

На правах рукописи

ПОЛЯКОВ СЕРГЕЙ ВЛАДИМИРОВИЧ

**МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ
С ПОМОЩЬЮ МНОГОПРОЦЕССОРНЫХ ВЫЧИСЛИТЕЛЬНЫХ
СИСТЕМ ПРОЦЕССОВ ЭЛЕКТРОННОГО ТРАНСПОРТА
В ВАКУУМНЫХ И ТВЕРДОТЕЛЬНЫХ МИКРО- И
НАНОСТРУКТУРАХ**

(05.13.18 - Математическое моделирование, численные методы
и комплексы программ)

ДИССЕРТАЦИЯ
на соискание ученой степени
доктора физико-математических наук

Москва – 2010

СОДЕРЖАНИЕ

Наименование	Стр.
Введение	5
Глава 1. Вычислительные основы решения задач электронного транспорта в микро- и наноструктурах	22
1.1. Математические модели электронного транспорта в твёрдотельных микро- и наноструктурах	22
1.1.1. Диффузионно-дрейфовая и квазигидродинамическая модели	24
1.1.2. Квантово-механические модели	30
1.2. Численные методы для анализа ДД и КГД моделей	34
1.2.1. Проблема численного решения краевых и начально-краевых задач для эволюционного уравнения общего вида	35
1.2.2. Схемы экспоненциальной подгонки на декартовых сетках	39
1.2.3. Схемы экспоненциальной подгонки на нерегулярных треугольных сетках	53
1.2.4. Схемы экспоненциальной подгонки на нерегулярных тетраэдральных сетках	85
1.3. Численные методы решения одномерных уравнений Фоккера-Планка и Шрёдингера	92
1.4. Разрешение проблемы некорректности одномерных краевых задач для уравнений Фоккера-Планка и Шрёдингера	95
Глава 2. Параллельные алгоритмы и технологии	99
2.1. Параллельные алгоритмы на основе преобразования Фурье	99
2.2. Параллельные алгоритмы на основе метода прогонки	110
2.2.1. Базовый алгоритм распараллеливания	114
2.2.2. Обобщения базового параллельного алгоритма	118
2.3. Параллельные итерационные методы решения уравнения Пуассона и стационарных схем экспоненциальной подгонки	124

2.4. Параллельная реализация нестационарных схем экспоненциальной подгонки	131
2.4.1 Параллельные алгоритмы решения нестационарных задач на ортогональных сетках	132
2.4.2. Технология решения задач на нерегулярных сетках	150
2.5. Распараллеливание по группам и балансировка загрузки	155
2.6. Гибридная технология параллельного программирования	158
Глава 3. Моделирование низкотемпературного примесного пробоя в полупроводниковых структурах	161
3.1. Введение в проблему	161
3.2. Физико-математическая модель	164
3.3. Численный алгоритм и программная реализация	171
3.4. Результаты моделирования	174
Глава 4. Моделирование процессов латерального переноса фотоиндуцированных носителей заряда в гетероструктурах с двумерным электронным газом	184
4.1. Введение в проблему	184
4.2. Постановка задачи	187
4.3. Равновесное состояние	193
4.4. Одномерная задача в условиях однородного освещения	196
4.4.1. Формулировка задачи	196
4.4.2. Численный алгоритм	197
4.4.3. Результаты численного анализа	199
4.5. Латеральный перенос в случае неоднородного освещения	203
4.5.1. Численный алгоритм в двумерном случае	203
4.5.2. Результаты моделирования	204
4.5.2.1. Полуаналитический подход и его результаты	205
4.5.2.2 Результаты двумерного моделирования	218

Глава 5. Моделирование электронного транспорта в квантовых каналах гетероструктур	222
5.1. Введение в проблему	223
5.2. Постановка модельной задачи	226
5.3. Численный алгоритм	229
5.4. Параллельная реализация	234
5.5. Результаты моделирования	241
Глава 6. Моделирование неравновесных процессов в ячейках автокатодных дисплеев и других автоэмиссионных микро- и наноструктур	258
6.1. Введение в проблему	258
6.2. Физико-математическая модель	261
6.3. Численный алгоритм	266
6.4. Программный комплекс MICRO_2D/3D	267
6.5. Результаты моделирования	277
6.5.1. Результаты моделирования в случае заданного распределения электрического поля на эмиссионной поверхности	277
6.5.2. Результаты моделирования реальной двумерной структуры	285
6.5.3. Результаты моделирования реальной трёхмерной структуры	295
Глава 7. Моделирование процессов образования и миграции пор в межсоединениях электрических схем	300
7.1. Введение в проблему	300
7.2. Постановка модельной задачи	303
7.3. Численный алгоритм и параллельная реализация	310
7.4. Результаты моделирования	315
Заключение	323
Список литературы	325
Список работ по теме диссертации	350

Введение

Диссертационная работа посвящена созданию математических методов исследования, параллельных численных алгоритмов и комплексов программ для моделирования с помощью современных многопроцессорных вычислительных систем (МВС) неравновесных электронных процессов в микро- и наноструктурах твердотельной и вакуумной электроники. Мотивацией для проведения работ в данном направлении была необходимость создания математических основ вычислительного эксперимента в относительно новой прикладной области, фундаментальный характер предполагаемых исследований, ориентация на использование современной суперкомпьютерной техники ввиду чрезвычайной вычислительной сложности анализируемых математических моделей. Рассмотрим эти вопросы подробнее.

Исследование физических процессов в электронных приборах является достаточно развитой отраслью науки и опирается на успехи в различных разделах физики в конце XIX и начале XX веков. Расцвет этой отрасли начался в 1950-х годах с массового внедрения радио, телевидения и электронных вычислительных машин в повседневную жизнь. Развитие электронной техники постоянно шло по пути миниатюризации и минимального энергопотребления. Номенклатура электронных устройств расширялась как по их назначению, так и по принципам действия. К концу 1950-х годов одновременно со становлением математического моделирования как основной методологии научных исследований [1] появились первые технологии компьютерного моделирования, причём в самых высокотехнологичных областях науки, таких как атомная и ядерная физика, аэро- и гидродинамика и других. Поскольку эти технологии были изначально ориентированы на использование электронной вычислительной техники, они естественным образом проникли и в область исследований, связанную с развитием элементной базы компьютеров и систем связи.

