



**Hochschule für Technik
und Wirtschaft Berlin**

University of Applied Sciences

Projekt Zeitaufgelöste Photolumineszenz

Abschlussarbeit

zur Erlangung des akademischen Grades
Master of Science (M.Sc.)

an der

Hochschule für Technik und Wirtschaft Berlin

Fachbereich Wirtschaftswissenschaften II

Studiengang Angewandte Informatik

1. Prüfer: Max Mustermann

2. Prüfer: Max Mustermann

Eingereicht von: Max Mustermann

Matrikelnummer: s0000000

Datum der Abgabe: 25.04.2017

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	1
2	Finite Differenzen der stationären Gleichung	2
2.1	Lineare stationäre Gleichung	2
2.2	Nicht Lineare stationäre Gleichung	8
3	Implizite Einschrittverfahren	10
3.1	Entwicklung	11
3.2	Anwendung	12
	Abbildungsverzeichnis	A
	Literatur	B

1 Einleitung

In dieser Hausarbeit sollen die Grundlagen einer Simulation der Dynamik in neuartigen Perowskit-Solarzellen gelegt werden. Diese Art der Dünnschicht Solarzellen erreicht hohe Wirkungsgrade von über 20% und ist somit für die Forschung von großer Interesse[1].

2 Finite Differenzen der stationären Gleichung

Im folgendem Kapitel soll die stationäre Verteilung der Ladungsträger bei kontinuierlicher Bestrahlung modelliert werden. Dadurch kann die zeitliche Abhängigkeit vernachlässigt werden ($\frac{\partial u}{\partial t} = 0$)

Die allgemeine DGL ist gegeben durch:

$$\frac{\partial u}{\partial t} = D \cdot \frac{\partial^2 u}{\partial z^2} - (k_1 + k_2 \cdot N_D) \cdot u - k_2 u^2 + s(t, z) \quad (2.1)$$

Mit $\frac{\partial u}{\partial t} = 0$ folgt die stationäre Gleichung:

$$D \cdot \frac{du}{dz} - (k_1 + k_2 N_D) \cdot u - k_2 \cdot u^2 = -s(z), \quad 0 < z < d \quad (2.2)$$

mit den Randbedingungen:

$$D \cdot \frac{\partial u}{\partial z}(0) = S_L u(0), \quad D \frac{\partial u}{\partial z}(d) = -S_R u(d) \quad (2.3)$$

2.1 Lineare stationäre Gleichung

Im Folgendem Kapitel soll nur der in u lineare Anteil der stationären, zeitunabhängigen Gleichung (Eq. 2.1) ohne den quadratischen Term $-k_2 u^2$ behandelt werden[1].

1. Erarbeiten Sie sich Abschnitt 8.8 aus [1] und beschreiben Sie Ihr Vorgehen für die Anwendung der Methode auf Gleichung (6).

Mit der Methode der finiten Differenzen für Zweipunkt-Grenzwertprobleme, beschrieben in [2, p. 442], können lineare Differenzialgleichungen zweiter Ordnung gelöst werden. Es werden dabei die Ableitungen der Gleichung durch Finite Differenzen substituiert, um eine diskretisierte Gleichung zu erhalten. Als Ergebnis erhält man eine Matrix, wodurch sich die zeitabhängige Stelle der Leitungsträgerdichte u_i mathematisch beschreiben lassen.

Für diese Methode sind drei Schritte notwendig:

- a) Diskretisierung eines Bereiches ($z \in [0, d]$) der Funktion in M gleich große Intervalle der Länge $h = \frac{(d-0)}{N}$ (Abb. 2.1)
 - b) Diskretisierung der Differenzialgleichung an den Knotenpunkten mit Approximation der Ableitung ()
2. Leiten Sie analog zu Gleichung (8.128) die Gleichungen für die gesuchten Werte u_0, u_1, \dots, u_N an den Punkten z_0, \dots, z_N her. Die Gleichungen enthalten u_1 und u_{N+1} , die im nächsten Schritt eliminiert werden. Verwenden Sie dabei die Abkürzung $s_i = s(z_i)$.

