

MATHEMATISCHES FORSCHUNGSINSTITUT OBERWOLFACH

Tagungsbericht 48/1989

Numerische Methoden zur Lösung kinetischer Gleichungen

12.11. bis 18.11.1989

Die Tagung fand unter der Leitung von Helmut Neunzert (Kaiserslautern) statt. Im Mittelpunkt des Interesses standen zwei Fragen:

- 1.) Die numerische Simulation der Boltzmann-Gleichung, insbesondere die Teilchen-Simulation
- 2.) Probleme der Quanten-Liouville-Gleichung aus der Halbleitertheorie

Zum ersten Thema stellt H. Babovsky ein Simulations-Schema für ein System mit wenigen Teilchen vor, das eine Analyse der systematischen Fehler einer solchen Simulation erlaubt. Von B. Wiesen wurde die Abhängigkeit der Lösung der Boltzmann-Gleichung vom Wirkungsquerschnitt des Streukerns untersucht. Zur Beschleunigung des Teilchen-Simulationsverfahrens stellte J. Struckmeier Ideen vor, die mit denen zur Konvergenz-Beschleunigung langsam konvergierender Folgen verbunden sind. F. Gropengießer beschäftigte sich mit Kriterien für einen Übergang zwischen der Simulation der Boltzmann-Gleichung und Algorithmen zur Lösung der hydrodynamischen Gleichungen, um gegebenenfalls zwischen den alternativen Algorithmen hin

und her zu schalten und so den Rechenaufwand für komplexere Geometrien zu vermindern. Eine Modifikation der Boltzmann-Gleichung für ein polyatomiges Gas leitete S. Körber her. G. Mißmahl untersuchte den Effekt einer Abkühlung des Systems bei Verwendung bestimmter Folgen mit niedriger Diskrepanz zur Simulation der Gas-Oberfläche-Wechselwirkung.

Zum zweiten Thema stellte P. Markowich die Quanten-Liouville-Gleichung vor, die aus der Schrödinger-Gleichung hergeleitet wird. A. Arnold zeigte die globale Existenz einer klassischen Lösung des Wigner-Poisson-Problems. F. Nier brachte zwei Beispiele für kinetische Modelle zur Simulation des Elektronen-Transports in Halbleitern. Ein Überblick über Methoden der Teilchen-Simulation für die Halbleiter-Boltzmann-Gleichung wurde von P. Degond gegeben. H. Mook stellte eine deterministische Teilchen-Methode zur Lösung der Halbleiter-Boltzmann-Gleichung vor. J. Wick beschäftigte sich mit Ideen zur Lösung von Problemen mit Teilchen-Kollision mit Hilfe von endlichen Teilchen-Methoden.

Diese beiden Haupt-Themen wurden von zusätzlichen Vorträgen begleitet.

So beschäftigte sich K. Dressler mit inversen Problemen der linearen Transport-Theorie. T. Platkowski zeigte bei einem Zwei-Geschwindigkeiten-Problem der Boltzmann-Gleichung, unter welchen Bedingungen das Randwertproblem eine eindeutige Lösung hat. G. Rein stellte lokale und globale Störungssätze für das relativistische Vlasov-Maxwell-System vor. J. Batt beschäftigte sich mit der Stabilität von stationären Lösungen des Vlasov-Poisson-Systems und zeigte, daß die insbesondere in Lehrbüchern der Astrophysik angebrachten Argumente für eine Stabilität solcher Lösungen mathematisch lückenhaft sind.

Da der Tagung die Idee eines Arbeitskreises zugrunde lag, kamen hauptsächlich offene Probleme zur Sprache die bei kinetischen Gleichungen auftreten. Abschließend vereinbarten die verschiedenen Teilnehmer-Gruppen, ihre Algorithmen auf ein gemeinsames Testproblem anzuwenden. Es ist geplant, bei Vorlage von ersten Ergebnissen wieder zusammenzukommen, um diese zu vergleichen und aufgetretene Probleme zu diskutieren.

Vortragsauszüge :

K. Dressler:

Inverse Problems in Linear Transport Theory

Inverse problems for a class of linear kinetic equations are investigated. The aim is to identify the scattering kernel of a transport equation (corresponding to the structure of a background medium) by observing the "albedo" part of the solution operator for the corresponding direct initial boundary value problem. This means to get information on some integral operator in an integro-differential equation through an overdetermined boundary value problem.

We first derive a constructive method for solving direct half-space problems and prove a new factorization theorem for the solutions. Using this result we investigate stationary inverse problems with respect to well posedness (e.g. reduce them to classical ill-posed problems, such as integral equations of first kind). In the time-dependent case we show that a quite general inverse problem is well posed and solve it constructively.

