

# *Reuni3n de la plataforma COMPUTING*



Universitat Aut3noma de Barcelona



Instituci3n Catalana de Recerca i Estudis Avançats



Departamento de Matem3tica Aplicada. Universidad de Granada

PROYECTO: DGI-MEC MTM2005-08024

I P: JOS3 ANTONIO CARRILLO DE LA PLATA

*Barcelona, 14 de noviembre 2006*

# *¿Quiénes somos?*

Título: Propiedades cualitativas de ecuaciones en derivadas parciales cinéticas y de difusión

## Equipo en Barcelona:

- José Antonio Carrillo de la Plata (IP)
- Francesco Vecil

## Equipo en Granada:

- María J. Cáceres Granados
- Pedro González Rodelas
- José Miguel Mantas Ruiz

## Investigadores extranjeros:

- Armando Majorana
- Lorenzo Pareschi
- Giuseppe Toscani

# *Problemas estudiados*

## 1. ECUACIONES CINÉTICAS:

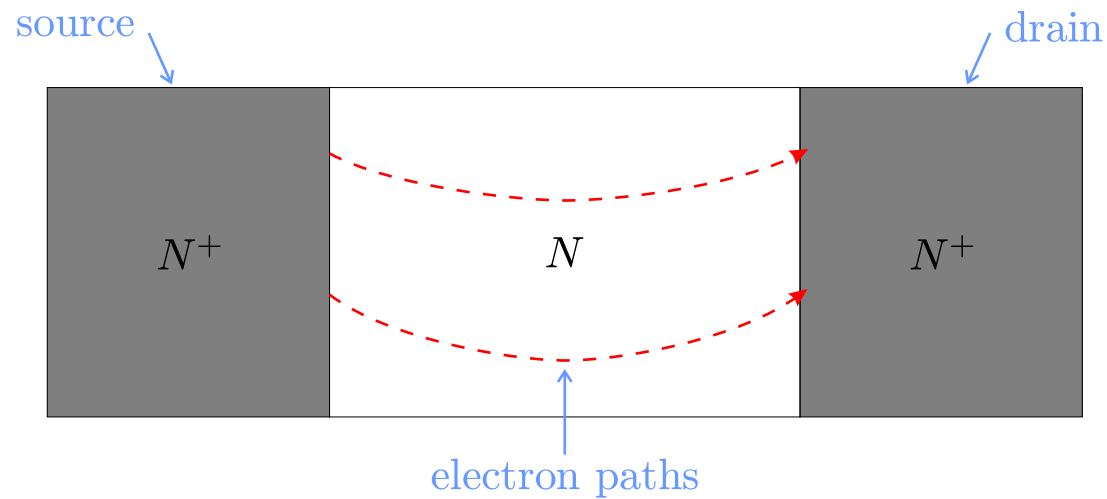
- MODELADO DE DISPOSITIVOS SEMICONDUCTORES
- MEDIOS GRANULARES

## 2. LÍMITES HIDRODINÁMICOS:

- MODELOS HIDRODINÁMICOS CLÁSICOS PARA SEMICONDUCTORES
- ECUACIONES DE DRIFT-DIFFUSION PARA SEMICONDUCTORES
- SISTEMA DE EULER COMPRESIBLE PARA MEDIOS GRANULARES
- ECUACIONES TIPO NAVIER-STOKES COMPRESIBLE PARA MEDIOS GRANULARES

# *Dispositivos semiconductores*

## Dispositivo $N^+ - N - N^+$



Sección de un dispositivo  $N^+ - N - N^+$

# *Dispositivos semiconductores*

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial f}{\partial t} + \frac{1}{\hbar} \nabla_{\mathbf{k}} \varepsilon \cdot \nabla_{\mathbf{x}} f - \frac{e}{\hbar} \mathbf{E} \cdot \nabla_{\mathbf{k}} f = Q(f) \\ \Delta V = \frac{e}{\epsilon_0} \left[ \rho(t, \mathbf{x}) - \underbrace{C(\mathbf{x})}_{\substack{\text{concentración de dopantes} \\ \downarrow}} \right], \quad \mathbf{E} = -\nabla_{\mathbf{x}} V \end{array} \right.$$

$$\rho(f)(t, \mathbf{x}) = \int_{\mathbb{R}^3} f(t, \mathbf{x}, \mathbf{k}) d\mathbf{k}, \quad \mathbf{x} \in \Omega, \quad t \geq 0$$

$$\varepsilon(\mathbf{k}) = \frac{1}{1 + \sqrt{1 + 2 \frac{\tilde{\alpha}}{m^*} \hbar^2 |\mathbf{k}|^2}} \frac{\hbar^2}{m^*} |\mathbf{k}|^2$$

