

Anwendungen von Optimaler Steuerung

In dieser Ausarbeitung beschäftigen wir uns mit zwei Anwendungen von Optimaler Steuerung: Dem Halbleiterdesign und der Glasproduktion. Unser Vorgehen ist zunächst die Erläuterung der physikalischen Hintergründe und die Modellierung des Problems, gefolgt von der numerischen Lösung. Das Folgende basiert auf M. Hinze, R. Pinnau, M. Ulbrich, S. Ulbrich: Optimization with PDE Constraints. Springer, 2008.

1 Optimale Steuerung von Halbleiterdesign

Halbleiter finden in vielen Bereichen Anwendung, z.B. bei Mikroprozessoren und Solarzellen sind sie wichtige Bauelemente. Dies ist auf ihre besonderen Eigenschaften zurückzuführen. Halbleiter reagieren ganz speziell und steuerbar auf angelegte Spannungen sowie Temperaturveränderungen.

Im Grunde ist ein Halbleiter ein spezifisch modifizierter Kristall. Es werden beim sogenannten *Dotierungsprozess* Fremdatome eingebracht. Diese ersetzen Atome im Kristall und führen so zu den gewünschten Eigenschaften des Halbleiters. Sie ergeben das *Dotierungsprofil*, welches die Art des Halbleiters bestimmt und wir später noch genauer definieren werden.

Optimale Steuerung von Halbleiterdesign kommt in viele Bereiche zum Einsatz, z.B. bei der Miniaturisierung und der Dotierung. Wir werden uns auf Letzteres konzentrieren und formulieren das folgendem Problem:

Erreichen eines gewünschten Stromflusses an einem Kontakt durch geringfügige Änderung des Dotierungsprofils.

1.1 Modellierung

Wir werden im Folgenden ein System von partiellen Differentialgleichungen herleiten, welches das elektrische Verhalten, also den Stromfluss im Halbleiter beschreibt, das *Drift-Diffusions-Modell*.

Beim erwähnten Dotierungsprozess gibt es zwei Arten von Atomen, die implantiert werden. *Donatoratome* haben mehr und *Akzeptoratome* weniger Bindungselektronen als die Atome des Halbleiters (zur Vereinfachung gehen wir von jeweils einem Elektron aus). Somit entsteht beim Einbringen eines Donatoratoms ein freies Elektron im Kristall. Umgekehrt entsteht beim Implantieren eines Akzeptoratoms ein *Loch*, da ein Elektron von einem angrenzenden Atome das Defizit ausgleicht. Dieser Vorgang wiederholt sich nun und ein Ladungstransport findet in Form von Löchern statt, der mit dem von positiv geladenen Teilchen vergleichbar ist.

Wir führen nun einige Funktionen ein, die dies genauer beschreiben. Sei $\Omega \subset \mathbb{R}^3$ als Gebiet des Halbleiters beschränkt und $\omega \subset \Omega$ eine Teilmenge, groß im Vergleich zu einem Elektron.

Definition 1.1. Für die *Elektronendichte* $n(x)$ und die *Durchschnittliche Elektronengeschwindigkeit* $v_n(x)$ auf Ω ist die Anzahl bzw. die durchschnittliche Geschwindigkeit von Elektronen in ω gegeben durch

$$\int_{\omega} n(x) dx \quad \text{bzw.} \quad \int_{\omega} v_n(x) dx$$

Die *Elektronenstromdichte* ist definiert als

$$J_n = qnv_n$$

mit Elementarladung q .

Definition 1.2. Die *Lochdichte* $p(x)$ und die *Durchschnittliche Lochgeschwindigkeit* $v_p(x)$ werden analog definiert. Für die *Lochstromdichte* J_p gilt

$$J_p = -qp v_p$$

Definition 1.3. Die *Stromdichte* J ist

$$J = J_n + J_p$$

Bemerkung. J ist eine vektorielle Größe, deren Richtung mit der der Durchschnittlichen Geschwindigkeit v übereinstimmt. Sie ist als einzige messbar.

Des Weiteren nehmen wir an, dass sich die Stromdichte aus zwei Faktoren zusammensetzt:

- (i) Die *Konvektionsstromdichte* J^{conv} beschreibt die Beschleunigung von geladenen Teilchen in einem Elektrischen Feld und wird deswegen als proportional dazu angenommen:

$$J_n^{\text{conv}} = -q\mu_n n E, \quad J_p^{\text{conv}} = q\mu_p p E$$

- (ii) Die *Diffusionsstromdichte* J^{diff} beschreibt zusätzliche Bewegungen der Teilchen, ausgelöst durch Dichtefluktuaton:

$$J_n^{\text{diff}} = qD_n \nabla n, \quad J_p^{\text{diff}} = qD_p \nabla p$$

mit Konstanten μ_n, μ_p , welche die Beweglichkeit der Elektronen bzw. Löcher beschreiben und D_n, D_p als Diffusionskonstanten.

$$J_n = (J_n^{\text{diff}} + J_n^{\text{conv}}), \quad J_p = -(J_p^{\text{diff}} + J_p^{\text{conv}})$$

Wie bereits erwähnt werden wir nun den wichtigen Begriff des *Dotierungsprofils* definieren.

Definition 1.4. Das *Dotierungsprofil* $C(x)$ ist

$$C(x) := N_D(x) - N_A(x)$$

mit der Dichte der Donatoratome N_D und der Akzeptoratome N_A .

