

间断有限元方法的算法设计与应用

鲁硕

lushuo@zju.edu.cn

信息与计算科学
浙江大学

2024 年 3 月 1 日

研究背景与意义

预备知识

离散方法

空间离散方法

时间离散方法

物理模型

DD 模型

HF 模型

误差分析

数值模拟

研究背景与意义

- 半导体是一种电导率在绝缘体至导体之间的物质或材料。半导体器件利用此特性在电子技术、清洁能源、制造业和自动化等许多领域具有重要意义。半导体宏观数学模型则是现代半导体工业的重要研究课题之一，它不仅为为半导体材料、微电子配件等相关领域的许多技术问题提供了理论上必要的解释，提供对器件行为和性能的预测和分析，利于半导体材料开发和优化。
- LDG 算法具有良好的 h-p 自适应性，出色的并行效率，因为它们在本质上是非常局部的。此外，这些方法具有优秀的可证明非线性稳定性。

介绍

- 基础符号 $I_j = (x_{j-\frac{1}{2}}, x_{j+\frac{1}{2}})$, $j = 1, 2, \dots, N$ 是计算域 I 的一个划分.

$\Delta x_j = x_{j+\frac{1}{2}} - x_{j-\frac{1}{2}}$, $x_j = \frac{1}{2}(x_{j-\frac{1}{2}} + x_{j+\frac{1}{2}})$, $h = \max\{\sup_j \Delta x_j\}$. 有限维计算空间

$$V_h = V_h^k = \{z : z|_{I_j} \in P^k(I_j)\}.$$

定义 $(u_h)_{j+\frac{1}{2}}^+ = u_h(x_{j+\frac{1}{2}}^+)$ 和 $(u_h)_{j+\frac{1}{2}}^- = u_h(x_{j+\frac{1}{2}}^-)$. 用 $[u_h]_{j+\frac{1}{2}} = (u_h)_{j+\frac{1}{2}}^+ - (u_h)_{j+\frac{1}{2}}^-$ 和 $(\bar{u}_h)_{j+\frac{1}{2}} = \frac{1}{2}((u_h)_{j+\frac{1}{2}}^+ + (u_h)_{j+\frac{1}{2}}^-)$ 来表示 u_h 在每个单元边界点的跳跃和平均值.

空间离散方法 I

DG 法就是想找到 V_h 一组基的系数, 进而得到解. 考虑简单的问题

$$\begin{cases} u_x = f, 0 \leq x \leq 1 \\ u(0) = a, \end{cases}$$

$\int_{I_j} v u_x = \int_{I_j} v f$ 由分部积分得

$$-\int_{I_j} u v_x dx + u_{j+\frac{1}{2}} v_{j+\frac{1}{2}} - u_{j-\frac{1}{2}} v_{j-\frac{1}{2}} = \int_{I_j} v f dx$$

假设 u 是准确解, u_h 是数值解. 对于任意可微的 v 上述等式都成立. 对上式求解得到的解就是数值解, 也就是上式可以写作

$$-\int_{I_j} u_h v_x dx + u_{j+\frac{1}{2}} v_{j+\frac{1}{2}} - u_{j-\frac{1}{2}} v_{j-\frac{1}{2}} = \int_{I_j} v f dx$$

空间离散方法 II

为了将 DG 法适用于含有高阶空间导数的方程，如

$$u_t = u_{xx} \quad (1)$$

令 $v = u_x$ 得到

$$u_t - v_x = 0, \quad (2)$$

$$v - u_x = 0. \quad (3)$$

LDG 法的想法是找到 $u_h, v_h \in V_h$ 使得 $\forall w, z \in V_h$, 我们有

$$\int_{I_j} u_t w dx + \int_{I_j} v_h w_x dx - \hat{v}_{j+1/2} w^-_{j+1/2} + 1/2 + \hat{v}_{j-1/2} w^+_{j-1/2} - 1/2 = 0, \quad (4)$$

$$\int_{I_j} v_h z dx + \int_{I_j} u_h z_x dx - \hat{u}_{j+1/2} z^-_{j+1/2} + \hat{u}_{j-1/2} z^+_{j-1/2} = 0. \quad (5)$$

其中 $\hat{u}_{j+1/2} = 1/2(u^-_{j+1/2} + u^+_{j+1/2}), \hat{v}_{j+1/2} = 1/2(v^-_{j+1/2} + v^+_{j+1/2})$.

