Hybridní řešení difúze a konvekce

1. Formulace problému

Příspěvek se zabývá numerickým řešením parciální diferenciální rovnice

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x}\left(d.\frac{\partial u}{\partial x} + v.u\right) + g,\quad t > 0, x \in (0, a) \qquad (1)$$

Neznámá funkce $u(x, t)$ nechť vyhovuje ještě okrajovým podmínkám 1. druhu

$$u(0, t) = U_0,\ u(a, t) = U_a$$

a počáteční podmínce

$$u(x, 0) = u_0(x).$$

Koeficienty d, v, g, rovnice (1) nechť jsou obecně funkcemi x, t, u, mohou mít i nespojitosti 1. druhu a nechť $d(x, t, u) \geqq \varepsilon > 0$. V důsledku závislosti koeficientů na funkci u je rovnice (1) obecně nelineární. V článku je prezentována numerická metoda řešení rovnice (1), která je vhodná pro hybridní výpočetní systém.

2. Algoritmus řešení

Při návrhu numerické metody řešení rovnice (1) budeme vycházet z několika následujících metod obecnějšího charakteru.

1. V poslední době je hybridní řešení parciálních diferenciálních rovnic evolučního typu prováděno metodou CSDT (semidiskretizace, při níž prostorová proměnná zůstává spojitá). Parciální funkci v čase $t = k.\Delta t$ budeme v dalším označovat, jak je to obvyklé, indexem k. Vzhledem k tomu, že diferenciální operátor na pravé straně rovnice (1) se při metodě CSDT nediskretizuje a tudíž zůstává neomezený, je nutné k numerické integraci podle času t použít implicitní formule.

2. Další z obecných myšlenek, kterou pro konstrukci numerické metody přijmeme, je tzv. metoda částečných kroků, známá z použití na číslicových počítačích. Filozofie této metody je ta, že operátor na pravé straně rovnice (1) rozložíme na součet n operátorů. Časový interval Δt rozdělíme na n dílů a v každém z nich necháme působit vždy jen jeden operátor, ale s n-násobnou intenzitou. Zde se nabízí rozdělit operátor na část difúzní (s koeficientem d) a část konvekční (s koeficientem v). Generační člen (koeficient g) můžeme připojit bez obtíží ke kterékoliv z nich, jelikož neobsahuje derivace podle proměnné x. Řešení rovnice s konvekčním členem je celkem běžné. Je známo, že vzniklou rovnici pro funkci u_k je nutno integrovat vždy ve směru kladné rychlosti v_k. Nabývá-li koeficient v_k obojího znaménka, je nutno rozdělit interval $(0, a)$ na takové části, aby v každé z nich koeficient v_k nezměnil znaménko. To je algoritmicky náročné. Metoda částečných kroků však nabízí jiné řešení. Rozložit rychlost v_k na součet dvou rychlostí, z nichž jedna je kladná a druhá záporná. Při realizaci na analogovém počítači však působí obtíže i to, je-li funkce v_k v nějakém bodě intervalu $(0, a)$ v absolutní hodnotě příliš malá. Proto budeme požadovat rozklad

$$v_k = v_k^+ + v_k^-;\ v_k^+ \geqq \delta > 0,\ v_k^- \leqq -\delta < 0,$$

kde δ je vhodně volené kladné číslo. Pro operátor na pravé straně rovnice (1) dostáváme tedy rozklad na 3 části: difúzní, konvekční s kladnou rychlostí a konvekční se zápornou rychlostí. Je-li rychlost jen jednoho znaménka, může eventuálně jeden konvekční člen odpadnout.

3. Protože rovnice (1) je obecně nelineární, vznikne použitím implicitní formule (nutnost jejího použití byla zdůrazněna v prvním odstavci) nelineární okrajová úloha pro funkci u_k, což je samozřejmě nevhodné. To se odstraní tím, že budeme uvažovat koeficienty d, v, g zpožděné, tj. v čase $(k - 1).\Delta t$. Je známo, že takové zpoždění může eventuálně způsobit nestabilitu výpočtu posloupnosti u_k, zvláště při výrazných závislostech koeficientů d, v, g na funkci u a při větších hodnotách Δt. Naproti tomu má ovšem tento postup řadu výhod. Jednak, to již bylo řečeno, je rovnice pro u_k lineární, dále je možno uvedený algoritmus bez obtíží aplikovat na soustavy rovnic typu (1), které mezi sebou mají vazbu prostřednictvím koeficientů d, v, g a konečně je možno postihnout i složité závislosti koeficientů rovnice (1) na funkci u, nejen na hodnotě funkce u v daném bodě. To vše se v praxi vyskytuje.

4. Přijetí všech myšlenek uvedených v předchozích odstavcích nás vede k následující formuli, složené z rovnic (2), (3), (4).

$$\frac{e - u_{k-1}}{\Delta t} = \frac{\partial}{\partial x}(v_{k-1}^+ . e) + g_{k-1} \qquad (2)$$

Tato rovnice představuje počáteční úlohu pro funkci e, integruje se v kladném směru osy x s počáteční podmínkou $e(0) = U_0$.

$$\frac{f - e}{\Delta t} = \frac{\partial}{\partial x}(v_{k-1}^- . f) \qquad (3)$$

Tato rovnice pro funkci f se integruje v záporném směru osy x s počáteční podmínkou $f(a) = e(a)$.

$$\frac{u_k - f}{\Delta t} = \frac{\partial}{\partial x}\left(d_{k-1} . \frac{\partial u_k}{\partial x}\right) \qquad (4)$$

Tato rovnice je okrajová úloha pro funkci u_k s podmínkami $u_k(0) = U_0$, $u_k(a) = U_a$.

