

[文章编号] 1001-246X(2004)04-0335-06

不同层显式格式及在微尺度热传导中的应用

唐 晨^{1,2}, 张桂敏¹, 闫海青¹, 李文润¹, 张 磊¹, 刘 铭¹

(1. 天津大学应用物理系, 天津 300072; 2. 中国科学院力学研究所非线性力学国家重点实验室, 北京 100080)

[摘 要] 基于指数拟合和牛顿插值多项式构造了用于数值计算偏微分方程的不同层显式格式, 应用不同层显式格式可获得不同精度的数值计算结果, 并将该算法应用于微结构热传导方程和薄膜强瞬态热传导方程中.

[关键词] 多层显式格式; 指数拟合; 微尺度热传导方程; 薄膜强瞬态热传导方程

[中图分类号] O241 [文献标识码] A

0 引言

近几年来自然科学和工程技术发展的一个重要趋势是朝微型化发展, 其中微电子机械系统尤其取得了巨大成功, 其影响遍及相当广泛的领域. 由于能量传输和交换的普遍性, 现在人们已经普遍地将注意力集中到一些小尺度和快速的热现象中. 构造用于数值计算微尺度热传导方程新的高精度方法, 对了解微电子材料的热物性、热行为有着重要的意义.

指数拟合法 (exponential fitting EF) 是近期提出的求解常微分方程方法, 这种方法放弃了传统的差分而改为积分, 所以是高精度的方法^[1-3]. 文[1]应用 Hermite 插值函数构造了 2 阶和 4 阶指数拟合算法, 但推导出的公式较为复杂. 显式指数拟合 Runge-Kutta 法由文[2]提出, 但显式指数拟合 Runge-Kutta 法的右函数计算次数要多于显式指数拟合多步法. 我们知道插值节点的个数不同, 即不同次数插值多项式构造不同阶次的算法. 当需要增加插值节点时牛顿插值多项式只需在原插值多项式的后面再添加新项即可, 所以本文应用牛顿插值多项式来重新构造具有不同阶次指数拟合算法, 并将该算法应用于微结构热传导方程和薄膜强瞬态热传导方程中, 取得了较好的效果.

1 基于指数拟合不同层显式格式的构造

以微尺度热传导方程为例, 说明新算法构造的原理, 微尺度热传导方程为^[4,5]

$$\frac{1}{2} \frac{\partial T}{\partial t} + \frac{3}{2} \frac{\partial^2 T}{\partial t^2} = \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + \frac{2}{2} \frac{\partial^3 T}{\partial t \partial x^2}, \quad 0 \leq x \leq 1, t > 0, \quad (1)$$

其解析解是 $T(x, t) = e^{-2t} \sin(x)$,

初边值条件是

$$\begin{aligned} T(x, 0) &= T_1, & \frac{\partial T}{\partial t}(x, 0) &= T_2, & 0 \leq x \leq 1, \\ T(0, t) &= T_3, & T(1, t) &= T_4, & t > 0. \end{aligned}$$

令

$$\frac{\partial T}{\partial t} = \dots, \quad (2)$$

方程(1)表示为

[收稿日期] 2003-04-10; [修回日期] 2003-09-05

[基金项目] 国家自然科学基金(编号:19902002); 上海交通大学振动、冲击、噪声国家重点实验室开放基金(编号:VSN-2003-03)和天津大学“985 教育振兴计划”基金资助项目

[作者简介] 唐晨(1963-), 女, 湖南慈利, 教授, 博士后, 从事激光应用与计算物理方面的研究.

$$\frac{\partial}{\partial t} + \frac{1}{q} = -\frac{\partial^2 T}{q \partial x^2} + \frac{T}{q} \frac{\partial^3 T}{\partial t \partial x^2}, \quad (3)$$

式中 q, T 是正的常数.

x 方向上采用差分,令 $x = x_i = i \cdot x$ ($i = 1, 2, \dots, m-1$), $T(x_i, t)$ 和 (x_i, t) 用 $T_i(t)$ 和 $i(t)$ 表示,方程(2)和(3)可表示为

$$\begin{cases} \frac{\partial T_i(t)}{\partial t} = i(t), \\ \frac{\partial i(t)}{\partial t} = -\frac{2}{q(x)^2} T_i(t) - \left(\frac{1}{q} + \frac{2T}{q(x)^2} \right) i(t) + \frac{1}{q(x)^2} [T_{i+1}(t) + T_{i-1}(t)] + \\ \frac{T}{q(x)^2} [i_{i+1}(t) + i_{i-1}(t)], \\ i = 1, 2, \dots, m-1, \end{cases} \quad (4)$$