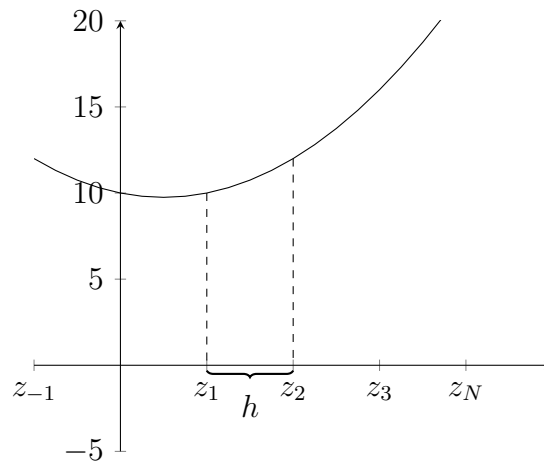


Abbildung 2.1: Beispieldarstellung: Knotenpunkte mit Schrittweite h

$$D \cdot \frac{du}{dz} - (k_1 + k_2 N_D) \cdot u - k_2 \cdot u^2 = -s(z), \quad 0 < z < d \quad (2.4)$$

$$\begin{aligned} k &= k_1 + k_2 * N_D \\ s_i &= s(z_i) \\ u(i) &\approx u_i \end{aligned}$$

$$\frac{\partial u}{\partial z} = \frac{(u_i + 1 - u_i)}{2 \cdot h} \quad (2.5)$$

$$\frac{\partial^2 u}{\partial z^2} = \frac{u_{i+1} - 2 \cdot u_i + u_{i-1}}{h^2} \quad i = 1, 2, \dots, N \quad (2.6)$$

$$D \cdot ((u_i + 1 - 2 \cdot u_i + u_{i-1})/(h^2)) - k \cdot u = -s_i \quad (2.7)$$

$$(D/h^2) \cdot u_i - 1 - (2D/h^2 + k) \cdot u_i + (D/h^2) \cdot u_{i+1} + 1 = -s_i \quad (2.8)$$

3. Approximieren Sie die ersten Ableitungen an den Randbedingungen:

$$D \cdot \frac{\partial u}{\partial z}(0) = S_L u(0), \quad D \frac{\partial u}{\partial z}(d) = -S_R u(d) \quad (2.9)$$

durch:

$$u' = \frac{u_1 - u_{-1}}{2 * h}, \quad u'(d) = \frac{u_N + 1 - u_{N+1}}{2 * h} \quad (2.10)$$

und lösen Sie die Gleichungen nach u_1 bzw. $u_N + 1$ auf. Setzen Sie diese Ausdrücke in die Gleichungen für die Knoten z_0 und z_N der letzten Teilaufgabe ein.

Erste Randbedingungen:

$$D \cdot \frac{\partial u}{\partial z}(0) = S_L u(0) \quad (2.11)$$

$$\frac{\partial u(0)}{\partial z} = S_L u(0)/D \quad (2.12)$$

$$S_L u(0)/D = \frac{u_1 - u_{-1}}{2 * h} \quad (2.13)$$

$$u(0) = D \cdot \frac{u_1 - u_{-1}}{2 * h} / S_L \quad (2.14)$$

$$u(0) = \frac{D}{2 * h * S_L} * u_1 - \frac{D}{2 * h * S_L} * u_{-1} \quad (2.15)$$

$$u_{-1} = u_1 - \frac{2 * h * S_L}{D} * u(0) \quad (2.16)$$

Zweite Randbedingungen:

$$D \frac{\partial u}{\partial z}(d) = -S_R u(d) \quad (2.17)$$

$$\frac{\partial u}{\partial z}(d) = -S_R u(d)/D \quad (2.18)$$

$$-S_R u(d)/D = \frac{u_N + 1 - u_N - 1}{2 * h} \quad (2.19)$$

$$u(d) = D \cdot \frac{u_N + 1 - u_N - 1}{-2 * h * S_R} \quad (2.20)$$

$$u(d) = \frac{D}{-2 * h * S_R} * u_N + 1 - \frac{D}{-2 * h * S_R} * u_N - 1 \quad (2.21)$$

$$u_N - 1 = \frac{-2 * h * S_R}{D} \cdot u(d) + u_N - 1 \quad (2.22)$$

$$u_N + 1 = \frac{-2 \cdot h \cdot S_R}{D} \cdot u(N) + u_N - 1 \quad (2.23)$$

für z_0 :

$$z_0 : \frac{u_1 - 2 \cdot h \cdot S_R / D \cdot u_0 - 2 \cdot u_0 + u_1}{h^2} \cdot D - k \cdot u(0) = -s(0) \quad (2.24)$$

für z_N :

$$z_N : \frac{u_N - 1 - 2 \cdot h \cdot S_R / D \cdot u_N - 2 \cdot u_N + u_N - 1}{h^2} \cdot D - k \cdot u(N) = -s(N) \quad (2.25)$$

für z_0 :

$$\begin{aligned} & \frac{u_1 - 2 \cdot h \cdot S_L / D \cdot u_0 - 2 \cdot u_0 + u_1}{h^2} \cdot D - k \cdot u(0) = -s(0) \\ & \frac{D \cdot u_1}{h^2} - \frac{2 \cdot S_L \cdot u_0}{h} - \frac{-2 \cdot u_0}{h} + \frac{D \cdot u_1}{h^2} - k \cdot u(0) = -s(0) \\ & 2 \cdot \frac{D \cdot u_1}{h^2} - \frac{2 \cdot S_L \cdot u_0}{h} - \frac{-2 \cdot u_0}{h} - k \cdot u(0) = -s(0) \\ & 2 \cdot \frac{D}{h^2} \cdot u_1 - \left(\frac{2 \cdot S_L}{h} + \frac{-2}{h} + k \right) \cdot u(0) = -s(0) \end{aligned} \quad (2.26)$$

für z_i :

$$\begin{aligned} & D \cdot \frac{u_i - 1 - 2 \cdot u_i + u_i + 1}{h^2} - k \cdot u(i) = -s(i) \\ & \frac{D \cdot u_i - 1}{h^2} - \frac{2 \cdot D \cdot u_i}{h^2} + \frac{-2 \cdot u_0}{h} - k \cdot u(i) = -s(i) \\ & \frac{D \cdot u_i - 1}{h^2} + \frac{D \cdot u_i + 1}{h^2} - \left(\frac{-2 \cdot D}{h} + k \right) \cdot u(i) = -s(i) \end{aligned} \quad (2.27)$$

für z_0 :

$$\begin{aligned}
 \frac{u_N - 1 - 2 \cdot h \cdot S_R / D \cdot u_N - 2 \cdot u_N + u_N - 1}{h^2} \cdot D - k \cdot u(N) &= -s(N) \\
 \frac{D \cdot u_N - 1}{h^2} - \frac{2 \cdot S_R \cdot u_N}{h} - \frac{2 \cdot u_N \cdot D}{h} + \frac{D \cdot u_N}{h^2} - k \cdot u(N) &= -s(N) \\
 2 \cdot \frac{D \cdot u_N - 1}{h^2} - \left(\frac{2 \cdot D}{h^2} + \frac{2 \cdot S_R}{h} + k \right) \cdot u(N) &= -s(N)
 \end{aligned} \tag{2.28}$$