# *Dispositivos semiconductores*

## Operador de colisión $Q(f)$

### Operador de relajación

- CARRILLO -GAMBA -SHU, , Phys. D, 146, pp. 289-306, 2001.  
[Determinista-hidrodinámicas/drift-diffusion](#)
- CARRILLO- GAMBA- MUSCATO- SHU , IMA Volume Series 135, pp. 75-84, 2003. [Determinista-MC](#)
- C-CARRILLO-DEGOND, ESAIM:M2NA, 36, pp. 1161-1176, 2002.  
[Validación del límite de Child-Langmuir](#)

# *Dispositivos semiconductores*

## Operador de colisión $Q(f)$

### Operador de relajación

- CARRILLO -GAMBA -SHU, , Phys. D, 146, pp. 289-306, 2001.  
[Determinista-hidrodinamicas/drift-diffusion](#)
- CARRILLO- GAMBA- MUSCATO- SHU , IMA Volume Series 135, pp. 75-84, 2003. [Determinista-MC](#)
- C-CARRILLO-DEGOND, ESAIM:M2NA, 36, pp. 1161-1176, 2002  
[Validación del límite de Child-Langmuir](#)

### Operador de colisión completo

- CARRILLO-GAMBA-MAJORANA-SHU, J. Comput. Phys. 184, pp. 498-525, 2003. [Silicio](#)
- C-CARRILLO-MAJORANA, [GaAs](#)

# *GaAs device*

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial f_{\Gamma}}{\partial t} + \frac{1}{\hbar} \nabla_{\mathbf{k}_{\Gamma}} \varepsilon_{\Gamma} \cdot \nabla_{\mathbf{x}} f_{\Gamma} - \frac{e}{\hbar} \mathbf{E} \cdot \nabla_{\mathbf{k}_{\Gamma}} f_{\Gamma} = Q_{\Gamma}(f_{\Gamma}, f_L) \\ \frac{\partial f_L}{\partial t} + \frac{1}{\hbar} \nabla_{\mathbf{k}_L} \varepsilon_L \cdot \nabla_{\mathbf{x}} f_L - \frac{e}{\hbar} \mathbf{E} \cdot \nabla_{\mathbf{k}_L} f_L = Q_L(f_L, f_{\Gamma}) \\ \Delta V = \frac{e}{\epsilon_0} [\rho(t, \mathbf{x}) - C(\mathbf{x})], \quad \mathbf{E} = -\nabla_{\mathbf{x}} V \\ \rho(t, \mathbf{x}) = Z_{L\Gamma} \rho_{\Gamma}(t, \mathbf{x}) + Z_{\Gamma L} \rho_L(t, \mathbf{x}) \end{array} \right.$$



# *GaAs device*

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial f_{\Gamma}}{\partial t} + \frac{1}{\hbar} \nabla_{\mathbf{k}_{\Gamma}} \varepsilon_{\Gamma} \cdot \nabla_{\mathbf{x}} f_{\Gamma} - \frac{e}{\hbar} \mathbf{E} \cdot \nabla_{\mathbf{k}_{\Gamma}} f_{\Gamma} = Q_{\Gamma}(f_{\Gamma}, f_L) \\ \frac{\partial f_L}{\partial t} + \frac{1}{\hbar} \nabla_{\mathbf{k}_L} \varepsilon_L \cdot \nabla_{\mathbf{x}} f_L - \frac{e}{\hbar} \mathbf{E} \cdot \nabla_{\mathbf{k}_L} f_L = Q_L(f_L, f_{\Gamma}) \\ \Delta V = \frac{e}{\epsilon_0} [\rho(t, \mathbf{x}) - C(\mathbf{x})], \quad \mathbf{E} = -\nabla_{\mathbf{x}} V \\ \rho(t, \mathbf{x}) = Z_{L\Gamma} \rho_{\Gamma}(t, \mathbf{x}) + Z_{\Gamma L} \rho_L(t, \mathbf{x}) \end{array} \right.$$