总变差不增龙格库塔法 (TVD RK) I

离散情况下的总变差是

$$TV(u^n) = TV(u(\cdot, t^n)) = \sum_j |u_{j+1}^n - u_j^n|$$

其中 $u_j^n = u(x_j, t^n)$.

TV 不增, 即

$$TV(u^{n+1}) \leq TV(u^n).$$

RK 通常有形式

$$u^{(i)} = \sum_{k=0}^{i-1} (a_{ik} u^{(k)} + \Delta t \beta_{ik} L(u^{(k)})), \quad i = 1, \dots, m, \quad (6)$$

$$u^{(0)} = u^n, \quad u^{(m)} = u^{n+1}.$$

总变差不增龙格库塔法 (TVD RK) II

引理

当 $a_{ik} \geq 0, \beta_{ik} \geq 0$, RK 法(6)在 CFL 条件下是 TVD, 其中 $CFL = \min_{i,k} \frac{\beta_{ik}}{\alpha_{ik}} \Delta t$, 即

$$\Delta t \leq CFL \Delta t_1 \quad (7)$$

最优三阶 TVD RK 法

$$\begin{aligned} u^{(1)} &= u^n + \Delta t L(u^n), \\ u^{(2)} &= \frac{1}{2} u^n + \frac{1}{4} u^{(1)} + \frac{1}{4} \Delta t L(u^{(1)}), \\ u^{n+1} &= \frac{1}{3} u^n + \frac{2}{3} u^{(2)} + \frac{2}{3} \Delta t L(u^{(2)}). \end{aligned}$$

其中 $\alpha_{ik} \geq 0, \beta_{ik} \geq 0$, $CFL=1$.

IMEX RK 法 I

该方法的想法是隐性处理线性扩散部分，显性处理非线性耦合漂移项来节省计算成本，同时依然追求无条件稳定性，即时间步长可以取小于给定常数的任意值。

DD 模型 I

DD(drift-diffusion) 模型

DD 模型

$$n_t - (\mu E n)_x = \tau \theta n_{xx}, \quad (8)$$

$$\phi_{xx} = \frac{e}{\epsilon} (n - n_d), \quad (9)$$

其中 $x \in (0, 1)$, 第一个方程具有周期边界条件, 势方程 $\phi(0, t) = 0, \phi(1, t) = v_{bias}$ 具有 Dirichlet 边界条件. 泊松方程(9)是电势方程, $E = -\phi_x$ 代表电场.

在系统(8)-(9), 未知变量是电子浓度 n 和电势 ϕ . m_0 是电子有效质量, k 是 Boltzmann 常数, e 是电子电荷, μ 是迁移率, T_0 是晶格温度, $\tau = \frac{m_0 \mu}{e}$ 是松弛参数, $\theta = \frac{k}{m_0} T_0$, ϵ 是介电常数, n_d 是掺杂, 这是一个给定的函数.

DD 模型 II

令 $q = \sqrt{\tau\theta}n_x$, 因此等式(8)可以写作

$$n_t - (\mu En)_x - \sqrt{\tau\theta}q_x = 0, \quad (10)$$

$$q - \sqrt{\tau\theta}n_x = 0, \quad (11)$$

$$E_x = -\frac{e}{\epsilon}(n - n_d), \quad (12)$$

$$E = -\phi_x. \quad (13)$$

DD 模型 III

用测试函数 $v, w, r, z \in V_h^k$ 分别乘以上述方程，再对所有包含空间导数的部分进行公式化的分部积分来得到

$$\begin{aligned} \int_{I_j} n_t v dx + \int_{I_j} (\mu E n + \sqrt{\tau \theta} q) v_x dx \\ - (\mu E n + \sqrt{\tau \theta} q)_{j+\frac{1}{2}} v_{j+\frac{1}{2}}^- + (\mu E n + \sqrt{\tau \theta} q)_{j-\frac{1}{2}} v_{j-\frac{1}{2}}^+ = 0, \end{aligned} \quad (14)$$

$$\begin{aligned} \int_{I_j} q w dx + \int_{I_j} \sqrt{\tau \theta} n w_x dx - \sqrt{\tau \theta} n_{j+\frac{1}{2}} w_{j+\frac{1}{2}}^- + \sqrt{\tau \theta} n_{j-\frac{1}{2}} w_{j-\frac{1}{2}}^+ = 0, \end{aligned} \quad (15)$$

$$\begin{aligned} - \int_{I_j} E r_x dx + E_{j+\frac{1}{2}} r_{j+\frac{1}{2}}^- - E_{j-\frac{1}{2}} r_{j-\frac{1}{2}}^+ = -\frac{e}{\epsilon} \int_{I_j} (n - n_d) r dx, \end{aligned} \quad (16)$$

$$\begin{aligned} \int_{I_j} E z dx - \int_{I_j} \phi z_x dx + \phi_{j+\frac{1}{2}} z_{j+\frac{1}{2}}^- - \phi_{j-\frac{1}{2}} z_{j-\frac{1}{2}}^+ = 0, \end{aligned} \quad (17)$$

其中 $j = 1, \dots, N$, $v, w, r, z \in V_h$.