将方程(4)表示为下面矩阵形式,

$$\dot{U} = HU + F \quad (5)$$

式中 $U = [T_1(t), \dots, T_i(t), \dots, T_{m-1}(t), i_1(t), \dots, i(t), \dots, i_{m-1}(t)]^T$.

$$H = \begin{bmatrix} 0 & \dots & 0 & 1 & \dots & 0 \\ \dots & \ddots & \dots & \dots & \ddots & \dots \\ 0 & \dots & 0 & 0 & \dots & 1 \\ -\frac{2}{q(x)^2} & \dots & 0 & \frac{1}{q} - \frac{2}{q(x)^2} & \dots & 0 \\ \dots & \ddots & \dots & \dots & \ddots & \dots \\ 0 & \dots & -\frac{2}{q(x)^2} & 0 & \dots & \frac{1}{q} - \frac{2}{q(x)^2} \end{bmatrix}, \quad (6)$$

$$F = \begin{bmatrix} 0 \\ \dots \\ 0 \\ \frac{1}{q(x)^2} [T_2(t) + T_0(t)] + \frac{T}{q(x)^2} [i_2(t) + i_0(t)] \\ \dots \\ \frac{1}{q(x)^2} [T_m(t) + T_{m-2}(t)] + \frac{T}{q(x)^2} [i_m(t) + i_{m-2}(t)] \end{bmatrix}. \quad (7)$$

引进积分因子 $\exp(-Ht)$, 方程(5)表示为

$$\frac{d}{dt} [\exp(-Ht) U(t)] = \exp(-Ht) \cdot F(t). \quad (8)$$

指数拟合算法在时间上放弃传统的差分, 而从 t^n 到 t^{n+1} 进行积分得到

$$U^{n+1} = \exp(Hh) \cdot U^n + \int_{t^n}^{t^{n+1}} \exp H(t^{n+1} - t) \cdot F(t) dt, \quad (9)$$

令 $t^{n+1} = t^n + h$, h 是时间步长, $t = t^n + \tau$, 方程(9)又可表示为

$$U^{n+1} = T \cdot U^n + \int_0^h \exp H(h - \tau) \cdot F(t^n + \tau) d\tau, \quad (10)$$

式中 $T = \exp(Hh)$.

对(10)式中 $F(t^n + \tau)$ 近似的方法不同, 构造出不同的指数拟合算法格式. 如果 $t^{n-1}, \dots, t^{n-1}, t^n$ 层的近似值 $U^{n-i}, \dots, U^{n-1}, U^n$ 已经求出, 由公式(7)得 F 在 $t^{n-i}, \dots, t^{n-1}, t^n$ 上的近似值 $F^{n-i}, \dots, F^{n-1}, F^n$. 用已求出的 $t^{n-i}, \dots, t^{n-1}, t^n$ 时刻的值 $F^{n-i}, \dots, F^{n-1}, F^n$ 来构造 $F(t^n + \tau)$ 的牛顿等距插值函数.

这里取 $i = 3$, 通过 $(t^{n-3}, F^{n-3}), (t^{n-2}, F^{n-2}), (t^{n-1}, F^{n-1}), (t^n, F^n)$ 的牛顿等距插值函数为

$$\begin{aligned}
 N(t^{n+1}) = & \left[1 + \frac{(-)}{h} + \frac{(-)(h+)}{2h^2} + \frac{(-)(h+)(2h+)}{6h^3} \right] F^n + \\
 & \left[\frac{(-)}{h} + \frac{(-)(h+)}{h^2} + \frac{(-)(h+)(2h+)}{2h^3} \right] F^{n-1} + \\
 & \left[\frac{(-)(h+)}{2h^2} + \frac{(-)(h+)(2h+)}{2h^3} \right] F^{n-2} + \left[\frac{(-)(h+)(2h+)}{6h^3} \right] F^{n-3},
 \end{aligned} \tag{11}$$

将上式近似代替(10)式的 $F(t^{n+1})$,通过下面的积分运算

$$\begin{aligned}
 \int_0^h \exp H(h-x) \cdot dx &= hb_0, \\
 \int_0^h \exp H(h-x) \cdot \frac{(-)}{h} dx &= hb_1, \\
 \int_0^h \exp H(h-x) \cdot \frac{(-)(h+)}{2h^2} dx &= hb_2, \\
 \int_0^h \exp H(h-x) \cdot \frac{(-)(h+)(2h+)}{6h^3} dx &= hb_3,
 \end{aligned}$$

