数值分析 Project 2020 Aut

在制作半导体器件时，常需要在硅晶体中参入杂质来改变其物理特性。在实际生产中，常使用扩散法实现。扩散是物质从高浓度的地方向低浓度的地方转移的现象，将含有杂质的气体包围着硅片，或者将杂质涂抹在硅表面，杂质就会由表及里地扩散。扩散现象可用扩散方程来描述：

$$q = -D\nabla u.$$

其中 q 表示扩散流强度，即单位时间内通过单位横截面积的粒子数；D 表示扩散系数，对于温度恒定的环境，可认为 D 为常数；u 表示粒子浓度（体密度），是关于时间 t 和空间坐标 (x, y, z) 的函数；负号表示扩散的方向与浓度梯度的方向相反。

由于杂质的扩散速度很慢，在研究杂质从硅片的一面向内扩散时，可以不考虑另一面的存在，因此可以将硅片的内部建模为半无界空间，即 $\{x > 0\}$。从初始时刻 $t = 0$ 开始，杂质从 $x = 0$ 处沿 x 轴方向扩散，考虑如下两种情况：

- 恒定表面浓度扩散。硅片暴露在含有杂质的气体中，杂质的体密度为 ρ，由于气体中杂质充足，在扩散过程中可近似认为 ρ 保持不变。
- 限定源扩散。硅片处于纯净的气体中，在 $t = 0$ 时刻在 $x = 0$ 表面处覆盖着一层杂质，杂质的面密度为 σ。

请针对上述两种情况，分别完成以下问题：

1 给出该物理问题的数学描述，即半无界空间下定解问题的数学表达式。

2 对于 1 中的问题，给出 $u(x,t)$ 的数值解。其中所有参数（D,ρ,σ）均取 1，$0 < t \leq 3, 0 < x \leq 3$。

3 对于恒定表面浓度扩散问题，解析解为

$$u(x,t) = \rho \mathrm{erfc}\left(\frac{x}{2\sqrt{Dt}}\right),$$

其中 erfc() 为余误差函数。对于限定源扩散问题，解析解为

$$u(x,t) = \left(\frac{\sigma}{\sqrt{D\pi t}}\right) e^{-\frac{x^2}{4Dt}}.$$

将解析解与 2 中的数值解对比并分析。

背景链接

物理问题通常研究一个变量 u 相对于时间 t 和空间 $\mathbf{r}$ 的变化规律，并且这种变化规律通常以偏微分方程的形式表现出来。（当存在多个变量 u 时，则表现为偏微分方程组）。

一般情况下，这个偏微分方程是二阶的，并且通常可以划分为三个范畴：波动问题，输运问题，和稳定场问题。这种划分并不绝对，有很多复杂的物理问题不属于这三种范畴，但是这种分类方式足以覆盖大多数常见的物理问题。

波动问题研究的是振动的传播规律，其标准表达式为

$$u_{tt} - a^2 \Delta u = 0,$$

其中 u_{tt} 是一种记法，表示 u 相对于 t 的二阶偏导数；$\Delta = \nabla \cdot \nabla$ 是拉普拉斯算子，通常也记为 ∇^2，在直角坐标系下，

$$\Delta = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2},$$

a 为一个取决于实际物理参数的常数。常见的实例有弦的一维振动，薄膜的二维振动，传输线模型，电磁波等等。

输运问题研究的是物质的扩散现象（例如本题）。其标准表达式为

$$u_t - a^2 \Delta u = 0,$$

常见的热传导问题也属于输运问题。

稳定场问题研究的是经过足够长时间之后，系统内的稳态分布情况。稳定场问题与时间无关，其标准表达式为

$$\Delta u = 0.$$

常见的实例如稳定的温度/浓度/电流分布等。

从数学上讲，波动方程对应于双曲型偏微分方程；稳定场方程对应于椭圆型偏微分方程；输运方程对应于抛物线型偏微分方程。

在实际应用中，还要注意两点，第一，上述的方程都是齐次的（等式右边为 0），当存在外界干扰因素时（例如受迫振动，存在源点/汇点等），方程通常是非齐次的。第二，还要特别注意“初始条件”和“边界条件”。这是物理上的一种称谓。所谓初始条件，是系统在 $t = 0$ 时刻所处的状态；所谓边界条件，是系统的边界处所满足的条件。即二者分别从时间和空间上限定了系统的原始状态。在偏微分理论中，时间和空间都是普通的变量，不需要刻意区分。因此物理上的初始条件和边界条件在数学上统称为（偏微分方程的）初始条件。

在对偏微分方程的求解上，最常见的解法是分离变量。著名的贝塞尔函数就是上述方程在柱坐标系下利用分离变量得到的解，如果是在球坐标系下，则会得到（连带）勒让德方程和球贝塞尔方程。分离变量法通常会得到本征值问题，这对应于贝塞尔函数和勒让德函数中的参数只能取某些特定的值（如整数，半整数等）。分离变量得到的解通常会是无穷级数，而本题中的解析解是闭式解，是利用格林函数得到的。

最后，做几点补充和说明：

1 上面的文字只是我个人的总结和理解，作为本次题目的背景和补充。如果你对于上面提及的某些术语不了解，或者想深入学习，请参考相关文献。

- 数学上，参考《偏微分方程》
- 带有物理背景的，参考《数学物理方法》
- 计算数值解方面的，参考本课程的 ppt 和教材。
- Wikipedia 也不错。

2 如果你对于上面的背景不甚了解，基本上也不会影响你完成本次作业。

提示

- 如背景链接中提到的，扩散问题的标准方程是

$$u_t - a^2\Delta u = 0.$$

- 注意偏微分方程的初始条件。
- 在第一小题中，你可能要用到 δ 函数，这是一个在 $x \neq 0$ 处取 0，在 $x = 0$ 处取 ∞ 的函数，并且 $\int_{-\infty}^{\infty} \delta(x)\mathrm{d}x = 1$。$\delta$ 函数可用来沟通面密度和体密度的联系。

要求

- 请提交报告文档和程序代码。
- 文档表达简洁准确，形式不限。
- 代码中有必要的注释。
- 注意 DDL！

提交截止时间： 2020.11.22, 23:59.