К началу 1990-х годов (когда автор начал работу в данной области), в электронике сложилось уже большое самостоятельное направление – математическое моделирование электронных приборов [2-16], охватывающее множество фундаментальных и прикладных проблем из различных разделов физики и системотехники, использующее различные типы математических моделей, как на схемном, так и на физическом уровне. Поскольку основной технологией производства электронных схем и систем была твёрдотельная кремниевая технология (см., например, [16]), то большая часть исследований была связана с изучением различных физических процессов в кремниевых и других полупроводниковых структурах. При этом в фундаментальных работах по физике полупроводников появились разделы, связанные с приложениями в электронике, и наоборот, в приборных исследованиях – обширные разделы, связанные с физикой полупроводниковых систем. Это обстоятельство позволяет не противопоставлять одни работы в данной области другим.

Практически одновременно стали складываться несколько подходов к теоретическому и численному исследованию электронных процессов. Один из них базировался на достижениях классической механики, другой вобрал в себя статистические и квантово-механические методы. Иллюстрацией достижений в рамках первого подхода могут служить такие известные работы как [17-45], в рамках второго – [46-58]. До некоторого момента подобные исследования велись относительно независимо и объединялись лишь в рамках асимптотических методов многомасштабного моделирования и теории возмущений [59-65]. Однако, когда активные элементы электронных приборов преодолели микронный масштаб и стали перемещаться в область наноразмеров (середина 1990-х годов), возникла необходимость объединения всех подходов. Исследования, учитывающие одновременно классические и квантовые свойства субмикронной структуры появились как раз в это время и бурно развиваются до настоящего момента. Со временем популярными стали работы по физике конденсированного

состояния низкоразмерных (мезоскопических) и наноструктур. При этом спектр исследуемых материалов не ограничился полупроводниками.

Приведём список работ [66-113], который далеко не полон, однако показывает, как за последние 15 лет традиционные классические подходы сменялись неклассическими и смешанными, микроструктуры превратились в мезо- и наноструктуры, а теоретический анализ все более ориентировался на высокопроизводительные компьютерные вычисления.

Анализ эволюции методов математического моделирования за последние 15 лет показывает (и это подтверждают, например, работы [109, 111-113]), что при моделировании реальных электронных систем низкой размерности необходим учёт различных геометрических и временных масштабов и сильно разнородных физических процессов в рамках одной задачи. Поэтому сегодня востребованы смешанные математические модели, включающие одновременно классические, полуклассические и квантовые описания электронных процессов в микро- и наноструктурах. При этом базовым подходом на макроуровне является чаще всего приближение механики сплошной среды (МСС), используемое как в классическом, так и в квантовом представлении. А на микро- и наноуровнях используются модели, учитывающие атомно-молекулярную структуру вещества.

Основу классических описаний в модели сплошной среды составляют, как правило, либо диффузионно-дрейфовое, либо квазигидродинамическое приближения, которые могут рассматриваться как в стационарном, так и в нестационарном случаях в пространстве от одного до трех измерений. В качестве неизвестных функций, как правило, используются концентрации, импульсы и энергия носителей заряда различного типа, а также потенциалы самосогласованного электрического и/или магнитного поля. В результате классическая часть модели представляется в виде системы нелинейных эволюционных уравнений динамики заряженных частиц, взаимодействующих в самосогласованном электрическом и/или магнитном поле.

Основу неклассических квантовых описаний составляют либо кинетические уравнения Больцмана для функций распределения частиц по скоростям, либо уравнения Шредингера в дифференциальной форме, записанные как для одночастичных, так и многочастичных волновых функций. Задачи для этих уравнений могут быть стационарными, квазистационарными или нестационарными. В первом случае может рассматриваться дискретный, непрерывный или смешанный спектр.

Дополнительно в модели могут присутствовать элементы статистического или имитационного моделирования, записанные как в классической, так и квантово-механической форме.

Учитывая особое внимание к микро- и наноструктурам с одномерным или двумерным электронным газом в связи с перспективами их применения в качестве базовых элементов новой электроники, выделим из общего ряда задачи моделирования одномерного электронного транспорта в квантовых структурах, которые чаще всего базируются на решении квазистационарной задачи туннелирования в приближении Хартри-Фока с учетом электрон-электронных взаимодействий и корреляционных эффектов. Именно этим моделям в диссертации было уделено особое внимание.

Сочетание в одной задаче классических и неклассических описаний приводит к существенному усложнению математической модели. Характерными особенностями такой модели являются, как правило, многомасштабность, многокомпонентность, нелинейность, в том числе нелокальная, некорректность в отдельных случаях, неоднородность по пространству и времени, большое число неизвестных функций. Эти особенности предъявляют повышенные требования к численным алгоритмам анализа таких моделей и вызывают необходимость применения современной компьютерной и суперкомпьютерной техники в численных экспериментах. Поэтому в диссертации были развиты методы и подходы изначально ориентированные на параллельные вычисления.

Примеров успешного решения сложных физических проблем в выбранной прикладной области теперь уже достаточно [109, 112]. Однако в каждом конкретном случае могут понадобиться новые математические методы и их компьютерные и суперкомпьютерные реализации. Не является исключением и настоящая диссертационная работа, в которой большинство из использованных математических моделей были относительно новыми и не имели развитой вычислительной базы для их детального анализа и соответственно результатов моделирования. Экспериментальные данные в выбранных приложениях до сих пор остаются неполными и имеют фрагментарный характер, не позволяющий сделать однозначные выводы о природе исследуемых физических процессов.

Конкретные цели и задачи диссертации. Основной целью данной работы было создание математических основ для моделирования с помощью современных многопроцессорных вычислительных систем неравновесных электронных процессов в микро- и наноструктурах твердотельной и вакуумной электроники и проведение вычислительных экспериментов для ряда актуальных проблем. В качестве конкретных прикладных задач были рассмотрены проблемы моделирования процессов примесного пробоя и одномерного электронного транспорта в квантовых каналах наноструктур на основе AlGaAs, электронной эмиссии из кремниевых автоэммиттеров субмикронных размеров, образования и миграции пор в межсоединениях электронных схем в современных чипах в результате электрических и термомеханических воздействий. Все эти задачи объединяет сильная нелинейность и многомасштабность моделируемых процессов, а также повышенная сложность при численной, а затем и компьютерной реализации. Следует подчеркнуть, что имеющиеся численные подходы и доступные на сегодняшний день комплексы программ до сих пор не позволяют решать рассмотренные в диссертации задачи в полном объеме и с необходимой точностью. Более того, многие из них появились под влиянием исследований

аналогичных представляемому в данной работе и проведенных в последние 15 лет.