Für den Ladungstransport im Halbleiter benötigen wir noch das *Elektrostatische Potential* V , welches sich als Lösung der folgenden Poissongleichung ergibt:

$$-\epsilon \Delta V = q(n - p + N_A - N_D) = q(n - p - C)$$

ϵ bezeichnet die Dielektrizitätskonstante des Halbleitermaterials. Es besteht ein Zusammenhang mit dem elektrischen Feld E über $E = -\nabla V$.

Annahmen:

- Ladungserhaltung
- Keine Generierungs- oder Rekombinationsprozesse
- $\omega \subset \Omega$ hat glatten Rand $\partial\omega$

Dann folgt mit dem *Satz von Gauß* und dem *Variationslemma* $\forall \omega$ mit Stromstärke I und Außennormalenvektor ν

$$I_{\partial\omega} = \int_{\partial\omega} J \cdot \nu \, ds = 0 \Rightarrow \int_{\omega} \operatorname{div} J \, dx = 0 \Rightarrow \operatorname{div} J = 0 \Rightarrow \operatorname{div} J_n = \operatorname{div} J_p = 0$$

Das sich ergebene Problem (1a)-(1c) ist nicht gut gestellt, folglich benötigen wir Randwerte auf $\partial\Omega$. Zu diesem Zweck teilen wir $\partial\Omega$ disjunkt in einen *ohmschen Kontakt* Γ_D und einen *isolierenden Kontakt* Γ_N auf. Wenn wir nun Ladungsneutralität ($n - p - C = 0$) und thermisches Gleichgewicht ($np = n_i^2$) auf Γ_D voraussetzen, mit intrinsische Ladungsträgerdichte n_i , erhalten wir (1d). Des Weiteren ergibt sich (1e), wenn man keinen Stromfluss und ein verschwindendes elektrisches Feld auf Γ_N annimmt. Zusammen erhalten wir das anfangs erwähnte *Drift-Diffusions-Modell*:

$$\operatorname{div} J_n = 0, \quad J_n = q(D_n \nabla n + \mu_n n \nabla V) \quad (1a)$$

$$\operatorname{div} J_p = 0, \quad J_p = -q(D_p \nabla p - \mu_p p \nabla V) \quad (1b)$$

$$-\epsilon \Delta V = q(n - p - C) \quad (1c)$$

$$n = n_D = \frac{C + \sqrt{C^2 + 4n_i^2}}{2}, \quad p = p_D = \frac{-C + \sqrt{C^2 + 4n_i^2}}{2},$$

$$V = V_D = -V_T \log\left(\frac{n_D}{n_i}\right) + V_{bi} \quad \text{auf } \Gamma_D \quad (1d)$$

$$J_n \cdot \nu = J_p \cdot \nu = \nabla V \cdot \nu = 0 \quad \text{auf } \Gamma_N \quad (1e)$$

mit thermische Spannung V_T und der angelegten Vorspannung V_{bi} .

Wir werden die Gleichungen noch entdimensionalisieren. Dazu führen wir charakteristische Werte L für die Länge, C_m als maximales Dotierungsprofil und $\mu_{n,p}$ für die Mobilitäten ein und definieren $\lambda^2 := \frac{\epsilon V_T}{q C_m L^2}$, $\delta^2 := \frac{n_i}{C_m}$.

$$\begin{aligned} n &\rightarrow C_m \tilde{n}, & p &\rightarrow C_m \tilde{p}, & x &\rightarrow L \tilde{x}, \\ C &\rightarrow C_m \tilde{C}, & V &\rightarrow V_T \tilde{V}, & J_{n,p} &\rightarrow \frac{q V_T C_m \mu_{n,p}}{L} \tilde{J}_{n,p} \end{aligned}$$

Nun können wir das entdimensionalisierte *Drift-Diffusions-Modell* mit Dirichlet-Randbedingungen auf Γ_D aufstellen:

$$\operatorname{div} J_n = 0, \quad J_n = \nabla n + n \nabla V \quad (2a)$$

$$\operatorname{div} J_p = 0, \quad J_p = -(\nabla p - p \nabla V) \quad (2b)$$

$$-\lambda^2 \Delta V = n - p - C \quad (2c)$$

$$n_D = \frac{C + \sqrt{C^2 + 4\delta^4}}{2}, \quad p_D = \frac{-C + \sqrt{C^2 + 4\delta^4}}{2}, \quad V_D = -\log\left(\frac{n_D}{n_i}\right) + V_{bi} \quad \text{auf } \Gamma_D \quad (2d)$$

1.2 Das Optimierungsproblem

Wir referieren auf unser anfangs gestelltes Problem:

Erreichen eines gewünschten Stromflusses an einem Kontakt durch geringfügige Änderung des Dotierungsprofils.

Der Stromfluss am Kontakt Γ ergibt sich mittels

$$I = \int_{\Gamma} \mathbf{J} \cdot \nu \, ds$$

wobei \mathbf{J} und damit I für ein festes C gegeben ist durch (2). Wir stellen das *Zielfunktional* \mathcal{J} auf.

$$\mathcal{J}(n, p, V, C) := \frac{1}{2} |I - I^*|^2 + \frac{\gamma}{2} \int_{\Omega} |\nabla(C - \bar{C})|^2 \, dx \quad (3)$$

Der erste Teil beschreibt die möglichst minimale Abweichung vom gewünschten Stromfluss I^* und der zweite Teil mit einem Referenz-Dotierungsprofil \bar{C} und Gewichtung γ stellt sicher, dass wir nicht die Art des Halbleiters ändern.

