

УДК 519.6

doi 10.26089/NumMet.v17r440

**РАЗРУШЕНИЕ РЕШЕНИЯ УРАВНЕНИЯ СТРАТИФИКАЦИИ ОБЪЕМНОГО ЗАРЯДА В ПОЛУПРОВОДНИКАХ: ЧИСЛЕННЫЙ АНАЛИЗ ПРИ СВЕДЕНИИ ИСХОДНОГО УРАВНЕНИЯ К ДИФФЕРЕНЦИАЛЬНО-АЛГЕБРАИЧЕСКОЙ СИСТЕМЕ**

Д. В. Лукьяненко<sup>1</sup>, А. А. Панин<sup>2</sup>

Показана эффективность одной из методик численной диагностики разрушения решения на примере решения нелинейного уравнения соболевского типа, описывающего стратификацию объемного заряда в полупроводниках. В процессе численного исследования этой задачи использовался подход, основанный на сведении исходного уравнения в частных производных к дифференциально-алгебраической системе с последующим решением этой системы с помощью одностадийной схемы Розенброка с комплексным коэффициентом. Численная диагностика разрушения точного решения указанного уравнения основывалась на методике вычисления апостериорной асимптотически точной оценки погрешности, получаемой при вычислении приближенного решения на последовательно сгущающихся сетках.

**Ключевые слова:** численная диагностика разрушения решения, метод Розенброка, дифференциальные уравнения в частных производных, дифференциально-алгебраические уравнения.

**1. Введение.** В последние 20–30 лет бурно развивается тематика режимов с обострениями, или “blow-up regimes” (также нередко пользуются термином “разрушение решения”). Несколько обобщая, можно сказать, что режим “blow-up” — это обращение нормы решения (в каком-либо функциональном пространстве) в бесконечность за конечное время. Если рассматривать функцию  $u(x, t)$  как функцию аргумента  $t$  со значениями в подходящем пространстве функций аргумента  $x$  и обозначать ее поэтому через  $u(x)(t)$ , то для времени  $T_{bl}$  разрушения решения можно записать:  $\lim_{t \rightarrow T_{bl}} \|u(x)(t)\| = +\infty$ .

Физически такие решения описывают взрывы, развитие неустойчивости и др. К настоящему времени существуют три основных группы методов аналитического исследования явлений “blow-up”. Это метод нелинейной емкости (пробных функций) С.И. Похожаева и Э. Митидиери [1] в различных вариантах, энергетический метод Х.А. Левина и его модификации [2–7] и метод автомодельных режимов, основанный на различных признаках сравнения и развитый в работах А.А. Самарского, В.А. Галактионова, С.П. Курдюмова и А.П. Михайлова [8] (см. также [9]). Однако не менее актуальна проблема численного исследования режимов с обострением. Она включает как минимум три задачи:

- 1) получить решение вблизи времени разрушения с приемлемой точностью;
- 2) имея полученные аналитически оценки времени  $T_{bl}$  разрушения решения, численно получить конкретную величину  $T_{bl}$  для конкретной модели;
- 3) установить сам факт разрушения решения, если это не удастся сделать аналитически.

Все эти задачи сложны, и им посвящена обширная литература. Так, нередко используются адаптивные подходы, связанные с уменьшением шага сетки (по времени и, возможно, по пространству) [10, 11] и с апостериорными оценками [11]. К ним примыкают методы, основанные на переходе от временной переменной к растянутой переменной [12], например к длине дуги графика. В некоторых случаях используется масштабирование решения по мере его роста [13].

Однако каждый из этих методов имеет ограниченную область применимости. Так, масштабирование допускают лишь определенные классы уравнений. Метод, примененный в работе [14], использует определенные свойства монотонности правой части и предполагает выбор некоторой вспомогательной функции, существование и нахождение которой составляет отдельную проблему. Последнее относится и к методу преобразования Сундмана [12], который наряду с методами замены переменной непосредственно применим лишь к обыкновенным дифференциальным уравнениям.

Метод, использованный в настоящей статье, основан на идеях апостериорной оценки точности. Его основные идеи изложены в работах [15–17]. Говоря коротко, на гладком решении эффективный порядок

<sup>1</sup> Московский государственный университет имени М. В. Ломоносова, физический факультет, Ленинские горы, 119992, Москва; доцент, e-mail: lukyanenko@physics.msu.ru

<sup>2</sup> Московский государственный университет имени М. В. Ломоносова, физический факультет, Ленинские горы, 119992, Москва; доцент, e-mail: a-panin@yandex.ru.

точности стремится к теоретическому для данной схемы — следовательно, резкое изменение эффективного порядка точности свидетельствует о разрушении решения. Данный метод кажется нам перспективным, поскольку он универсален (применим, пожалуй, к произвольному обыкновенному дифференциальному уравнению или уравнению в частных производных) и накладывает минимальные требования на априорную информацию. Достаточно знать верхнюю оценку величины  $T_{bl}$ . Однако даже не зная ее, как правило, можно найти приближенное значение  $T_{bl}$  и высказать гипотезу о разрушении решения, если разрушение не было доказано аналитически. Идейно к нему близок метод работы [18], диагностирующий разрушение по росту невязки численного решения при параметре сетки, стремящемся к нулю (для гладкого решения невязка должна убывать).

В данной работе мы применяем указанный метод диагностики разрушения решения к рассмотренной нами ранее в [19] начально-краевой задаче

$$\begin{cases} \frac{\partial}{\partial t} (u_{xx} - e^{\varepsilon u}) + u_{xx} = \nu (e^{\varepsilon u} - 1), & x \in (0, l), \quad t > 0, \\ u(x, 0) = u_{init}(x), \quad u_x(0, t) = \alpha, \quad u_x(l, t) = \beta, \end{cases} \quad (1)$$

описывающей стратификацию пространственного заряда в полупроводниках.

Отметим, что [19], как и настоящая статья, продолжает цикл работ авторов, начатый работой [20], где рассматривалось разрушение решения уравнения ионно-звуковых волн в плазме.