В рамках указанной выше прикладной тематики в диссертации стояли следующие задачи:

- на основе предварительного анализа разработать или выбрать наиболее адекватные математические модели изучаемых процессов;
- разработать или адаптировать к конкретным условиям эффективные численные методы для анализа используемых математических моделей;
- реализовать численные методики в виде комплексов последовательных и/или параллельных программ;
- провести детальное компьютерное моделирование исследуемых процессов и выработать рекомендации для специалистов из выбранных предметных областей;
- обобщить полученные математические результаты на случай более общих постановок задач из выбранных классов.

Методы исследования. В диссертационной работе применялся практически весь аппарат методов математического моделирования. На уровне моделей в основу работы легли модели механики сплошной среды и полуклассические квантово-механические модели (мотивация такого подхода подробно рассмотрена в п. 1.1 гл. 1). Основу численных алгоритмов составили сеточные методы решения обыкновенных дифференциальных уравнений и уравнений с частными производными. При построении пространственно-временных аппроксимаций дифференциальных уравнений использовались методы конечных разностей и конечных объёмов, применяемые как на ортогональных, так и на нерегулярных треугольных и тетраэдральных сетках (детали этого выбора обсуждаются в п. 1.2, 1.3 гл. 1). При построении нерегулярных треугольных и тетраэдральных сеток использовались прямые методы типа Делоне. Для некоторых из построенных

численных схем проводился анализ устойчивости и сходимости с помощью принципа максимума и/или метода энергетических неравенств.

Для решения систем линейных алгебраических уравнений, возникающих в результате сеточных аппроксимаций дифференциальных уравнений, использовались как прямые методы (методы прогонки и преобразования Фурье), так и итерационные (метод переменных направлений и схема сопряженных градиентов с предобуславливателями Якоби и неполного разложения Холецкого). Для решения систем нелинейных уравнений использовались метод простой итерации и метод Ньютона. Детали параллельной реализации этих методов рассматриваются в гл. 2.

Для преодоления проблемы большой размерности сеточных задач использовались методы свертки решения, продолжения решения по малому параметру, локально-одномерный подход. Для частичного разрешения проблемы многомасштабности моделируемых процессов использовался метод введения параметра порядка. Для верификации полученных численных результатов проводилось их сравнение с известными теоретическими фактами и экспериментальными и расчетными данными других исследователей.

Основные результаты работы можно сформулировать следующим образом:

1. Разработаны вычислительные основы математического моделирования с помощью многопроцессорных вычислительных систем нескольких актуальных для приложений классов задач твердотельной и вакуумной микро- и наноэлектроники.
2. Развита математическая модель электронной эмиссии с поверхности кремниевых микро- и наноструктур и электро-, термо- и стресс-миграции пор в медных межсоединениях электронных схем.
3. Разработаны конечно-объемные схемы экспоненциальной подгонки для решения начально-краевых задач для эволюционных уравнений на ортогональных и нерегулярных треугольных и тетраэдральных сетках.

4. Предложены методика регуляризации и численные алгоритмы решения пространственно нуль-мерных и одномерных нелокально нелинейных некорректных математических задач, моделирующих электронные процессы в наноструктурах.
5. Разработаны параллельные алгоритмы решения задач электронного транспорта в полупроводниковых твердотельных и вакуумных микро- и наноструктурах.
6. Созданы комплексы параллельных программ для моделирования процессов электронной эмиссии с поверхности кремниевых автокатодов и электро-, термо- и стресс- миграции пор в медных межсоединениях электронных схем.
7. С помощью разработанных вычислительных методик и комплексов программ получены новые результаты в исследовании процессов низкотемпературного примесного пробоя в полупроводниках типа GaAs, одномерного электронного транспорта в наноструктурах на основе AlGaAs, автоэлектронной эмиссии из кремниевого микроатода с учетом реальной геометрии структуры.

Научная новизна полученных в диссертации результатов состоит в следующем.

1. В диссертации исследуются новые математические модели, описывающие электронные процессы в микро- и наноструктурах и разработанные автором совместно со специалистами и коллегами из Фрязинского отделения ИРЭ РАН, МГТУ «СТАНКИН», LSI Logic Incorporation. В качестве таковых можно указать модели примесного пробоя и одномерного электронного транспорта в наноструктурах на основе AlGaAs, модель неравновесного электронного транспорта в кремниевом автоэмиттере субмикронных размеров, модель процессов электро-, термо- и стресс- миграции в медных межсоединениях электронных схем.

2. В диссертации разработаны оригинальные численные методы анализа изучаемых процессов на базе как традиционных, так и новых

математических моделей. Среди развитых численных подходов отметим конечно-объемные схемы экспоненциальной подгонки для решения начально-краевых задач для эволюционных уравнений на ортогональных и нерегулярных треугольных и тетраэдральных сетках, методику регуляризации и численные методы решения пространственно одномерных нелокально нелинейных квантовых задач в приближении Хартри-Фока.

3. В процессе работы над диссертацией автором созданы новые параллельные алгоритмы и комплексы программ, реализующие разработанные численные методы, а именно, параллельные реализации конечно-объемных схем экспоненциальной подгонки на ортогональных и нерегулярных сетках в одномерном, двумерном и трехмерном случаях, а также параллельный алгоритм решения нелокально нелинейной системы уравнений Шредингера большой размерности, используемый для моделирования одномерного электронного транспорта в квантовом канале наноструктуры и включающий методику балансировки загрузки вычислителей.

4. В диссертации проведены численные исследования задач, для которых натурные эксперименты и вычисления других авторов либо отсутствуют, либо весьма фрагментарны. В частности:

- проведено численное моделирование задачи о примесном пробое в наноструктуре на основе AlGaAs, для которой в литературе имелись только теоретические оценки;
- выполнено численное исследование процессов переноса фотоиндуцированных носителей заряда в слое двумерного электронного газа наноструктуры на основе AlGaAs с целью определения возможностей оптической диагностики таких структур на этапе роста (ранее для данной задачи известны были только результаты нескольких натуральных экспериментов, проведенных во Фрязинском отделении ИРЭ РАН);

- проведен детальный численный анализ одномерного электронного транспорта в квантовом канале наноструктуры на основе AlGaAs (ранее для данной задачи имелись отдельные теоретические оценки и результаты зарубежных натуральных экспериментов, напрямую не позволяющие судить о физической основе транспорта);
- выполнено детальное численное исследование задачи об электронной эмиссии из кремниевого автоэммиттера субмикронных размеров в различных пространственных постановках (одномерной, двумерной, трехмерной), в том числе, с учетом реальной геометрии катодной ячейки (ранее для анализа экспериментальных данных в этой области обычно использовались оценки на основе упрощенной модели, не отражающей особенностей распределения электрического поля и электронного транспорта в реальных микрокатодах).

