Poisson-Nernst-Planck 方程组的有限元方法研究及其应用

张倩茹

摘要

Poisson-Nernst-Planck (PNP) 方程组广泛应用于生物离子通道、半导体器件和纳米管仿真等领域中，本文主要研究了 PNP 方程组的有限元方法。

首先，我们提出了面向生物离子通道的基于约化模型的初始化方法，为 PNP 方程组的非线性解耦迭代提供初值。我们的初始化方法是基于可近似 PNP 方程组的拟平衡态约化模型设计的，数值实验表明我们的方法可以替代连续化方法为 PNP 方程组提供初值，有效地减少解耦迭代的步数，提高解耦迭代的收敛效率。对称离子浓度边界条件下，从 PNP 方程组的线性扰动模型得到的电流-电压曲线在低膜电压区域和直接求解PNP 方程组得到电流-电压曲线十分接近。

接下来，我们提出了求解半导体器件和纳米管仿真中的 PNP 方程组的平均化有限元方法。该方法用 Slotboom 变量将对流扩散方程转化为带有指数项系数的自伴二阶椭圆方程，之后引入四种平均化技巧处理指数项系数，相应的方法记为 A1-A4。方法 A1 在整个四面体单元上计算指数项系数的调和平均值；方法 A2-A4 在四面体单元的每条边上分别计算指数项系数的算术平均值、调和平均值和熵平均值。我们的方法能够有效地避免非物理数值振荡现象的出现，并且保证电流的守恒性。数值结果表明方法A4 在高偏压条件下能产生比方法 A1-A3 更为准确的结果，半导体器件和纳米管仿真实验也说明方法A4 能够很好地刻画 出它们各自丰富的物理特性。不仅如此，平均化有限元方法的实现过程不需要用到对偶 Voronoi 网格，且具有推导过程简单，刚度矩阵易于构造的优点。

最后，结合修正 Jordan-Kinderlehrer-Otto (JKO) 格式和 Scharfetter-Gummel (SG) 稳定化技巧，我们提出了可以保持解非负、能量耗散和总质量守恒的含时 NP 方程的有限元方法。不同于经典的 Galerkin 方法，JKO 格式将偏微分方程的数值求解问题转化为优化问题，加入 SG 稳定化技巧的有限元离散格式和修正 JKO 格式的 Fisher 信息正则化项可以保证离散后的优化问题的目标函数的凸性。我们证明了我们的有限元离散格式产生的数值解可以保持含时NP 方程所具有的物理性质：解非负、总质量守恒、能量耗散，数值实验结果也验证了这一结论。

关键字：有限元方法，约化模型，平均化技巧，PNP 方程组