В [19] с помощью метода сжимающих отображений [21] была доказана локальная (по времени) разрешимость задачи (1), а также методом пробных функций [1] аналитически продемонстрировано, что при некоторых начальных данных имеет место разрушение решения. Точнее, доказаны следующие теоремы.

**Теорема 1.** *Для любых начальных данных  $u_0(x) \in C^2[0, l]$  (согласованных с граничными условиями) существует такое  $\varepsilon_0 > 0$ , что решение задачи (1) существует при всех  $\varepsilon \in (0, \varepsilon_0)$  по крайней мере локально по времени.*

**Теорема 2.** *Задача (1) не имеет глобального (по времени) решения, если граничные условия удовлетворяют неравенству  $\alpha - \beta - \nu l > 0$ . При этом время разрушения удовлетворяет оценке*

$$T_{bl} \leq T^* = \frac{1}{\nu} \ln \left( 1 + \frac{\nu J(0)}{\alpha - \beta - \nu l} \right), \quad J(0) = \int_0^l e^{\varepsilon u_{init}(x)} dx. \quad (2)$$

Кроме того, в работе [19] были продемонстрированы возможности численной диагностики разрушения решения указанным выше методом. Однако в [19] в связи с теоретической направленностью работы остался открытым вопрос об эффективности примененных численных схем для численной диагностики разрушения решения по времени и пространству. В частности, для решения уравнения (1) непосредственно применялся жесткий метод прямых (SMOL — Stiff Method Of Lines), который позволял свести исходное уравнение в частных производных к неявной системе обыкновенных дифференциальных уравнений (к сожалению, не разрешенной относительно производных). В этом случае применяемая для численного решения полученной системы обыкновенных дифференциальных уравнений схема Розенброка с комплексным коэффициентом CROS1 давала всего лишь первый порядок точности по времени, хотя в случае явной системы обыкновенных дифференциальных уравнений (либо дифференциально-алгебраической системы) она бы давала второй порядок точности по временной переменной. В [19] было сделано замечание о том, что возможно сведение исходного дифференциального уравнения из (1) к дифференциально-алгебраической системе, для которой не происходило бы потери точности при применении схемы Розенброка с комплексным коэффициентом. В настоящей статье мы подробно рассматриваем соответствующий вопрос.

**2. Сведение исходного уравнения к дифференциально-алгебраической системе и ее приближенный метод решения.** В этом и следующем разделах мы детально обсудим методы, которые помогут нам численно диагностировать факт разрушения решения и уточнить его локализацию как во времени, так и в пространстве. Напомним, что априорная информация (2), полученная аналитически в теоретической части работы [19], дает нам верхнюю оценку  $T^*$  времени  $T_{bl}$  разрушения решения, однако не дает детального описания процесса разрушения. Численный же подход, использующий аналитически полученную априорную информацию, может помочь детализировать процесс разрушения и уточнить момент разрушения.

Для начала сведем исходное уравнение (1) к системе такого вида, который необходим для применения эффективных численных методов, которые будут описаны ниже. Для начала мы выполним замену

$v = u_{xx} - e^{\varepsilon u}$ , в результате которой задача (1) примет следующий вид:

$$\begin{cases} 0 = u_{xx} - e^{\varepsilon u} - v, & x \in (0, l), \quad t \in (0, T^*], \\ \frac{\partial v}{\partial t} = (\nu - 1)e^{\varepsilon u} - v - \nu, \\ u(x, 0) = u_{\text{init}}(x), \quad u_x(0, t) = \alpha, \quad u_x(l, t) = \beta, \\ v(x, 0) = u_{\text{init}}(x)_{xx} - e^{\varepsilon u_{\text{init}}(x)}. \end{cases} \quad (3)$$

Мы ставим задачу численного нахождения решения до момента времени  $T^*$  включительно, хотя знаем, что решение в этот момент времени не существует и, более того, даже может разрушиться ранее. Это допущение связано с тем, что мы хотим диагностировать разрушение решения численно, а значит, нам необходимо найти *численное* решение вплоть до этого момента времени включительно.

С целью численного решения дифференциально-алгебраической системы (3) мы применяем жесткий метод прямых (SMOL) [22, 23] для того, чтобы свести исходную дифференциально-алгебраическую систему уравнений с одним уравнением в частных производных к дифференциально-алгебраической системе, которая содержит в дифференциальной части обыкновенные дифференциальные уравнения и которая может быть эффективно решена с помощью одностадийной схемы Розенброка с комплексным коэффициентом CROS1 [24].

Сначала мы введем равномерную сетку  $X_N$  только по пространственной переменной  $x$  с шагом  $h = (l - 0)/N$ , содержащую  $N + 1$  узлов (что соответствует  $N$  интервалам):  $X_N = \{x_n, 0 \leq n \leq N : x_n = 0 + nh\}$ . Таким образом, после конечноразностной аппроксимации пространственных производных со вторым порядком точности в (3) мы получим следующую систему обыкновенных дифференциальных уравнений, из которой требуется определить  $N - 1$  неизвестных функций  $u_n \equiv u_n(t) \equiv u(x_n, t)$  ( $n = \overline{1, N - 1}$ ,  $u_0$  и  $u_N$  определяются из соотношений, заданных граничными условиями) и  $N - 1$  вспомогательных функций  $v_n \equiv v_n(t) \equiv v(x_n, t)$  ( $n = \overline{1, N - 1}$ ,  $v_0$  и  $v_N$  не входят в систему):

$$\begin{cases} 0 = \frac{u_{n+1} - 2u_n + u_{n-1}}{h^2} - e^{\varepsilon u_n} - v_n, \\ \frac{dv_n}{dt} = (\nu - 1)e^{\varepsilon u_n} - v_n - \nu, \\ u_n(0) = u_{\text{init}}(x_n), \quad u_0 = \frac{4}{3}u_1 - \frac{1}{3}u_2 - \frac{2}{3}h\alpha, \quad u_N = \frac{4}{3}u_{N-1} - \frac{1}{3}u_{N-2} + \frac{2}{3}h\beta, \\ v_n(0) = \frac{u_{\text{init}}(x_{n+1}) - 2u_{\text{init}}(x_n) + u_{\text{init}}(x_{n-1})}{h^2} - e^{\varepsilon u_{\text{init}}(x_n)}. \end{cases}$$