Теоретическая и практическая ценность результатов диссертации заключается в ниже следующем.

- Совместно со специалистами в области твердотельной и вакуумной микро- и наноэлектроники разработаны новые математические модели, более адекватно воспроизводящие моделируемые процессы и явления.
- Разработаны новые эффективные численные методы компьютерного анализа используемых математических моделей.
- Разработаны новые подходы к параллельной реализации традиционных и новых численных алгоритмов с целью использования их при моделировании с помощью современных суперкомпьютерных систем.
- На основе предложенных математических моделей и разработанных численных методов созданы комплексы программ для персональных и суперкомпьютеров, позволяющие проводить детальные исследования задач из выбранных прикладных областей. Один из комплексов внедрен в промышленную систему моделирования.
- С помощью разработанных комплексов программ изучены механизмы пробоя наноструктуры на основе AlGaAs и развития зарядовой и

спиновой неустойчивости в квантовом канале такой наноструктуры, выявлены возможности неразрушающей оптической диагностики наноструктур в процессе их роста, исследованы особенности электронного транспорта в кремниевых микроавтоэмиттерах и рассчитаны их эмиссионные характеристики, получены реалистичные данные о процессе образования и миграции пор в межсоединениях электронных схем под действием протекающего по ним тока.

Личный вклад соискателя. В диссертационной работе представлены результаты, полученные при решающем вкладе соискателя. Основные результаты диссертации получены лично соискателем. Исключение составляют формулировки математических моделей для рассмотренных в работе приложений и физические интерпретации полученных результатов моделирования. В частности, физико-математические модели низкотемпературного примесного пробоя, фотоиндуцированного классического и неравновесного квантового электронного транспорта в селективно-легированных гетероструктурах с двумерным электронным газом (см. гл. 1, 3, 4) разработаны профессором В.А. Сабликовым из Фрязинского отделения ИРЭ РАН, физико-математическая модель электронной эмиссии из кремниевых автоэмиттеров субмикронных размеров (см. гл. 1, 6) разработана совместно с профессором В.А. Федирко из МГТУ «СТАНКИН», математическая модель образования и миграции пор под действием электрического тока и термомеханических напряжений (см. гл. 7) разработана совместно с профессором В.Я. Сухаревым и доктором Jun Ho Choу из LSI Logic Incorporation.

Достоверность и обоснованность полученных в диссертации результатов определяется их теоретическим и численным анализом (предложенные численные методы исследованы на устойчивость и сходимость либо теоретически, либо численно) и верификацией при разнообразном тестировании, включающем сравнение с точными решениями (при их наличии), сравнением с результатами экспериментов и расчетами по

другим моделям, ясным физическим смыслом полученных результатов и согласованностью с современными представлениями о предмете исследования.

Апробация работы. Результаты исследований, приведенных в диссертационной работе, были представлены и обсуждались на 40 всероссийских и международных конференциях:

- The Third International Congress on Industrial and Applied Mathematics (ICIAM'95), Hamburg (Germany), July, 3-7, 1995.
- 2-ая Российская конференция по физике полупроводников, г. Зеленогорск, 26 февраля - 1 марта 1996 г.
- 23-rd International Simposium on Compound Semiconductors, 23-27 September, 1996, S.-Peterburg, Russia.
- 4-ый Международный симпозиум "Наноструктуры: Физика и Технология - 96", С.-Петербург, 23-27 сентября 1996 г.
- 5-ый Международный симпозиум "Наноструктуры: Физика и Технология - 97", С.-Петербург, 23-27 июня 1997 г.
- Третья международная научная конференция "Математические модели нелинейных возбуждений, переноса, динамики, управления в конденсированных системах и других средах", Тверь, 29 июня - 3 июля 1998 г.
- Fourth Int. Conf. on Numerical Methods and Applications – NMA'98, Sofia (Bulgaria), 19-23 August 1998.
- 6-ой Международный симпозиум "Наноструктуры: Физика и Технология", С.-Петербург, 22-26 июня 1998 г.
- 7-ой Международный симпозиум "Наноструктуры: Физика и Технология", С.-Петербург, 14-18 июня 1999 г.
- Четвертый Всероссийский семинар "Проблемы теоретической и прикладной электронной оптики", Москва, 21-22 октября 1999 г.
- IV Российская конференция по физике полупроводников "Полупроводники 99", Новосибирск, 25-29 октября 1999 г.

- 12-th Internatinal Vacuum Microelectronics Conference, IVMC'99, Darmstadt (Germany), July 6-9, 1999.
- Международная конференция "Математическая физика, математическое моделирование и приближенные методы", посвященная памяти академика А.Н. Тихонова, Обнинск, 15-19 мая 2000 г.
- 4-ая Международная научная конференция "Математические модели нелинейных возбуждений, переноса, динамики, управления в конденсированных системах и других средах", г. Москва, 27 июня - 1 июля 2000 г.
- 8-ой Международный симпозиум "Наноструктуры: Физика и Технология", С.-Петербург, 19-23 июня 2000 г.
- 3-rd International Conference "Finite Difference Schemes: Theory and Applications (FDS-2000)", Palanga, Lithuania, Sept. 1-4, 2000.
- Всероссийская научная конференция "Высокопроизводительные вычисления и их приложения", Черногловка, 30 октября - 2 ноября 2000 г.
- 13-th Internatinal Vacuum Microelectronics Conference, IVMC'00, Darmstadt, Germany, July 6-9, 2000.
- 6th International Computational Accelerator Physics Conference (ICAP 2000), Darmstadt (Germany), Sept. 11-14, 2000.
- Second International Conference "MODERN TRENDS in COMPUTATIONAL PHYSICS – MTCP2000", Dubna (Russia), July 24-29, 2000.
- Int. Conf. "Displays and Vacuum Electronics (DVE 2001)", Garmish-ParteanKirche (Germany), May 2-3, 2001.
- Int. Conf. "Dynamical systems modelling and stability investigation", Kyiv (Ukraine), May 22-25, 2001.
- 4th International Vacuum Electron Sources Conference (IVESC'2002), Saratov (Russia), July 15-19, 2002.

