

# 局部间断伽辽金法的算法设计与应用

鲁硕

lushuo@zju.edu.cn

指导老师：仲杏慧

信息与计算科学  
浙江大学

2024 年 5 月 23 日

## 研究背景与意义

## 预备知识

### DD 模型

LDG 离散 DD 模型  
误差估计

### HF 模型

误差估计

### 数值算例

参数选取  
TVD LDG 格式  
IMEX LDG 格式

## 总结与展望

# 研究背景与意义

- 对于 LDG 法解决一维漂移-扩散 (DD) 模型和高场 (HF) 模型问题已经有了理论上的误差估计, 但其正确性还缺少完善的验证.
- 我们的主要工作是验证补充多维度数值算例对比以及验证误差估计的正确性.

# 基础符号

- 计算域  $I$  (本文取  $[0, 0.6]$ ) 的一个划分:  $I_j = (x_{j-\frac{1}{2}}, x_{j+\frac{1}{2}}), j = 1, 2, \dots, N$ .  
 $\Delta x_j = x_{j+\frac{1}{2}} - x_{j-\frac{1}{2}}, x_j = \frac{1}{2}(x_{j-\frac{1}{2}} + x_{j+\frac{1}{2}}), h = \max_j \Delta x_j$ .

$$0 = x_{\frac{1}{2}} < x_{\frac{3}{2}} < \dots < x_{N-\frac{1}{2}} < x_{N+\frac{1}{2}} = 0.6.$$

- 有限维计算空间  $V_h^k = \{z: z|_{I_j} \in P^k(I_j)\}$ , 其中  $P^k(I_j)$  表示  $I_j$  上的  $k$  次多项式.

# DD 模型

## 漂移-扩散 (DD) 模型

### DD 模型

$$n_t - (\mu E n)_x = \tau \theta n_{xx}, \quad (1)$$

$$\phi_{xx} = \frac{e}{\epsilon} (n - n_d), \quad (2)$$

其中  $x \in (0, 1)$ , 第一个方程具有周期边界条件, 势方程  $\phi(0, t) = 0, \phi(1, t) = v_{bias}$  具有 Dirichlet 边界条件. 泊松方程(2)是电势方程.

在系统(1)-(2), 未知变量是电子浓度  $n$  和电势  $\phi$ ,  $E = -\phi_x$  代表电场. 其余物理量均已知.

# DD 模型弱形式

引入辅助变量  $q = \sqrt{\tau\theta}n_x$  和测试函数  $v, \omega, r, z \in V_h^k$ , 得到 DD 模型的弱形式:

## 弱形式

$$\begin{aligned} \int_{I_j} n_t v dx + \int_{I_j} (\mu E n + \sqrt{\tau\theta} q) v_x dx \\ - (\mu E n + \sqrt{\tau\theta} q)_{j+\frac{1}{2}} v_{j+\frac{1}{2}}^- + (\mu E n + \sqrt{\tau\theta} q)_{j-\frac{1}{2}} v_{j-\frac{1}{2}}^+ = 0, \end{aligned} \quad (3)$$

$$\begin{aligned} \int_{I_j} q \omega dx + \int_{I_j} \sqrt{\tau\theta} n \omega_x dx - \sqrt{\tau\theta} n_{j+\frac{1}{2}} \omega_{j+\frac{1}{2}}^- + \sqrt{\tau\theta} n_{j-\frac{1}{2}} \omega_{j-\frac{1}{2}}^+ = 0, \end{aligned} \quad (4)$$

$$\begin{aligned} - \int_{I_j} E r_x dx + E_{j+\frac{1}{2}} r_{j+\frac{1}{2}}^- - E_{j-\frac{1}{2}} r_{j-\frac{1}{2}}^+ = -\frac{e}{\epsilon} \int_{I_j} (n - n_d) r dx, \end{aligned} \quad (5)$$

$$\begin{aligned} \int_{I_j} E z dx - \int_{I_j} \phi z_x dx + \phi_{j+\frac{1}{2}} z_{j+\frac{1}{2}}^- - \phi_{j-\frac{1}{2}} z_{j-\frac{1}{2}}^+ = 0, \end{aligned} \quad (6)$$

# DD 模型 LDG 格式

将精确解  $n, q, E$  替换为数值解  $n_h, q_h, E_h$ , 单元边界上的项替换为数值通量, 得到:

## DD 模型半 LDG 格式

$$\begin{aligned} \int_{I_j} (n_h)_t v dx + \int_{I_j} \left( \mu E_h n_h + \sqrt{\tau \theta} q_h \right) v_x dx \\ - \left( \mu \widehat{E_h n_h} + \sqrt{\tau \theta} \hat{q}_h \right)_{j+\frac{1}{2}} v_{j+\frac{1}{2}}^- + \left( \mu \widehat{E_h n_h} + \sqrt{\tau \theta} \hat{q}_h \right)_{j-\frac{1}{2}} v_{j-\frac{1}{2}}^+ = 0, \end{aligned} \quad (7)$$

$$\int_{I_j} q_h w dx + \int_{I_j} \sqrt{\tau \theta} n_h w_x dx - \sqrt{\tau \theta} (\hat{n}_h)_{j+\frac{1}{2}} w_{j+\frac{1}{2}}^- + \sqrt{\tau \theta} (\hat{n}_h)_{j+\frac{1}{2}} w_{j-\frac{1}{2}}^+ = 0, \quad (8)$$

$$E_h = \int_0^x -\frac{e}{\varepsilon} (n_h - n_d) dx + E_0 - v_{\text{bias}}, \quad (9)$$

将精确解  $n, q, E, \phi$  替换为对应的数值解  $n_h, q_h, E_h, \phi_h$ , 单元边界上的项替换为数值通量, 得到:

## DD 模型 LDG 格式

$$\begin{aligned} \int_{I_j} (n_h)_t v dx + \int_{I_j} \left( \mu E_h n_h + \sqrt{\tau \theta} q_h \right) v_x dx \\ - \left( \mu \widehat{E_h n_h} + \sqrt{\tau \theta} \hat{q}_h \right)_{j+\frac{1}{2}} v_{j+\frac{1}{2}}^- + \left( \mu \widehat{E_h n_h} + \sqrt{\tau \theta} \hat{q}_h \right)_{j-\frac{1}{2}} v_{j-\frac{1}{2}}^+ = 0, \end{aligned} \quad (10)$$

$$\begin{aligned} \int_{I_j} q_h w dx + \int_{I_j} \sqrt{\tau \theta} n_h w_x dx - \sqrt{\tau \theta} (\hat{n}_h)_{j+\frac{1}{2}} w_{j+\frac{1}{2}}^- + \sqrt{\tau \theta} (\hat{n}_h)_{j+\frac{1}{2}} w_{j-\frac{1}{2}}^+ = 0, \end{aligned} \quad (11)$$

$$\begin{aligned} - \int_{I_j} E_h r_x dx + (\widehat{E_h})_{j+\frac{1}{2}} r_{j+\frac{1}{2}}^- - (\widehat{E_h})_{j-\frac{1}{2}} r_{j-\frac{1}{2}}^+ = -\frac{e}{\epsilon} \int_{I_j} (n_h - n_d) r dx, \end{aligned} \quad (12)$$

$$\begin{aligned} \int_{I_j} E_h z dx - \int_{I_j} \phi_h z_x dx + (\hat{\phi}_h)_{j+\frac{1}{2}} z_{j+\frac{1}{2}}^- - (\hat{\phi}_h)_{j-\frac{1}{2}} z_{j-\frac{1}{2}}^+ = 0. \end{aligned} \quad (13)$$



# 误差估计

我们定义:  $\|u\|_{L^\infty(0,T;L^2)} = \max_{0 \leq t \leq T} \|u^m\|_{L^2(I)}$  和  $\|u\|_{L^2(0,T;L^2)} = (\int_0^T \|u^m\|_{L^2(I)}^2 \Delta t)^{1/2}$ . 对于 DD 模型的三阶 TVD LDG 格式, 我们有以下误差估计<sup>[1]</sup>:

## 定理 (DD 模型三阶 TVD LDG 格式误差估计)

设  $n, q$  是光滑精确解, 它们足够光滑且有有界导数. 设  $n_h, q_h$  是半 LDG 格式(7)-(8)的数值解. 相应的数值误差记为  $e_u = u - u_h (u = n, q)$ . 如果有限元空间  $V_h^k$  是  $k \geq 1$  次分段多项式, 则对于足够小的  $h$ , 有以下误差估计成立:

$$\|n - n_h\|_{L^\infty(0,T;L^2)} + \|q - q_h\|_{L^2(0,T;L^2)} \leq Ch^{k+\frac{1}{2}}, \quad (14)$$

其中常数  $C$  依赖于最终时间  $T, k, \|n\|_{L^\infty(0,T;H^{k+1})}$  和  $\|n_x\|_{0,\infty}$ .