DD 模型 IV

DD 另一种 LDG 格式

$$\begin{aligned} \int_{I_j} (n^h)_t v dx + \int_{I_j} \left(\mu E^h n^h + \sqrt{\tau\theta} q^h \right) v_x dx \\ - \left(\mu \widehat{E^h n^h} + \sqrt{\tau\theta} \hat{q}^h \right)_{j+\frac{1}{2}} v_{j+\frac{1}{2}}^- + \left(\mu \widehat{E^h n^h} + \sqrt{\tau\theta} \hat{q}^h \right)_{j-\frac{1}{2}} v_{j-\frac{1}{2}}^+ = 0, \end{aligned} \quad (18)$$

$$\int_{I_j} q^h w dx + \int_{I_j} \sqrt{\tau\theta} n^h w_x dx - \sqrt{\tau\theta} \hat{n}_{j+\frac{1}{2}}^h w_{j+\frac{1}{2}}^- + \sqrt{\tau\theta} \hat{n}_{j-\frac{1}{2}}^h w_{j-\frac{1}{2}}^+ = 0, \quad (19)$$

$$E_x^h = \tilde{E}_x^h = -\frac{e}{\varepsilon} (n^h - n_d), \quad (20)$$

$$E^h = \tilde{E}^h - v_{\text{bias}} = \int_0^x -\frac{e}{\varepsilon} (n^h - n_d) dx + E_0 - v_{\text{bias}}, \quad (21)$$

其中, $E_0 = E^h(0) = \int_0^1 \left(\int_0^x \frac{e}{\varepsilon} (n^h - n_d) ds \right) dx$. 这里的 “hat” 表示数值通量.

HF 模型 I

HF 模型

$$n_t + J_x = 0, \quad x \in (0, 1), \quad (22)$$

$$\phi_{xx} = \frac{e}{\epsilon}(n - n_d). \quad (23)$$

Poisson 电场方程(23)带有周期边界条件, 其中 $J = J_{hyp} + J_{vis}$, 而

$$J_{hyp} = -\mu n E + \tau \mu \left(\frac{e}{\epsilon} \right) n (-\mu n E + \omega)$$

$$J_{vis} = -\tau \left(n (\theta + 2\mu^2 E^2) \right)_x + \tau \mu E (\mu n E)_x.$$

这里, $\omega = (\mu n E)|_{x=0}$ 取常数. 未知量与 DD 模型中相同: 电子浓度 n 和电势 ϕ .

HF 模型 II

定义 $C_1 = \frac{\tau\mu e}{\varepsilon}$, $C_2 = \frac{\tau\mu^2 e}{\varepsilon} = \mu C_1$ 和 $C_3 = \frac{\tau\mu e\omega}{\varepsilon} = \omega C_1$,
 $q = \sqrt{\tau\theta + \tau\mu^2 E^2} n_x = \left(\sqrt{\tau\theta + \tau\mu^2 E^2} n \right)_x - \left(\sqrt{\tau\theta + \tau\mu^2 E^2} \right)_x n$, 我们可以将方程 (22) 改
 写为以下系统

$$n_t + \left(- (3C_2 E n_d + \mu E - C_3) n + 2C_2 E n^2 - \sqrt{\tau\theta + \tau\mu^2 E^2} q \right)_x = 0, \quad (24)$$

$$q = \left(\sqrt{\tau\theta + \tau\mu^2 E^2} n \right)_x - \left(\sqrt{\tau\theta + \tau\mu^2 E^2} \right)_x n. \quad (25)$$