- V International Conference on Numerical Methods and Applications – NM & A 02, Borovets (Bulgaria), August 20-24, 2002.
- Четвёртый Всероссийский семинар "Сеточные методы для краевых задач и приложения", Казань, 13-16 сентября 2002 г.
- 5th International Congress on Mathematical Modeling, Dubna (Russia), September 30 - October 6, 2002.
- Международная конференция "Математические идеи П.Л. Чебышева и их приложение к современным проблемам естествознания", Обнинск, 14-18 мая 2002 г.
- Пятый Всероссийский семинар "Сеточные методы для краевых задач и приложения", посвященный 200-летию Казанского государственного университета, Казань, 17-21 сентября 2004 г.
- IV International Congress on Mathematical Modeling, Nizhny Novgorod (Russia), September 20-26, 2004.
- Всероссийская научная конференция «Научный сервис в сети: технологии параллельного программирования», Новороссийск, 18-23 сентября 2006 г.
- Международная научная конференция «Параллельные вычислительные технологии (ПаВТ'2007)», Челябинск, 29 января - 2 февраля 2007 г.
- Восьмой всероссийский семинар "Проблемы теоретической и прикладной электронной и ионной оптики", Москва, 29-31 мая 2007 г.
- Всероссийская научная конференция "Научный сервис в сети Интернет: многоядерный компьютерный мир. 15 лет РФФИ", Новороссийск, 24-29 сентября 2007 г.
- Седьмой Всероссийский семинар "Сеточные методы для краевых задач и приложения", Казань, 21-24 сентября 2007 г.
- XIV научно-техническая конференция с участием зарубежных специалистов «Вакуумная наука и техника», Сочи, 8-15 октября 2007 г.

- Всероссийская научная конференция "Научный сервис в сети Интернет: решение больших задач", Новороссийск, 22-27 сентября 2008 г.
- Международная научная конференция "Моделирование нелинейных процессов и систем", Москва, 14-18 октября 2008 г.
- Девятый Всероссийский семинар "Проблемы теоретической и прикладной электронной и ионной оптики", Москва, 27-29 мая 2009 г.
- International Conference «Mathematical Modeling and Computational Physics (ММСР'2009)», Dubna, July 7-11, 2009.
- Всероссийская суперкомпьютерная конференция "Научный сервис в сети ИНТЕРНЕТ. Масштабируемость, параллельность, эффективность", Абрау-Дюрсо, 21-26 сентября 2009 г.

Результаты работы обсуждались на рабочих семинарах ИММ РАН, НИВЦ МГУ, МСЦ РАН, РИЦ «Курчатовский институт».

Реализация и внедрение результатов работы. Работа выполнена в Институте математического моделирования РАН и включает результаты пятнадцатилетних исследований соискателя по созданию математических моделей, численных методов, параллельных алгоритмов и комплексов программ для моделирования актуальных научно-технических задач в области твердотельной и вакуумной микро- и наноэлектроники.

Работа выполнялась в рамках научных планов Института математического моделирования РАН, проектов Программ фундаментальных исследований Президиума и Отделения математических наук РАН, проектов Российского фонда фундаментальных исследований, проектов ИНТАС, проекта Научно-технической программы Союзного государства «Разработка и использование программно-аппаратных средств Грид-технологий перспективных высокопроизводительных (суперкомпьютерных) вычислительных систем семейства «СКИФ», проектов Центра математического моделирования ИММ РАН – МГТУ «СТАНКИН», а также в

рамках научного сотрудничества с компанией LSI Logic Incorporation (США) – производителем чипов для персональных и промышленных компьютеров.

Научные положения диссертации и разработанные на их основе методики, алгоритмы и программные комплексы использовались для совместных исследований в следующих организациях: Фрязинское отделение Института радиотехники и электроники им. В.А. Кательникова РАН, ФГУП «НИИФП им. Ф.В. Лукина», Центр математического моделирования ИММ РАН – МГТУ «СТАНКИН», LSI Logic Incorporation.

Результаты работы, посвященные параллельной реализации численных алгоритмов, вошли в основу учебного курса «Параллельные вычисления в микроэлектронике», читаемом автором на базовой кафедре математического моделирования Московского государственного института электронной техники (технического университета).

Основные публикации. По теме диссертации опубликовано 54 работы, из них 21 – статьи в ведущих отечественных и зарубежных рецензируемых журналах, в том числе 14 – статьи в российских рецензируемых журналах из списка ВАК. Основные публикации приведены в конце работы в виде отдельного списка [А1-А48].

Благодарности. Автор выражает глубокую благодарность руководителям Института математического моделирования РАН А.А. Самарскому и Б.Н. Четверушкину, создавшим поистине творческую атмосферу в ИММ РАН и обративших внимание многих молодых исследователей на такое перспективное направление математического моделирования как высокопроизводительные вычисления в естественных и гуманитарных науках. Отдельно хочется поблагодарить Б.Н. Четверушкина за его постоянное внимание и поддержку в работе. Также автор выражает искреннюю благодарность своим учителям Ю.Н. Карамзину и В.А. Трофимову за формирование научного мировоззрения и постоянное внимание к работе. Автор выражает глубокую благодарность своим старшим коллегам и соавторам В.А. Сабликову и В.А. Федирко за инициацию

интереса к фундаментальным и прикладным проблемам микро- и наноэлектроники и неоценимую помощь в развитии физико-математических моделей, использовавшихся в диссертации. Также автор благодарен своим коллегам и соавторам И.В. Абалакину, Е.Н. Аристовой, В.Г. Бобкову, А.С. Болдареву, П.Н. Вабищевичу, В.В. Вьюркову, В.А. Гасилову, Е.Н. Головченко, И.А. Граур, Т.Г. Елизаровой, И.Г. Захаровой, Е.Л. Карташевой, Г.М. Кобелькову, С.Г. Кобелькову, Т.К. Козубской, Э.М. Кононову, О.А. Косолапову, П.С. Кринову, Т.А. Кудряшовой, С.И. Мартыненко, О.Ю. Милюковой, В.А. Николаевой, О.Г. Ольховской, И.В. Попову, А.А. Свердлину, С.А. Сукову, Л.Ю. Тремсиной, И.В. Фрязинову, А.Г. Чурбанову, Е.В. Шильникову, М.В. Якобовскому за многочисленные обсуждения широкого спектра проблем вычислительной математики, математического моделирования, параллельных вычислений и программирования, затронутых в диссертации. Отдельную благодарность хочется выразить руководителям и сотрудникам Межведомственного суперкомпьютерного центра РАН Г.И. Савину, Б.М. Шабанову, Ж.Е. Вершининой, О.С. Аладышеву, П.Н. Телегину и другим за многолетнее сотрудничество и поддержку при проведении вычислительных экспериментов на параллельных вычислительных системах МСЦ РАН. Хочется также поблагодарить свою семью за долготерпение и помощь при подготовке диссертации.

