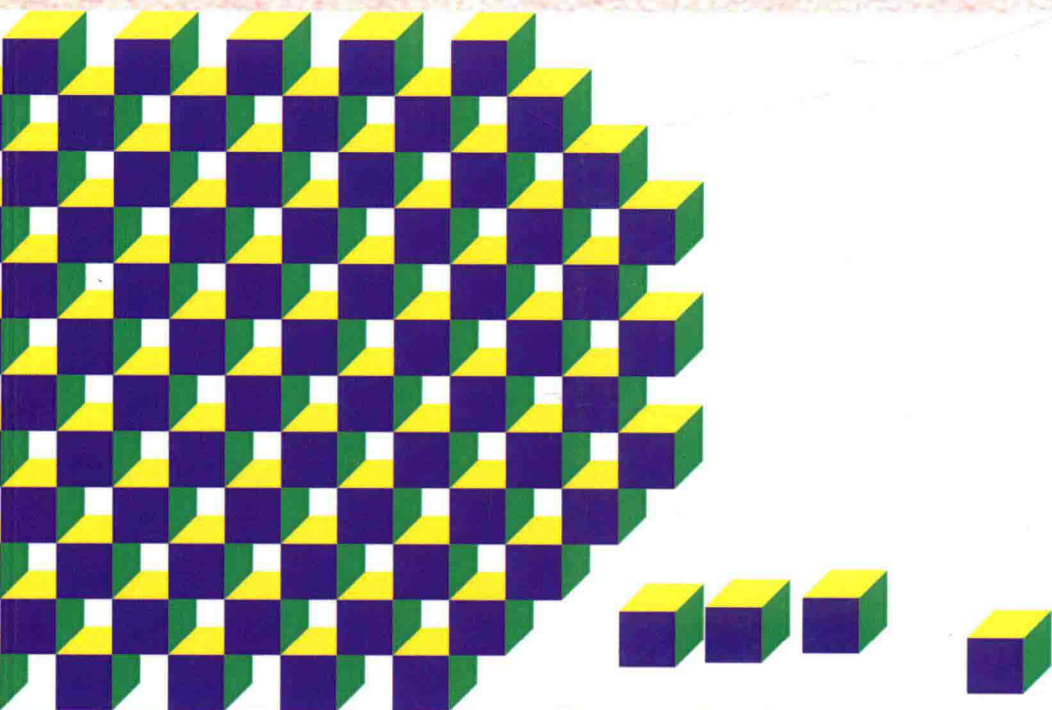


非均质材料

特征值问题 多尺度计算方法

张磊 著



非均质材料特征值问题 多尺度计算方法

张 磊 著

電子工業出版社

Publishing House of Electronics Industry

北京 • BEIJING

内 容 简 介

本书针对各类具有多尺度特性的特征值问题给出简化数学处理方法(均匀化和多尺度方法),既讨论单一物理系统的特征值问题,又讨论多物理耦合系统的特征值问题,既研究线性特征值问题,又研究非线性特征值问题。主要内容包括:椭圆方程特征值问题、线弹性方程组特征值问题,Steklov 边界型特征值问题、Maxwell 方程组特征值问题和 Schrödinger-Poisson 系统的多尺度分析与算法。

本书既可供科研人员、工程研究人员系统学习或案头参考,也可作为相关专业研究生教材使用。

未经许可,不得以任何方式复制或抄袭本书之部分或全部内容。
版权所有,侵权必究。

图书在版编目(CIP)数据

非均质材料特征值问题多尺度计算方法 / 张磊著. —北京: 电子工业出版社, 2016.5
ISBN 978-7-121-28449-6

I. ①非… II. ①张… III. ①功能材料—特征值问题—计算方法 IV. ①TB34

中国版本图书馆 CIP 数据核字(2016)第 059778 号

责任编辑: 董亚峰

印 刷: 北京七彩京通数码快印有限公司

装 订: 北京七彩京通数码快印有限公司

出版发行: 电子工业出版社

北京市海淀区万寿路 173 信箱 邮编 100036

开 本: 787×1 092 1/16 印张: 13.25 字数: 256 千字

版 次: 2016 年 5 第 1 版

印 次: 2016 年 5 第 1 次印刷

定 价: 56.00 元

凡所购买电子工业出版社图书有缺损问题, 请向购买书店调换。若书店售缺, 请与本社发行部联系, 联系及邮购电话: (010) 88254888, 88258888。

质量投诉请发邮件至 zltz@phei.com.cn, 盗版侵权举报请发邮件至 dbqq@phei.com.cn。

本书咨询联系方式: (010) 88254694。

前言

2006 年, 作者从南开大学数学科学学院数学与应用数学专业毕业, 保送至中国科学院计算数学与工程计算研究所计算数学专业攻读博士学位, 那年第一次接触到一个全新的名词“多尺度”。从对此领域的一无所知, 到之后十年的研究工作, 偶尔回想起来, 整个过程总是历历在目。没见博士生导师之前, 从网上了解到导师的研究方向是多尺度计算。于是在第一次见导师的时候, 作者和导师有了这样的对话:

“什么是多尺度计算?”

“就是研究算法。”

“什么是算法?”

“就是求解数学模型的方法。”

“求解什么数学模型?”

“偏微分方程模型。”

“为什么要用多尺度计算?”

“因为要解的偏微分方程不好解。”

.....