式中

$$b_0 = -\frac{H^{-1}}{h} (I - T), \tag{12}$$

$$b_1 = -\frac{H^{-1}}{h} I - \left\{ \frac{H^{-1}}{h} \right\}^2 (I - T), \tag{13}$$

$$b_2 = -\frac{H^{-1}}{h} I - \left\{ \frac{H^{-1}}{h} \right\}^2 \left\{ \frac{3}{2} I - \frac{1}{2} T \right\} - \left\{ \frac{H^{-1}}{h} \right\}^3 (I - T), \tag{14}$$

$$b_3 = -\frac{H^{-1}}{h} I - \left\{ \frac{H^{-1}}{h} \right\}^2 \left\{ \frac{11}{6} I - \frac{1}{3} T \right\} - \left\{ \frac{H^{-1}}{h} \right\}^3 (2I - T) - \left\{ \frac{H^{-1}}{h} \right\}^4 (I - T). \tag{15}$$

I 是与 T 同阶的单位矩阵, b_0, b_1, b_2, b_3 不依赖于函数值 $F^{n-3}, F^{n-2}, F^{n-1}, F^n$ 和 $y^{n-3}, y^{n-2}, y^{n-1}, y^n$ 可预先求出. 由于 b_3 中后几项的值非常小,所以本文采用任意精度计算 b_0, b_1, b_2, b_3 .

式(10)表示为

$$U^{n+1} = T \cdot U^n + h(b_0 + b_1 + b_2 + b_3) F^n - h(b_1 + 2b_2 + 3b_3) F^{n-1} + h(b_2 + 3b_3) F^{n-2} - hb_3 F^{n-3}. \tag{16}$$

(16)式所表示的算法,其局部截断误差为 $O(h^{3+2} + x^2)$. 由式(16)可见,要计算第 $n+1$ 层的值 U^{n+1} ,要用到第 $n, n-1, n-2, n-3$ 层的值,前后联系到 5 个时间层次,所以式(16)所示格式为 5 层显式格式.

同理可得, $i=2$ 时 4 层显式格式

$$U^{n+1} = T \cdot U^n + h(b_0 + b_1 + b_2) F^n - h(b_1 + 2b_2) F^{n-1} + hb_2 F^{n-2}, \tag{17}$$

其局部截断误差为 $O(h^{2+2} + x^2)$.

$i=1$ 时 3 层显式格式

$$U^{n+1} = T \cdot U^n + h(b_0 + b_1) F^n - hb_1 F^{n-1}, \tag{18}$$

其局部截断误差为 $O(h^{1+2} + x^2)$.

$i=0$ 时 2 层显式格式

$$U^{n+1} = T \cdot U^n + hb_0 F^n, \tag{19}$$

其局部截断误差为 $O(h^{0+2} + x^2)$.

新算法的计算步骤:

将空间坐标离散化,将方程转化为公式(5)所示矩阵形式.

计算出指数矩阵 $T = \exp(-Hh)$,再由公式(12)~(15)采用任意精度求出系数 b_0, b_1, b_2, b_3 .

选择不同层显式格式,由公式(16)~(19)可得到数值解,多层显式格式要用到前几层的解,可采用 2 层显式格式获得.

2 新算法的应用

2.1 在微尺度热传导方程中的应用

采用 3 层显式格式数值计算方程(1),为了比较取与文[4]相同的参数, $x = 0.1$,时间步长 $h = 0.001$,计算了如下定义的误差值.

$$Error = \left(\sum_{j=1}^{N-1} x_j | (T_{exact})_j^n - T_j^n | \right)^{\frac{1}{2}}, \tag{20}$$

式中 $(T_{exact})_i^n$ 是 $x = i \cdot x, t = nh$ 时 T 的精确值, T_i^n 是由本文方法获得的 $x = i \cdot x, t = nh$ 时 T 的数值解. 表 1 给出不同时刻的 $Error$ 值. 图 1 是本文方法与文[4]采用 Crank-Nicholson 方法的比较.