ГЛАВА 1

Вычислительные основы решения задач электронного транспорта в микро- и наноструктурах

В данной главе представляются вычислительные основы моделирования электронных процессов в микро- и наноструктурах твердотельной и вакуумной электроники. В начале главы перечисляются используемые математические модели. Затем представляются разработанные в рамках диссертации численные методы для анализа выбранных математических моделей.

1.1 Математические модели электронного транспорта в твёрдотельных микро- и наноструктурах

Рассмотрим математические модели, которые будут использоваться в диссертации для описания процессов электронного транспорта в микро- и наноструктурах, применяющихся в твердотельной электронике. Как показывает анализ публикаций, посвященных теоретическим и численным исследованиям в данной предметной области, большинство используемых математических моделей основываются на детерминистическом подходе и лежат в рамках приближения механики сплошной среды (МСС) [114-117]. Объяснением этому факту может служить как широта возможностей для описания электронных процессов в рамках моделей МСС, так и большая экспериментальная и теоретическая база, подтверждающая их работоспособность.

Полностью статистические подходы (например, статистический вариант метода Монте-Карло [118-122]), а также методы имитационного моделирования (например, методы классической молекулярной динамики [123-135]), имеют меньшее распространение вследствие их высокой вычислительной емкости и сложности анализа получаемых результатов. К тому же, очень часто статистические подходы объединяются с моделями

сплошной среды. Например, широко используется метод частиц [136], квантовый метод Монте-Карло [137, 138] (объединяющий вариационный и диффузный варианты), квантовый метод молекулярной динамики [139, 140]. В этих методах используются как статистические суммы и интегралы, статистические уравнения динамики частиц, так и непрерывные описания глобальных полей, описываемые в рамках классической механики, например, электро- и магнитодинамики.

Учитывая сказанное, в настоящей работе предпочтение было отдано моделям МСС, основанным на решении систем нелинейных дифференциальных уравнений. В рамках данного подхода можно условно выделить три класса моделей: модели классической механики, модели квантовой механики и смешанные, использующие оба подхода. Использование тех или иных моделей отталкивается от физических условий и параметров изучаемых электронных структур.

Современная электроника оперирует с приборами, в которых размеры активных элементов лежат в субмикронном и частично нанометровом диапазоне (условно от 500 до 10 нм). Например, силовые элементы современных чипов и питающие их линии по толщине имеют размеры от нескольких микрон до нескольких сотен нанометров. В то же время затворы процессорных транзисторов и переключателей имеют размеры 32 нм в производстве, 15-18 нм – в технологических экспериментах и дизайне, 5-10 нм – в научных разработках. Для такого рода объектов в литературе появился термин – мезоскопические структуры [141]. Под мезоскопическими структурами понимаются структуры, размеры которых на несколько порядков больше атомных, однако в них сохраняется квантовая когерентность частиц. В результате, в таких структурах реализуются квантовые эффекты, существенно влияющие на поведение структуры в целом. Для описания электронных процессов в мезоскопических структурах используются как классические, так и квантовые модели. Однако наиболее эффективными оказываются смешанные описания.

Учитывая сказанное, в работе используются все три подхода. При этом для описания классической динамики заряженных частиц в мезоскопических структурах выбрана гидродинамическая модель в диффузионно-дрейфовом [3, 26, 37] и квазигидродинамическом [6, 8, 12, 14, 15, 18, 142-155] приближениях. Для учета квантовых эффектов используются стационарные и квазистационарные квантово-механические модели, основанные на кинетическом уравнении Фоккера-Планка [33, 156-158] и уравнениях Шрёдингера в линейном приближении [159] и в приближении Хартри-Фока [160-165].

Рассмотрим далее каждую из этих моделей применительно к тем задачам, которые рассматриваются в последующих главах.

1.1.1 Диффузионно-дрейфовая и квазигидродинамическая модели

Диффузионно-дрейфовая модель (ДДМ) выводится из кинетического уравнения Больцмана с помощью метода моментов в предположении о том, что при внешнем воздействии на изучаемую твердотельную структуру локально изменяются только концентрации заряженных и/или электрически нейтральных частиц, и при этом сохраняется полная энергия всей системы частиц. В такой ситуации ДДМ включает объемные уравнения неразрывности для концентраций свободных частиц и массовые балансные уравнения для концентраций связанных частиц. ДДМ дополняет уравнение Пуассона для потенциала самосогласованного электрического поля, если хотя бы одна группа частиц – заряженные. Если по какой-то причине изменяется энергия всей рассматриваемой системы (например, по структуре течет ток или она нагревается вследствие другого внешнего воздействия), то ДДМ дополняется уравнением энергии, которое в большинстве случаев можно записать в виде уравнения теплопроводности.

Уравнения, входящие в ДДМ дополняются начальными условиями и граничными условиями на поверхности структуры, а также на внутренних границах структуры, разделяющих одни ее компоненты от других. Для

уравнений неразрывности на внешних границах структуры обычно задаются либо постоянные концентрации частиц, либо их потоки. На внутренних границах структуры задаются условия сопряжения, например, равенство уровней Ферми. Граничные условия для потенциала электрического поля задаются в виде условий Дирихле или условий на протекающий в цепи ток на металлических контактах, условий Неймана – на диэлектрических поверхностях, условий сопряжения нормальных и тангенциальных компонент поля на границах раздела структуры. Граничные условия для уравнения теплопроводности ставятся в виде условий Дирихле (задана температура окружающей среды), Неймана (структура теплоизолирована), Ньютона (задан теплообмен с окружающей средой), смешанных или условий сопряжения.