T. Platkowski:

Nonuniqueness of Boundary Value Problems for the Two-Velocity Models of the Boltzmann-Equation

We consider the general boundary value problem for the two-velocity model of the Boltzmann-Equation in an interval $[-1,1]$:

$$\begin{aligned} \frac{\partial N_1}{\partial x} &= \alpha N_1^2 + \beta N_1 N_2 + \gamma N_2^2 \\ - \frac{\partial N_2}{\partial x} &= -\alpha N_1^2 - \beta N_1 N_2 - \gamma N_2^2 \\ (1) \quad N_1 \Big|_{x=-L} &= \alpha_1 N_2 \Big|_{x=-L} + \beta_1 \\ N_2 \Big|_{x=+L} &= \alpha_2 N_1 \Big|_{x=+L} + \beta_2 \end{aligned}$$

The parameters α, β, γ determine the model (e.g. $\alpha = -1, \beta = 0, \gamma = 1$ give the Carleman model etc.); $\alpha_1, \alpha_2, \beta_1, \beta_2$ are the boundary parameters.

We obtain necessary and sufficient conditions for existence of two solutions of (1) and for existence of the unique solution; we also give examples of the existence of two positive solutions of (1) for a given choice of the boundary parameters and discuss possible generalizations and applications in numerical procedures.

G. Rein:

Lokale und globale Störungssätze für das relativistische Vlasov-Maxwell-System

Gegeben sei das relativistische Vlasov-Maxwell-System für ein kollisionsfreies Plasma bestehend aus N verschiedenen Teilchensorten:

$$\partial_t f_l(t, \mathbf{x}, \mathbf{v}) + \hat{\mathbf{v}} \cdot \partial_{\mathbf{x}} f_l(t, \mathbf{x}, \mathbf{v}) + q_l (E(t, \mathbf{x}) + \hat{\mathbf{v}} \times B(t, \mathbf{x})) \cdot \partial_{\mathbf{v}} f_l(t, \mathbf{x}, \mathbf{v}) = 0$$

$$\partial_t E(t, \mathbf{x}) - \operatorname{rot} B(t, \mathbf{x}) = -4\pi \mathbf{j}(t, \mathbf{x}), \quad \operatorname{div} E(t, \mathbf{x}) = 4\pi \rho(t, \mathbf{x})$$

$$\partial_t B(t, \mathbf{x}) + \operatorname{rot} E(t, \mathbf{x}) = 0, \quad \operatorname{div} B(t, \mathbf{x}) = 0$$

$$q_l \in \mathbb{R}, \quad l = 1, \dots, N, \quad t \geq 0, \quad \mathbf{x} \in \mathbb{R}^3, \quad \mathbf{v} \in \mathbb{R}^3, \quad \hat{\mathbf{v}} := \frac{\mathbf{v}}{\sqrt{1 + v^2}}$$

$$\rho(t, \mathbf{x}) := \sum_{l=1}^N q_l \int f_l(t, \mathbf{x}, \mathbf{v}) d\mathbf{v}, \quad \mathbf{j}(t, \mathbf{x}) := \sum_{l=1}^N q_l \int \hat{\mathbf{v}} f_l(t, \mathbf{x}, \mathbf{v}) d\mathbf{v}$$

Es wird das Verhalten klassischer Lösungen dieses Systems unter kleinen Störungen der Anfangsdaten untersucht. Neben Aussagen über stetige Abhängigkeit von den Anfangsdaten erhält man folgende globale Störungsaussage: Erfüllt eine globale (d.h. für alle $t \geq 0$ existierende) Lösung für $t \rightarrow \infty$ eine gewisse, näher zu spezifizierende Abfallbedingung an die Kraftfelder, so erfüllt jede andere Lösung, welche genügend nahe an der vorgegebenen startet, ebenfalls diese Bedingung und ist damit insbesondere global. Eine Folgerung aus diesem allgemeinen Resultat ist die Existenz globaler, klassischer Lösungen für fast symmetrische Anfangsdaten.

J. Batt:

Stability of Stationary Solutions of the Vlasov-Poisson System

Es wird herausgestellt, daß die insbesondere in Lehrbüchern der Astrophysik angebrachten Argumente für die Stabilität von stationären Lösungen des Vlasov-Poisson-Systems (z.B. T. Binney - S. Tremaine, Galactic Dynamics, Princeton Series in Astrophysics 1987, S 285 und S 303) mathematisch lückenhaft sind. Nicht einmal die durch Linearisierung entstandene Gleichung ist mathematisch auf Existenz untersucht (ebda, Gleichung (5-5)). Es wird eine solche Gleichung im kugelsymmetrischen Fall für stationäre Lösungen diskutiert, die nur von der Energie abhängen.

