

ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССОВ В ЖИДКОМ ПОЛУПРОВОДНИКЕ

A. F. Гильмутдинова

NUMERAL COMPUTATION OF PROCESSES IN LIQUID SEMI-CONDUCTOR

A. F. Gilmutdinova

Целью статьи является численное исследование начально-краевой задачи для уравнения КПС, подтверждающей феномен неединственности данной задачи

Ключевые слова: уравнение соболевского типа, численное моделирование, фазовое пространство

The goal of the paper is the numerical study of an initial-boundary problem for the Korpusov – Pletner – Sveshnikov equation in which the phenomena of solutions nonuniqueness of this problem was show.

Keywords: Sobolev type equation, numeral computation, phase space

Введение

Пусть $\Omega \subset \mathbb{R}^n$, $n \in \mathbb{N}$ – ограниченная область с границей $\partial\Omega$ класса C^∞ . В области $\Omega \times \mathbb{R}$ рассмотрим уравнение

$$(\lambda - \nabla^2)u_t = \alpha \nabla^2 u + \beta(\nabla, u \nabla u), \quad (0.1)$$

моделирующее метастабильные процессы в жидком двухкомпонентном полупроводнике. Параметры $\alpha, \beta, \lambda \in \mathbb{R}$ характеризуют свойства полупроводника, причем если знаки параметров α и β для нас безразличны, то о знаке λ следует сказать особо ввиду его важности для дальнейшего. Параметр $\lambda = \kappa/r^2$, где κ – коэффициент электрической поляризуемости, а r^2 – некоторая положительная постоянная, отвечающая за другие свойства полупроводника. Так вот, квазистационарные процессы в полупроводниках возможны только при условии отрицательности коэффициента κ . Причем именно в данном случае возможен пробой полупроводника, наблюдаемый экспериментально ([1], гл.2, п.1 и п.2).

Впервые уравнение (0.1) было получено в работе [2], поэтому в дальнейшем оно будет называться по имени авторов – *уравнением Корпусова – Плетнера – Свешникова (уравнением КПС)*. В этой же работе была установлена однозначная разрешимость уравнения (0.1) при краевых условиях Дирихле на границе $\partial\Omega \times \mathbb{R}$ и начальном условии вида

$$(\lambda - \nabla^2)(u(x, 0) - u_0(x)) = 0, \quad x \in \Omega, \quad (0.2)$$

но только в случае положительности параметра λ , что влечет обратимость дифференциального оператора при производной по времени в уравнении КПС.

Качественное исследование данной задачи облегчается тем обстоятельством, что она в подходящим образом подобранных банаховых пространствах \mathcal{U} и \mathcal{F} редуцируется к задаче Шоултера – Сидорова

$$L(u(0) - u_0) = 0, \quad (0.3)$$

для полулинейного уравнения соболевского типа

$$Lu = Mu + N(u). \quad (0.4)$$

Основным методом исследования полулинейных уравнений соболевского типа служит метод фазового пространства, предложенный Г. А. Свиридиюком и Т. Г. Сукачевой [3].

Нашей целью является численное исследование данной начально-краевой задачи.

1. Морфология фазового пространства

Рассмотрим начально-краевую задачу

$$(\lambda - \nabla^2)(u(x, 0) - u_0(x)) = 0, \quad x \in (a, b), \quad (1.1)$$

$$u(a, t) = u(b, t) = 0, \quad t \in \mathbb{R} \quad (1.2)$$

для уравнения Корпусова – Плетнера – Свешникова

$$\lambda u_t - u_{txx} = \alpha u_{xx} + \beta(uu_x)_x. \quad (1.3)$$

Чтобы редуцировать задачу (1.2), (1.3) к уравнению (0.4) возьмем пространства $\mathfrak{U} = \overset{\circ}{W}_2^1$, $\mathfrak{F} = W_2^{-1}$. Пространство \mathfrak{F} сопряжено к \mathfrak{U} относительно скалярного произведения $\langle \cdot, \cdot \rangle$ из L_2 . Операторы L и M определим формулами

$$\langle Lu, v \rangle = \int_a^b (\lambda uv + u_x v_x) dx, \quad \langle Mu, v \rangle = - \int_a^b \alpha u_x v_x dx,$$

где $u, v \in \mathfrak{U}$. По построению операторы $L, M \in \mathcal{L}(\mathfrak{U}; \mathfrak{F})$ и фредгольмовы.