HF 模型 III

我们分别用测试函数 $v, w \in V_h^k$ 乘以方程 (24)-(25), 并对涉及空间导数的所有项进行形式上的分部积分, 得到以下弱形式

$$\begin{aligned}
 & \int_{I_j} n_t v dx + \int_{I_j} (3C_2 E n_d + \mu E - C_3) n v_x dx - (3C_2 E n_d n + \mu E n - C_3 n)_{j+\frac{1}{2}} v_{j+\frac{1}{2}}^- \\
 & + (3C_2 E n_d n + \mu E n - C_3 n)_{j-\frac{1}{2}} v_{j-\frac{1}{2}}^+ - \int_{I_j} 2C_2 E n^2 v_x dx + 2C_2 (E n^2)_{j+\frac{1}{2}} v_{j+\frac{1}{2}}^- - 2C_2 (E n^2)_{j-\frac{1}{2}} v_{j-\frac{1}{2}}^+ \\
 & + \int_{I_j} \sqrt{\tau\theta + \tau\mu^2 E^2} q v_x dx - \left(\sqrt{\tau\theta + \tau\mu^2 E^2} q \right)_{j+\frac{1}{2}} v_{j+\frac{1}{2}}^- + \left(\sqrt{\tau\theta + \tau\mu^2 E^2} q \right)_{j-\frac{1}{2}} v_{j-\frac{1}{2}}^+ = 0
 \end{aligned} \tag{26}$$

$$\begin{aligned}
 & \int_{I_j} q w dx + \int_{I_j} \sqrt{\tau\theta + \tau\mu^2 E^2} n w_x dx + \int_{I_j} \left(\sqrt{\tau\theta + \tau\mu^2 E^2} \right)_x n w dx \\
 & - \left(\sqrt{\tau\theta + \tau\mu^2 E^2} n \right)_{j+\frac{1}{2}} w_{j+\frac{1}{2}}^- + \left(\sqrt{\tau\theta + \tau\mu^2 E^2} n \right)_{j-\frac{1}{2}} w_{j-\frac{1}{2}}^+ = 0.
 \end{aligned} \tag{27}$$

HF 模型 IV

将上述方程中的精确解 n, q 替换为它们在 V_h^k 中的数值近似 n^h, q^h , 注意到数值解 n^h 和 q^h 在单元边界上不连续, 然后将单元边界上的项替换为合适的数值通量, 我们得到 LDG 格式:

$$\begin{aligned}
 & \int_{I_j} n_t^h v dx + \int_{I_j} (3C_2 E^h n_d + \mu E^h - C_3) n^h v_x dx \\
 & - (3C_2 E^h n_d + \mu E^h - C_3)_{j+\frac{1}{2}} \hat{n}_{j+\frac{1}{2}}^h v_{j+\frac{1}{2}}^- + (3C_2 E^h n_d + \mu E^h - C_3)_{j-\frac{1}{2}} \hat{n}_{j-\frac{1}{2}}^h v_{j-\frac{1}{2}}^+ \\
 & - \int_{I_j} 2C_2 E^h (n^h)^2 v_x dx + 2C_2 \left(E^h (\widehat{(n^h)^2}) \right)_{j+\frac{1}{2}} v_{j+\frac{1}{2}}^- - 2C_2 \left(E^h (\widehat{(n^h)^2}) \right)_{j-\frac{1}{2}} v_{j-\frac{1}{2}}^+ \\
 & + \int_{I_j} \sqrt{\tau\theta + \tau\mu^2 (E^h)^2} q^h v_x dx \\
 & - \left(\sqrt{\tau\theta + \tau\mu^2 (E^h)^2} \hat{q}^h \right)_{j+\frac{1}{2}} v_{j+\frac{1}{2}}^- + \left(\sqrt{\tau\theta + \tau\mu^2 (E^h)^2} \hat{q}^h \right)_{j-\frac{1}{2}} v_{j-\frac{1}{2}}^+ = 0, \quad (28)
 \end{aligned}$$

$$\int_{I_j} q^h w dx + \int_{I_j} \sqrt{\tau\theta + \tau\mu^2 (E^h)^2} n^h w_x dx + \int_{I_j} \left(\sqrt{\tau\theta + \tau\mu^2 (E^h)^2} \right)_x n^h w dx$$

误差分析 I

由于篇幅限制，具体证明过程此处不列出。

- DD 模型 LDG 格式

定理

设 n, q 是问题(8)-(9)的精确解，具有足够光滑且有界导数。设 n^h, q^h 是半离散 LDG 格式(18)-(19)的数值解，并将相应的数值误差记为 $e_u = u - u_h (u = n, q)$ 。如果有限元空间 V_h^k 是 $k \geq 1$ 次分段多项式，则对于足够小的 h ，有以下误差估计成立：

$$\|n - n^h\|_{L^\infty(0,T;L^2)} + \|q - q^h\|_{L^2(0,T;L^2)} \leq Ch^{k+\frac{1}{2}}$$