Эта система может быть переписана в виде

$$\begin{cases} M \frac{d\mathbf{u}}{dt} = \mathbf{f}(\mathbf{u}), \\ \mathbf{u}(0) = \mathbf{u}_{\text{init}}, \end{cases} \quad \text{где} \quad \begin{cases} \mathbf{u} &= (u_1, u_2, u_3, \dots, u_{N-1}, v_1, v_2, v_3, \dots, v_{N-1})^T, \\ \mathbf{f} &= (f_1, f_2, f_3, \dots, f_{2N-2})^T, \\ \mathbf{u}_{\text{init}} &= (u_1(0), u_2(0), u_3(0), \dots, u_{N-1}(0), v_1(0), v_2(0), v_3(0), \dots, v_{N-1}(0))^T. \end{cases} \quad (4)$$

Вектор-функция  $\mathbf{f}$  имеет следующую структуру:

$$f_n = \begin{cases} \frac{1}{h^2} \left( u_2 - 2u_1 + \left( \frac{4}{3}u_1 - \frac{1}{3}u_2 - \frac{2}{3}h\alpha \right) \right) - e^{\varepsilon u_1} - v_1, & \text{если } n = 1, \\ \frac{1}{h^2} (u_{n+1} - 2u_n + u_{n-1}) - e^{\varepsilon u_n} - v_n, & \text{если } n = \overline{2, N - 2}, \\ \frac{1}{h^2} \left( \left( \frac{4}{3}u_{N-1} - \frac{1}{3}u_{N-2} + \frac{2}{3}h\beta \right) - 2u_{N-1} + u_{N-2} \right) - e^{\varepsilon u_{N-1}} - v_{N-1}, & \text{если } n = N - 1, \\ (\nu - 1)e^{\varepsilon u_{n-N+1}} - v_{n-N+1} - \nu, & \text{если } n = \overline{N, 2N - 2}, \end{cases}$$

а матричная функция  $M$  имеет вид  $M_{n,n} = \begin{cases} 0, & \text{если } n = \overline{1, N - 1}, \\ 1, & \text{если } n = \overline{N, 2N - 2}; \end{cases}$  остальные элементы матрицы  $M$  равны нулю.

Для численного решения системы (4) мы будем использовать схему Розенброка с комплексным коэффициентом (CROS1), которая является наилучшим выбором для решения задач такого рода по причине порядка точности этой схемы  $O(\tau^2)$ , ее монотонности и устойчивости в  $L_2$  [25].

Еще раз отметим, что в отличие от работы [19] мы получили систему, для которой схема CROS1 будет давать второй порядок точности по времени (а не первый, как в [19]). Однако наша система имеет вырожденную матрицу  $M$ .

Для того чтобы применить схему CROS1, мы введем равномерную сетку (также можно использовать и квазиравномерную сетку [16] без каких-либо изменений в алгоритме)  $T_M$  по  $t$ , которая имеет  $M + 1$  узлов (т.е.  $M$  интервалов):  $T_M = \{t_m, 0 \leq m \leq M : 0 = t_0 < t_1 < t_2 < \dots < t_{M-1} < t_M = T^*\}$ .

После этого мы можем применить схему CROS1 для решения системы (4):

$$\mathbf{u}(t_{m+1}) = \mathbf{u}(t_m) + (t_{m+1} - t_m) \operatorname{Re} \mathbf{w}, \quad (5)$$

где  $\mathbf{w}$  является решением линейной системы

$$\left[ M - \frac{1+i}{2} (t_{m+1} - t_m) \mathbf{f}_u(\mathbf{u}(t_m)) \right] \mathbf{w} = \mathbf{f}(\mathbf{u}(t_m)).$$

Здесь  $\mathbf{f}_u$  — якобиан, который для рассматриваемой системы имеет следующую структуру:

$$\begin{aligned} (f_u)_{n,n-1} &= \begin{cases} \frac{1}{h^2}, & \text{если } n = \overline{2, N-2}, \\ \frac{1}{h^2} \left(1 - \frac{1}{3}\right), & \text{если } n = N-1, \end{cases} \\ (f_u)_{n,n} &= \begin{cases} \frac{1}{h^2} \left(-2 + \frac{4}{3}\right) - \varepsilon e^{\varepsilon u_1}, & \text{если } n = 1, \\ \frac{1}{h^2} (-2) - \varepsilon e^{\varepsilon u_n}, & \text{если } n = \overline{2, N-2}, \\ \frac{1}{h^2} \left(\frac{4}{3} - 2\right) - \varepsilon e^{\varepsilon u_{N-1}}, & \text{если } n = N-1, \\ -1, & \text{если } n = \overline{N, 2N-2}, \end{cases} \\ (f_u)_{n,n+1} &= \begin{cases} \frac{1}{h^2} \left(1 - \frac{1}{3}\right), & \text{если } n = 1, \\ \frac{1}{h^2}, & \text{если } n = \overline{2, N-2}, \end{cases} \\ (f_u)_{n,n-N+1} &= (\nu - 1) \varepsilon e^{\varepsilon u_{n-N+1}}, \quad \text{если } n = \overline{N, 2N-2}, \\ (f_u)_{n-N+1,n} &= -1, \quad \text{если } n = \overline{N, 2N-2}. \end{aligned}$$

Другие компоненты матрицы  $\mathbf{f}_u$  в случае рассматриваемого уравнения равны нулю.

Таким образом, матрица системы (5) состоит из четырех блоков размерности  $(N-1) \times (N-1)$  (структура матрицы представлена на рис. 1). Этот факт дает возможность применить алгоритм решения линейной системы, который найдет решение системы (5) за  $O(N)$  операций.

**3. Численная диагностика разрушения решения.** При численных расчетах важно не только получить приближенный численный результат, но также и выполнить некоторую оценку его точности. Метод вычисления апостериорной асимптотически точной оценки погрешности [15] позволяет это сделать. Однако этот метод также может помочь и диагностировать факт разрушения точного решения [17]. Основные формулы и утверждения этого раздела настоящей статьи впервые были представлены в работах [15–17].