H. Babovsky:

Simulation of Steady Kinetic Equations

For a class of Monte-Carlo Simulation methods for the time dependent Boltzmann Equation a Law of Large Numbers is known stating that for fixed time intervals $[0, T]$ the simulated solutions converge to the exact solution as the particle number N tends to infinity. However, the solution of practical interest is different. To obtain stationary solutions within a reasonable amount of calculation time, one is interested in the long time behavior of small particle systems. In the talk I present a new simulation scheme which allows to study the ergodic behavior of the underlying Markov-process and to analyse the systematic errors in such a scheme for small N .

B. Wiesen:

On the Dependence of the Solution of the Boltzmann-Equation on the Scattering Cross Section

The scattering cross section is a parameter in the Boltzmann-Equation (BE). Considering the spatially homogeneous case it is interesting to get some information about this function from the solution.

To study this problem we first define an appropriate Banach space for the scattering cross sections. In the next step we derive a representation of the solution of the BE. Using this representation we can show that the above mentioned problem is ill-posed if the initial distribution function has a finite energy.

J. Struckmeier:

Acceleration Techniques for the Boltzmann-Equation

The computational effort for 3d-flow simulations of the Boltzmann-Equation with complex geometry is still very high. This comes from the fact that the instationary equation is simulated until a steady state is reached. The idea now is to accelerate the convergence to the steady state. Some ideas for such techniques are given. They are connected with transformations of slowly convergent sequences and ideas about domain decompositions.

F. Gropengießer:

Transition between the Boltzmann-Equation and the Hydrodynamic Equations

The range of practical use of simulation schemes for solving the Boltzmann-Equation is strongly limited by the highly increasing computational effort when the gasdensity is increasing (i.e. in the lower reentry phase of space vehicles). However in high density gases the distribution function is known to be close to a Maxwellian distribution function so that we can reduce the computational effort by solving the hydrodynamic equations. A criterion for the validity of the hydrodynamic equations is discussed and a simplified simulation scheme is proposed, which uses the ideas of hydrodynamics.

S. Körber:

Boltzmann-Equation for Polyatomic Gases

A model for a polyatomic gas is presented, namely the "loaded-sphere"-model. In connection with this model the corresponding Boltzmann-Equation will be derived. The additional terms in the free streaming part along with the differences in the collision integral to the "normal" Boltzmann-Equation are discussed. After introducing a simulation scheme for numerical solutions of this "modified" Boltzmann-Equation results of computational calculations are shown. These calculations are studies about the internal structur of a shock wave in a polyatomic gas.

G. Mißmahl:

Randwertprobleme bei der Boltzmann-Simulation

Bei numerischen Verfahren zur Lösung der Boltzmann-Gleichung kommt es beim Einsatz bestimmter "low discrepancy"-Folgen für die Simulation der Gas-Oberfläche-Wechselwirkung zu einer Abkühlung des Systems, "Numerical Freezing" genannt. Eine Untersuchung der Verwendung dieser LD-Folgen für Monte-Carlo-Simulationen liefert eine Erklärung des Effektes und Möglichkeiten zur Fehlerverminderung. Dabei erweist sich der Einsatz einer Folge als sinnvoll, die eine Modifikation der Van der Corput-Halton-Folge darstellt.

(Literatur: Diplomarbeit "Randwertprobleme bei der Boltzmann-Simulation",
G. Mißmahl, Fachbereich Mathematik, Universität Kaiserslautern)

P. Markowich:

Die Quanten-Liouville-Gleichung

Die Quanten-Liouville-Gleichung wird aus der Schrödinger-Gleichung hergeleitet und mit Hilfe von Halbgruppenmethoden analysiert. Weiter sind die Kopplung mit Poisson-Gleichung (selbst-konsistentes Potential) und die speziell für Halbleitersimulation bedeutende Erweiterung auf Transport in Kristallen (Wigner-Poisson-Gleichung) besprochen.

A. Arnold:

The Wigner-Poisson-Problem in 2D

In dieser gemeinsamen Arbeit mit F. Nier wird die globale Existenz einer klassischen Lösung des Wigner-Poisson Problems gezeigt. Die Ladungsneutralität des 2d Systems mit einem konstanten Ionenhintergrund impliziert die Beschränktheit des elektrostatischen Potentials. Durch Umformulierung des Wigner-Poisson Problems als abzählbar viele Schrödinger-Gleichungen, die mit dem Newton-Potential gekoppelt sind, erhält man die eindeutige Lösung mit Hilfe der Halbgruppentheorie.