Рассмотрим пример простейшей диффузионно-дрейфовой модели для полупроводниковой структуры, содержащей объемные примеси обоих типов (доноры и акцепторы), локальное равновесие в которой нарушается с помощью электрического или оптического воздействия. Как отмечалось выше, в этом случае ДДМ содержит уравнения неразрывности для свободных носителей заряда, электронов и дырок, массовые балансные уравнения для связанных носителей заряда на примесях (например, электронов на донорах и дырок на акцепторах), уравнение Пуассона и уравнение теплопроводности:

$$\frac{\partial n}{\partial t} = +\frac{1}{e} \operatorname{div} \mathbf{j}_n + G_n - R_n, \quad \mathbf{j}_n = e\mu_n n \mathbf{E} + eD_n \nabla n, \quad (1.1)$$

$$\frac{\partial p}{\partial t} = -\frac{1}{e} \operatorname{div} \mathbf{j}_p + G_p - R_p, \quad \mathbf{j}_p = e\mu_p p \mathbf{E} - eD_p \nabla p,$$

$$\frac{\partial n_D}{\partial t} = G_D - R_D, \quad \frac{\partial p_A}{\partial t} = G_A - R_A, \quad (1.2)$$

$$\operatorname{div}(\epsilon \mathbf{E}) = -4\pi e(n - p + n_D - p_A), \quad \mathbf{E} = -\nabla \varphi, \quad (1.3)$$

$$\rho c_p \frac{\partial T}{\partial t} = -\operatorname{div} \mathbf{Q}_T + (\mathbf{j}_n + \mathbf{j}_p, \mathbf{E}) + G_T - R_T, \quad \mathbf{Q}_T = -\kappa_T \nabla T. \quad (1.4)$$

Здесь использованы следующие общепринятые обозначения: n и p – объемные концентрации свободных неравновесных электронов и дырок, n_D и p_A – объемные концентрации связанных электронов на донорах и дырок на акцепторах, \mathbf{j}_n и \mathbf{j}_p – плотности объемных токов свободных электронов и дырок, e – элементарный заряд, равный заряду электрона, μ_n , μ_p и D_n , D_p – объемные коэффициенты подвижности и диффузии электронов и дырок, связанные соотношениями [31]:

$$D_n = \mu_n k_B T, \quad D_p = \mu_p k_B T, \quad (1.5)$$

k_B – постоянная Больцмана, T – температура решетки, G_k и R_k ($k = n, p, D, A$) – темпы генерации и рекомбинации соответствующих носителей заряда, удовлетворяющие принципу детального равновесия [31]

$$G_n - G_p + G_D - G_A - R_n + R_p - R_D + R_A = 0, \quad (1.6)$$

\mathbf{E} и φ – напряженность и потенциал электрического поля, ϵ – диэлектрическая проницаемость структуры, ρ – плотность, c_p – теплоемкость при постоянном давлении, \mathbf{Q}_T – плотность потока энергии, κ_T – коэффициент теплопроводности, G_T и R_T – темпы генерации и релаксации энергии, div и ∇ – операторы дивергенции и градиента в декартовых координатах (x, y, z) , t – время. Уравнения (1.1)-(1.4) записываются в ограниченной области Ω с границей $\partial\Omega$ для $t > 0$.

Начальные условия для уравнений (1.1), (1.2) и (1.4) можно, например, принять в виде

$$n|_{t=0} = n_0, \quad p|_{t=0} = p_0, \quad n_A|_{t=0} = n_{A0}, \quad p_A|_{t=0} = p_{A0}, \quad T|_{t=0} = T_0. \quad (1.7)$$

Условия на границе могут иметь весьма разнообразный вид. Для примера возьмем ситуацию, когда на границе заданы нормальные компоненты плотностей электронного и дырочного токов j_n^0 и j_p^0 , распределение потенциала φ_0 и температура окружающей среды T_0 :

$$(\mathbf{j}_n, \mathbf{n})|_{\partial\Omega} = j_n^0, \quad (\mathbf{j}_p, \mathbf{n})|_{\partial\Omega} = j_p^0, \quad \varphi|_{\partial\Omega} = \varphi_n, \quad T|_{\partial\Omega} = T_0. \quad (1.8)$$

Здесь \mathbf{n} – внешняя нормаль к поверхности области Ω .

ДДМ для металлических структур содержит обычно уравнения неразрывности (диффузии) для нейтральных частиц, например, для атомов или молекул металлов, составляющих структуру. Количество уравнений на единицу меньше, чем количество различных компонент (или фаз) в структуре. В зависимости от причины изменения соотношения фаз в структуре, уравнения диффузии дополняются уравнением теплопроводности, уравнением Пуассона для потенциала электрического поля, уравнениями для компонент тензора термо-механических напряжений [166].

В главе 7 для многослойной структуры, содержащей металлические и полупроводниковые элементы, использовались следующие квазистационарные уравнения:

$$\begin{aligned} \operatorname{div} \boldsymbol{\sigma}_i &= 0, \quad (x_1, x_2, x_3) \in \Omega, \\ \boldsymbol{\sigma}_i &= (\sigma_{i1}, \sigma_{i2}, \sigma_{i3})^T \quad (i=1,2,3), \quad \mathbf{u} = (u_1, u_2, u_3)^T, \\ \sigma_{ii} &= (2\mu + \lambda) \frac{\partial u_i}{\partial x_i} + \lambda \sum_{j \neq i} \frac{\partial u_j}{\partial x_j} - K\alpha, \quad \sigma_{ij} = \sigma_{ji} = \mu \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) - \gamma. \end{aligned} \quad (1.9)$$

Здесь $\boldsymbol{\sigma}_k$ – вектор-столбцы, составляющие тензор термоупругих напряжений, \mathbf{u} – вектор смещений, μ , λ и K – безразмерные коэффициенты Ламэ и модуль всестороннего сжатия, α и γ – функции нагрузки, возникающей при тепловом расширении структуры и изменении её массового состава, зависящие от температуры и массовых долей компонент среды. На границе структуры задаются либо компоненты вектора смещения, либо напряжения.