4. Stellen Sie das lineare Gleichungssystem für die Größen analog zu Gleichung (8.133) in Atkinson Han Elementary Numerical Analysis 2004 AuszugDatei und folgende dar: $A \cdot u = b$, $u = [u_i]$, $b = [b_i]$ Ordnen Sie die Gleichungen analog zu den Knotenpunkten.

für u_1 :

$$\begin{aligned}
 \frac{D \cdot u_1 - 1}{h^2} - \left(\frac{2 \cdot D}{h^2} + k \right) \cdot u_1 + \frac{D \cdot u_1 + 1}{h^2} &= -s_1 \\
 \frac{D \cdot u_0}{h^2} - \left(\frac{2 \cdot D}{h^2} + k \right) \cdot u_1 + \frac{D \cdot u_2}{h^2} &= -s_1
 \end{aligned} \tag{2.29}$$

für $u_N - 1$:

$$\begin{aligned}
 \frac{D \cdot u_{N-1} - 1}{h^2} - \left(\frac{2 \cdot D}{h^2} + k \right) \cdot u_N - 1 + \frac{D \cdot u_N - 1 + 1}{h^2} &= -s_N - 1 \\
 \frac{D \cdot u_N - 2}{h^2} - \left(\frac{2 \cdot D}{h^2} + k \right) \cdot u_N - 1 + \frac{D \cdot u_N}{h^2} &= -s_N - 1
 \end{aligned}$$

Mit Hilfe der Matrixform $A \cdot u = b$ lässt sich dieses Gleichungssystem mit Hilfe von Matlab durch gelöst werden. Dazu wird die Koeffizientenmatrix

$$\begin{bmatrix}
 -\frac{(2 \cdot S_L)}{h+2} & \frac{2 \cdot D}{h^2} & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\
 \frac{D}{h^2} & -\frac{(2 \cdot D)}{h^2+k} & \frac{D}{h^2} & \cdots & \cdots & \cdots \\
 \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & & \\
 \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & & \\
 \vdots & & \frac{D}{h^2} & -\frac{(2 \cdot D)}{h^2+k} & \frac{D}{h^2} & \\
 \vdots & & & \frac{2 \cdot D}{h^2} & -\frac{(2 \cdot D)}{h^2+2 \cdot S_R} &
 \end{bmatrix} \tag{2.30}$$

der unbekannten Vektor:

und die rechte Seite:

bestimmt.

2.2 Nicht Lineare stationäre Gleichung

Nichtlineare DGL:

$$D \frac{\partial^2 u}{\partial z^2} - (k_1 + k_2 N_D)u - k_2 u^2 = -s(z) \quad (2.31)$$

Diskretisierung der DGL:

$$D \frac{u_{i+1} - 2u_i + u_{i-1}}{h^2} - k \cdot u_i - k_2 \cdot u_i^2 = z_i \quad (2.32)$$

Mit den Randbedingung:

$$D \cdot \frac{\partial u}{\partial z}(0) = S_L u(0), \quad D \frac{\partial u}{\partial z}(d) = -S_R u(d) \quad (2.33)$$

Und den Approximationen der ersten Ableitung der Randbedingungen:

$$u'(0) \approx \frac{u_1 - u_{-1}}{2h} \quad u'(d) \approx \frac{u_{N+1} - u_{N-1}}{2h} \quad (2.34)$$

Damit folgt für die Randbedingung:

$$D \cdot \frac{u_1 - u_{-1}}{2h} = S_L u_0, \quad D \frac{u_{N+1} - u_{N-1}}{2h} = -S_R u_N \quad (2.35)$$

umgestellt nach u_{-1}

$$u_{-1} = -\frac{S_L 2h}{D} \cdot u_0 + u_1 \quad (2.36)$$

umgestellt nach u_{N+1}

$$u_{N+1} = -\frac{S_R 2h}{D} \cdot u_N + u_{N-1} \quad (2.37)$$

Damit folgt für die Funktion $F(u) = b$:

