非均质材料与结构特征值问题的多尺度模型与算法研究

张 磊
导师: 曹礼群 研究员

摘要

本论文研究的是非均质材料与结构特征值问题的多尺度模型与算法. 首先我们讨论了复合材料线弹性方程组特征值问题的多尺度计算, 提出了多尺度有限元算法, 大量数值算例验证了理论分析的正确性. 接着我们考虑复相介质 Steklov 特征值方程的多尺度分析与算法, 给出了边界层方程的定义, 对多尺度渐近解得到了 $\varepsilon^{1/2}$ 收敛阶估计; 同时对均匀化 Steklov 特征值问题得到了有限元超逼近估计. 然后针对非均质光电子器件 Schrödinger-Poisson 问题的多尺度模拟, 我们提出了基于多尺度渐近展开的数值算法, 数值模拟结果显示了我们算法的有效性; 同时通过第一性原理计算, 我们研究了微纳米尺度下器件材料的一些物理参数, 数值实验结果验证了弹性常数和介电常数的尺度不变性特征. 最后我们考虑光子晶体能带结构的计算与优化问题, 给出了三维光子晶体能带结构计算以及二维光子晶体能带结构优化的数值结果.

关键词: 特征值问题, 多尺度渐近展开, 非均质材料与结构, 弹性方程组, Steklov 特征值问题, Schrödinger-Poisson 问题, Maxwell 方程组, 光子晶体, 场效应晶体管, 量子点, 有限元方法, 第一性原理计算.