Funkce e, f jsou pomocné a představují funkci u_{k-1} po změně za čas Δt vlivem členů v^+ a g, resp. $v^- + g$. Je třeba si uvědomit, že funkce e, f nemusí být spojité a ani nevyhovují okrajovým podmínkám, předepsaným pro rovnici (1). Tyto okrajové podmínky nelze splnit z toho důvodu, že úlohy (2) a (3) mají nižší řád než úloha (4). Funkce u_k je však již spojitá a vyhovuje předepsaným okrajovým podmínkám.

Porušování okrajových podmínek je věc nepřirozená. Dá se však předpokládat, že pro malé Δt bude i porušení okrajových podmínek ve funkcích e, f malé. Porušení okrajových podmínek funkce f je pro rovnici (4) analogické skokové změně okrajových podmínek. Vlivem nenulového Δt však zůstane difúzní tok v rovnici (4) na okrajích omezený, ovšem s jeho případným zvětšením je vhodné počítat při volbě jeho normy. Porušené okrajové podmínky je možno korigovat i v jiných fázích výpočtu, než jak je to uvedeno zde.

Dále je nepřirozené rozdělení difúzního a konvekčního toku. Funkce u_k z rovnice (4) má totiž absolutně spojitý difúzní tok, zatímco má být spojitý součet difúzního a konvekčního toku.

I přes tyto námitky je metoda částečných kroků kupodivu velmi dobře použitelná na hybridním výpočetním systému. Řešení rovnic (2) a (3) je běžné a je uvedeno např. v [2] nebo [4]. Rovněž řešení rovnice (4) lze najít v mnoha pramenech, např. v [1], [2], [3], [4].

3. Aplikační oblasti — závěrečné poznámky

Dominantními mechanismy pohybu nosičů v polovodiči jsou právě difúze spolu s konvekcí v elektrickém poli. Polovodič můžeme tedy popsat rovnicí typu (1), přesněji soustavou dvou takových rovnic pro elektrony a díry. Koeficienty rovnice (1) přitom složitě závisí na koncentracích nosičů v celém objemu polovodiče prostřednictvím jistého integrálního operátoru (inverzními k Laplaceovu operátoru).

Další aplikační oblastí mohou být výměníky tepla. Zde opět máme soustavu alespoň dvou rovnic typu (1). Rychlost v je pro nestlačitelnou tekutinu a pro konstantní průřez potrubí v každé rovnici prostorově konstantní, koeficienty difúze a přestupů tepla mohou záviset na teplotách, čímž se úloha stane nelineární. Okrajové podmínky zde bývají poněkud složitější, než jak jsme je pro jednoduchost uvažovali dříve. Pro obě tyto aplikační oblasti je použitelná formule uvedená ve čtvrtém odstavci, pro první z nich byla vyzkoušena na hybridním výpočetním systému ADT 7000 v práci [4]. V důsledku zpožděných koeficientů jsou vznikající soustavy okrajových nebo počátečních úloh lineární a navíc se rozpadají, takže je můžeme řešit pro každou rovnici zvlášť.

K předchozím metodám zbývá na závěr dodat toto: vhodnost metody CSDT pro hybridní výpočet byla zdůvodňována již v mnoha pracích, např. [2]. Zpoždění koeficientů (odst. 3) bylo vyzkoušeno na modelování různých polovodičových struktur na číslicových počítačích v [3] a [5] a je možné, že u jiného okruhu nelineárních úloh by se mohly vyskytnout obtíže s numerickou stabilitou posloupnosti u_k, resp. s příliš ostrým omezením na Δt. Nyní se budeme zabývat odst. 2., tj. metodou částečných kroků. Nepoužití této metody nás vede k formuli

$$\frac{u_k - u_{k-1}}{\Delta t} = \frac{\partial}{\partial x}\left(d_{k-1} \cdot \frac{\partial u_k}{\partial x} + v_{k-1} \cdot u_k\right) + g_{k-1}$$

Pro funkci u_k dostáváme okrajovou úlohu, která je v důsledku zpožděných koeficientů lineární. Lze ji tedy bez obtíží faktorizovat, což je zároveň přirozená metoda pro hybridní řešení okrajového problému. Tato metoda byla implementována na hybridním počítači ADT 7000, avšak ukázala se vhodná jen pro malý konvekční člen. Podrobnosti lze nalézt v práci [4], kde se též tato formule srovnává s formulí z odst. 4. Pro výraznější konvekční člen bylo vhodnější užít metodu částečných kroků.

Metodou částečných kroků lze rovněž úlohu difúze a konvekce řešit ve více dimenzích, v tomto případě se též mluví o metodě střídání směrů.

Literatura

[1] BRČÁK, J.: Hybridní simulace jednorozměrného šíření tepla. Automatizace 24 (1981), č. 4.

[2] KRČMÁŘ, J.: Hybridní metody řešení parabolické rovnice. Kandidátská dizertační práce, Praha, 1978.

[3] ROUBÍČEK, T.: Modelování polovodičových součástek na číslicovém počítači. Sborník stud. věd. prací k 9. SVK 1980, ČVUT FEL, Praha, 1980.

[4] ROUBÍČEK, T.: Hybridní řešení difúze a konvekce. Diplomová práce, kat. počítačů FEL, ČVUT, Praha, 1980.

[5] REISER, M.: Two-dimensional Numerical Solution of the Semiconductor Transport Equation for the FET Problem. Conference Digest Computational Physics, London, 1970.

Ing. Tomáš Roubíček