Заметим также, что если структура магнитная, то необходимо учитывать изменения характеристик электромагнитного поля в структуре. Для этого можно записать либо нестационарную систему уравнений Максвелла для основных характеристик поля, либо уравнений Лифшица-Ландау для моментов, либо воспользоваться различными приближениями электромагнитостатики [167]. В диссертации этот вариант задач не рассматривается, однако разработанный численный подход применялся в [168] к решению системы одномерных нестационарных уравнений Лифшица-

Ландау при численном анализе процессов перемагничивания многослойной металлической пленки.

При рассмотрении процессов в многослойных структурах, содержащих металлы, полупроводники и диэлектрики, в каждом слое (подобласти) рассматривается конкретный вариант ДДМ и ставятся соответствующие условия сопряжения.

В диссертации ДДМ применяется для анализа процессов переноса фотовозбужденных носителей заряда в полупроводниковой гетероструктуре с двумерным электронным газом (гл. 4), а также для моделирования процессов образования и миграции пор в межсоединениях электрических схем (гл. 7). В последнем случае рассматривается многослойная структура металл-диэлектрик и учитываются электро- и термомеханические изменения ее геометрии.

Если при внешнем воздействии на рассматриваемую структуру локально изменяются не только концентрации заряженных частиц, но и их энергии, например, когда частота столкновений в рамках каждой подсистемы частиц оказывается существенно выше частоты рассеяния энергии этой подсистемы, то используется *квазигидродинамическая модель* (КГДМ). В ней к уравнениям для концентраций, используемым в ДДМ, добавляются уравнения энергии для каждой подсистемы частиц. Они также получаются из кинетического уравнения Больцмана для функции распределения частиц по скоростям с помощью метода моментов. В рамках этой модели для характеристики внутренней энергии подсистемы частиц часто используют представление об эффективной температуре этой подсистемы, поэтому КГД модель в этом случае иногда называют многотемпературной.

Если при внешнем воздействии на структуру локально изменяются не энергии, а импульсы частиц, то записывается другой вариант квазигидродинамической модели, в котором наряду с уравнениями неразрывности рассматриваются уравнения движения, записанные либо относительно импульсов частиц, либо относительно их скоростей. В случае

изменений концентраций, импульсов и энергий частиц используется полная *гидродинамическая модель* [157]. В диссертации эти модели не рассматриваются, однако предлагаемые ниже численные подходы можно распространить и на этот случай.

В полупроводнике обычно рассматривают уравнения для плотности энергии электронов и дырок или чаще для неравновесной электронной (дырочной) температуры, а также уравнение для полной энергии структуры, которое можно записать в виде уравнения теплопроводности.

В гл. 6 диссертации исследуется двух- и трехтемпературный варианты КГД модели для кремниевой структуры. Поэтому в дополнение к уравнениям (1.1), (1.3), (1.4) в этом случае добавляются одно или два уравнения для плотностей энергии электронов и дырок $w_n = \frac{3}{2}nk_B T_n$ и $w_p = \frac{3}{2}pk_B T_p$ (T_n и T_p – температуры неравновесных электронов и дырок):

$$\begin{aligned} \frac{\partial w_n}{\partial t} &= -\operatorname{div} \mathbf{Q}_n + \tilde{G}_n - \tilde{R}_n, \quad \mathbf{Q}_n = \tilde{\mu}_n n \mathbf{E} + \tilde{D}_n \nabla n, \\ \frac{\partial w_p}{\partial t} &= -\operatorname{div} \mathbf{Q}_p + \tilde{G}_p - \tilde{R}_p, \quad \mathbf{Q}_p = \tilde{\mu}_p p \mathbf{E} + \tilde{D}_p \nabla p. \end{aligned} \quad (1.10)$$

Здесь \mathbf{Q}_n и \mathbf{Q}_p – плотности потоков энергии электронов и дырок, $\tilde{\mu}_n$, $\tilde{\mu}_p$ и \tilde{D}_n , \tilde{D}_p – объемные коэффициенты дрейфа и диффузии плотности энергии электронов и дырок, \tilde{G}_n, \tilde{G}_p и \tilde{R}_n, \tilde{R}_p – темпы генерации и релаксации плотности энергии электронов и дырок. Начальные условия для уравнений (1.10) вытекают из (1.7). Граничные условия аналогичны (1.8):

$$(\mathbf{Q}_n, \mathbf{n})|_{\partial\Omega} = Q_n^0, \quad (\mathbf{Q}_p, \mathbf{n})|_{\partial\Omega} = Q_p^0. \quad (1.11)$$

В заключение пункта отметим, что ДД и КГД модели рассматриваются в пространственной геометрии, имеющей от одного до трех измерений, как в стационарном, так и в нестационарном случаях.

1.1.2 Квантово-механические модели

Для описания электронного транспорта в мезоскопических структурах с учетом квантовых эффектов в диссертации используются три модели. Первая модель базируется на кинетическом уравнении Фоккера-Планка [33, 156-158] для симметричной части функции распределения электронов по энергии $f(t, \varepsilon)$ в нуль-мерном приближении:

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial \varepsilon} \left\{ A(\varepsilon) \frac{\partial f}{\partial \varepsilon} + B(\varepsilon) f \right\} + G\{f\} - R\{f\} + S\{f\} = 0. \quad (1.12)$$

Здесь $A(\varepsilon)$, $B(\varepsilon)$ – нелинейные интегральные коэффициенты, зависящие от энергии ε явным образом, $G\{f\}$ и $R\{f\}$ – генерационное и релаксационное слагаемые (также содержащие интегралы от f), $S\{f\}$ – интеграл столкновений, $t > 0$ – время, $\varepsilon > 0$ – энергия, отсчитываемая от дна зоны проводимости.

Стационарное уравнение (1.12) применяется в гл. 3 для моделирования явления низко-температурного примесного пробоя в полупроводниках типа GaAs. Оно учитывает диффузию и дрейф электронов в самосогласованном электрическом поле, процессы ударной ионизации, возбуждения и рассеяния электронов на примесях, а также парные электрон-электронные взаимодействия. Для стационарного уравнения (1.12) формулируется нелокальная краевая задача в ограниченной области энергий $[\varepsilon_p, \varepsilon_M]$ с условиями:

$$f(\varepsilon_p) = F\{f\}, \quad f(\varepsilon_M) = 0. \quad (1.13)$$

Здесь $F\{f\}$ – нелинейный функционал от f .

Стационарную краевую задачу (1.12), (1.13) назовем моделью Фоккера-Планка (МФП).

Вторая модель описывает одномерный стационарный квантовый перенос электронов через заданный потенциальный барьер. