

ACTIVIDAD DEL GRUPO DE INVESTIGACIÓN CON  
PROYECTO: DGI-MEC MTM2005-08024  
(IP: JOSÉ A. CARRILLO DE LA PLATA)  
REFERENTE A LA PLATAFORMA COMPUTING

## 1. Problemas estudiados

Estudiamos simulaciones numéricas para ecuaciones cinéticas que aparecen en teoría de semiconductores o en medios granulares. En ambos casos partimos de la ecuación de Boltzmann; en el primero consideramos esta ecuación para semiconductores y el segundo para gases granulares con choques inelásticos. La ecuación de Boltzmann para semiconductores está acoplada con la ecuación de Poisson, para modelar el campo eléctrico originado por las propias partículas cargadas.

En teoría de semiconductores simulamos el sistema de Boltzmann-Poisson en distintos dispositivos, donde la diferencia entre unos y otros radica en el material empleado (diferentes fenómenos de scattering y por ello diferentes operadores de colisión) y en la geometría del dispositivo (diferentes condiciones frontera). Obtenemos la distribución de probabilidad de encontrar una partícula con una posición y una velocidad dadas en un instante de tiempo concreto. De este modo podemos simular la evolución de todos sus momentos. Los resultados son comparados con experimentos físicos y con los resultados obtenidos empleando Monte Carlo.

En el caso de medios granulares, en la ecuación de Boltzmann consideramos sus tres primeros momentos y obtenemos un sistema de Euler compresible y un sistema de Navier-Stokes compresible, que son los que simulamos numéricamente.

Ambos problemas (semiconductores y medios granulares) los resolvemos numéricamente escribiéndolos como una ley de conservación.

## 2. Métodos numéricos empleados

Los métodos empleados para nuestras simulaciones son aplicables a leyes de conservación. Como decíamos nuestros modelos son rescritos como leyes de conservación y una vez escritos de esta forma seguimos el siguiente esquema:

- Esquema WENO (Weighted Essentially Non-Oscillatory) para aproximar por diferencias finitas los flujos hiperbólicos usando upwinding. Esta forma de aproximar los flujos es muy interesante para regiones con altos gradientes, como ocurre por ejemplo, en semiconductores donde se tienen zonas muy dopadas y suponen saltos grandes de dopaje entre distintas regiones.

En el caso de los modelos hidrodinámicos para medios granulares, debido a que las leyes de conservación son no lineales, la construcción de los flujos es más complicada ya que los valores propios y los vectores propios (izquierda y derecha) tienen que ser explícitamente calculados.

- Evaluaciones directas (o aproximaciones) en los términos de colisión. En las simulaciones de modelos granulares los términos de viscosidad son calculados mediante diferencias finitas centradas.
- Evolución con esquema explícito Runge-Kutta de 3<sup>er</sup> orden hasta que se estabilizan las cantidades hidrodinámicas. Se considera una condición CFL en cada paso. (Podría haberse considerado un Runge-Kutta implícito o cualquier otro método, pero para nuestras simulaciones el método explícito empleado es efectivo).

En el caso de semiconductores la ecuación de Boltzmann está acoplada con la ecuación de Poisson que resolvemos con un usual método de diferencias finitas centradas.

Todo este esquema lo hemos implementado también en programación paralela.

Las principales ventajas del método son:

- No son ruidosos (en comparación con Monte Carlo).
- 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, ...

Además de estos métodos basados en un esquema WENO, el grupo ha trabajado en esquemas semi-Lagrangianos y de balance de flujos junto con técnicas de splitting para ecuaciones de transporte, que por ejemplo podrían ser aplicados a semiconductores. Estas nuevas técnicas eliminan la restrictiva condición CFL, que como citamos abajo, suponen un impedimento para la rapidez de computo del método.

### 3. Principales dificultades

Las principales dificultades encontradas son:

- Se necesita una malla 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. Por ejemplo, en el caso de semiconductores tenemos 6 variables y si se considera el caso de GaAs se tienen que simular dos ecuaciones de Boltzmann.

Todas estas dificultades se resumen diciendo que requiere un tiempo de computación alto, que hemos tratado de reducir empleando programación en paralelo.