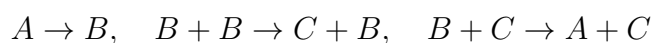
$$\begin{aligned}
F_0 &= \frac{D}{h^2}u_1 - \frac{2D + kh^2}{h^2}u_0 + \frac{D}{h^2} \cdot \left(-\frac{S_L 2h}{D} \cdot u_0 + u_1 \right) - k_2 u_0^2 \\
&\vdots \\
F_i &= \frac{D}{h^2}u_{i+1} - \frac{2D + kh^2}{h^2}u_i + \frac{D}{h^2} \cdot u_{i-1} - k_2 u_i^2 \\
&\vdots \\
F_N &= \frac{D}{h^2} \left(-\frac{S_R 2h}{D} \cdot u_N + u_{N-1} \right) - \frac{2D + kh^2}{h^2}u_N + \frac{D}{h^2}u_{N-1} - k_2 u_N^2
\end{aligned}$$

Vereinfacht zu :

$$\begin{aligned}
F_0 &= 2 \cdot \frac{D}{h^2}u_1 - \left(\frac{S_L 2h + 2D + kh^2}{h^2} \right) u_0 - k_2 u_0^2 \\
&\vdots \\
F_i &= \frac{D}{h^2}u_{i+1} - \frac{2D + kh^2}{h^2}u_i + \frac{D}{h^2} \cdot u_{i-1} - k_2 u_i^2 \\
&\vdots \\
F_N &= -\frac{2D + kh^2 + S_R 2h}{h^2}u_N + 2\frac{D}{h^2}u_{N-1} - k_2 u_N^2
\end{aligned}$$

3 Implizite Einschrittverfahren

Steife Systeme treten aber auch in der Modellierung von Reaktionen in der Chemie auf. Als Beispiel soll eine chemische Reaktion dreier Stoffe $A; B; C$ aus [3] dienen:



.

Die Dynamik der Konzentrationen der einzelnen Komponenten können durch Anfangswertproblem

$$A : y_1' = -0.04 \cdot y_1 + 10^4 \cdot y_2 y_3 \quad (3.1)$$

$$B : y_2' = 0.04 \cdot y_1 - 10^4 \cdot y_2 y_3 - 3 \cdot 10^7 y_2^2 \quad (3.2)$$

$$C : y_3' = 3 \cdot 10^7 y_2^2 \quad (3.3)$$

$$(3.4)$$

mit den Anfangswerten

$$y_1(0) = 1, y_2^2(0) = 0, y_3(0) = 0$$

modelliert werden. Anhand dieses Systems sollen im folgenden steife Differenzialgleichungen untersucht und ein effizientes numerisches Verfahren entwickelt werden.

3.1 Entwicklung

Ein allgemeines System von Anfangswertproblemen für eine Funktion y kann als folgendes geschrieben werden:

$$y' = f(t, y), \text{quad} t \in [a, b], \text{quad} y(a) = y_a$$

Der Wert von y wird näherungsweise an den Zeitpunkten berechnet:

$$y^{(i)} \approx y(t_i), \text{quad} i = 0, 1, \dots, N$$

Das implizite Euler-Verfahren $y^{(i+1)} = y(i) + hf(t_i + 1, y^{(i+1)})$

Die implizite Trapezregel: $y^{(i+1)} = y(i) + h/2[f(t_i, y^{(i)}) + f(t_i + 1, y^{(i+1)})]$

Aufgabe 1. Erarbeiten Sie sich Abschnitt 8.4 aus [2] Atkinson Han Elementary Numerical Analysis 2004 AuszugDatei und fassen Sie in eigenen Worten zusammen, was Sie unter steifen Differenzialgleichung verstehen. Unter einer starren Differentialgleichung versteht man eine Gleichung mit bestimmten numerischen Methoden, die besonders große Störungsfaktoren am Ausgang aufweisen, sofern die Schrittweite nicht allzu klein ausgewählt wird.