Wir schreiben das Problem (2)+(3) in der bekannten Form

$$\min_{(y,u) \in Y \times U} \mathcal{J}(y, u) \quad \text{s.t.} \quad e(y, u) = 0, \quad u \in U_{ad}, \quad y \in Y_{ad} \quad (4)$$

mit $\mathcal{J} : Y \times U \rightarrow \mathbb{R}$, $e : Y \times U \rightarrow Z$ für Banachräume U, Y, Z .

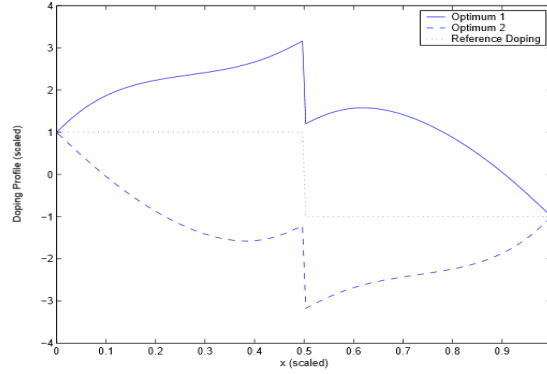


Abbildung 1: Optimierte Dotierungsprofil einer symmetrischen n-p-Diode

Als Zustand ergibt sich $y \stackrel{\text{def}}{=} (n, p, V)$ und als Kontrolle $u \stackrel{\text{def}}{=} C$ direkt aus dem Modell.

Nun müssen wir noch die Funktionenräume passend wählen.

$$U_{ad} \stackrel{\text{def}}{=} \{u \in H^1(\Omega) : u = \bar{C} \text{ auf } \Gamma_D\}$$

folgt aus der Definition der Zielfunktion.

Als Zustandsraum definieren wir $Y_{ad} = Y \stackrel{\text{def}}{=} y_D + Y_0$ mit $y_D \stackrel{\text{def}}{=} (n_D, p_D, V_D)$ hinsichtlich der Randwerte (2d) und

$$Y_0 \stackrel{\text{def}}{=} \underbrace{[\{\phi \in H^1(\Omega) : \phi|_{\partial\Omega} = 0 \text{ auf } \Gamma_D\} \cap L^\infty(\Omega)]^3}_{H_{0,\Gamma_D}^1(\Omega)}$$

Zuletzt definieren wir $Z \stackrel{\text{def}}{=} [H^{-1}(\Omega)]^3$ und man kann zeigen, dass e aus (4) damit wohldefiniert ist.

$$e(y, u) = e(n, p, V, C) \stackrel{\text{def}}{=} \begin{pmatrix} \Delta n + \text{div}(n \nabla V) \\ \Delta p - \text{div}(p \nabla V) \\ -\lambda^2 \Delta V - n + p + C \end{pmatrix}$$

Darüber hinaus gilt folgendes

Theorem 1.5. *Das Optimierungsproblem mit Nebenbedingungen (4) nimmt mindestens eine Lösung $(n^*, p^*, V^*, C^*) = (y^*, u^*) \in Y \times U_{ad}$ an.*

Diese Lösung ist im Allgemeinen jedoch nicht eindeutig, wie wir in Abbildung 1 erkennen können. Der Minimierer hat die Möglichkeit, die Elektronen- und Lochstromdichte zu vertauschen, was zu den beiden präsentierten Optima führt.

Nun stellen wir das zugehörige Optimalitätssystem erster Ordnung auf, mit dem *Adjungierten Ansatz*, da wir im weiteren Verlauf die Ableitung des Zielfunktional benötigen. Sei die *adjungierte Variable* $\xi \stackrel{\text{def}}{=} (\xi^n, \xi^p, \xi^V) \in Z^* = [H^1(\Omega)]^3$ und die *Lagrangefunktion* $L : Y \times U \times Z^* \rightarrow \mathbb{R}$

$$L(y, u, \xi) \stackrel{\text{def}}{=} \mathcal{J}(y, u) + \langle e(y, u), \xi \rangle_{Z, Z^*}$$

Für kleine Stromdichten existiert genau ein Lagrangemultiplikator $\xi \in Z^*$ der das Optimalitätssystem erster Ordnung erfüllt:

$$L'(y^*, u^*, \xi^*) = 0$$

Dies ist äquivalent dazu, dass die optimale Lösung das *Zustandssystem*, das *adjungierte System* und die *Optimalitätsbedingung* erfüllt:

$$\begin{aligned} e(y^*, u^*) &= 0 \\ e_y^*(y^*, u^*)\xi^* + \mathcal{J}_y(y^*, u^*) &= 0 \\ e_u^*(y^*, u^*)\xi^* + \mathcal{J}_u(y^*, u^*) &= 0 \end{aligned}$$