表 1 方程(1)数值解在不同时刻的 $Error$ 值

Table 1 The Error of the numerical solution for Eq. (1) at various time

t	$Error$
0.1	5.109e - 004
0.2	1.012e - 003
0.3	1.014e - 003
0.4	7.863e - 004
0.5	5.339e - 004
0.6	3.346e - 004
0.7	1.989e - 004
0.8	1.140e - 004
0.9	6.366e - 005
1.0	3.486e - 005

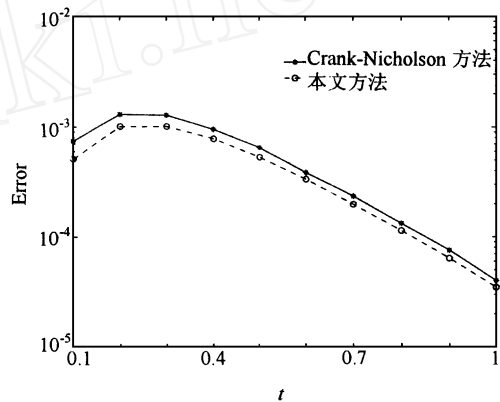


图 1 两种方法获得的方程(1)数值解的误差 $Error$

Fig. 1 Errors of the numerical solutions for Eq. (1) with the different methods

2.2 薄膜强瞬态热传导方程

薄膜强瞬态热传导方程是^[6,7]

$$R \frac{\partial^2 T}{\partial t^2} + \frac{\partial T}{\partial t} = \frac{\partial^2 T}{\partial x^2}, \tag{21}$$

初边值条件是 $T(x, 0) = T_0, \frac{\partial T}{\partial t}(x, 0) = 0, T(0, t) = T_1, T(L, t) = T_0$.

$\sqrt{\kappa/R}$ 是热量传播速度, 本文取文[7]中的参数, $\kappa = \frac{1}{3} \times 12288^2 \times 36.5 \times 10^{-12} \text{ m}^2 \cdot \text{s}^{-1}, R = 36.5 \times 10^{12} \text{ s}, T_0$

$= 300 \text{ K}$, 膜厚 $L = 1 \mu\text{m}$, 膜的一边突然增加温度 $T = 0.1 \text{ K}$. 对 T, t, x 进行无量纲处理, 令 $\theta = \frac{T - T_0}{T_1 - T_0}, \tau = \frac{t}{R}, \xi = \frac{x}{L}$, 方程(21)可表示为

$$\frac{\partial^2 \theta}{\partial \xi^2} + \frac{\partial \theta}{\partial \tau} = \frac{\partial^2 \theta}{\partial \tau^2}, \tag{22}$$

式中 $\xi = \frac{x}{L}$, 初边值条件是 $(\theta, 0) = 0, \frac{\partial \theta}{\partial \tau}(\theta, 0) = 0, (0, \tau) = 1, (1, \tau) = 0$, 方向上离散化, 将方程(22)

转换为一阶常微分方程组

$$\begin{cases} \frac{\partial \theta_i(\tau)}{\partial \tau} = f_i(\tau), \\ \frac{\partial f_i(\tau)}{\partial \tau} = -2k \theta_i(\tau) - f_i(\tau) + k[\theta_{i+1}(\tau) + \theta_{i-1}(\tau)], \end{cases} \tag{23}$$

式中 $k = \frac{1}{(\Delta \xi)^2}$, $\Delta \xi$ 是 ξ 方向上的步长, $i = 1, 2, \dots, m - 1, m = 1/\Delta \xi$, 将方程(23)进一步表示为

$$\dot{U} = HU + F,$$

式中

$$U = [u_1(\xi), \dots, u_i(\xi), \dots, u_{m-1}(\xi), f_1(\xi), \dots, f_i(\xi), \dots, f_{m-1}(\xi)]^T,$$

$$H = \begin{bmatrix} 0 & \dots & 0 & 1 & \dots & 0 \\ \dots & \ddots & \dots & \dots & \ddots & \dots \\ 0 & \dots & 0 & 0 & \dots & 1 \\ -2k & \dots & 0 & -1 & \dots & 0 \\ \dots & \ddots & \dots & \dots & \ddots & \dots \\ 0 & \dots & -2k & 0 & \dots & -1 \end{bmatrix}, \quad F = \begin{bmatrix} 0 \\ \dots \\ 0 \\ k(u_2(\xi) + u_0(\xi)) \\ \dots \\ k(u_m(\xi) + u_{m-2}(\xi)) \end{bmatrix},$$

$u_0(\xi)$ 和 $u_m(\xi)$ 可由边值条件给出. 本文分别选取 ξ 方向上步长 $\Delta\xi = 0.05$, 时间步长取 $h = 0.01$. 因为不知道它的解析解, 我们采用四五阶变步长 Runge-Kutta 法计算方程 (23), Runge-Kutta 法的相对误差和绝对误差都控制得十分小 (如 10^{-15}), 此时获得的值作为精确值. 分别采用 2 层到 5 层显式积分格式计算方程 (23), 表 2 给出了 $\Delta\xi = 0.1$ 时下式定义的误差 $Error1$. 图 2 是采用 5 层显式积分格式获得方程 (22) 稳定状态时无量纲温度分布.