Мы аппроксимировали все пространственные производные в (3) с точностью  $O(h^2)$ , а при численном интегрировании системы (4) используем схему CROS1, которая имеет точность  $O(\tau^2)$ . Поэтому построенный метод решения системы (3) имеет точность  $O(\tau^2 + h^2)$ .

Для начала введем базовую сетку  $X_N \times T_M: \{x_n, t_m\}, 0 \leq n \leq N, 0 \leq m \leq M$ . После этого произведем последовательное сгущение сеток, начиная с базовой, и вычислим решения  $u(x, t)$  на полученных сетках. В связи с тем, что теоретический порядок точности по времени и по пространству равен  $p = 2$ , мы выполним

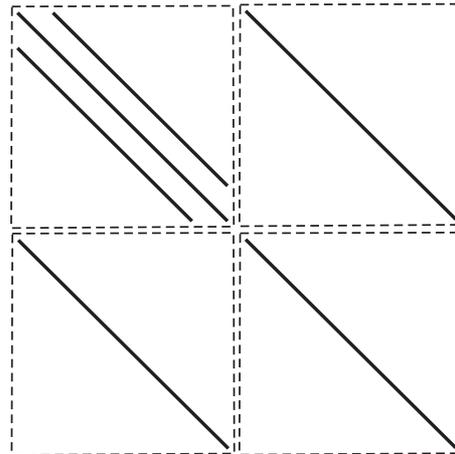


Рис. 1. Структура матрицы системы (5)

последовательное сгущение сетки по времени в целое число раз  $r_t$  и сгущение пространственной сетки в целое число раз  $r_x$  так, чтобы выполнялось условие  $r_t^p = r_x^p$  (подробности см. в [16]), т.е. в нашем случае  $r_t^2 = r_x^2$ . Наиболее удобно для счета выбрать  $r_t = r_x = 2$  (отметим, что в отличие от  $r_t = 4$  в [19] данный набор параметров будет приводить к более эффективному счету за счет гораздо меньшего числа шагов по временной переменной, необходимых для счета). В этом случае каждая последующая сетка  $X_{r_x^{s-1}N} \times T_{r_t^{s-1}M}$  ( $s$  — номер сетки) имеет узлы, совпадающие с узлами базовой сетки  $(x_n, t_m)$ . В этих узлах  $(x, t)$  мы можем получить апостериорную асимптотически точную оценку погрешности [16, 17]

$$\Delta^{(r_x^s N, r_t^s M)}(x, t) = \frac{u^{(r_x^s N, r_t^s M)}(x, t) - u^{(r_x^{s-1} N, r_t^{s-1} M)}(x, t)}{r_t^2 - 1} + o(\tau^2 + h^2)$$

и оценить эффективный порядок точности [16, 17]

$$p_s^{\text{eff}}(x, t) = \log_{r_t} \frac{u^{(r_x^{s-1} N, r_t^{s-1} M)}(x, t) - u^{(r_x^{s-2} N, r_t^{s-2} M)}(x, t)}{u^{(r_x^s N, r_t^s M)}(x, t) - u^{(r_x^{s-1} N, r_t^{s-1} M)}(x, t)}.$$

В точках  $(x, t)$ , в которых решение исходной задачи имеет непрерывные вторые производные по времени и пространству, имеет место сходимость

$$p_s^{\text{eff}}(x, t) \xrightarrow{s \rightarrow \infty} p^{\text{theor}} = 2, \tag{6}$$

а соответствующая оценка погрешности является асимптотически точной при  $s \rightarrow \infty$  (или, что то же самое, при  $N, M \rightarrow \infty$ ). Нарушение этой сходимости (6) говорит о потере гладкости точного решения. В частности, в случае степенной “сингулярности”  $u(x, t) \sim (T_{\text{bl}} - t)^{-\beta}$  для любого  $t > T_{\text{bl}}$  эффективный порядок точности  $p^{\text{eff}}(x, t) \xrightarrow{N, M \rightarrow \infty} -\beta$ . Это позволяет нам найти соответствующую степень  $\beta$ . Если  $p^{\text{eff}}(x, t) \xrightarrow{N, M \rightarrow \infty} -\infty$  для любого  $t > T_{\text{bl}}$ , то мы можем утверждать, что решение экспоненциально возрастает, т.е.  $u(x, t) = \infty$ ; если  $p^{\text{eff}}(x, t) \xrightarrow{N, M \rightarrow \infty} 0$  для любого  $t > T_{\text{bl}}$ , то рост решения в окрестности “сингулярности” является логарифмическим:  $u(x, t) \sim \ln(T_{\text{bl}} - t)$ . Момент разрушения решения  $T_{\text{bl}}$  может быть найден с точностью до величины интервала базовой сетки по времени. Локализация разрушения решения по пространственной координате может быть осуществлена с точностью до величины интервала базовой сетки по пространству.

Если нарушение гладкости решения возникает во всей области по пространственной переменной одновременно, то отклонение сходимости  $p^{\text{eff}}(x, t)$  от 2 возникает во всех точках сетки  $\{x_n\}$  с первого временного слоя  $t \geq T_{\text{bl}}$  (см. пример 1 и пример 2). Если разрушение решения возникает в одной-единственной точке  $x^*$ , то описанный метод позволяет проследить во времени процесс разрушения решения в остальных точках (см. пример 3 в [20]). Такая диагностика процесса разрушения решения возможна в связи с тем, что схема CROS не приводит к переполнению даже в том случае, когда решение задачи устремляется к бесконечности [15, 17].

**Пример 1.** Для начала рассмотрим пример со следующим набором входных данных:

$$u_{\text{init}}(x) \equiv \sin x, \quad \alpha = 1, \quad \beta = -1, \quad \nu = \pi/l^2, \quad l = \pi, \quad \varepsilon = 0.01.$$

В работе [19] была получена верхняя оценка для времени разрушения решения:

$$T_{\text{bl}} \leq T^* = \pi \ln \left( 1 + \frac{1}{\pi} \int_0^\pi e^{\varepsilon u_{\text{init}}(x)} dx \right) \approx 2.19. \quad (7)$$

В этом случае точное решение уравнения (1) не может быть получено аналитически. Применим численный алгоритм диагностики момента и места разрушения решения. Для численного решения задачи (1) мы возьмем следующий набор параметров:  $T^* = 2.19$ ,  $N = 50$ ,  $M = 50$ ,  $r_x = 2$ ,  $r_t = 2$ ,  $S = 6$  (число последовательно используемых для вычислений сеток, включая начальную).

Мы хотим обратить внимание на то, что в отличие от аналогичного примера в [19] за счет  $r_t = 2$  (вместо  $r_t = 4$  в [19]) на финальной сетке по времени мы будем иметь только 1600 интервалов (вместо 51 200), что дает существенный выигрыш во времени вычислений.

Получив приближенное численное решение на разных сетках, мы можем проверить сходимость эффективного порядка точности к теоретическому для каждого временного слоя по формуле

$$p_s^{\text{eff}}(t_m) = \log_{r_t} \frac{\sqrt{\sum_{n=0}^N \left( u^{(r_x^{s-1}N, r_t^{s-1}M)}(x_n, t_m) - u^{(r_x^{s-2}N, r_t^{s-2}M)}(x_n, t_m) \right)^2}}{\sqrt{\sum_{n=0}^N \left( u^{(r_x^sN, r_t^sM)}(x_n, t_m) - u^{(r_x^{s-1}N, r_t^{s-1}M)}(x_n, t_m) \right)^2}}, \quad (8)$$

где  $s$  — номер соответствующей сетки. Кроме того, еще раз хотим обратить внимание, что под обозначением  $(x_n, t_m)$  подразумеваются узлы, совпадающие с соответствующими узлами базовой сетки. После вычислений на  $S$  вложенных сетках эффективный порядок точности  $p^{\text{eff}}$  для каждого временного слоя  $t_m$  сходится к  $p^{\text{theor}} = 2$  (см. рис. 2) за исключением временного слоя, соответствующего моменту времени  $t_{50}$ :  $p^{\text{eff}}(t_{50}) \rightarrow 0$ , что означает, что  $T_{\text{bl}} \in (t_{49}, t_{50}] \equiv (2.14, 2.19]$  является временем разрушения решения и что в точке  $T_{\text{bl}}$  решение имеет логарифмический характер роста  $u(x, t) \sim \ln(T_{\text{bl}} - t)$ .

Мы также можем оценить эффективный порядок точности для каждой пространственной точки выбранного временного слоя, соответствующего моменту времени  $t_m$ , по формуле

$$p_s^{\text{eff}}(x_n, t_m) = \log_{r_t} \frac{u^{(r_x^{s-1}N, r_t^{s-1}M)}(x_n, t_m) - u^{(r_x^{s-2}N, r_t^{s-2}M)}(x_n, t_m)}{u^{(r_x^sN, r_t^sM)}(x_n, t_m) - u^{(r_x^{s-1}N, r_t^{s-1}M)}(x_n, t_m)}. \quad (9)$$

Мы можем использовать эту формулу, например, для временного слоя, соответствующего моменту времени  $t_{50}$ , в котором было диагностировано разрушение решения, с целью определить, возникло ли разрушение на всем временном слое или только в отдельных точках по пространственной переменной. На рис. 3 мы можем видеть, что решение разрушилось во всех пространственных точках соответствующего временного слоя.

**Пример 2.** Рассмотрим такие же дополнительные условия, как и в примере 1, только изменим параметр  $\varepsilon$ :  $\varepsilon = 700$ . Для численной диагностики разрушения решения во времени и в пространстве опять применим описанный алгоритм. Верхняя оценка  $T^*$  для времени разрушения  $T_{\text{bl}}$  может быть вычислена численно по формуле (7):  $T^* \approx 2.19 \cdot 10^3$ . Для численного решения задачи (1) мы будем использовать следующий набор параметров:  $T^* = 2.19 \times 10^3$ ,  $N = 50$ ,  $M = 50$ ,  $r_x = 2$ ,  $r_t = 2$ ,  $S = 7$  (число сеток, использовавшихся для вычислений, включая исходную).

Как и в примере 1, мы можем оценить эффективный порядок точности по формуле (8). После вычислений на  $S$  вложенных сетках эффективный порядок точности  $p^{\text{eff}}$  для каждого временного слоя  $t_m$  сходится к  $p^{\text{theor}} = 2$  (см. рис. 4) до временного слоя, соответствующего моменту времени  $t_{50}$ :  $p^{\text{eff}}(t_{50}) \rightarrow 0$ , что означает, что  $T_{\text{bl}} \in (t_{49}, t_{50}] \equiv (2.14, 2.19] \times 10^3$  является временем разрушения решения и что в точке  $T_{\text{bl}}$  решение имеет логарифмический характер роста  $u(x, t) \sim \ln(T_{\text{bl}} - t)$ .

Мы хотим обратить внимание на то, что оценка  $T^*$  для времени разрушения решения  $T_{\text{bl}}$  в этом примере существенно выше, чем соответствующее значение в примере 1, и мы при этом проводим расчеты на сетках таких же размерностей, поэтому “точной” сходимости эффективного порядка точности  $p^{\text{eff}}$  к 0 не

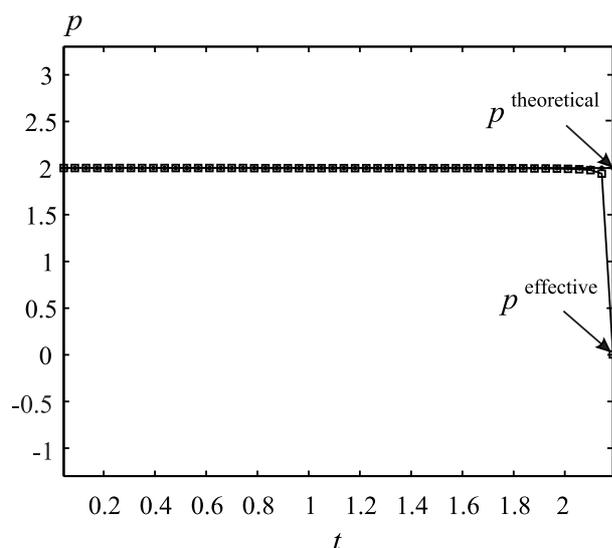


Рис. 2. Пример 1. Эффективный порядок точности для каждого временного слоя. Диагностировано в момент времени  $T_{b1} \in (t_{49}, t_{50}) \equiv (2.14, 2.19]$  разрушение решения. Здесь и далее нулевой временной слой не показан

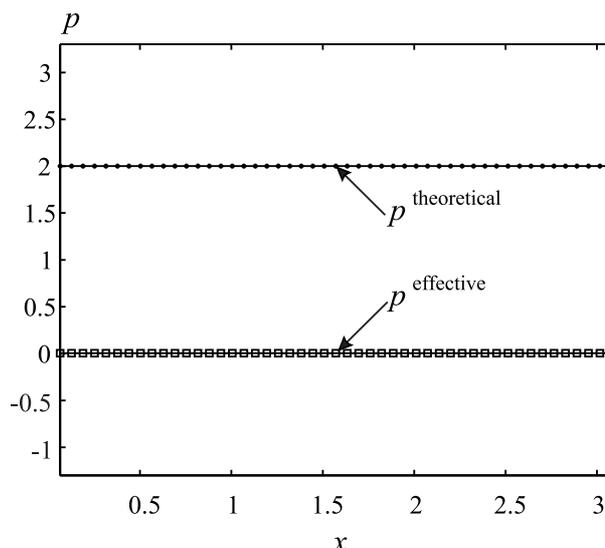


Рис. 3. Пример 1. Эффективный порядок точности для каждой пространственной точки временного слоя, соответствующего моменту времени  $t_{50} = 2.19$ , на котором был диагностирован факт разрушения решения. Разрушение решения диагностировано во всех пространственных точках этого временного слоя

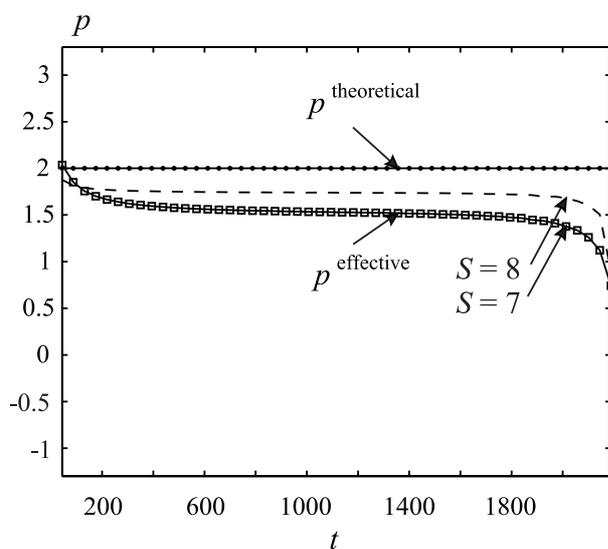


Рис. 4. Пример 2. Эффективный порядок точности для каждого временного слоя

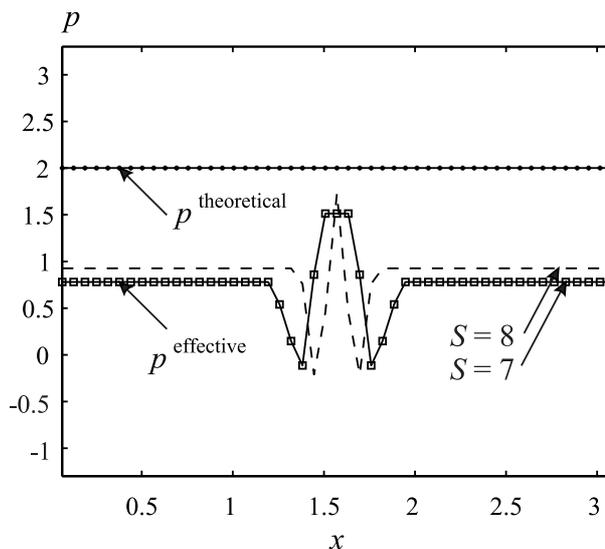


Рис. 5. Пример 2. Эффективный порядок точности для каждой пространственной точки первого временного слоя, на котором распознано разрушение решения

будет. С целью улучшения характера сходимости для вычислений можно использовать квазиравномерную сетку по времени [16], сгущающуюся в окрестности  $t = T^*$ , либо увеличить число сеток  $S$ , на которых будет выполняться вычисления.

Мы также можем использовать формулу (9) для временного слоя, соответствующего моменту времени  $t_{50}$  и на котором было диагностировано разрушение решения, с целью определить, возникло ли разрушение на всем временном слое или только в отдельных точках по пространственной переменной. На рис. 5 мы можем видеть, что решение разрушилось во всех пространственных точках соответствующего временного слоя за исключением точек  $x \in X \subset (x_{24}, x_{26}) \equiv (1.51, 1.63)$ .

**4. Выводы.** В настоящей статье на примере уравнения стратификации объемного заряда в полу-

проводниках продемонстрирована эффективность метода численной диагностики разрушения решения путем оценки эффективного порядка точности по Ричардсону. Проведенные численные эксперименты позволили сравнить два подхода к дискретизации уравнения в частных производных с нелинейным оператором, стоящим под знаком производной по времени. Оказалось, что способ, выбранный в настоящей статье (сведение исходного уравнения к дифференциально-алгебраической системе), работает эффективнее ранее примененного нами метода. Это связано с тем, что достижение одного и того же теоретического порядка точности по временной и пространственной переменным позволяет избежать чрезмерного сгущения сеток (разница в числе узлов лавинообразно нарастает при увеличении числа использованных сеток). При этом подход, примененный в настоящей работе, является не более сложным в численной реализации по сравнению с примененным ранее.

Работа выполнена при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (коды проектов 16-01-00755, 16-01-00437, 14-01-00182 и 15-01-03524).

#### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Митидиери Э.Л., Похожаев С.И. Априорные оценки и отсутствие решений дифференциальных неравенств в частных производных // Труды МИАН им. Стеклова. 2001. **234**. 3–383.
2. Levine H.A. Some nonexistence and instability theorems for solutions of formally parabolic equations of the form  $Pu_t = -Au + \mathcal{F}(u)$  // Archive for Rational Mechanics and Analysis. 1973. **51**, N 5. 371–386.
3. Levine H.A. Instability and nonexistence of global solutions to nonlinear wave equations of the form  $Pu_{tt} = -Au + \mathcal{F}(u)$  // Transactions of the American mathematical society. 1974. **192**. 1–21.
4. Калантаров В.К., Ладьяженская О.А. О возникновении коллапсов для квазилинейных уравнений параболического и гиперболического типов // Записки научн. сем. ЛОМИ. 1977. **69**. 77–102.
5. Свешников А.Г., Альшин А.Б., Корпусов М.О., Плетнер Ю.Д. Линейные и нелинейные уравнения соболевского типа. М.: Физматлит, 2007.
6. Корпусов М.О. Разрушение в неклассических волновых уравнениях. М.: Эдиториал УРСС, 2010.
7. Корпусов М.О. О разрушении ионно-звуковых волн в плазме // Математический сборник. 2011. **202**, № 1. 37–64.
8. Самарский А.А., Галактионов В.А., Курдюмов С.П., Михайлов А.П. Режимы с обострением в задачах для квазилинейных параболических. М.: Наука, 1987.
9. Галактионов В.А., Похожаев С.И. Уравнения нелинейной дисперсии третьего порядка: ударные волны, волны разрежения и разрушения // Журнал вычислительной математики и математической физики. 2008. **48**, № 10. 1819–1846.
10. Pelinovsky D.E., Xu C. On numerical modelling and the blow-up behavior of contact lines with a  $180^\circ$  contact angle // Journal of Engineering Mathematics. 2015. **92**. 31–44.
11. Cangiani A., Georgoulis E.H., Kyza I., Metcalfe S. Adaptivity and blow-up detection for nonlinear evolution problems // ArXiv preprint: <https://arxiv.org/abs/1502.03250>.
12. Haynes R., Turner C. A numerical and theoretical study of blow-up for a system of ordinary differential equations using the Sundman transformation // Atlantic electronic journal of mathematics. 2007. **2**, N 1. 1–13.
13. Berger M., Kohn R.V. A rescaling algorithm for the numerical calculation of blowing-up solutions // Communications on Pure and Applied Mathematics. 1988. **41**, N 6. 841–863.
14. Cho C.-H. Numerical detection of blow-up: a new sufficient condition for blow-up // Japan Journal of Industrial and Applied Mathematics. 2016. **33**, N 1. 81–98.
15. Альшина Е.А., Калиткин Н.Н., Корякин П.В. Диагностика особенностей точного решения при расчетах с контролем точности // Журнал вычислительной математики и математической физики, 2005. **45**, № 10. 1837–1847.
16. Калиткин Н.Н., Альшин А.Б., Альшина Е.А., Rogov B.B. Вычисления на квазиравномерных сетках. М.: Физматлит, 2005.
17. Al'shin A.B., Al'shina E.A. Numerical diagnosis of blow-up of solutions of pseudoparabolic equations // Journal of Mathematical Sciences. 2008. **148**, N 1. 143–162.
18. Hoffman J., Johnson C. Blow up of incompressible Euler solutions // BIT Numerical Mathematics. 2008. **48**, N 2. 285–307.
19. Korpusov M.O., Lukyanenko D.V., Panin A.A., Yushkov E.V. Blow-up phenomena in the model of a space charge stratification in semiconductors: analytical and numerical analysis // Mathematical Methods in the Applied Sciences. 2016 (in press). doi: 10.1002/mma.4142.
20. Korpusov M.O., Lukyanenko D.V., Panin A.A., Yushkov E.V. Blow-up for one Sobolev problem: theoretical approach and numerical analysis // Journal of Mathematical Analysis and Applications. 2016. **442**, N 2. 451–468.
21. Колмогоров А.Н., Фомин С.В. Элементы теории функций и функционального анализа. М.: Наука, 1981.
22. Hairer E., Wanner G. Solving ordinary differential equations. Stiff and differential-algebraic problems. Berlin: Springer, 2002.

23. *Калиткин Н.Н.* Численные методы решения жестких систем // Математическое моделирование. 1995. **7**, № 5. 8–11.
24. *Rosenbrock H.H.* Some general implicit processes for the numerical solution of differential equations // Computer Journal. 1963. **5**, N 4. 329–330.
25. *Альшин А.Б., Альшина Е.А., Калиткин Н.Н., Корягина А.Б.* Схемы Розенброка с комплексными коэффициентами для жестких и дифференциально-алгебраических систем // Журнал вычислительной математики и математической физики. 2006. **46**, № 8. 1392–1414.

Поступила в редакцию  
27.09.2016

---

**Blow-up Phenomena in the Model of a Space Charge Stratification in Semiconductors:  
Numerical Analysis of Original Equation Reduction to a Differential-Algebraic System**

D. V. Luk'yanenko<sup>1</sup>, and A. A. Panin<sup>2</sup>

<sup>1</sup> *Lomonosov Moscow State University, Faculty of Physics; Leninskie Gory, Moscow, 119991, Russia; Ph.D., Associate Professor, e-mail: lukyanenko@physics.msu.ru*

<sup>2</sup> *Lomonosov Moscow State University, Faculty of Physics; Leninskie Gory, Moscow, 119991, Russia; Ph.D., Associate Professor, e-mail: a-panin@yandex.ru*

Received September 27, 2016

**Abstract:** The efficiency of one of the methods for the numerical diagnostics of solution's blow-up is shown using the example of solving a nonlinear Sobolev-type equation that describes a space charge stratification in semiconductors. An approach to reduce the original partial differential equation to a differential-algebraic system is used. This system is solved by the Rosenbrock scheme with a complex coefficient. The numerical diagnostics of solution's blow-up is based on the Richardson extrapolation procedure.

**Keywords:** numerical diagnostics of solution's blow-up, Rosenbrock method, partial differential equations, differential-algebraic equations.