偏微分方程大学阶段作者是学过的, 它是构建科学、工程学和其他领域数学模型的主要手段。第一次见过导师之后, 作者对多尺度计算这一研究领域的认识就是六个字“解偏微分方程”。而导师后来给作者确定的研究方向就是专门解偏微分方程特征值问题, 如果读者学过偏微分方程的话, 应该知道偏微分方程特征值问题是不同于偏微分方程边值问题等其他问题的一类特殊模型, 但这类问题模型应用是很广泛的, 求解起来也是很难的。

十年间, 作者的研究工作始终围绕如何解偏微分方程特征值问题来展开。开始研究之后, 作者渐渐明白为什么导师让研究的这些偏微分方程特征值问题不好求解, 因为方程的系数是快速振荡的。如果读者学过有限差分、有限元、有限体等数值计算方法的话, 应该知道对于快速振荡的方程系数, 网格剖分需要非常细密, 结果就是计算量惊人。为什么方程系数会快速振荡呢? 因为作者研究的是材料科学领域的偏微分方程模型, 而现在的新材料一般都是非均质材料, 且材料结构是非常复杂的, 自然建出的偏微分方程模型的系数也是快速振荡的。数学和工程上给这类问题取了个很“高大上”的名字, 叫多尺度问题, 设计出的计算方法叫多尺度算法。

作者的研究工作从最简单的问题、最简单的方程开始。首先研究线性特征值问题, 因为非线性系统总是困难的。先从 Poisson 方程特征值问题多尺度计算开始。之后把微分算子改变了一下, 尝试更复杂一点的线弹性方程组特征值问题, 接着又把微分算子变成了 Maxwell 算子, 即 Maxwell 方程组特征值问题。研究完这三类问题之后, 加拿大 Alberta 大学的 Allegretto 教授和林延平教授提出作者可以研究一类比较特殊的特征值

问题，这类特征值问题的特征参数出现在边界条件里，即 Steklov 特征值问题。线性问题虽然各有不同，但终究是一类比较容易研究的问题。非线性系统呢？多物理系统呢？于是，作者又在导师的指导下，开始了非线性多物理耦合系统的多尺度分析与算法研究。也是从比较简单的 Schrödinger-Poisson 系统开始，这是半导体量子器件模拟中经常需要求解的基本方程。本书介绍了一些初步的研究结果，今后还有很长很多的路要走，在这里梳理出来，也希望给之后的研究者有一些参考作用。

事实上，回忆和分享这段研究过程，也正是整理此书的主要目的。

张磊
于北京万寿路

目 录

第 1 章 绪论	1
1.1 非均质材料	1
1.2 非均质材料特征值问题	2
1.2.1 非均质材料椭圆特征值问题	3
1.2.2 非均质材料弹性波方程特征值问题	4
1.2.3 非均质材料 Steklov 特征值问题	6
1.2.4 非均质材料 Maxwell 方程组特征值问题	8
1.2.5 非均质纳米材料 Schrödinger-Maxwell 系统	8
1.2.6 光子晶体的能带结构	10
1.3 本书的主要内容	11
第 2 章 预备知识	13
2.1 一些函数空间及其性质	13
2.2 抽象算子谱的性质	17
2.3 多尺度渐近展开技术	19
2.4 基于密度泛函理论的第一性原理计算	22
第 3 章 非均质材料线性椭圆特征值的高阶多尺度 Rayleigh 商校正	29
3.1 问题模型	29
3.2 高阶多尺度 Rayleigh 商校正格式	30
3.3 多尺度有限元算法	35
3.4 数值实验	38
第 4 章 非均质材料线弹性方程组特征值问题的多尺度分析与计算	47
4.1 问题模型	47
4.2 多尺度渐近分析	48
4.3 多尺度有限元算法	54
4.4 数值实验	58
4.4.1 等效材料系数的计算	58
4.4.2 特征值和特征函数的计算	61
第 5 章 非均质材料线性 Steklov 特征值问题的多尺度分析与计算	77
5.1 问题模型	77
5.2 多尺度渐近分析	78
5.3 相关问题的有限元计算	91

5.3.1	单胞问题	91
5.3.2	均匀化 Steklov 特征值问题	92
5.3.3	边界层问题	103
5.4	多尺度有限元算法	104
5.5	数值实验	109
5.5.1	常系数情形	109
5.5.2	具有快速振荡系数的情形	112
第 6 章	非均质材料线性 Maxwell 方程组特征值问题的多尺度分析与计算	129
6.1	问题模型	129
6.2	多尺度渐近分析	129
6.2.1	均匀化方法	129
6.2.2	多尺度渐近方法	135
6.3	多尺度有限元算法	139
6.4	数值实验	144
第 7 章	非均质纳米材料 Schrödinger-Poisson 系统的多尺度分析与计算	149
7.1	问题模型	149
7.2	模型有效性的数学证明	150
7.3	多尺度渐近分析	152
7.4	相关问题的有限元计算	154
7.4.1	单胞问题	154
7.4.2	均匀化 Schrödinger-Poisson 问题	155
7.5	材料物理性质的第一性原理计算	157
7.5.1	弹性常数	157
7.5.2	介电常数	158
7.5.3	有效质量	159
7.6	多尺度有限元算法	160
7.7	数值实验	161
7.7.1	材料参数的计算	161
7.7.2	Schrödinger-Poisson 系统的计算	167
第 8 章	光子晶体能带结构的计算与优化	175
8.1	三维光子晶体的能带结构计算	175
8.1.1	问题模型	175
8.1.2	有限元离散	178
8.1.3	数值结果	179

8.2 二维光子晶体的能带结构优化	181
8.2.1 问题模型	181
8.2.2 广义梯度最速下降法	183
8.2.3 数值结果	184
8.3 本章小结	187
后 记	189
参考文献	191

第1章 绪论

1.1 非均质材料

非均质材料在航空、航天、建筑、光电子学、微电子学等诸多领域具有重要的应用。所谓非均质材料指的是由不同材料或不同状态的同一材料组成的复合体。其种类很多,包括人工材料和天然材料。人工材料包括各种工程非均质材料,含有微小缺陷(微裂纹和微孔洞)的固体,点阵材料,胶体,泡沫材料,聚合物,混凝土以及半导体异质结构,光子晶体,等等。天然材料更多,例如动物组织(骨骼、软组织等)、土壤、面粉、冰、木头、植物组织、细胞簇,等等。这些材料具有明显的非均匀性和清晰的微细观结构。