Обозначим через $\{\lambda_k\}$ занумерованные по невозрастанию множество собственных значений однородной задачи Дирихле для оператора Лапласа $\frac{\partial^2}{\partial x^2}$ на (a, b) , а через $\{\varphi_k\}$ – ортонормированное в смысле L_2 множество соответствующих собственных функций. Определим оператор N формулой

$$\langle N(u), v \rangle = - \int_a^b \beta uu_x v_x dx, \quad u, v \in \mathfrak{U}.$$

Построим L - спектр оператора M

$$\sigma^L(M) = \left\{ \frac{\alpha \lambda_k}{\lambda - \lambda_k} : k \in \mathbb{N} \setminus \{l : \lambda = \lambda_l\} \right\}.$$

Проекторы имеют вид

$$P = \mathbb{I} - \langle \cdot, \varphi_l \rangle \varphi_l, \quad Q = \mathbb{I} - \langle \cdot, \varphi_l \rangle \varphi_l.$$

Построим множество

$$\mathfrak{M} = \{u \in \mathfrak{U} : \langle (Mu + N(u)), \varphi_l \rangle = 0, \lambda = \lambda_l\}$$

и пространства

$$\mathfrak{U}^0 = \ker L = \text{span}\{\varphi_l : \lambda = \lambda_l\}, \quad \mathfrak{U}^1 = \{u \in \mathfrak{U} : \langle u, \varphi_l \rangle = 0, \lambda = \lambda_l\}.$$

Возьмем произвольную точку $u \in \mathfrak{U}$, тогда $u = a\varphi_l + v$, где $v = Pu \in \mathfrak{U}^1$, $a \in \mathbb{R}$. Точка $u \in \mathfrak{M}$ точно тогда, когда выполнено

$$\frac{a^2}{2} \|\varphi_l\|_{L_3}^3 + a \left(\int_a^b v \varphi_l^2 dx + \frac{\alpha}{\beta} \right) + \frac{1}{2} \int_a^b v^2 \varphi_l dx = 0. \quad (1.4)$$

Введем в рассмотрение функционал

$$\Delta(v) = \left(\int_a^b v \varphi_l^2 dx + \frac{\alpha}{\beta} \right)^2 - \|\varphi_l\|_{L_3}^3 \int_a^b v^2 \varphi_l dx,$$

$\Delta : \mathfrak{U}^1 \rightarrow \mathbb{R}$, и построим множества

$$\mathfrak{U}_+^1 = \{v \in \mathfrak{U}^1 : \Delta(v) > 0\}, \mathfrak{U}_-^1 = \{v \in \mathfrak{U}^1 : \Delta(v) < 0\}.$$

Возьмем точку $v \in \mathfrak{U}_+^1$, тогда уравнение (1.4) имеет два решения

$$\begin{aligned} a_- &= \|\varphi_l\|_{L_3}^{-3} \left(-\frac{\alpha}{\beta} - \int_a^b v \varphi_l^2 dx - \sqrt{\Delta(v)} \right), \\ a_+ &= \|\varphi_l\|_{L_3}^{-3} \left(-\frac{\alpha}{\beta} - \int_a^b v \varphi_l^2 dx + \sqrt{\Delta(v)} \right). \end{aligned} \quad (1.5)$$

Построим множества

$$\mathfrak{M}_{+(-)} = \{u \in \mathfrak{U} : u = a_{+(-)}(v)\varphi_l + v, v \in \mathfrak{U}_+^1\}.$$

С использованием подхода, изложенного в [4], доказаны следующие теоремы.

Теорема 1. Пусть $\alpha, \beta \in \mathbb{R} \setminus \{0\}$ и

(i) $\lambda \notin \{\lambda_k\}$. Тогда фазовым пространством уравнения (1.3) является все пространство \mathfrak{U} .

(ii) $\lambda \in \{\lambda_k\}$. Тогда фазовым пространством уравнения (1.3) является множество $\mathfrak{M}_+ \cup \mathfrak{M}_-$, каждая компонента которого \mathfrak{M}_+ и \mathfrak{M}_- биективно проектируется на множество \mathfrak{U}_+^1 .

Теорема 2. При любых $\alpha, \beta \in \mathbb{R} \setminus \{0\}$ и

(i) $\lambda \in \mathbb{R} \setminus \{-\lambda_k\}$ существует точно одно решение задачи (1.1) – (1.3) при любых $u_0 \in \mathfrak{U}$.

(ii) $\lambda \in \{-\lambda_k\}$ существует два различных решения задачи (1.1) – (1.3) при любых $u_0 \in \mathfrak{U}$ таких, что $Pu_0 \in \mathfrak{U}_+^1$.

(iii) $\lambda \in \{-\lambda_k\}$ не существует ни одного решения задачи (1.1) – (1.3) при любых $u_0 \in \mathfrak{U}$ таких, что $Pu_0 \in \mathfrak{U}_-^1$.