其中常数 C 依赖于最终时间 T 、 k 、 $\|n\|_{L^\infty(0,T;H^{k+1})}$ 、 $\|n_x\|_{0,\infty}$ 、 $\|n_d\|_{0,\infty}$ 。

误差分析 II

• HF 模型 LDG 格式

定理

设 n, q 是问题 (24)-(25) 的精确解, 具有足够光滑且有界导数. 设 n^h, q^h 是半离散 LDG 格式 (28)-(28) 的数值解, 并将相应的数值误差记为 $e_u = u - u_h (u = n, q)$. 如果有限元空间 V_h^k 是 $k \geq 2$ 次分段多项式, 则对于足够小的 h , 有以下误差估计成立:

$$\|n - n^h\|_{L^\infty(0, T; L^2)} + \|q - q^h\|_{L^2(0, T; L^2)} \leq Ch^{k+\frac{1}{2}}$$

其中常数 C 依赖于最终时间 T 、 k 、 $\|n\|_{L^\infty(0, T; H^{k+1})}$ 、 $\|n_x\|_{0, \infty}$ 、 $\|n_d\|_{0, \infty}$ 以及导数 $|a'|$ 和 $|b'|$ 的界.

误差分析 III

• DD 模型三阶 IMEX LDG 格式

定理

令 n^m, q^m 是问题 (14)-(17) 在时间层级 m 的精确解, 它们足够光滑且有有界导数. 令 n_h^m, q_h^m 是三阶 IMEX LDG 格式. 如果有限元空间 V_h^k 是 $k(k \geq 0)$ 阶间断多项式, 那么对于足够小的 h , 存在正常数 C 与 h 无关, 使得下列误差估计成立

$$\|n - n_h\|_{L^\infty(0, T; L^2)} + \|q - q_h\|_{L^2(0, T; L^2)} \leq C(h^{k+1} + (\Delta t)^3) \quad (31)$$

其中 C 依赖于最终时间 T , k , 反常数 C_2 , $\|n\|_{L^\infty(0, T; H^{k+1})}$, $\|n_x\|_{L^\infty}$ 和 $\|E\|_{L^\infty}$.

误差分析 IV

• DD 模型 Dirichlet 边界条件

定理

令 n, q 是问题 (14)-(17) 的精确解, 它们足够光滑且导数有界. 令 n_h, q_h 是半离散 LDG 格式的数值解. 定义对应的数值误差 $e_h = u - u_h (u = n, q)$. 如果有限元空间 V_h^k 是 $k (k \geq 0)$ 阶间断多项式, 那么对于足够小的 h , 下列误差估计成立

$$\|n - n_h\|_{L^\infty(0, T; L^2)} + \|q - q_h\|_{L^2(0, T; L^2)} \leq Ch^{k+\frac{1}{2}} \quad (32)$$

其中 C 依赖于最终时间 T , k , 反常数 C_2 , $\|n\|_{L^\infty(0, T; H^{k+1})}$, $\|n_x\|_{L^\infty}$ 和 $\|E\|_{L^\infty}$.

如果我们选择边界处的数值通量

$$(\hat{q}_h)_{\frac{1}{2}} = (q_h^+)_{\frac{1}{2}} + c_0[n_h]_{\frac{1}{2}}. \quad (33)$$

误差分析 V

我们可以得到下列最优误差估计.

$$\|n - n_h\|_{L^\infty(0, T; L^2)} + \|q - q_h\|_{L^2(0, T; L^2)} \leq Ch^{k+1} \quad (34)$$

其中 C 依赖于最终时间 T , k , 反常数 C_2 , $\|n\|_{L^\infty(0, T; H^{k+1})}$, $\|n_x\|_{L^\infty}$ 和 $\|E\|_{L^\infty}$.

数值模拟 I

具体参数受限于篇幅省略.

图1描绘出 DD 和 HF 模型的模拟结果, 上面两张图片比较了 DD 模型的模拟结果, $\mu = \mu(n_d)$ with $\mu = 0.75$. 下面两张图比较 DD 模型和 HF 模型的结果, $\mu = \mu(n_d)$.