随着各种工程材料的不断问世,非均质材料的种类越来越多。事实上,自然界中的材料本来就是非均质的,均质材料只是在工程结构的宏观尺度范围内的理想化模型,而在微细观尺度范围内,所有的材料都表现出其特有的非均质性。同时由于非均质材料具有可设计性强,性能好等诸多特点,它在科学研究与工程应用中受到越来越多的重视。

以往对于非均质材料的研究主要是集中于航空、航天、建筑等领域经常使用的非均质材料。它是由两种或两种以上不同性能、不同形态的组分材料通过复合工艺组合而成的一类有用的多相材料。非均质材料由基体相、增强相和界面相三者组成。基体相一般是连续的,增强相是分散的、被基体包容的那部分组分,界面相是增强相和基体相之间的一个交界面,这个微小区域在复合时发生了复杂的物理和化学变化,这些变化对非均质材料的宏观性能产生了影响。非均质材料是非均质的各向异性材料,具有比强度高、比模量大、耐化学腐蚀、电性能好、成型工艺性优越、可设计性好等一系列优点。近几十年来,非均质材料在航空、航天、建筑、化工、汽车和造船等领域应用越来越广泛,研究工作十分活跃。人类已经从合成材料时代进入非均质材料时代。由于非均质材料本身强烈的结构特征,其性能和损伤破坏规律取决于其组分材料性质,但同时也取决于其细观结构特征,这些特征包括增强相(例如纤维)的体积份数、分布规律、形状以及界面相的性质等。如何揭示非均质材料细观特征对其性能的影响,是一个很有意义的课题。

近年来,随着信息技术等应用需求的不断提高以及材料制备技术的迅猛发展,寻求价格低、速度快、尺寸小、可靠性高的器件,并实现器件的高度集成化已成为计算机工业的关键问题。随着线路中集成的器件越来越多,单个器件的尺度已到了纳米量级。在光电子、微电子工业等领域,各种新型非均质材料以及具有特殊功能的非均质光电子器件,如半导体异质结、量子点、CMOS 场效应晶体管、光子晶体等,成为近年来器件研制的一个前沿。当系统的几何尺寸与电子波长可以比拟时,量子效应将成为主导的效应。当晶体管的尺寸不断缩小而达到纳米量级时,将出现许多新的量子现象,如电子干涉、电磁振荡等。目前又发现了许多基于量子效应的新型电子和光电子器件,如共振隧道二极管和量子阱红外探测器等。因此,对低维量子限制系统(如半导体量子点、量子线、量子阱结构)的研究,成为近年来非均质材料研究的热点问题,同时也代表了现代凝聚态物理的发

展趋势. 对于非均质光电子器件, 相应的理论、模型和数值模拟, 例如维度如何影响材料的电子态密度, 材料的电、磁、光学性质, 低维度系统模型的求解等受到越来越多的关注与讨论. 对于这类具有纳米微结构的非均质材料的研究, 我们既要考虑其宏观特性, 更要重视其微观信息, 涉及电磁学、量子力学等多个物理学科, 这无疑是一个新颖而又有挑战性的课题.

在非均质光电子材料中, 有一类非常有前途的材料叫光子禁带材料, 它是基于光子晶体的特殊性质发展起来的. 所谓光子晶体指的是由不同折射率的介质周期性排列而成的人工微结构, 它是 1987 年由 S. John 和 E. Yablonovitch 分别独立提出的. 由于介电常数存在空间上的周期性, 引起空间折射率的周期变化, 当介电常数的变化足够大且变化周期与光波长相当时, 光波的色散关系出现带状结构, 此即光子能带结构 (Photonic Band structures). 这些被禁止的频率区间称为光子频率带隙 (Photonic Band Gap, PBG), 频率落在禁带中的光或电磁波是被严格禁止传播的. 特别需要指出的是, 介电常数周期性排列的方向并不等同于带隙出现的方向, 在一维光子晶体和二维光子晶体中, 也有可能出现全方位的三维带隙结构. 光子晶体和半导体在基本模型和研究思路上有许多相似之处, 原则上人们可以通过设计和制造光子晶体及其器件, 达到控制光子运动的目的. 光子晶体的出现, 使人们操纵和控制光子的梦想成为可能. 光子晶体完全依靠自身结构就可实现带阻滤波, 且结构比较简单, 在微波电路、微波天线等方面均具有广阔的应用前景. 国外在这一方面的研究已经取得了很多成果, 而国内的研究才刚刚起步, 所以从事光子晶体的研究具有重要的意义.

光子晶体满足的基本方程是 Maxwell 方程组. 光子晶体的理论研究始于 20 世纪 80 年代末期. 虽然 1987 年 Yablonovitch 和 John 就提出了光子晶体的概念, 但直到 1989 年, Yablonovitch 和 Gmitter 才首次在实验上证实三维光子能带结构的存在, 物理界才开始大举投入这方面的理论研究. 由于光子晶体有类似电子晶体的结构, 人们通常采用分析电子晶体的方法结合电磁理论来分析光子晶体的特性, 并取得了和实验一致的结果. 主要的方法有: 平面波展开法 (PWM)、传输矩阵法 (TMN)、有限差分域法 (FDTD) 和散射矩阵法 (SMM) 等. 对于单纯介电常数调制所组成的光子晶体, 因为光子没有相互作用, 从 Maxwell 方程组得到的光子晶体能带结构相当准确. 考虑到光子晶体的制备难度, 人们完全可以用理论计算方法代替比较复杂的制备探索, 实现先优化设计, 后制备的最佳材料设计理念. 因此, 光子晶体的理论计算受到了人们的重视. 对于光子晶体能带结构的计算与优化问题, 发展高效、实用的数值算法是一个非常意义的研究课题.

