1971-90.
af: Peder Voetmann Christiansen
- 203/90 "OPGAVESAMLING I MATEMATIK" 1974-1990
afløser tekst 170/88
- 204/91 "ERKENDELSE OG KVANTEMEKANIK"
et Breddemodul Fysik Projekt
af: Thomas Jessen
Vejleder: Petr Višcor
- 205/91 "PEIRCE'S LOGIC OF VAGUENESS"
by: Claudine Engel-Tiercelin
Department of Philosophy
Université de Paris-1
(Panthéon-Sorbonne)
- 206a+b/91 "GERMANIUMBEAMANALYSE SAMT A - GE TYNDFILMS ELEKTRISKE EGENSKABER"
Eksperimentelt Fysikspeciale
af: Jeanne Linda Mortensen og Annette Post Nielsen
Vejleder: Petr Višcor
- 207/91 "SOME REMARKS ON AC CONDUCTION IN DISORDERED SOLIDS"
by: Jeppe C. Dyre
- 208/91 "LANGEVIN MODELS FOR SHEAR STRESS FLUCTUATIONS IN FLOWS OF VISCO-ELASTIC LIQUIDS"
by: Jeppe C. Dyre
- 209/91 "LORENZ GUIDE" Kompendium til den danske fysiker Ludvig Lorenz, 1829-91.
af: Helge Kragh
- 210/91 "Global Dimension, Tower of Algebras, and Jones Index of Split Seperable Subalgebras with Unitality Condition."
by: Lars Kadison
- 211/91 "I SANDHEDENS TJENESTE"
- historien bag teorien for de komplekse tal.
af: Lise Arleth, Charlotte Gjerrild, Jane Hansen, Linda Kyndlev, Anne Charlotte Nilsson, Kamma Tulinius.
Vejledere: Jesper Larsen og Bernhelm Booss-Bavnbek
- 212/91 "Cyclic Homology of Triangular Matrix Algebras"
by: Lars Kadison
- 213/91 "Disease-induced natural selection in a diploid host"
by: Viggo Andreasen and Freddy B. Christiansen

- 214|91 "Halløj i æteren" - om elektromagnetisme. Oplæg til undervisningsmateriale i gymnasiet.
Af: Nils Kruse, Peter Gastrup, Kristian Hoppe, Jeppe Guldager
Vejledere: Petr Viscor, Hans Hedal
- 215|91 "Physics and Technology of Metal-Insulator-Metal thin film structures used as planar electron emitters
by: A.Delong, M.Drsticka, K.Hladil, V.Kolarik, F.Olsen, P.Pavelka and Petr Viscor.
- 216|91 "Kvantemekanik på PC'eren".
af: Thomas Jessen
-
- 217/92 "Two papers on APPLICATIONS AND MODELLING IN THE MATHEMATICS CURRICULUM"
by: Mogens Niss
- 218/92 "A Three-Square Theorem"
by: Lars Kadison
- 219/92 "RUPNOK - stationær strømning i elastiske rør"
af: Anja Boisen, Karen Birkelund, Mette Olufsen
Vejleder: Jesper Larsen
- 220/92 "Automatisk diagnosticering i digitale kredsløb"
af: Bjørn Christensen, Ole Møller Nielsen
Vejleder: Stig Andur Pedersen
- 221/92 "A BUNDLE VALUED RADON TRANSFORM, WITH APPLICATIONS TO INVARIANT WAVE EQUATIONS"
by: Thomas P. Branson, Gestur Olafsson and Henrik Schlichtkrull
- 222/92 On the Representations of some Infinite Dimensional Groups and Algebras Related to Quantum Physics
by: Johnny T. Ottesen
- 223/92 THE FUNCTIONAL DETERMINANT
by: Thomas P. Branson
- 224/92 UNIVERSAL AC CONDUCTIVITY OF NON-METALLIC SOLIDS AT LOW TEMPERATURES
by: Jeppe C. Dyre
- 225/92 "HATMODELLEN" Impedansspektroskopi i ultrarent en-krySTALLINSK silicium
af: Anja Boisen, Anders Gorm Larsen, Jesper Varmer, Johannes K. Nielsen, Kit R. Hansen, Peter Bøggild og Thomas Hougaard
Vejleder: Petr Viscor
- 226/92 "METHODS AND MODELS FOR ESTIMATING THE GLOBAL CIRCULATION OF SELECTED EMISSIONS FROM ENERGY CONVERSION"
by: Bent Sørensen
- 227/92 "Computersimulering og fysik"
af: Per M.Hansen, Steffen Holm, Peter Maibom, Mads K. Dall Petersen, Pernille Postgaard, Thomas B.Schrøder, Ivar P. Zeck
Vejleder: Peder Voetmann Christiansen
- 228/92 "Teknologi og historie"
Fire artikler af:
Mogens Niss, Jens Høyrup, Ib Thiersen, Hans Hedal
- 229/92 "Masser af information uden betydning"
En diskussion af informationsteorien i Tor Nørretranders' "Mærk Verden" og en skitse til et alternativ baseret på andenordens kybernetik og semiotik.
af: Søren Brier
- 230/92 "Vinklens tredeling - et klassisk problem"
et matematisk projekt af
Karen Birkelund, Bjørn Christensen
Vejleder: Johnny Ottesen
- 231A/92 "Elektrondiffusion i silicium - en matematisk model"
af: Jesper Voetmann, Karen Birkelund, Mette Olufsen, Ole Møller Nielsen
Vejledere: Johnny Ottesen, H.B.Hansen
- 231B/92 "Elektrondiffusion i silicium - en matematisk model" Kildetekster
af: Jesper Voetmann, Karen Birkelund, Mette Olufsen, Ole Møller Nielsen
Vejledere: Johnny Ottesen, H.B.Hansen