Daraus ergibt sich das folgende System gekoppelter Differentialgleichungen

$$\Delta \xi^n - \nabla V \nabla \xi^n = \xi^V \quad (5a)$$

$$\Delta \xi^p + \nabla V \nabla \xi^p = -\xi^V \quad (5b)$$

$$-\lambda^2 \Delta \xi^V + \operatorname{div}(n \nabla \xi^n) - \operatorname{div}(p \nabla \xi^p) = 0 \quad (5c)$$

$$\xi^{J_n} = \begin{cases} \int_{\Gamma} J_n \cdot \nu \, ds - I_n^*, & \text{auf } \Gamma \\ 0, & \text{auf } \Gamma_D / \Gamma \end{cases} \quad (5d)$$

$$\xi^{J_p} = \begin{cases} \int_{\Gamma} J_p \cdot \nu \, ds - I_p^*, & \text{auf } \Gamma \\ 0, & \text{auf } \Gamma_D / \Gamma \end{cases} \quad (5e)$$

$$\xi^V = 0 \quad \text{auf } \Gamma_D \quad (5f)$$

$$\nabla \xi^n \cdot \nu = \nabla \xi^p \cdot \nu = \nabla \xi^V \cdot \nu = 0 \quad \text{auf } \Gamma_N \quad (5g)$$

sowie die Optimalitätsbedingungen

$$\gamma \Delta(u - \bar{C}) = \xi^V \quad \text{auf } \Omega \quad (6a)$$

$$u = \bar{C} \quad \text{auf } \Gamma_D \quad (6b)$$

$$\nabla u \cdot \nu = \nabla \bar{C} \cdot \nu \quad \text{auf } \Gamma_N \quad (6c)$$

1.3 Numerische Resultate

In diesem Abschnitt wenden wir die Methoden *Steepest Descent* und *Reduced Newton* auf das präsentierte Optimierungsproblem an, genauer gesagt,

auf eine unsymmetrische n-p-Diode. Diese besteht aus zwei Bereichen, einem positiv und einem negativ dotierten. Für eine separate Anpassung des gewünschten Elektronen- und Loch-Strom am Kontakt, betrachten wir eine leicht veränderte Zielfunktion. Dies ist notwendig, da die Lösung sonst, wie erwähnt, nicht eindeutig ist.

$$\mathcal{J}(n, p, V, C) := \frac{1}{2} |I_n - I_n^*|^2 + \frac{1}{2} |I_p - I_p^*|^2 + \frac{\gamma}{2} \int_{\Omega} |\nabla(C - \bar{C})|^2 dx$$

Für V_{bi} klein (\rightarrow thermisches Gleichgewicht) hat (2) eine eindeutige Lösung. Dann ist $\hat{J}(u) \stackrel{\text{def}}{=} J(y(u), u)$ die reduzierte Zielfunktion.

Beginnen wollen wir mit dem folgenden

Algorithmus 1.6 (Steepest Descent).

1. Choose $u_0 \in U_{ad}$
2. For $k = 1, 2, \dots$ compute $u_k = u_{k-1} - \sigma_k \nabla \hat{J}(u_{k-1})$

Wir wählen die *Schrittweite* σ_k via *Linesearch*

$$\sigma_k = \underset{\sigma}{\operatorname{argmin}} \hat{J}(u_{k-1} - \sigma \nabla \hat{J}(u_{k-1}))$$

Um $\hat{J}'(u) = \mathcal{J}_u(y, u) + e_u^* \xi$ zu berechnen, muss man (2) für y und (5) für ξ lösen. Dann ergibt sich der Riesz-Representant $\nabla \hat{J}(u)$ als Lösung einer Poisson-Gleichung mit dem Ansatz $\mathcal{J}'(u)\phi = \langle \nabla \hat{J}(u), \phi \rangle_{H^1}$.

Nun geben wir die verwendeten Diskretisierungen, Parameter sowie Referenzwerte an, gefolgt von der Präsentation der Numerischen Ergebnisse:

- Äquidistantes, eindimensionales Gitter mit 1000 Punkten
- $\lambda^2 = 10^{-3}$, $\delta^2 = 10^{-2}$, $V_{bi} = 10$, $\gamma = 2 \cdot 10^{-2}$
- Abbruchbedingung $\|\nabla \hat{J}(u_k)\|_{H^1} / \|\nabla \hat{J}(u_0)\|_{H^1} < 5 \cdot 10^{-4}$

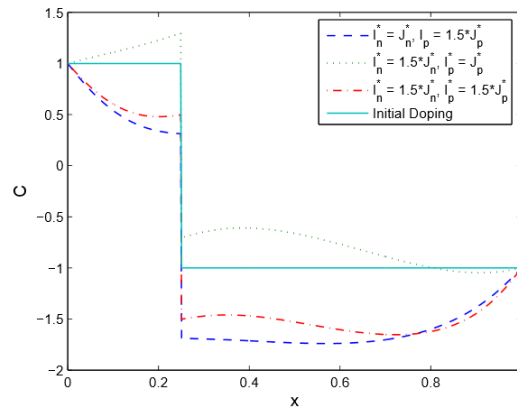


Abbildung 2: Optimierte Dotierungsprofil

Für unterschiedliche Werte für I_n^* und I_p^* ergeben sich die in Abbildung 2 dargestellten, optimalen Dotierungsprofile. Auf der x-Achse ist der Bereich des Halbleiters abgetragen und auf der y-Achse das Dotierungsprofil $C(x) = N_D(x) - N_A(x)$, beides skaliert.