2. Численные эксперименты

На основе теоретических результатов для подтверждения нетривиальности фазового пространства задачи Шоултера – Сидорова для уравнения Корпусова – Плетнера – Свешникова в системе компьютерной математики Maple 12.0. разработана программа, которая позволяет:

1. По заданным коэффициентам α, β, λ на основе метода Галеркина находить численное решение задачи Шоултера – Сидорова для уравнения Корпусова – Плетнера – Свешникова.

2. Получить графическое изображение этого приближенного решения, которое показывает нетривиальность фазового пространства.

Для реализации вычислительных алгоритмов программы использовались встроенные функции и стандартные операторы языка программирования Maple 12.0. Для получения графического изображения подключен пакет plots.

В полосе $(0, \pi) \times \mathbb{R}$ рассмотрим уравнение Корпусова – Плетнера – Свенникова

$$\lambda u_t - u_{txx} = \alpha u_{xx} + \beta(uu_x)_x. \quad (2.1)$$

и начально-краевую задачу

$$L(u(0) - u_0) = 0, \quad (2.2)$$

$$u(0, t) = u(\pi, t) = 0, t \in \mathbb{R} \quad (2.3)$$

для него. Решение начально-краевой задачи (2.1)-(2.3) будем искать в виде галеркинской суммы

$$u^m(t, x) = \sum_{k=1}^m u_k(t) \varphi_k, \quad m > 1, \quad (2.4)$$

где $\{\varphi_k\}$ – ортонормированное в смысле L_2 множество собственных функций, соответствующие собственным значениям λ_k однородной задачи Дирихле для оператора $\frac{\partial^2}{\partial x^2}$ на $(0, \pi)$. Легко подсчитать, что $\varphi_k = \varphi_k(x) = \sqrt{\frac{2}{\pi}} \sin(kx)$, а $\lambda_k = -k^2$.

Пример 1. Требуется найти численное решение задачи (2.1)-(2.3) при заданных коэффициентах $\alpha = 20$, $\beta = 25$, $\lambda = -1$ и $m = 2$, а также получить графическое изображение этого решения.

Так как $m = 2$, то в силу (2.4)

$$u(t, x) = u_1(t) \sqrt{2/\pi} \sin x + u_2(t) \sqrt{2/\pi} \sin 2x.$$

$\lambda = -1$ (условия теоремы 2(ii), (iii) выполняются, ввиду того, что $\lambda \in \{-k^2\}$). Тогда, умножив скалярно (2.1) на функции φ_k , $k = 1, 2$, получим систему дифференциальных уравнений

$$\begin{cases} 4\sqrt{2}u_2(t)^2 + 5\sqrt{2}u_1(t)^2 + 3\pi^{3/2}u_1(t) = 0, \\ 640\sqrt{2}u_1(t)u_2(t) + 240\pi^{3/2}u_2(t) + 9\dot{u}_2(t)\pi^{3/2} = 0. \end{cases} \quad (2.5)$$

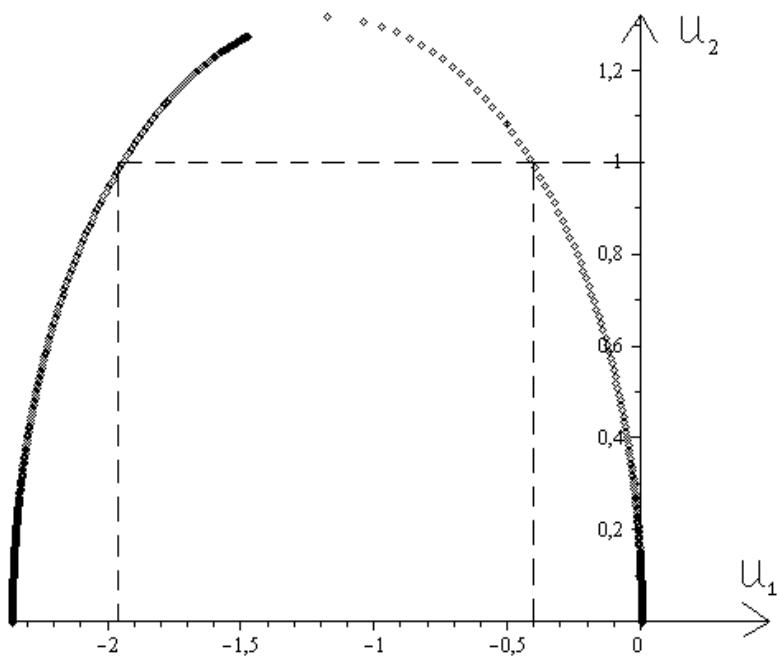
Система (2.5) имеет два стационарных решения

$$(u_1(t) = 0, u_2(t) = 0), (u_1(t) = -(3/10)\pi^{3/2}\sqrt{2}, u_2(t) = 0).$$

Начальное значение $u_0 = \begin{pmatrix} u_{01} \\ u_{02} \end{pmatrix}$, тогда задача Шоултера-Сидорова (2.2) для системы уравнений (2.5) примет вид

$$\begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 9\pi^{3/2} \end{pmatrix} \left[\begin{pmatrix} u_1(0) \\ u_2(0) \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} u_{01} \\ u_{02} \end{pmatrix} \right] = 0. \quad (2.6)$$

Задача (2.6) при $u_0 = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}$ для системы (2.5) имеет полученные ранее два стационарных решения. Рассмотрим другое начальное условие $u_2(1) = 1$, по которому найдем два условия на $u_1(1)$, а именно $u_{01+} = -0,4096752508$ и $u_{01-} = -1,952766240$, удовлетворяющие системе (2.5). Решим две задачи Коши для этой системы уравнений. Фазовое пространство системы (2.5) изображено на рисунке, результаты численного решения частично приведены в таблицах 1 и 2.



Фазовое пространство системы (2.5) при различных данных Коши, но одинаковых данных Шоуолтера – Сидорова

Таблица 1

Численное решение системы (2.5) с начальными условиями
 $u_1(1) = -0,4096752508, u_2(1) = 1$

$u_1(t)$	$u_2(t)$
-1,181138709	1,320644939
-1,109337027	1,318197361
-0,9937117979	1,303899373
-0,8956068680	1,281457650
-0,7994165490	1,249753675
-0,6900613485	1,201064305
-0,5973007684	1,147998555
-0,4999724286	1,078877746
-0,4098504961	1,000168979
-0,3999706595	0,9905369461
-0,2435745929	0,8031985309
-0,1890937409	0,7167343452
-0,1463869058	0,6367901668
-0,1130652586	0,5638333163
-0,8716760788e ⁻¹	0,4979087082
-0,6710381679e ⁻¹	0,4387852723
-0,5159890077e ⁻¹	0,3860651178
-0,1249740705e ⁻²	0,6073393299e ⁻¹
-0,4301939681e ⁻³	0,3563921814e ⁻¹
-0,1753736568e ⁻⁴	0,7196422470e ⁻²
-0,1218532584e ⁻⁵	0,1896953452e ⁻²

Таблица 2

Численное решение системы (2.5) с начальными условиями
 $u_1(1) = -1,952766240, u_2(1) = 1$

$u_1(t)$	$u_2(t)$
-2,362441492	$0,1003192683e^{-5}$
-2,362441492	$0,1114077178e^{-4}$
-2,362441488	$0,1047761256e^{-3}$
-2,362440870	$0,1355589623e^{-2}$
-2,362365880	$0,1494251926e^{-1}$
-2,358932134	$0,1017248684$
-2,330150041	$0,3066843586$
-2,215918021	$0,6370668308$
-2,036836638	$0,9104963298$
-1,952766240	1
-1,859992974	$1,080827648$
-1,764551333	$1,148372201$
-1,674941381	$1,199750621$
-1,600135431	$1,234804093$
-1,545962615	$1,256108068$
-1,512212525	$1,267737621$
-1,493759364	$1,273578653$
-1,480192352	$1,277643548$
-1,476862571	$1,278611729$
-1,476526330	$1,278708850$

Литература

1. Линейные и нелинейные уравнения соболевского типа / А. Г. Свешников, А. Б. Альшин, М. О. Корпусов, Ю. Д. Плетнер. – М.: ФИЗМАТЛИТ, 2007. – 736 с.
2. Корпусов, М.О. О квазистационарных процессах в проводящих средах без дисперсии / М. О. Корпусов, Ю. Д. Плетнер, А. Г. Свешников // Журн. вычисл. мат. и мат. физики. – 2000. – Т. 4, № 8. – С. 1237 – 1249.
3. Свиридов, Г. А. Фазовые пространства одного класса операторных полулинейных уравнений типа Соболева / Г. А. Свиридов, Т. Г. Сукачева // Дифференц. уравнения. – 1990. – Т. 26, № 2. – С. 250 – 258.
4. Свиридов, Г. А. О складке фазового пространства одного неклассического уравнения / Г. А. Свиридов, А. Ф. Карамова (А. Ф. Гильмутдинова) // Дифференц. уравнения. – 2005. – Т. 41, № 10. – С. 1400 – 1405.

Уравнения математической физики,
 Южно-Уральский государственный университет
 algil@list.ru

Поступила в редакцию 2 сентября 2009 г.