1.2 非均质材料特征值问题

非均质材料的特征值问题是研究非均质材料时经常遇到的一类问题. 从工程非均质材料、复相介质的一些经典力学问题到新型非均质光电子器件中的一些电磁学问题, 都常常需要讨论相关特征值问题的模型与算法.

1.2.1 非均质材料椭圆特征值问题

非均质材料周期结构声波和振动问题可转化为以下具有周期振荡间断系数椭圆特征值问题:

$$\begin{cases} \mathcal{L}_\varepsilon u^\varepsilon(x) \equiv -\frac{\partial}{\partial x_i} \left(a_{ij}(\frac{x}{\varepsilon}) \frac{\partial u^\varepsilon(x)}{\partial x_j} \right) + a_0(\frac{x}{\varepsilon}) u^\varepsilon(x) = \lambda^\varepsilon \rho(\frac{x}{\varepsilon}) u^\varepsilon(x) & \text{in } \Omega, \\ u^\varepsilon(x) = 0 & \text{on } \Gamma_0, \\ \sigma_\varepsilon(u^\varepsilon) = 0 & \text{on } \Gamma_1, \end{cases} \tag{1.1}$$

其中, $\Omega \subset R^n, n \geq 1$ 是有界区域, 边界为 $\partial\Omega = \overline{\Gamma}_0 \cup \overline{\Gamma}_1, \Gamma_0 \cap \Gamma_1 = \varnothing, \partial\Omega$ 是分片光滑的 Lipschitz 连续边界. 这里 $\varepsilon > 0$ 是周期性微结构的相对尺寸, 即 $0 < \varepsilon = \frac{l}{L} < 1$, 其中 l, L 分别是非均质材料结构周期单胞和整体区域的尺寸, 如图 1.1 (a) 和图 1.1 (b) 所示. 这里 $\rho(\frac{x}{\varepsilon})$ 是质量密度函数, $\sigma_\varepsilon(u^\varepsilon) \equiv \nu_i a_{ij}(\frac{x}{\varepsilon}) \frac{\partial u^\varepsilon(x)}{\partial x_j}$. 本书采用 Einstein 求和约定.

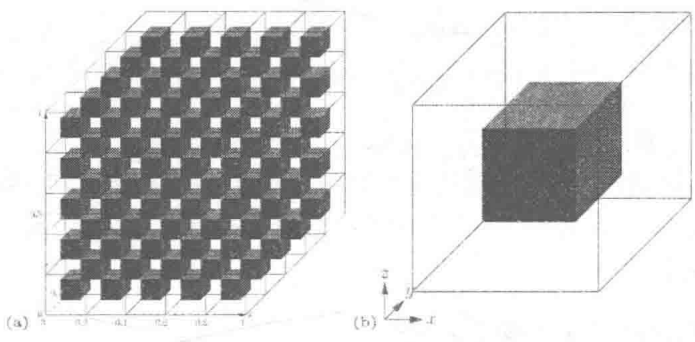


图 1.1 (a) 整体区域 Ω ; (b) 周期单胞 $Q = (0, 1)^2$.

由于非均质材料结构包含大量的夹杂或孔洞, 直接进行数值计算需要非常细的网格, 从而产生难以承受的计算规模和时间. 为此, 物理学家和力学家提出了各类平均化方法, 数学家发展了均匀化方法, 其核心思想是寻找等效参量. 如 Kesavan [100, 101] 很早就研究了椭圆特征值问题的均匀化方法并给出了收敛性结果. 大量数值模拟结果告诉我们, 当 ε 不是特别小的时候, 均匀化方法的数值精度远远无法满足实际工程计算的需要, 见文献 [24–26, 45, 195], 于是很多多尺度算法被提出. Oleinik 等 [95, 135] 讨论了具有快速振荡系数的一维 Sturm-Liouville 方程, 并给出了特征值和特征函数的完全渐近展开. 曹礼群和崔俊芝等 [24, 25] 对一般区域及孔洞区域的椭圆特征值问题给出了高阶渐近分析结果.

在已有的工作中, 关于特征函数的高阶多尺度校正, 无论是一维还是高维情形都有了很多成熟的理论结果和数值结果. 但关于特征值的高阶多尺度校正, 仅有一维情形. Oleinik 等 [95, 135] 给出了完全渐近展开式. 对于高维情形, 仍然没有一种完善的多尺度算法.

曹礼群和崔俊芝等^[24-26]在他们的工作中指出,对于一般区域和孔洞区域,当小参数 ε 较小时,均匀化问题的特征值和原始问题的特征值是十分接近的,即可以用均匀化问题的特征值作为原始问题特征值的近似值.

1979 年, Kesavan^[100, 101] 在他的工作中给出了一般区域特征值的高阶校正格式如下:

$$\lambda_k^{\varepsilon, s} = \sum_{l=0}^s \varepsilon^l \lambda_k^{(l)}, \quad s = 1, 2, k \geq 1, \quad (1.2)$$

其中

$$\begin{aligned} \lambda_k^{(1)} &= -\lambda_k^{(0)} \left(u_k^0(x), N_{\alpha_1}(\xi) \frac{\partial u_k^0(x)}{\partial x_{\alpha_1}} \right), \\ \lambda_k^{(2)} &= -\lambda_k^{(0)} \left(u_k^0(x), N_{\alpha_1 \alpha_2}(\xi) \frac{\partial^2 u_k^0(x)}{\partial x_{\alpha_1} \partial x_{\alpha_2}} \right) - \lambda_k^{(0)} \left(N_{\alpha_1}(\xi) \frac{\partial u_k^0(x)}{\partial x_{\alpha_1}}, N_{\alpha_1}(\xi) \frac{\partial u_k^0(x)}{\partial x_{\alpha_1}} \right) \\ &\quad - \lambda_k^{(1)} \left(u_k^0(x), N_{\alpha_1}(\xi) \frac{\partial u_k^0(x)}{\partial x_{\alpha_1}} \right). \end{aligned} \quad (1.3)$$

这里, $(\lambda_k^{(0)}, u_k^0(x)), k \geq 1$ 是均匀化特征值问题的第 k 个特征值和特征函数, $N_{\alpha_1}(\xi)$, $N_{\alpha_1 \alpha_2}(\xi)$ 是单胞函数, 内积 $(u, v) = \int_{\Omega} uv dx$. 注意, $N_{\alpha_1}(\xi)$, $N_{\alpha_1 \alpha_2}(\xi)$ 以及 $(\lambda_k^{(0)}, u_k^0(x)), k \geq 1$ 的定义分别见第 3 章式 (3.6)、(3.7)、(3.8).

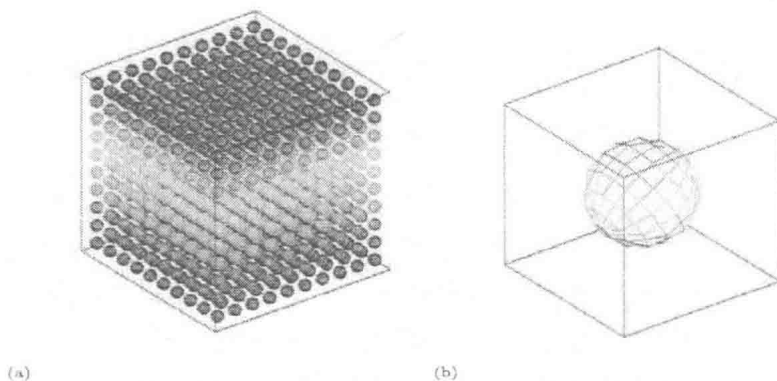
但大量数值结果显示, 当非均质材料参数相差较大, ε 不是很小时, 均匀化方法和上述高阶校正方法式 (3.2) 和式 (3.3) 难以满足计算精度的要求, 因此还需要寻找新的校正算法来提高数值精度.

1.2.2 非均质材料弹性波方程特征值问题

对于具有周期性微结构非均质材料的弹性波问题, 线弹性方程组可以表述为如下形式:

$$\begin{cases} \rho(\frac{x}{\varepsilon}) \frac{\partial^2 U_i^\varepsilon(x, t)}{\partial t^2} - \frac{\partial}{\partial x_p} \left(a_{ipkl}(\frac{x}{\varepsilon}) \frac{\partial U_k^\varepsilon(x, t)}{\partial x_l} \right) = \rho(\frac{x}{\varepsilon}) f_i(x, t), \\ i = 1, \dots, n, \quad \text{in } \Omega \\ U^\varepsilon(x, t) = g_0(x, t), \quad \text{on } \Gamma_u \\ \sigma_\varepsilon(U^\varepsilon) = g_1(x, t), \quad \text{on } \Gamma_\sigma \\ U^\varepsilon(x, 0) = \bar{U}_0(x), \quad \partial_t U^\varepsilon(x, 0) = \bar{U}_1(x), \end{cases} \quad (1.4)$$

其中, $\Omega \subset R^n, n \geq 1$ 是有界 Lipschitz 区域, 边界为 $\Gamma = \partial\Omega = \bar{\Gamma}_u \cup \bar{\Gamma}_\sigma, \Gamma_u \cap \Gamma_\sigma = \emptyset$. 这里 $\varepsilon > 0$ 是非均质材料的周期性微结构的相对尺寸, 即 $0 < \varepsilon = \frac{d}{D} < 1$, 其中 d, D 分别是周期单胞和整体区域的尺寸, 如图 1.2 所示. $U^\varepsilon(x, t) = (U_1^\varepsilon(x, t), \dots, U_n^\varepsilon(x, t))$ 是位移函数, $\sigma_\varepsilon(U^\varepsilon) = (\sigma_{1,\varepsilon}(U^\varepsilon), \dots, \sigma_{n,\varepsilon}(U^\varepsilon))$ 是 Γ_σ 上的表面应力, 其中 $\sigma_{i,\varepsilon}(U^\varepsilon) \equiv \nu_p a_{ipkl}(\frac{x}{\varepsilon}) \frac{\partial U_k^\varepsilon(x, t)}{\partial x_l}, i = 1, \dots, n$. $f(x, t) = (f_1(x, t), \dots, f_n(x, t))$ 是体积力, $g_0(x, t), g_1(x, t)$ 分别是边界 Γ_u 和 Γ_σ 上的位移函数和表面应力, $\rho(\frac{x}{\varepsilon})$ 是质量密度函数. $f(x, t),$

图 1.2 (a) 整体区域 Ω ; (b) 周期单胞 $Q = (0, 1)^3$.

$g_0(x, t)$, $g_1(x, t)$, $\bar{U}_0(x)$ 和 $\bar{U}_1(x)$ 均为已知函数. $A(\frac{x}{\varepsilon}) = (a_{ipkl}(\frac{x}{\varepsilon}))$ 是弹性系数矩阵. 特别地, 对均匀各向同性体, 有 $a_{ipkl} = \lambda \delta_{ip} \delta_{kl} + \mu \delta_{il} \delta_{pk} + \mu \delta_{ik} \delta_{pl}$, 其中 $\lambda > 0$, $\mu > 0$ 为 Lamé 常数, δ_{ij} 是 Kronecker 符号. 当 $\varepsilon > 0$ 充分小时, $A(\frac{x}{\varepsilon})$ 的元素是快速振荡函数.

由于方程式 (1.4) 是线性的, 将 $U^\varepsilon(x, t)$ 分解为 $U^\varepsilon(x, t) = V^\varepsilon(x, t) + W^\varepsilon(x, t)$, 其中 $V^\varepsilon(x, t)$, $W^\varepsilon(x, t)$ 分别是下列问题的解.

$$\left\{ \begin{array}{l} \rho(\frac{x}{\varepsilon}) \frac{\partial^2 V_i^\varepsilon(x, t)}{\partial t^2} - \frac{\partial}{\partial x_p} \left(a_{ipkl}(\frac{x}{\varepsilon}) \frac{\partial V_k^\varepsilon(x, t)}{\partial x_l} \right) = \rho(\frac{x}{\varepsilon}) f_i(x, t), \\ i = 1, \dots, n, \quad \text{in } \Omega \\ V^\varepsilon(x, t) = 0, \quad \text{on } \Gamma_u \\ \sigma_\varepsilon(V^\varepsilon) = 0, \quad \text{on } \Gamma_\sigma \\ V^\varepsilon(x, 0) = 0, \quad \partial_t V^\varepsilon(x, 0) = 0, \end{array} \right. \quad (1.5)$$

$$\left\{ \begin{array}{l} \rho(\frac{x}{\varepsilon}) \frac{\partial^2 W_i^\varepsilon(x, t)}{\partial t^2} - \frac{\partial}{\partial x_p} \left(a_{ipkl}(\frac{x}{\varepsilon}) \frac{\partial W_k^\varepsilon(x, t)}{\partial x_l} \right) = 0, \\ i = 1, \dots, n, \quad \text{in } \Omega \\ W^\varepsilon(x, t) = g_0(x, t), \quad \text{on } \Gamma_u \\ \sigma_\varepsilon(W^\varepsilon) = g_1(x, t), \quad \text{on } \Gamma_\sigma \\ W^\varepsilon(x, 0) = \bar{U}_0(x), \quad \partial_t W^\varepsilon(x, 0) = \bar{U}_1(x). \end{array} \right. \quad (1.6)$$

通过 Fourier 变换, 可以将式 (1.5) 或式 (1.6) 变为相应的特征值问题 [138]. 为方便

起见, 考虑如下问题:

$$\begin{cases} \mathcal{L}_{i,\varepsilon} u^\varepsilon \equiv -\frac{\partial}{\partial x_p} \left(a_{ipkl} \left(\frac{x}{\varepsilon} \right) \frac{\partial u_k^\varepsilon(x)}{\partial x_l} \right) = \lambda^\varepsilon \rho \left(\frac{x}{\varepsilon} \right) u_i^\varepsilon(x), & i = 1, \dots, n \text{ in } \Omega \\ u^\varepsilon(x) = 0, & \text{on } \Gamma_u \\ \sigma_\varepsilon(u^\varepsilon) = 0, & \text{on } \Gamma_\sigma, \end{cases} \quad (1.7)$$

其中, $\mathcal{L}_\varepsilon u^\varepsilon = (\mathcal{L}_{1,\varepsilon} u^\varepsilon, \dots, \mathcal{L}_{n,\varepsilon} u^\varepsilon)$. 本书采用 Einstein 求和约定.

由于非均质材料结构具有很强的非均质性, 包含大量的夹杂或者孔洞, 直接进行数值计算就需要非常细的网格, 从而产生无法承受的计算时间. 科学家和工程师们提出了许多均匀化的方法来克服这一困难. 例如工程应用中的 Voigt-Reuss 不等式、Hill 理论、Eshelby 方法、自洽方法、Hashin-Shtrikman 上下界方法、微分方法和 Mori-Tanaka 方法等. 感兴趣的读者可以参考文献 [125]. 同时在数学理论方面, 数学家们提出了均匀化理论, 见文献 [19, 110] 等. 对于椭圆特征值问题的均匀化理论研究有许多重要的文献. 例如 Kesavan^[100, 101] 很早就研究了这类特征值问题的均匀化方法并给出了收敛性结果; Vanninathan^[176] 得到了孔洞区域问题的均匀化结果. Allaire 和 Conca^[5] 利用 Bloch 分解技术给出了谱的渐近分析结果.

众所周知, 上述均匀化的方法仅仅是找到了非均质材料的等效弹性模量, 假如需要对材料进行强度分析, 还得计算位移场以及应力应变场. 大量的数值结果也表明当 ε 不是足够小的时候, 均匀化方法无法得到满意的数值精度, 见文献 [24–26]. 因此需要进行多尺度渐近分析, 并寻找相应的数值算法.

关于特征值问题的多尺度校正子以及相应的收敛性结果在许多文献中可以看到. 例如早期 Bensoussan, Lions 和 Papanicolaou^[19], Sanchez-Palencia^[150], Bakhvalov 和 Panasenko^[14], Jikov, Kozlov 和 Oleinik^[95] 等人的著作. Oleinik 等^[95, 135] 讨论了具有快速振荡系数的一维 Sturm-Liouville 方程, 并给出了特征值和特征函数的完全渐近展开. 在文献 [161] 中, Smyshlyaev 和 Cherednichenko 对无限延伸的周期弹性结构问题, 将变分法和类似的渐近技术相结合, 给出了高阶的校正子及均匀化方程并且得到了严格理论估计. Santosa, Moskow 和 Vogelius^[124, 151] 对二维非孔洞区域问题给出了均匀化特征值的一阶校正及相应的收敛性证明. Cao 和 Cui 等^[24, 25] 对一般区域及孔洞区域的椭圆特征值问题给出了高阶渐近分析结果. 关于一般区域上特征值问题式 (1.7) 的多尺度分析及算法的讨论在文献中还很少见到.