Aufgabe 2: Setzen Sie in den Gleichungen des impliziten Euler-Verfahrens und der impliziten Trapezregel $y^{(i+1)} = y(i) + z$

und formulieren Sie jeweils die Gleichung für als Nullstellenproblem: $F_{\text{euler}}(z) = 0, \text{quad} F_{\text{trapez}}(z) = 0$

$$y^{(i+1)} = y(i) + hf(t_i + 1, y^{(i+1)})$$

und die implizite Trapezregel: $y^{(i+1)} = y(i) + h/2[f(t_i, y^{(i)}) + f(t_i + 1, y^{(i+1)})]$

wir setzen nun $y^{(i+1)} = y(i) + z$

in:

$$y^{(i)} + z = y(i) + hf(t_i + 1, y(i) + z)$$

und in:

$$y^{(i)} + z = y(i) + h/2[f(t_i, y^{(i)}) + f(t_i + 1, y(i) + z)]$$

ein. Formulieren wir nun beides als Nullstellenproblem für erhalten wir

$$F_{euler}(z) = z - hf(t_i + 1, y^{(i)} + z) = 0$$

und

$$F_{trapez}(z) = z - h/2[f(t_i, y^{(i)} + f(t_i + 1, y^{(i)} + z))] = 0$$

Aufgabe 3. Bestimmen Sie die Jacobi-Matrizen und von und in Abhängigkeit von , d.h. der Jacobi-Matrix von bezüglich .

$$D \cdot F_{euler}(z) = D \cdot z - h \cdot D(y) \cdot f(t_i + 1, y^{(i)} + z)$$

für das implizite Euler-Verfahren und

$$D \cdot F_{trapez}(z) = h/2 \cdot [D(y) \cdot f(t_i + 1, y^{(i)}) + h \cdot D(y)f(t_i + 1, y^{(i)} + z)] - D \cdot z$$

für das implizite Trapez-Verfahren,

wobei $D, f =$

$$\begin{bmatrix} \frac{\partial f_1}{\partial y_1} & \frac{\partial f_1}{\partial y_2} & \cdots & \frac{\partial f_1}{\partial y_n} \\ \frac{\partial f_2}{\partial y_1} & \frac{\partial f_2}{\partial y_2} & \cdots & \frac{\partial f_2}{\partial y_n} \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ \frac{\partial f_n}{\partial y_1} & \frac{\partial f_n}{\partial y_2} & \cdots & \frac{\partial f_n}{\partial y_n} \end{bmatrix} \quad (3.5)$$

und $Dz =$

$$\begin{bmatrix} 1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 1 & \cdots & 0 \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ 0 & \cdots & 0 & 1 \end{bmatrix} \quad (3.6)$$

3.2 Anwendung

1. Formulieren Sie Gleichung (9) als System der Form (11) mit Funktion $f_{chem}(t; y)$.

$$y' = f(t, y) =$$

$$\begin{bmatrix} -0.04y_1 + 10^4 y_2 y_3 \\ 0.04y_1 - 10^4 y_2 y_3 \cdot 10^7 y_2^2 \\ 3 \cdot 10^7 y_2^2 \end{bmatrix} \quad (3.7)$$

mit $t \in [0, \sim], y(0) =$

$$\begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}$$

(3.8)

Abbildungsverzeichnis

2.1	Beispieldarstellung: Knotenpunkte mit Schrittweite h	3
-----	--	---

Literatur

- [1] Prof. Dr. Andreas Zeiser, *Angewandte Mathematik: Projekt Zeitaufgelöste Photolumineszenz*, Moodle.
- [2] K. E. Atkinson und W. Han, *Elementary numerical analysis*, 3rd ed. / Kendall Atkinson, Weimin Han. Chichester: Wiley, 2004, ISBN: 9780471433378. Adresse: <http://worldcatlibraries.org/wcpa/oclc/52418321>.