Beim Referenzdotierungsprofil (Initial Doping) gilt $I_n^* = J_n^*$, $I_p^* = J_p^*$ für feste Werte J_n^*, J_p^* . Unser Ziel ist eine Verstärkung des Lochstroms ($I_n^* = J_n^*$, $I_p^* = 1,5 \cdot J_p^*$), des Elektronenstroms ($I_n^* = 1,5 \cdot J_n^*$, $I_p^* = J_p^*$) oder beider Ströme ($I_n^* = 1,5 \cdot J_n^*$, $I_p^* = 1,5 \cdot J_p^*$) um 50%. Wie zu erkennen ist, wurde der Bereich von 0 bis 0,25 negativ dotiert und der Bereich ab 0,25 positiv. Der Wechsel in der Dotierung ist durch den Abfall der Kurven gekennzeichnet. Dieser ist in allen Fällen an der selben Stelle. Wenn ein größerer Lochstrom gewünscht ist, ist der Wert des Dotierungsprofils entsprechend geringer und umgekehrt bei gewünschter Steigerung des Elektronenstroms.

Wenden wir uns dem zweiten Verfahren zu, dem

Algorithmus 1.7 (Reduced Newton).

1. Choose u_0 in a neighborhood of u^*
2. For $k = 0, 1, 2, \dots$
 - (a) Solve $\hat{\mathcal{J}}''(u_k)\delta u_k = -\hat{\mathcal{J}}'(u_k)$
 - (b) Set $u_{k+1} = u_k + \delta u_k$

Den Schritt (2.a) führen wir iterativ mit einem *Conjugated Gradient* Algorithmus durch. Dies hat den Vorteil, dass wir nicht die Hessematrix berechnen müssen, sondern nur ihre Anwendung auf δu , was den numerischen Aufwand stark reduziert.

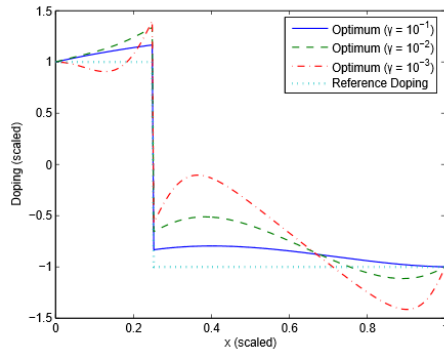
Algorithmus 1.8 (Reduced Newton mit CG-Step).

1. Choose u_0 in a neighborhood of u^*
2. For $k = 0, 1, 2, \dots$
 - (a) Evaluate $\hat{\mathcal{J}}'(u_k)$ and set $\delta u_k^j = 0$
 - (b) For $j = 1, 2, \dots$ do until convergence
 - i. Evaluate $q_k^j = \hat{\mathcal{J}}''(u_k)\delta u_k^j$
 - ii. Compute δu_k^{j+1} by cg-step
 - (c) Set $u_{k+1} = u_k + \delta u_k$

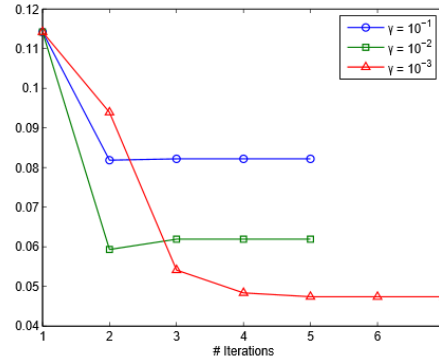
Um $\hat{\mathcal{J}}'(u)$ zu berechnen, muss man erneut (2) für y und (5) für ξ lösen. Wir verwenden identische Werte für die numerische Berechnung, mit dem Unterschied, dass wir diesmal den Einfluss von γ betrachten.

- Äquidistantes, eindimensionales Gitter mit 1000 Punkten

- $\lambda^2 = 10^{-3}$, $\delta^2 = 10^{-2}$, $V_{bi} = 10$



(a) Abhängigkeit des Optimums



(b) Abhängigkeit des Zielfunktional

Ziel ist es erneut den Elektronen- und Lochstrom um je 50% zu steigern. Diesmal jedoch abhängig vom Parameter γ . Dies führt mit kleinerem γ zu größeren Abweichungen von der Referenzdopierung \bar{C} wie in (a) zu erkennen. Des Weiteren ist in (b) die Anzahl der Iterationen gegen die Abweichung vom gewünschten Stromfluss abgebildet. Es ist zu erkennen, dass das Verfahren nach wenigen Schritten konvergiert, wobei für den kleinsten Wert von γ zwei Iterationen mehr benötigt werden.

2 Optimale Steuerung von Glaskühlung

Bei vielen Anwendungen wie z.B. Linsen für Laseroptik oder Spiegel für Weltraumteleskope wird qualitativ hochwertiges Glas benötigt. Dabei werden ganz besondere Anforderungen an das Glas gestellt, welche den Einsatz von optimaler Steuerung notwendig machen.

Wir werden uns nur auf einen bestimmten Bereich der Glasproduktion konzentrieren, auf den Kühlprozess des Glases in einer kontrollierten Umgebung. Dabei ist aus mehreren Gründen darauf zu achten, ein vorgegebenes Kühlprofil im Glas einzuhalten. Thermaler Stress im Material soll vermieden werden und gewünschte chemische Reaktionen sollen homogen stattfinden. Dies ergibt ein Randwert-Steuerungsproblem, welches wir zunächst allgemein formulieren:

Erreichen eines räumlich möglichst konstanten, gewünschten Kühlprofils im Glas.