# 误差估计

对于一阶 IMEX LDG 格式，我们有以下误差估计<sup>[2]</sup>：

## 定理 (一阶 IMEX LDG 格式误差估计)

令  $n^m, q^m$  是在时间层级  $m$  的光滑精确解，它们足够光滑且有有界导数。令  $n_h^m, q_h^m$  是一阶 IMEX LDG 格式的数值解。如果有限元空间  $V_h^k$  是  $k(k \geq 0)$  阶间断多项式，那么对于足够小的  $h$ ，存在与  $h$  无关的正常数  $C$ ，使得下列误差估计成立

$$\|n - n_h\|_{L^\infty(0,T;L^2)} + \|q - q_h\|_{L^2(0,T;L^2)} \leq C(h^{k+1} + \Delta t), \quad (15)$$

其中  $C$  依赖于最终时间  $T, k, C_\mu$ ，反常数  $C_2, \|n\|_{L^\infty(0,T;H^{k+1})}, \|n_x\|_{L^\infty}$  和  $\|E\|_{L^\infty}$ 。

# 误差估计

对于二阶 IMEX LDG 格式, 我们有以下误差估计<sup>[2]</sup>:

## 定理 (二阶 IMEX LDG 格式误差估计)

令  $n^m, q^m$  是在时间层级  $m$  的光滑精确解, 它们足够光滑且有有界导数. 令  $n_h^m, q_h^m$  是二阶 IMEX LDG 格式的数值解. 如果有限元空间  $V_h^k$  是  $k(k \geq 0)$  阶间断多项式, 那么对于足够小的  $h$ , 存在与  $h$  无关的正常数  $C$ , 使得下面的误差估计成立

$$\|n - n_h\|_{L^\infty(0,T;L^2)} \leq C(h^{k+1} + (\Delta t)^2), \quad (16)$$

其中  $C$  依赖于最终时间  $T, k, C_\mu$ , 反常数  $C_2, \|n\|_{L^\infty(0,T;H^{k+1})}, \|n_x\|_{L^\infty}$  和  $\|E\|_{L^\infty}$ .

# 误差估计

对于三阶 IMEX LDG 格式, 我们有以下误差估计<sup>[2]</sup>:

## 定理 (三阶 TVD LDG 格式误差估计)

令  $n^m, q^m$  是在时间层级  $m$  的光滑精确解, 它们足够光滑且有有界导数. 令  $n_h^m, q_h^m$  是三阶 IMEX LDG 格式的数值解. 如果有限元空间  $V_h^k$  是  $k(k \geq 0)$  阶间断多项式, 那么对于足够小的  $h$ , 存在与  $h$  无关的正常数  $C$ , 使得下面的误差估计成立

$$\|n - n_h\|_{L^\infty(0, T; L^2)} \leq C(h^{k+1} + (\Delta t)^3), \quad (17)$$

其中  $C$  依赖于最终时间  $T, k, C_\mu$ , 反常数  $C_2, \|n\|_{L^\infty(0, T; H^{k+1})}, \|n_x\|_{L^\infty}$  和  $\|E\|_{L^\infty}$ .

# HF 模型

高场模型由以下方程以及带有周期边界条件的 Poisson 电场方程 (2)表示

$$n_t + J_x = 0, \quad x \in (0, 1), \quad (18)$$

其中

$$J = J_{hyp} + J_{vis},$$

$$J_{hyp} = -\mu n E + \tau \mu \left( \frac{e}{\varepsilon} \right) n (-\mu n E + \omega),$$

$$J_{vis} = -\tau \left( n (\theta + 2\mu^2 E^2) \right)_x + \tau \mu E (\mu n E)_x.$$

这里, 未知量与 DD 模型相同: 电子浓度  $n$  和电势  $\phi$ , 其余变量与 DD 模型相同, 均已知. HF 模型的半 LDG 格式的求法和 DD 模型相同.

# 三阶 TVD LDG 误差估计

对于 HF 模型的三阶 TVD LDG 格式, 定义  $C_1 = \frac{\tau\mu e}{\varepsilon}$ ,  $C_2 = \frac{\tau\mu^2 e}{\varepsilon} = \mu C_1$  和  $C_3 = \frac{\tau\mu e\omega}{\varepsilon} = \omega C_1$  和  $a := \sqrt{\tau\theta + \tau\mu^2 E^2}$ ,  $b := 3C_2 En_d + \mu E - C_3$ , 然后我们有误差估计<sup>[1]</sup>:

## 定理 (HF 模型三阶 TVD LDG 误差估计)

设  $n, q$  是 HF 弱形式的光滑精确解, 具有足够光滑且有界导数. 设  $n_h, q_h$  是半 LDG 格式的数值解, 并将相应的数值误差记为  $e_u = u - u_h (u = n, q)$ . 如果有限元空间  $V_h^k$  是  $k \geq 2$  次分段多项式, 则对于足够小的  $h$ , 有以下误差估计成立:

$$\|n - n_h\|_{L^\infty(0, T; L^2)} + \|q - q_h\|_{L^2(0, T; L^2)} \leq Ch^{k+\frac{1}{2}}$$

其中常数  $C$  依赖于最终时间  $T, k, \|n\|_{L^\infty(0, T; H^{k+1})}, \|n_x\|_{0, \infty}, \|n_d\|_{0, \infty}$  以及导函数  $|a'|$  和  $|b'|$  的界.

# 参数选取

- 基函数：基函数选取正交归一化的 Legendre 多项式基和放缩为首一多项式的正交 Legendre 多项式基.
- 初值函数：半自定义，过渡部分采用平滑过渡函数.
- 收敛条件： $\|u^m - u^{m+1}\| < \epsilon$ .

# TVD LDG 格式

全变差随时间层的变化.

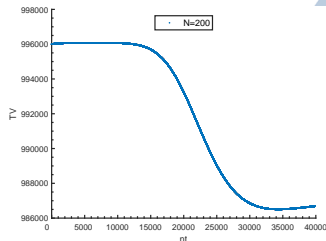
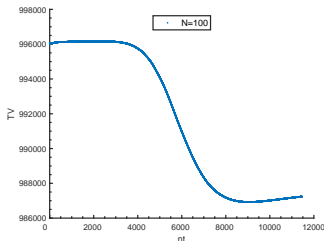


图 1: 默认值: DD 模型三阶 TVDRK, 计算空间  $V^2$ , 网格数  $N = 100$  和  $N = 200$ , 迁移率  $\mu = 0.75$ .  
nt: 时间层; TV: 全变差.



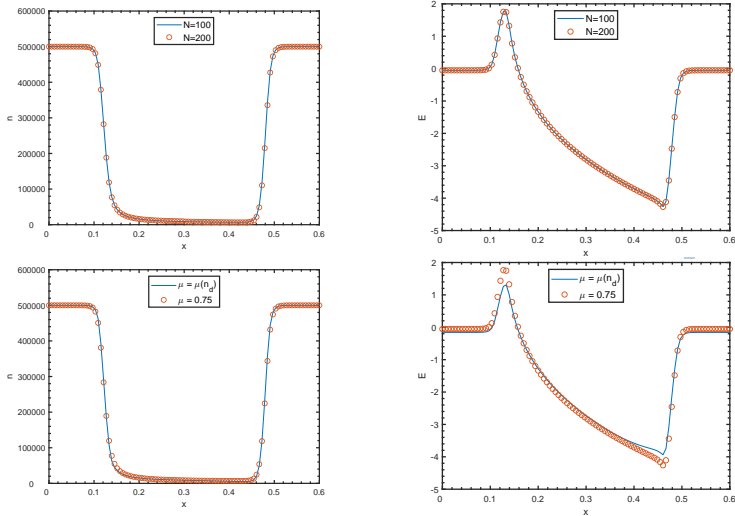


图 2: DD 模型三阶 TVDRK, 计算空间  $V^2$ , 网格数  $N = 100$ , 迁移率  $\mu = 0.75$ . 左: 电子浓度  $n$ ; 右: 电势  $E$ .