F. Nier:

Quantum and Kinetic Models of Semiconductor Physics and their Numerical Solutions

Kinetic Models are used in semiconductor physics in order to describe the electron transport. Here we show two of these Models which involve quantum phenomena, with giving mathematical and numerical results.

P. Degond:

Semiconductor Boltzmann-Equation / Electron Beams / Particle Methods

Review of methods and results in the particle simulations of the semiconductor Boltzmann-Equation.

H. Moock:

A Deterministic Particle Method for the Simulation of the Semiconductor Boltzmann-Equation

To solve the semiconductor Boltzmann-Equation the most widely used method is the Monte-Carlo method. Because this method is quite noisy, one needs a large number of particles to get sufficient precise results. As an interesting alternative

we develop a deterministic particle method. The underlying idea of this method is to discretize the equation with respect to the time and to interpret the result time discretized function as the density function of a measure, which again is approximated by a discrete measure. The convergence of the method is proved and first numerical experiments work very promising.

J. Wick:

Some Ideas for Finite Particle Methods

For collisionless kinetic problems like the Vlasov equation finite particle methods are well-established. For the extension to problems with collisions as in rarefied gases or semi-conductor, several suggestions are made and tested. Here we propose the rewriting of the equation into divergence form and to compute the speed of propagation from the flux vector. This leads to a system of ODE's, which gives good results in 1D and can be expanded to higher-dimensional problems.

Berichterstatter: Guido Mißmahl

Tagungsteilnehmer

A. Arnold
Fachbereich Mathematik / FB 3
der Technischen Universität Berlin
Straße des 17. Juni 135

1000 Berlin 12

F. Gropengießer
Fachbereich Mathematik
der Universität Kaiserslautern
Erwin-Schrödinger-Straße
Postfach 3049

6750 Kaiserslautern

Dr. H.K. Babovsky
Fachbereich Mathematik
der Universität Kaiserslautern
Erwin-Schrödinger-Straße
Postfach 3049

6750 Kaiserslautern

S. Körber
Fachbereich Mathematik
der Universität Kaiserslautern
Erwin-Schrödinger-Straße
Postfach 3049

6750 Kaiserslautern

Prof. Dr. J. Batt
Mathematisches Institut
der Universität München
Theresienstr. 39

8000 München 2

Prof. Dr. P. Markowich
Fachbereich Mathematik / FB 3
der Technischen Universität Berlin
Straße des 17. Juni 135

1000 Berlin 12

Dr. P. Degond
Centre de Mathematiques Appliquees
Ecole Polytechnique
E.R. A. - C. N. R. S. 756

F-91128 Palaiseau Cedex

G. Mißmahl
c/o J. Struckmeier, FB Mathematik
Universität Kaiserslautern
Erwin-Schrödinger-Str.
Postfach 3049

6750 Kaiserslautern

Dr. K. Dreßler
Fachbereich Mathematik
der Universität Kaiserslautern
Erwin-Schrödinger-Straße
Postfach 3049

6750 Kaiserslautern

H. Moock
Fachbereich Mathematik
der Universität Kaiserslautern
Erwin-Schrödinger-Straße
Postfach 3049

6750 Kaiserslautern

Prof. Dr. H. Neunzert
Fachbereich Mathematik
der Universität Kaiserslautern
Erwin-Schrödinger-Straße
Postfach 3049

6750 Kaiserslautern

J. Struckmeier
Fachbereich Mathematik
der Universität Kaiserslautern
Erwin-Schrödinger-Straße
Postfach 3049

6750 Kaiserslautern

F. Nier
Centre de Mathematiques Appliquees
Ecole Polytechnique
E.R. A. - C. N. R. S. 756

F-91128 Palaiseau Cedex

Prof. Dr. J. Wick
Fachbereich Mathematik
der Universität Kaiserslautern
Erwin-Schrödinger-Straße
Postfach 3049

6750 Kaiserslautern

Dr. T. Platkowski
Institute of Mathematics
University of Warsaw
PKiN IXp., p 9936

00-901 Warszawa
POLAND

B. Wiesen
Fachbereich Mathematik
der Universität Kaiserslautern
Erwin-Schrödinger-Straße
Postfach 3049

6750 Kaiserslautern

G. Rein
Mathematisches Institut
der Universität München
Theresienstr. 39

8000 München 2

6
7
8