**References**

1. E. Mitidieri and S. I. Pokhozhaev, "A Priori Estimates and Blow-up of Solutions to Nonlinear Partial Differential Equations and Inequalities," Tr. Mat. Inst. im. V.A. Steklova, Ross. Akad. Nauk **234**, 3–383 (2001) [Proc. Steklov Inst. Math. **234**, 1–362 (2001)].
2. H. A. Levine, "Some Nonexistence and Instability Theorems for Solutions of Formally Parabolic Equations of the Form  $Pu_t = -Au + \mathcal{F}(u)$ ," Arch. Rational Mech. Anal. **51** (5), 371–386 (1973).
3. H. A. Levine, "Instability and Nonexistence of Global Solutions to Nonlinear Wave Equations of the Form  $Pu_{tt} = -Au + \mathcal{F}(u)$ ," Trans. Am. Math. Soc. **192**, 1–21 (1974).
4. V. K. Kalantarov and O. A. Ladyzhenskaya, "The Occurrence of Collapse for Quasilinear Equations of Parabolic and Hyperbolic Types," Zap. Nauch. Semin. Leningr. Otd. Mat. Inst. Steklova **69**, 77–102 (1977). [J. Math. Sci. **10** (1), 53–70 (1978)].
5. A. G. Sveshnikov, A. B. Al'shin, M. O. Korpusov, and Yu. D. Pletner, *Linear and Nonlinear Equations of Sobolev Type* (Fizmatlit, Moscow, 2007) [in Russian].
6. M. O. Korpusov, *Blow-up in Nonclassical Wave Equations* (Editorial, Moscow, 2010) [in Russian].
7. M. O. Korpusov, "Blow-up of Ion Acoustic Waves in a Plasma," Mat. Sb. **202** (1), 37–64 (2011) [Sb. Math. **202** (1), 35–60 (2011)].
8. A. A. Samarskii, V. A. Galaktionov, S. P. Kurdyumov, and A. P. Mikhailov, *Blow-up in Quasilinear Parabolic Equations* (Nauka, Moscow, 1987; Gruyter, Berlin, 1995).
9. V. A. Galaktionov and S. I. Pokhozhaev, "Third-Order Nonlinear Dispersive Equations: Shocks, Rarefaction, and Blowup Waves," Zh. Vychisl. Mat. Mat. Fiz. **48** (10), 1819–1846 (2008) [Comput. Math. Math. Phys. **48** (10), 1784–1810 (2008)].
10. D. E. Pelinovsky and C. Xu, "On Numerical Modelling and the Blow-up Behavior of Contact Lines with a 180° Contact Angle," J. Eng. Math. **92**, 31–44 (2015).

11. A. Cangiani, E. H. Georgoulis, I. Kyza, and S. Metcalfe, “Adaptivity and Blow-up Detection for Nonlinear Evolution Problems,” arXiv preprint: 1502.03250v1 [math.NA] (Cornell Univ. Library, Ithaca, 2015), available at <https://arxiv.org/abs/1502.03250/>.
12. R. Haynes and C. Turner, “A Numerical and Theoretical Study of Blow-up for a System of Ordinary Differential Equations Using the Sundman Transformation,” *Atl. Electron. J. Math.* **2** (1), 1–13 (2007).
13. M. Berger and R. V. Kohn, “A Rescaling Algorithm for the Numerical Calculation of Blowing-up Solutions,” *Commun. Pure Appl. Math.* **41** (6), 841–863 (1988).
14. C.-H. Cho, “Numerical Detection of Blow-up: A New Sufficient Condition for Blow-up,” *Japan J. Indust. Appl. Math.* **33** (1), 81–98.
15. E. A. Alshina, N. N. Kalitkin, and P. V. Koryakin, “Diagnostics of Singularities of Exact Solutions in Computations with Error Control,” *Zh. Vychisl. Mat. Mat. Fiz.* **45** (10), 1837–1847 (2005) [*Comput. Math. Math. Phys.* **45** (10), 1769–1779 (2005)].
16. N. N. Kalitkin, A. B. Al’shin, E. A. Al’shina, and B. V. Rogov, *Calculations on Quasi-Uniform Grids* (Fizmatlit, Moscow, 2005) [in Russian].
17. A. B. Al’shin and E. A. Al’shina, “Numerical Diagnosis of Blow-up of Solutions of Pseudoparabolic Equations,” *J. Math. Sci.* **148** (1), 143–162 (2008).
18. J. Hoffman and C. Johnson, “Blow up of Incompressible Euler Solutions,” *BIT Numer. Math.* **48** (2), 285–307 (2008).
19. M. O. Korpusov, D. V. Lukyanenko, A. A. Panin, and E. V. Yushkov, “Blow-up Phenomena in the Model of a Space Charge Stratification in Semiconductors: Analytical and Numerical Analysis,” *Math. Meth. Appl. Sci.*, 2016 (in press). doi: 10.1002/mma.4142
20. M. O. Korpusov, D. V. Lukyanenko, A. A. Panin, and E. V. Yushkov, “Blow-up for One Sobolev Problem: Theoretical Approach and Numerical Analysis,” *J. Math. Anal. Appl.* **442** (2), 451–468 (2016).
21. A. N. Kolmogorov and S. V. Fomin, *Elements of the Theory of Functions and Functional Analysis* (Nauka, Moscow, 1981; Dover, New York, 1999).
22. E. Hairer and G. Wanner, *Solving Ordinary Differential Equations. Stiff and Differential-Algebraic Problems* (Springer, Berlin, 2002).
23. N. N. Kalitkin, “Numerical Methods for Solving Stiff Systems,” *Mat. Model.* **7** (5), 8–11 (1995).
24. H. H. Rosenbrock, “Some General Implicit Processes for the Numerical Solution of Differential Equations,” *Comput. J.* **5** (4), 329–330 (1963).
25. A. B. Al’shin, E. A. Al’shina, N. N. Kalitkin, and A. B. Koryagina, “Rosenbrock Schemes with Complex Coefficients for Stiff and Differential Algebraic Systems,” *Zh. Vychisl. Mat. Mat. Fiz.* **46** (8), 1392–1414 (2006) [*Comput. Math. Math. Phys.* **46** (8), 1320–1340 (2006)].