上面两图基于 DD 模型；下面两图表示 DD 模型和 HF 模型的结果对比。

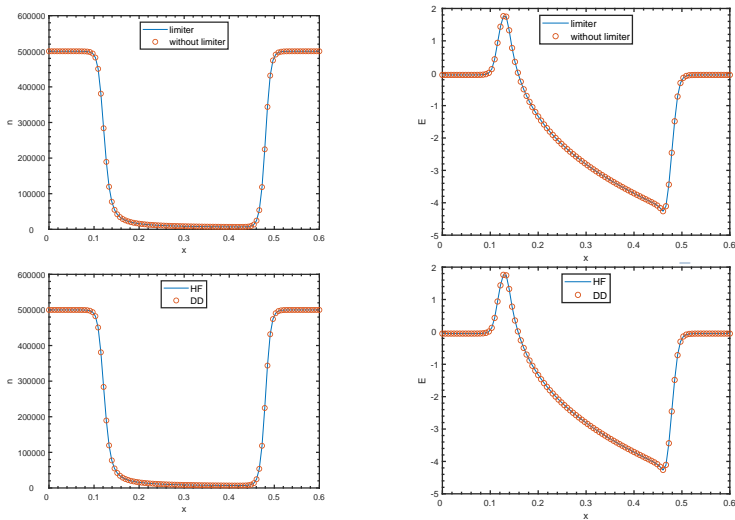


图 3: 三阶 TVDRK, 计算空间  $V^2$ , 网格数  $N = 100$ , 迁移率  $\mu = 0.75$ . 左: 电子浓度  $n$ ; 右: 电势  $E$ .

# 收敛结果

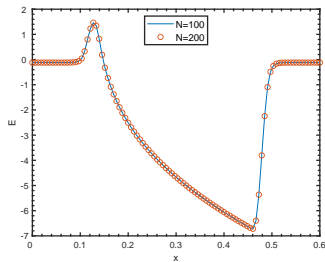
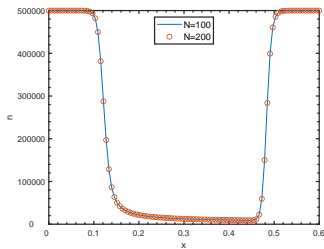


图 4: 默认值: DD 模型三阶 IMEXRK, 计算空间  $V^2$ , 网格数  $N = 100$  和  $N = 200$ , 迁移率  $\mu = 0.75$ . 左: 电子浓度  $n$ ; 右: 电势  $E$ .

# IMEX LDG 格式的误差估计

$$\|n - n_h\|_{L^\infty(0,T;L^2)} \leq C_1 h^{k+1} + C_2 (\Delta t)^{tk} \leq C(h^{k+1} + (\Delta t)^{tk}), \quad tk = 2, 3. \quad (19)$$

N	IMEX2		IMEX3	
	$\frac{\ n_h - n\ }{\ n\ }$	Order	$\frac{\ n_h - n\ }{\ n\ }$	Order
25	4.42e-03	—	4.42e-03	—
50	1.21e-03	1.87	1.21e-03	1.87
100	1.65e-04	2.88	1.65e-04	2.88
200	2.16e-05	2.93	2.16e-05	2.93
400	2.79e-06	2.95	2.79e-06	2.95
800	3.41e-07	3.03	3.41e-07	3.03

表 1: IMEX LDG 格式误差估计. 网格数  $N$ , 收敛阶 Order, 计算空间  $V^2$ , 时间步长  $\Delta t = 1.2e-03$ , 相对误差  $(\|n_h - n\|)/\|n\|$ .

# 一阶 IMEX LDG 格式的误差估计

$$\|n - n_h\|_{L^\infty(0,T;L^2)} + \|q - q_h\|_{L^2(0,T;L^2)} \leq C(h^{k+1} + \Delta t) \quad (20)$$

N	$V^0$		$V^1$		$V^2$	
	$\ n_h - n\  + \ q_h - q\ $	Order	$\ n_h - n\  + \ q_h - q\ $	Order	$\ n_h - n\  + \ q_h - q\ $	Order
25	3.04e+07	—	8.93e+06	—	4.02e+06	—
50	1.96e+07	0.63	4.14e+06	1.11	7.20e+05	2.48
100	1.12e+07	0.81	1.19e+06	1.80	3.07e+05	1.23
200	5.87e+06	0.93	4.05e+05	1.55	2.92e+05	0.07
400	2.98e+06	0.98	3.02e+05	0.42	2.91e+05	0.00
800	1.52e+06	0.97	2.92e+05	0.05	2.91e+05	0.00

表 2: 一阶 IMEX LDG 格式误差估计. 网格数  $N$ , 收敛阶 Order, 计算空间  $V^k, k = 0, 1, 2$ , 时间步长  $\Delta t = 1.2e - 03$ , 绝对误差  $\|n_h - n\| + \|q_h - q\|$ .

## 二阶 IMEX LDG 格式的误差估计

$$\|n - n_h\|_{L^\infty(0,T;L^2)} \leq C(h^{k+1} + (\Delta t)^2) \quad (21)$$

N	$V^0$		$V^1$		$V^2$	
	$\frac{\ n_h - n\ }{\ n\ }$	Order	$\frac{\ n_h - n\ }{\ n\ }$	Order	$\frac{\ n_h - n\ }{\ n\ }$	Order
25	9.94e-02	—	3.23e-02	—	4.42e-03	—
50	5.51e-02	0.85	9.31e-03	1.80	1.21e-03	1.87
100	2.80e-02	0.98	2.45e-03	1.92	1.65e-04	2.88
200	1.41e-02	0.99	6.22e-04	1.98	2.16e-05	2.93
400	7.07e-03	1.00	1.58e-04	1.98	2.79e-06	2.95
800	3.54e-03	1.00	3.90e-05	2.02	3.41e-07	3.03

表 3: 二阶 IMEX LDG 格式误差估计. 网格数  $N$ , 收敛阶 Order, 计算空间  $V^k, k = 0, 1, 2$ , 时间步长  $\Delta t = 1.2e - 03$ , 相对误差  $(\|n_h - n\|)/\|n\|$ .

# 三阶 IMEX LDG 格式的误差估计

$$\|n - n_h\|_{L^\infty(0,T;L^2)} \leq C(h^{k+1} + (\Delta t)^3) \quad (22)$$

N	$V^0$		$V^1$		$V^2$	
	$\frac{\ n_h - n\ }{\ n\ }$	Order	$\frac{\ n_h - n\ }{\ n\ }$	Order	$\frac{\ n_h - n\ }{\ n\ }$	Order
25	9.96e-02	—	3.23e-02	—	4.42e-03	—
50	5.51e-02	0.85	9.31e-03	1.80	1.21e-03	1.87
100	2.80e-02	0.98	2.45e-03	1.92	1.65e-04	2.88
200	1.41e-02	0.99	6.22e-04	1.98	2.16e-05	2.93
400	7.07e-03	1.00	1.58e-04	1.98	2.79e-06	2.95
800	3.54e-03	1.00	3.90e-05	2.02	3.41e-07	3.03

表 4: 三阶 IMEX LDG 格式误差估计. 网格数  $N$ , 收敛阶 Order, 计算空间  $V^k, k = 0, 1, 2$ , 时间步长  $\Delta t = 1.2e - 03$ , 相对误差  $(\|n_h - n\|)/\|n\|$ .

# 计算性能

	TVDRK3			IMEX3		
$\Delta t$	1.6e-05	4.0e-04	6.0e-04	8.0e-04	1.0e-03	1.2e-03
nt	11457	414	354	307	255	217
t	0.1833	0.1656	0.2124	0.2456	0.2550	0.2604

表 5: TVDRK LDG 格式和 IMEX LDG 格式达到稳态的时间步长  $\Delta t$ , 时间层数  $nt$ , 时间  $t$ . 网格数  $N = 100$ , 计算空间  $V^2$ .

	TVDRK3			IMEX3		
$\Delta t$	4.2e-06	4.0e-04	6.0e-04	8.0e-04	1.0e-03	1.2e-03
nt	39892	416	353	307	255	217
t	0.1675	0.1664	0.2118	0.2456	0.2550	0.2604

表 6: TVDRK LDG 格式和 IMEX LDG 格式达到稳态的时间步长  $\Delta t$ , 时间层数  $nt$ , 时间  $t$ . 网格数  $N = 200$ , 计算空间  $V^2$ .



# 总结与展望

- 根据数值算例的结果，我们证明了 TVD LDG 格式和 IMEX LDG 格式收敛性，以及 IMEX LDG 格式的无条件稳定性. 并证明了 IMEX LDG 格式误差分析的正确性.
- 由于结果中时间项的影响远小于空间项，未来可以考虑求出时间项和空间项系数的显式表达式，来获得更加精确的误差估计. 在此基础上我们可以更精确地选择时间步长.
- 这些数值方法也有望应用于其他物理模型.

# 参考文献

- [1] LIU Y, SHU C W. Error analysis of the semi-discrete local discontinuous Galerkin method for semiconductor device simulation models[J]. *Science China Mathematics*, 2010, 53: 3255-3278.
- [2] LIU Y, SHU C W. Analysis of the local discontinuous Galerkin method for the drift-diffusion model of semiconductor devices[J]. *Science China Mathematics*, 2016, 59: 115-140.

# 鸣谢

# 谢谢!