2.1 Modellierung

Bei der Glaskühlung treten Temperaturen von bis zu $T = 1500K$ (1226.85°C) auf, was eine durch Strahlung bestimmte Wärmeausbreitung zur Folge hat.

Eine Charakterisierung der Wärmeausbreitung als Welle stellt die Gleichung $c = \lambda \cdot \nu$ da, die den Zusammenhang von Ausbreitungsgeschwindigkeit c , Wellenlänge λ und Frequenz ν beschreibt.

Entscheidend für unser Problem ist die *Strahlungsintensität* $I(x, t, \omega, \nu)$ in Abhängigkeit vom Ort x , der Zeit t , der Winkelrichtung ω und der Frequenz ν . Wir betrachten das beschränkte räumliche Gebiet $\Omega \subset \mathbb{R}^3$ und Zeit $t \in [0, 1]$ und treffen vereinfachende Annahmen:

- (i) c groß \rightarrow Quasistatischer Prozess
- (ii) Keine Streuung im Glas
- (iii) Graues Medium, wodurch I unabhängig von ν ist

Nun betrachten wir einen kleinen Teil Δx eines Strahls in Richtung ω . Dann gewinnt man Energie durch Emission und verliert Energie durch Absorption in Höhe von $\kappa B \Delta x - \kappa I \Delta x = \kappa(B - I) \Delta x$ mit Absorptionskoeffizient κ und Plancks Funktion $B(T, \nu) = n_G^2 \frac{2h\nu^3}{c^2} (e^{\frac{h\nu}{kT}} - 1)^{-1}$. B entspricht der abgestrahlten Energie pro Zeit und Ort bei Temperatur T .

Wir erhalten die folgende Gleichung für die Strahlungsintensität:

$$\begin{aligned} I(x + c\omega\Delta t, \omega, t + \Delta t) - I(x, \omega, t) &= \kappa(B - I)\Delta x \\ \xrightarrow{\Delta t \rightarrow 0, \Delta x = c\Delta t} & \frac{1}{c} \partial_t I + \omega \nabla I = \kappa(B - I) \\ \xrightarrow{\text{Annahme(ii)}} & \omega \nabla I = \kappa(B - I) \end{aligned}$$

Nun skalieren wir mit der optischen Dichte $\epsilon = \frac{1}{\kappa_{ref} \chi_{ref}}$ des Materials und erhalten

$$\epsilon \omega \nabla I = \kappa(B - I) \iff \left(1 + \frac{\epsilon}{\kappa} \omega \cdot \nabla\right) I = B$$

Der numerische Aufwand um diese Gleichung zu lösen wäre allerdings viel zu hoch, da sämtliche Winkelrichtungen ω betrachtet werden müssten. Aus diesem Grund wenden wir eine Asymptotische Analyse an.

Wir verwenden die Neumann-Reihe und invertieren so den Transportoperator $\left(1 + \frac{\epsilon}{\kappa} \omega \cdot \nabla\right)$.

$$\begin{aligned} I &= \left(1 + \frac{\epsilon}{\kappa} \omega \cdot \nabla\right)^{-1} B \\ &= \left(1 - \frac{\epsilon}{\kappa} \omega \cdot \nabla + \frac{\epsilon^2}{\kappa^2} (\omega \cdot \nabla)^2 - \frac{\epsilon^3}{\kappa^3} (\omega \cdot \nabla)^3 + \dots\right) B \end{aligned}$$

Sei $\rho := \int_{S^2} I \, d\omega$ die durchschnittliche Strahlungsintensität. Dann liefert Integration über S^2 nach ω und erneute Anwendung der Neumann-Reihe die sogenannte SP_N -Approximation zur Ordnung $O(\epsilon^{2N})$:

$$4\pi B = \left(1 - \frac{\epsilon^2}{3\kappa^2} \nabla^2 - \frac{4\epsilon^4}{45\kappa^4} \nabla^4 - \frac{44\epsilon^6}{945\kappa^6} \nabla^6\right) \rho + O(\epsilon^8)$$

Wir verwenden die SP_1 -Approximation $\kappa\rho - \frac{\epsilon^2}{3\kappa}\Delta\rho = 4\pi\kappa B$. Da die Strahlungsintensität mittels B von der Temperatur abhängt, müssen wir dies noch mit der Wärmeleitungsgleichung koppeln. Es ergibt sich das System (7) mit Anfangs- und Randwerten:

$$\partial_t T = k\Delta T + \frac{1}{3\kappa}\Delta\rho \quad (7a)$$

$$0 = \kappa\rho - \frac{\epsilon^2}{3\kappa}\Delta\rho - 4\pi\kappa a T^4 \quad (7b)$$

$$T(x, 0) = T_0(x) \quad (7c)$$

$$n \cdot \nabla T = \frac{h}{\epsilon k}(u - T), \quad n \cdot \nabla \rho = \frac{3\kappa}{2\epsilon}(4\pi a u^4 - \rho) \quad (7d)$$

Bemerkung. Die Gleichungen (7d) ergeben sich aus *Newtons Cooling Law* und dem Strahlungsgewinn über den halbdurchlässigen Rand.

Der Parameter u beschreibt die Umgebungstemperatur und wird im Folgenden als *Kontrolle* dienen, h den Wärmeleitkoeffizient und k ist die Kreiswellenzahl.