表 2 无量纲温度在 $\Delta\xi = 0.1$ 的误差 $Error1$

Table 2 The Error of dimensionless temperature at $\Delta\xi = 0.1$

方法	Error1
2 层显式格式	1.083 5e - 004
3 层显式格式	1.808 3e - 005
4 层显式格式	4.467 2e - 007
5 层显式格式	4.891 4e - 008

$$Error1 = \frac{\left(\sum_{j=1}^{N-1} | (u_{exact})_j^n - u_j^n | \right)^{\frac{1}{2}}}{N - 1}. \quad (24)$$

3 结论

本文采用牛顿插值多项式, 构造了 3~5 阶指数拟合显式多步法, 当采用高次牛顿插值多项式时, 可构造更高阶次显式格式. 本文发挥了牛顿插值多项式在增加插值节点时只需在原插值多项式的后面再添加新项即可的优势, 可方便地构造不同阶次显式格式. 构造的算法是半离散方法, 同时第 $n+1$ 层的值利用了前面层的值, 是高效率的方法, 为数值计算微尺度热传导方程提供了有效手段. 将本文方法与其它算法结合可进一步构造出数值计算偏微分方程高性能方法, 这些研究工作将在其它论文中阐述.

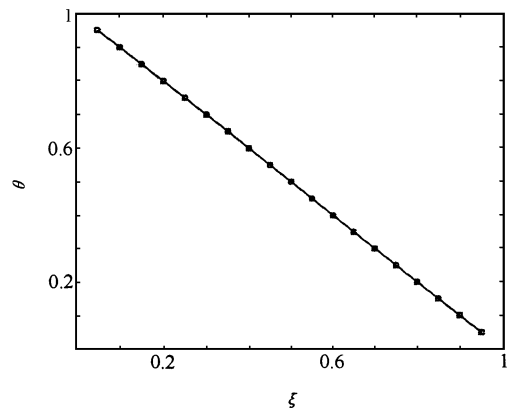


图 2 方程 (22) 稳定状态时无量纲温度分布
Fig. 2 Dimensionless temperature for Eq. (22) at steady state

[参 考 文 献]

[1] McCartin B J. Exponential fitting of the delayed recruitment/renewal equation [J]. Journal of Computational and Applied Mathematics, 2001, **136**: 343 - 356.

[2] Vanden Berghe G, Ixaru L Gr, De Meyer H. Frequency determination and step-length control for exponentially-fitted Runge-Kutta methods [J]. Journal of Computational and Applied Mathematics, 2001, **132**: 95 - 105.

[3] Jiang Lishang, Yue Xingye. Local Exponentially fitted finite element schemes for singularly perturbed convection-diffusion problems [J]. Journal of Computational and Applied Mathematic, 2001, **132**: 277 - 293.

[4] Dai W, Nassar R. A finite difference method for solving the heat transport equation at the microscale [J]. Numer Methods Partial Differential Equations, 1999, **15**: 698 - 708.

[5] Joseph D D. Heat waves [J]. Rev Modern Phys, 1989, **61**: 41 - 73.

[6] 姜任秋. 热传导、质扩散与动量传递中的瞬态冲击效应[M]. 北京: 科学技术出版社, 1997.

[7] Joshi A A, Majumdar A. Transient ballistic and diffusive photo heat transport in thin films [J]. J Appl Phy, 1993, **74**: 31 - 39.

The Various Layer Explicit Schemes and Their Applications for Heat Transport Equations at the Microscale

TANG Chen^{1,2}, ZHANG Gui-min¹, YAN Hai-qing¹, LI Werrun¹, ZHANG Hao¹, LIU Ming¹

(1. Dept of Applied Physics, Tianjing Univ, Tianjing 300072, China;

2. State Key Lab of Nonlinear Mechanics, Institute of Mechanics, Chinese Academy of Sciences, Beijing 100080, China)

Abstract: The various order explicit schemes based on exponential fitting and Newton interpolants are constructed for partial differential equations. The various precision can be achieved by employing the various order explicit schemes. When the schemes are applied to heat transport equations at the microscale and strong transient heat transport in thin film, the effects are admirable. Numerical calculations show the present method is high accurate and computationally efficient.

Key words: The various order explicit schemes; exponential fitting; heat transport equations at the microscale; strong transient heat transport in thin film