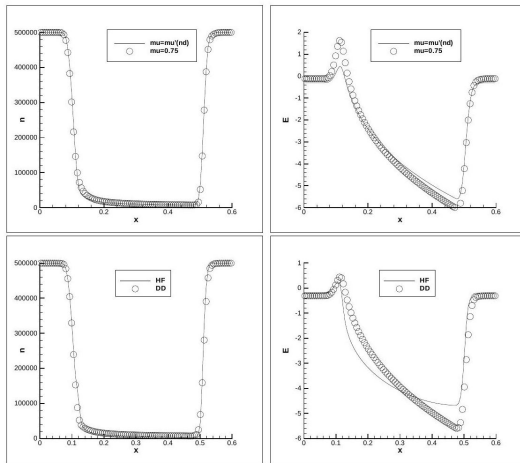


图 1: $[0, 0.6]$ with 100 mesh cells. Left: density ρ vs x , Right: energy E vs x .

数值模拟 II

阶 IMEX LDG 方案的模拟结果与 TVD RK 时间离散化的结果以供比较. 基选择缩放的 Legendre 多项式基.

数值模拟显示, 无论选择 h 的值如何 (在 $[0, 0.6]$ 中的 100 或 200 网格单元格), 方案都是稳定的. 代码在网格细化期间产生数值收敛结果 (为节省空间, 未显示网格细化结果), 正如本文所示的理论结果所预期的.

从表1和表2中, 我们可以看到, 使用第三阶 IMEX LDG 方案, 我们可以使用更大的时间步长, 从而显著节省 CPU 时间. IMEX 方案因此是研究像 DD 这样的模型描述正确物理规律的适用性的一个可靠而有效的工具.

表 1: 在 $[0, 0.6]$ 中具有 100 个网格单元的第三阶 RK LDG 和第三阶 IMEX LDG 方法达到稳态所需的时间步长 Δt , 时间步数 nt , 时间 t , 和 CPU 时间

	Third order EX-RK	Third order IMEX				
Δt	$1.688\text{E} - 5$	$1.2\text{E} - 3$	$1.8\text{E} - 3$	$2.4\text{E} - 3$	$3.0\text{E} - 3$	$3.6\text{E} - 3$
nt	44063	711	476	356	286	239
t	0.7436	0.8532	0.8568	0.8544	0.8580	0.8604
CPU time	58.8904	4.6332	3.4008	2.5272	2.0592	1.482

数值模拟 III

表 2: 在 $[0, 0.6]$ 中具有 200 个网格单元的三阶 RK LDG 法和三阶 IMEX LDG 方法达到稳态所需的时间步长 Δt , 时间步数 nt , 时间 t , 和 CPU 时间.

	Third order EX-RK	Third order IMEX				
Δt	$4.22\text{E} - 6$	$1.2\text{E} - 3$	$1.8\text{E} - 3$	$2.4\text{E} - 3$	$3.0\text{E} - 3$	$3.6\text{E} - 3$
nt	176081	727	480	360	298	249
t	0.7431	0.8724	0.864	0.864	0.894	0.8964
CPU time	202.3957	7.5349	5.5224	4.3680	3.4476	3.276

数值模拟 IV

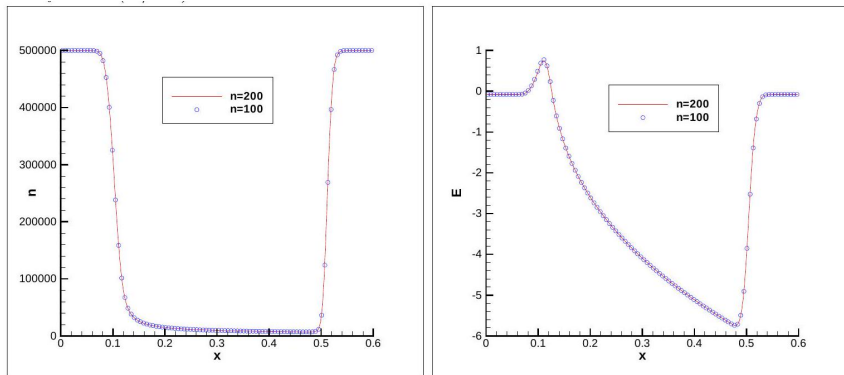


图 2: 在 $[0, 0.6]$ 有 100 或 200 个网格单元, $\Delta t = 1.2E-3$. 左边: 密度 n (10^{12} cm^{-3}); 右边: 电场 E (V/um).

鸣谢

谢谢!