1.2.3 非均质材料 Steklov 特征值问题

在很多物理问题中, 例如移动容器中流体的动力学问题, 即流体晃动问题 (Sloshing Problems)^[32], 钟摆震动问题^[2], 具有动力学边界条件的抛物或者双曲方程通过变量分离法得到的特征值问题^[84] 等, 还会遇到以下这种边界上出现特征值参数的 Steklov 型

特征值问题:

$$\begin{cases} -\frac{\partial}{\partial x_i} \left(a_{ij}(x) \frac{\partial u}{\partial x_j} \right) + a_0(x)u = 0, & \text{in } \Omega, \\ u = 0, & \text{on } \Gamma_0, \\ \sigma(u) \equiv \nu_i a_{ij}(x) \frac{\partial u}{\partial x_j} = \lambda u, & \text{on } \Gamma_1, \end{cases} \quad (1.8)$$

关于 Steklov 型特征值问题比较早的研究结果可以参考 Courant 和 Hilbert 的工作 [52]. 后来 Osborn [136] 对紧算子情形发展了一套一般性的近似理论. Bramble 和 Osborn [21] 对二阶非自伴微分算子 Steklov 型特征值问题提出了 Galerkin 近似方法. Andreev 和 Todorov [7] 对二阶自伴椭圆微分算子给出了等参有限元分析. 常系数 Steklov 特征值问题很容易被转化为边界积分方程的特征值问题, 进而许多数学家选择边界元方法来处理问题. Han, Guan 和 He [79] 通过边界积分方程对 Steklov 特征值问题发展了边界元方法. Huang 和 Lü [89] 利用机械求积法得到了由 Steklov 特征值问题导出的边界积分方程的外推公式.

考虑非均质材料中的 Steklov 特征值问题:

$$\begin{cases} \mathcal{L}_\varepsilon u^\varepsilon = 0, & \text{in } \Omega, \\ u^\varepsilon = 0, & \text{on } \Gamma_0, \\ \sigma_\varepsilon(u^\varepsilon) = \lambda^\varepsilon u^\varepsilon, & \text{on } \Gamma_1, \end{cases} \quad (1.9)$$

其中, $\Omega \subset \mathbb{R}^n$, $n = 2, 3$ 是有界 Lipschitz 凸多角区域或者光滑区域, 且具有周期性微结构, 边界为 $\Gamma = \partial\Omega = \bar{\Gamma}_0 \cup \bar{\Gamma}_1$, $\Gamma_0 \cap \Gamma_1 = \emptyset$. 这里 $\mathcal{L}_\varepsilon$ 指的是如下具有快速振荡系数的二阶偏微分算子

$$\mathcal{L}_\varepsilon \phi \equiv -\frac{\partial}{\partial x_i} \left(a_{ij} \left(\frac{x}{\varepsilon} \right) \frac{\partial \phi}{\partial x_j} \right) + a_0 \left(\frac{x}{\varepsilon} \right) \phi,$$

另外

$$\sigma_\varepsilon(\phi) \equiv \nu_i a_{ij} \left(\frac{x}{\varepsilon} \right) \frac{\partial \phi}{\partial x_j},$$

其中, $\vec{\nu} = (\nu_1, \dots, \nu_n)$ 表示边界 Γ_1 的单位外法向, $\varepsilon > 0$ 是一个周期小参数.

同样, 由于非均质材料具有非均质的特点, 问题的求解也面临网格剖分过密, 计算量太大的困难. 知道均匀化方法可以克服这一困难. 许多数学家也已经对这一问题的均匀化理论进行了研究. Kesavan [100, 101] 很早就给出了一般非孔洞区域 Steklov 特征值问题的均匀化结果. Vanninathan [176] 对周期孔洞区域 Steklov 特征值问题进行了均匀化分析. 另外还有许多有关 Steklov 特征值问题边界均匀化理论的研究, 见文献 [23, 75, 78, 93, 112]. 知道均匀化方法研究的是 $\varepsilon \rightarrow 0$ 时解的渐近行为. 大量数值模拟结果告诉我们, 当 ε 不是特别小的时候, 均匀化方法的数值精度远远无法满足实际工程计算的需要, 见文献 [24-26, 45]. 因此需要对该问题进行多尺度分析, 并寻找精度更高, 更加有效的数值算法. 关于这种边界上出现特征值参数的 Steklov 型特征值问题, 相关的多尺度分析及数值结果还很少.

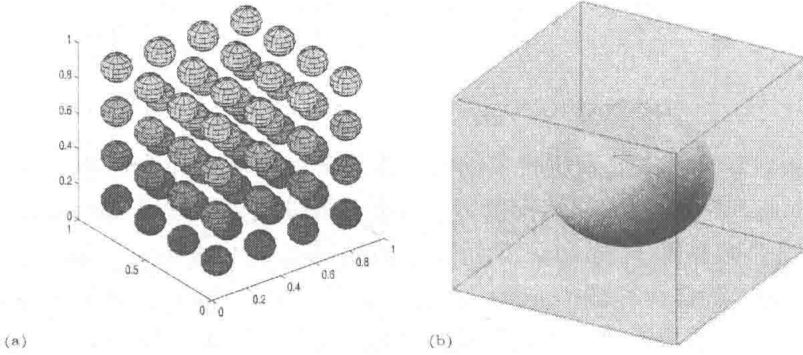


图 1.3 (a) 整体区域 Ω ; (b) 周期单胞 $Q = (0, 1)^3$.

1.2.4 非均质材料 Maxwell 方程组特征值问题

周期结构非均质材料线性 Maxwell 方程组的特征值问题可以表述为如下形式:

$$\begin{cases} \operatorname{curl}(A^\varepsilon(\mathbf{x})\operatorname{curl}\mathbf{u}^\varepsilon(\mathbf{x})) = \lambda^\varepsilon\eta^\varepsilon(\mathbf{x})\mathbf{u}^\varepsilon(\mathbf{x}), & \mathbf{x} \in \Omega, \\ \nabla \cdot (\eta^\varepsilon(\mathbf{x})\mathbf{u}^\varepsilon(\mathbf{x})) = 0, & \mathbf{x} \in \Omega, \\ \mathbf{u}^\varepsilon(\mathbf{x}) \times \mathbf{n} = 0, & \mathbf{x} \in \partial\Omega, \end{cases} \quad (1.10)$$

其中, $\Omega \subset \mathbb{R}^n$, $n \geq 1$ 是有界 Lipschitz 区域. 这里 $\varepsilon > 0$ 是非均质材料周期性微结构的相对尺寸, 即 $0 < \varepsilon = \frac{d}{D} < 1$, 其中 d, D 分别是周期单胞和整体区域的尺寸, 如图 6.1 所示. $\operatorname{curl} = \nabla \times$, $\nabla \cdot = \operatorname{div}$. $A^\varepsilon(\mathbf{x}) = (a_{ij}^\varepsilon(\frac{\mathbf{x}}{\varepsilon})) = (a_{ij}(\frac{\mathbf{x}}{\varepsilon}))$ 和 $\eta^\varepsilon(\mathbf{x}) = \eta(\frac{\mathbf{x}}{\varepsilon}) = (\eta_{ij}(\frac{\mathbf{x}}{\varepsilon}))$ 分别是材料的磁张量和介电张量.

1.2.5 非均质纳米材料 Schrödinger-Maxwell 系统

上述问题考虑的都是经典力学的模型, 当考虑新型的非均质光电子器件时, 器件本身或其微结构的尺寸已经达到纳米量级, 因此需要考虑量子效应的影响. 在研究这类非均质材料的电磁学问题时, 需要讨论的物理模型是一个多物理耦合模型. 考虑量子化粒子在外电磁场作用下的运动情况, 需要求解如下的 Schrödinger-Maxwell 系统 [18, 128]

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \frac{1}{2m} \left(-i\hbar \nabla - \frac{e}{c} \mathbf{A} \right)^2 \psi - e\phi\psi, \quad (1.11)$$

$$\mathbf{E} = -\frac{1}{c} \mathbf{A}_t - \nabla\phi, \quad \mathbf{H} = \nabla \times \mathbf{A}, \quad (1.12)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{E} = 4\pi\rho, \quad (1.13)$$

$$\nabla \times \mathbf{H} - \frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t} = \frac{4\pi}{c} \mathbf{j}. \quad (1.14)$$

其中, $\psi(x, t)$ 为波函数, m, e 分别为量子化粒子的质量和电量, $\hbar = h/2\pi$, h 为 Planck 常数. $E(x, t), H(x, t)$ 分别为外电场和外磁场. $\rho = \rho_0 - \rho_g$ 为电荷密度, ρ_0 是系统中掺杂外电荷的密度, $\rho_g = e|\psi|^2$ 是量子化粒子的电荷密度. $j = j_0 + j_g$, j_0 是系统所受的外部电流密度, $j_g = 2Im\bar{\psi}(\nabla - iA)\psi$ 是量子化粒子自身运动产生的电流密度.

对于稳恒电磁场 $\phi = \phi(x), A = A(x)$, 且假设磁场不存在的情形, 即 $A = 0$, 上述模型可以简化为如下 Schrödinger-Poisson 方程

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta u - e\phi u = \omega u \quad (1.15)$$

$$-\Delta\phi = 4\pi(\rho_0 - e|u|^2) \quad (1.16)$$

这是一个考虑稳恒外电场存在下 Schrödinger 算子的特征值问题, 其中 ω 对应量子态的能级. 对于这一非线性问题, Benci 等 [18] 1998 年运用变分方法在给定的边界条件下证明了方程解的存在性.

在半导体量子器件的数值模拟中, 经常需要求解如下形式的 Schrödinger-Poisson 系统 [201]

$$\left[-\frac{\hbar}{2m^*}\nabla^2 + V_c(r) - e\phi(r) + V_{xc}(r)\right]\psi(r, E) = E\psi(r, E) - \quad (1.17)$$

$$\nabla \cdot [\epsilon(r)\nabla\phi(r)] = e[N_D^+(r) - n(r)] \quad (1.18)$$

$$n(r) = 2 \int N(E)f(E)|\psi(r, E)|^2 dE \quad (1.19)$$

其中, 式 (1.17) 是有效质量近似下基于密度泛函理论的 Schrödinger 方程, 式 (1.18) 是描述器件宏观电位势分布的静电学 Poisson 方程, m^* 是载流子的有效质量, ϵ 是介电常数, $V_c(r)$ 为半导体材料的导带边势, $V_{xc}(r)$ 是密度泛函理论中的交换关联势, $n(r)$ 是空间位置 r 的载流子密度, $N(E)$ 是电子态密度, $f(E)$ 是费米分布函数, $N_D^+(r)$ 是杂质的分布函数. 通过 Schrödinger-Poisson 系统的求解, 可以得到半导体器件的内部电位势、电场强度以及载流子密度等物理量的分布. 而半导体器件的设计和应用正是涉及器件内部这些物理量的分布以及器件的终端特性. 器件模拟的目的, 就是在完成半导体器件结构尺寸和杂质分布的设计后, 对器件的性能做出定量预计, 借以减少研制费用并缩短设计周期. 因此如何有效地对非均质的半导体量子器件进行器件模拟逐步受到越来越多的研究与关注. Tan 等 [164] 讨论了求解这一问题的有限差分法 (FDM). Trellakis 等 [171] 将有限元方法应用到二维量子线情形的 Schrödinger-Poisson 系统求解, Harrison 等 [80] 研究了量子阱、量子线、量子点情形求解该问题的有限元方法 (FEM) 和有限差分法. Cheng 等 [41] 实现了求解这一问题的快速谱元方法 (SEM).