$$\left\{ \begin{array}{l} Q(f_A) = \underbrace{Q(f_A, f_A)}_{\text{intravalley}} + \underbrace{\sum_B Q(f_A, f_B)}_{\text{intervalley}} \\ Q_A^{(\gamma)}(f_A, f_A) = \int_{\mathbb{R}^3} \left[ S^{(\gamma)}(\mathbf{k}'_A, \mathbf{k}_A) f'_A - S^{(\gamma)}(\mathbf{k}_A, \mathbf{k}'_A) f_A \right] d\mathbf{k}'_A \\ Q_A^{(\gamma)}(f_A, f_B) = \int_{\mathbb{R}^3} \left[ S^{(\gamma)}(\mathbf{k}_B, \mathbf{k}_A) f_B - S^{(\gamma)}(\mathbf{k}_A, \mathbf{k}_B) f_A \right] d\mathbf{k}_B \end{array} \right.$$

# *Cambio de variable*

2D

$$\Phi(t, x, y, w, \mu, \phi) = s(w)f(t, x, y, w, \mu, \phi) ,$$

satisface

$$\frac{\partial \Phi}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x}(a_1 \Phi) + \frac{\partial}{\partial y}(a_2 \Phi) + \frac{\partial}{\partial w}(a_3 \Phi) + \frac{\partial}{\partial \mu}(a_4 \Phi) + \frac{\partial}{\partial \phi}(a_5 \Phi) = s(w)C(\Phi)$$

# *Cambio de variable*

2D

Términos de flujo:

$$a_1(w, \mu) = \frac{1}{t_*} \frac{\mu s(w)}{(1+2\alpha_\kappa w)^2}$$

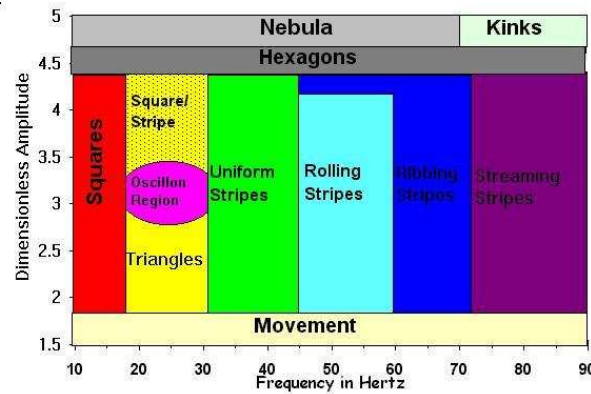
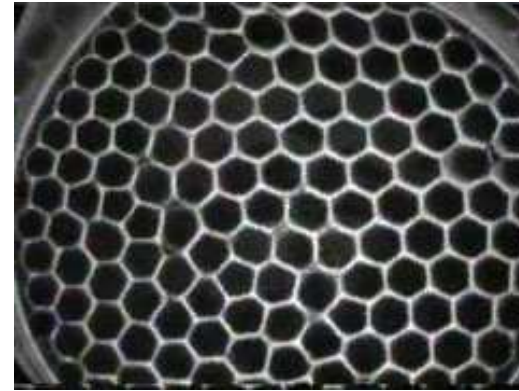
$$a_2(w, \mu, \phi) = \frac{1}{t_*} \frac{\sqrt{1-\mu^2} s(w) \cos \phi}{(1+2\alpha_\kappa w)^2}$$

$$a_3(t, x, y, w, \mu, \phi) = - \frac{2s(w) [E_x(t, x, y) \mu + E_y(t, x, y) \sqrt{1-\mu^2} \cos \phi]}{t_* (1+2\alpha_\kappa w)^2}$$

$$a_4(t, x, y, w, \mu, \phi) = - \sqrt{1-\mu^2} \frac{(1+2\alpha_\kappa w) [E_x(t, x, y) \sqrt{1-\mu^2} - E_y(t, x, y) \mu \cos \phi]}{t_* s(w)}$$

$$a_5(t, x, y, w, \mu, \phi) = \frac{E_y(t, x, y)}{t_*} \frac{\sin \phi}{\sqrt{1-\mu^2}} \frac{1+2\alpha_\kappa w}{s(w)},$$

# Medios granulares

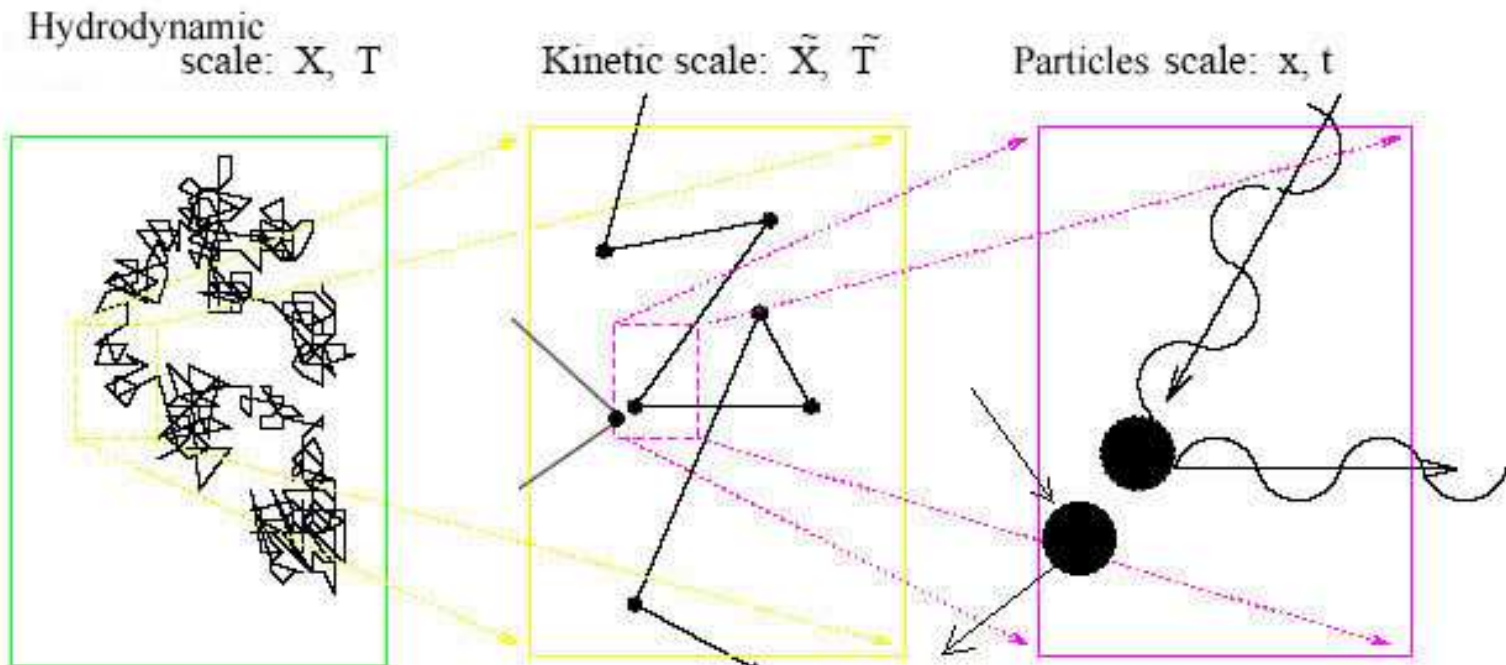


Formación de patrones.

*a*

<sup>a</sup>Bizon, C., Shattuck, M. D., Swift, J.B., Swinney, H.L., Phys. Rev. E (1999).

# *Descripción estadística*



- **Descripción de Partículas:** Imposible porque es un número muy grande
- **Descripción cinética:**  $f(t, x, v)$  densidad de partículas en el tiempo  $t$  en la posición  $x$  con velocidad  $v$
- **Descripción hidrodinámica:** Sistema para las cantidades macroscópicas: densidad, momento y temperatura

# *Descripción cinética*

BOLTZMANN EQUATION para partículas inelásticas:

$$\frac{\partial f}{\partial t} + (v \cdot \nabla_x) f = Q_e(f, f)$$

$$Q_e(f, f) = \frac{1}{4\pi} \int_{\mathbb{R}^3} \int_{S_+^2} ((v - w) \cdot n) \left[ \frac{1}{e^2} f(v^*) f(w^*) - f(v) f(w) \right] dndw.^a$$

---

<sup>a</sup>Jenkins, J. T., Richman, M. W., Arch. Rat. Mech. Anal. (1985).

# *Descripción hidrodinámica*

SISTEMA DE EULER COMPRESIBLE:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{U}) = 0$$

$$\frac{\partial \mathbf{U}}{\partial t} + (\mathbf{U} \cdot \nabla) \mathbf{U} + \frac{1}{\rho} \nabla p = 0$$

$$\frac{\partial \theta}{\partial t} + (\mathbf{U} \cdot \nabla) \theta + \frac{2}{3} \theta \nabla \cdot \mathbf{U} = -\Gamma \theta^{3/2}$$

con  $p = \rho \theta$ .

# *Descripción hidrodinámica*

SISTEMA DE NAVIER-STOKES COMPRESIBLE:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \operatorname{div}(\rho U) = 0$$

$$\frac{\partial(\rho U)}{\partial t} + \operatorname{div}[\rho(U \otimes U)] + \nabla p = \operatorname{div}(P) + \rho \mathcal{F}$$

$$\frac{\partial W}{\partial t} + \operatorname{div}[UW] = -\operatorname{div}(q) + P : E + U \cdot \operatorname{div}(P) - \Gamma + \rho U \mathcal{F},$$

con  $W = \frac{3}{2}\rho\theta + \frac{1}{2}\rho|U|^2$  y  $P$  el tensor presión.



# *Ley de conservación*

Los modelos estudiados:

- Semiconductores
- Medios granulares

Se escriben como una ley de conservación:

$$\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \operatorname{div}(\mathbf{f}(\mathbf{u})) = \mathbf{g}(\mathbf{u})$$

que se discretiza

$$\frac{d\mathbf{u}_i}{dt} = -\frac{\hat{\mathbf{f}}_{i+\frac{1}{2}} - \hat{\mathbf{f}}_{i-\frac{1}{2}}}{\Delta x} + \mathbf{g}(\mathbf{u}_i).$$

# *Métodos Numéricos*

- Esquema **WENO (Weighted Essentially Non-Oscillatory)** para aproximar por diferencias finitas los flujos hiperbólicos usando upwinding.
  - ◇ Interesantes para regiones con altos gradientes
  - ◇ Modelos hidrodinámicos para **medios granulares**: valores y vectores propios tienen que ser explícitamente calculados → **construcción de flujos más complicada** .

# *Métodos Numéricos*

- Evaluaciones directas (o aproximaciones) en los términos de colisión
  - ◇ **Semiconductores**: Diferencias entre Si y GaAs
  - ◇ **Medios granulares**: términos de viscosidad calculados mediante diferencias finitas centradas

# *Métodos Numéricos*

- Evolución con esquema explícito **Runge-Kutta de 3<sup>er</sup> orden** hasta que se estabilizan las cantidades hidrodinámicas.

# *Principales dificultades*

- Se necesita una **mallla uniforme y fina**. Aunque se está trabajando con ideas nuevas en esta dirección
- La condición **CFL para Runge-Kutta** en cada paso impone un paso muy pequeño
- Hay un **número grande de variables**. Ej. GaAs en semiconductores



**TIEMPO DE COMPUTACIÓN ALTO**

Para ahorrar tiempo de computación se trabaja en paralelo

# *Principales dificultades*

Se está trabajando en:

- Esquemas semi-Lagrangianos y de balance de flujos junto con técnicas de splitting para ecuaciones de transporte
- Eliminar la restricción de malla uniforme para WENO.

# *Ventajas*

- **No son ruidosos** (en comparación con MC)
- Permite obtener la **evolución** de la función de densidad y por tanto de todos los momentos
- Se pueden extender las técnicas a otras situaciones en las que haya una ley de conservación por medio: biología, astrofísica, ...

# *Relación con otros grupos*

- Departamento de electrónica y tecnología de los computadores (UGR)
- Irene Gamba (University of Texas at Austin)
- Armando Majorana (Università di Catania)
- Chi-Wang Shu (Brown University)
- Thorsten Pöschel (Charité, Institut für Biochemie, Berlín)
- Clara Salueña (Universitat Rovira i Virgili, Tarragona)
- Grupo de Carlos Parés de la Universidad de Málaga
- Grupo de Rosa Donat de la Universidad de Valencia