2.2 Das Optimierungsproblem

Wir erinnern an unser anfangs gestelltes Problem:

Erreichen eines räumlich möglichst konstanten, gewünschten Kühlprofils im Glas.

Wir formulieren das folgende Zielfunktional

$$\mathcal{J}(T, u) = \frac{1}{2} \|T - T_d\|_{L^2(0,1;L^2(\Omega))}^2 + \frac{\delta}{2} \|u - u_d\|_{H^1(0,1;\mathbb{R})}^2 \quad (8)$$

Dabei beschreibt $T_d(t, x)$ ein gewünschtes Temperaturprofil, welches für die erwähnten chemischen Reaktionen benötigt wird und $u_d(t)$ eine bekannte Kühlkurve. Durch δ lassen sich die Kosten anpassen. Es ergibt sich aus (7) + (8) das Randwert-Steuerungsproblem für den Zustand $y \stackrel{\text{def}}{=} (T, \rho)$ und Kontrolle u .

$$\min_{(y,u) \in Y_\infty \times U} \mathcal{J}(y, u) \quad s.t. \quad e(y, u) = 0 \quad (9)$$

Jetzt wählen wir die Funktionenräume und definieren den Operator e passend zu (7).

$$\begin{aligned} \mathcal{Q} &\stackrel{\text{def}}{=} (0, 1) \times \Omega, \quad \Sigma \stackrel{\text{def}}{=} (0, 1) \times \partial\Omega, \quad V \stackrel{\text{def}}{=} L^2(0, 1; H^1(\Omega)), \\ W &\stackrel{\text{def}}{=} \{\phi \in V : \phi_t \in V^*\}, \quad Y \stackrel{\text{def}}{=} W \times V, \quad Z \stackrel{\text{def}}{=} V \times V \times L^2(\Omega) \end{aligned}$$

Als Raum für die Kontrolle u wählen wir $U \stackrel{\text{def}}{=} H^1(0, 1; \mathbb{R})$ und für den Zustand y den Raum $Y_\infty \stackrel{\text{def}}{=} Y \cap [L^\infty(\mathcal{Q})]^2$.

Des Weiteren sei $e \stackrel{\text{def}}{=} (e_1, e_2, e_3) : Y_\infty \times U \rightarrow Z^*$ als schwache Formulierung der Gleichungen (7) für eine Testfunktion $\phi \in V$ gegeben durch

$$\begin{aligned} \langle e_1, \phi \rangle_{V^*, V} &\stackrel{\text{def}}{=} \langle \partial_t T, \phi \rangle_{V^*, V} + k(\nabla T, \nabla \phi) + \frac{1}{3\kappa}(\nabla \rho, \nabla \phi)_{L^2(\mathcal{Q})} \\ &\quad + k\alpha(T - u, \phi)_{L^2(\Sigma)} + \frac{1}{3\kappa}\gamma(\rho - 4\pi a u^4, \phi)_{L^2(\Sigma)} \end{aligned} \quad (10a)$$

$$\begin{aligned} \langle e_2, \phi \rangle_{V^*, V} &\stackrel{\text{def}}{=} \frac{\epsilon^2}{3\kappa}(\nabla \rho, \nabla \phi)_{L^2(\mathcal{Q})} + \kappa(\rho - 4\pi a T^4, \phi)_{L^2(\mathcal{Q})} \\ &\quad + \frac{\epsilon^2}{3\kappa}\gamma(\rho - 4\pi a u^4, \phi)_{L^2(\Sigma)} \end{aligned} \quad (10b)$$

$$e_3 \stackrel{\text{def}}{=} T(0) - T_0 \quad (10c)$$

$$\alpha = \frac{h}{2\epsilon}, \quad \gamma = \frac{3\kappa}{2\epsilon}.$$

Theorem 2.1. *Für Ω ausreichend regulär und gegebenes $u \in U$ und $T_0 \in L^\infty(\Omega)$ besitzt das SP_1 -System $e(y, u) = 0$ definiert durch (10) eine eindeutige Lösung $(T, \rho) \in Y_\infty$.*

Wenn wir das Optimierungsproblem (9) betrachten, folgt die Existenz eines Minimierers aus

Theorem 2.2. *Es existiert ein Minimierer $(y^*, u^*) \in Y_\infty \times U$ für (9).*

Folglich macht es Sinn, das reduzierte Kostenfunktional $\hat{\mathcal{J}}(u) \stackrel{\text{def}}{=} \mathcal{J}(y(u), u)$ zu betrachten. Unser Ziel ist es, das Newton Verfahren anzuwenden und aus diesem Grund benötigen wir die Ableitung von $\hat{\mathcal{J}}$. Sei also $\xi = (\xi_T, \xi_\rho) \in Z$ die adjungierte Variable. Es gilt

$$\xi = -e^*(y(u), u)J_y(y(u), u), \quad \hat{\mathcal{J}}'(u) = J_u(y(u), u) + e_u^*(y(u), u)\xi$$

und es ergibt sich das adjungierte System

$$-\partial_t \xi_T = k\Delta \xi_T + 16\pi a \kappa T^3 \xi_\rho - (T - T_d), \quad (11a)$$

$$-\frac{\epsilon^2}{3\kappa}\Delta \xi_\rho + \kappa \xi_\rho = \frac{1}{3\kappa}\Delta \xi_T, \quad \text{in } \mathcal{Q} \quad (11b)$$

$$k(n \cdot \nabla \xi_T + \alpha \xi_T) = 0, \quad (10c)$$

$$n \cdot \nabla \xi_T + \gamma \xi_T + \epsilon^2(n \cdot \nabla \xi_\rho + \gamma \xi_\rho) = 0, \quad \text{in } \Sigma \quad (11d)$$

$$\xi_T(1) = 0 \quad \text{in } \Omega \quad (11e)$$

Der Vollständigkeit halber geben wir noch die Lagrangefunktion $L : Y_\infty \times U \times Z \mapsto \mathbb{R}$ an

$$L(y, u, \xi) \stackrel{\text{def}}{=} \mathcal{J}(y, u) + \langle e(y, u), \xi \rangle_{Z^*, Z}$$

und formulieren das folgende

Theorem 2.3. Sei (y^*, u^*) eine Optimale Lösung von (9), dann existiert genau ein $\xi \in Z^*$ mit $L'(y^*, u^*, \xi^*) = 0$.

2.3 Numerische Resultate

Wir verwenden erneut den

Algorithmus 2.4 (Reduced Newton).

1. Choose u_0 in a neighborhood of u^*
2. For $k = 0, 1, 2, \dots$
 - (a) Solve $\hat{J}''(u_k)\delta u_k = -\hat{J}'(u_k)$
 - (b) Set $u_{k+1} = u_k + \delta u_k$

Wie zuvor lösen wir den Schritt (2.a) mit dem *Conjugated Gradient* Algorithmus.

In diesem Fall sind zwei Diskretisierungen erforderlich. Räumlich verwenden wir ein nicht-einheitliches Gitter mit 109 Punkten und einer größeren Dichte am Rand. Bei der Diskretisierung der Zeit verwenden wir ein uniformes Gitter mit 180 Punkten. Den Zustandssystem für (T, ρ) und das adjungierte Systeme lösen wir mit dem *Impliziten Euler Verfahren*.

Unser Ziel ist es, ein Temperaturprofil T_d konstant im Glas zu erreichen. Dabei ermöglichen Intervalle konstanter Temperatur langsame Reaktionen und Peaks deuten auf Reaktionen mit einer großen Aktivierungsenergie hin.

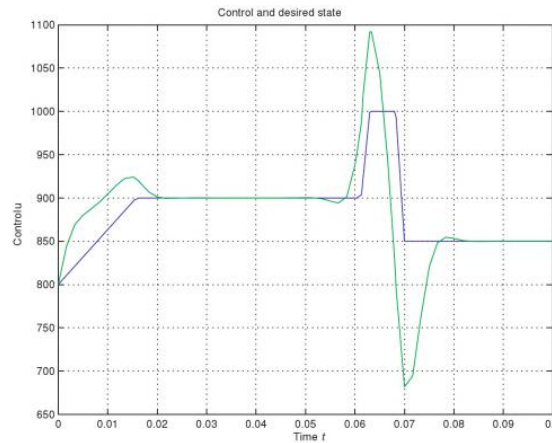


Abbildung 3: Optimiertes (hell) und unoptimiertes (dunkel) Kühlprofil

In Abbildung 3 erkennt man das gewünschte Temperaturprofil im Glas als dunkle Kurve in der Zeit. Das selbe Profil wird als *Educated Guess* für die Kontrolle verwendet, was zu der Temperaturabweichung über die Zeit in

Abbildung 4 (links) führt. Die helle Linie entspricht nun unserer optimierten Kontrolle mit der zugehörigen Abweichung der Temperatur im Glas in Abbildung 4 (rechts).

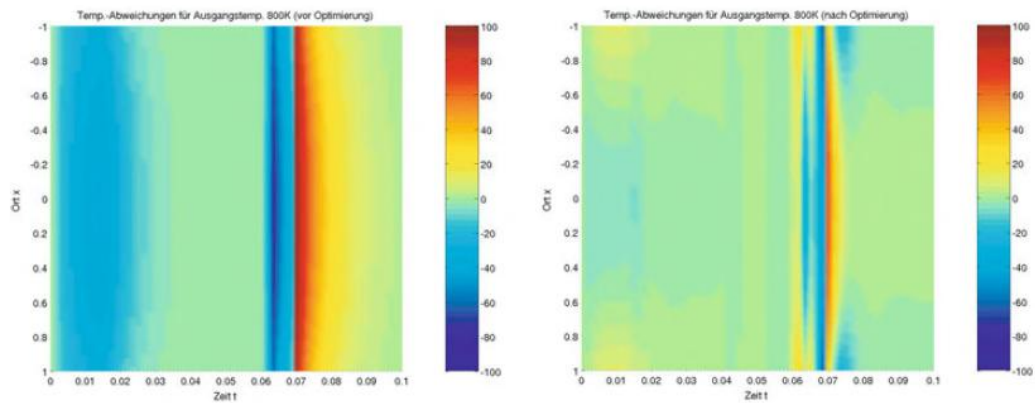


Abbildung 4: Temperaturabweichung vom gewünschten Profil, unoptimiert (links) und optimiert (rechts)

Es ist zu erkennen, dass die Abweichung der Temperatur im Glas nach der Optimierung wesentlich geringer ist als zuvor. Gerade die großen Unterschiede auf Grund des Peaks zwischen 0,06 und 0,07 wurden teilweise behoben. Die Optimierung liefert eine sehr gute Temperaturkurve für die Außentemperatur.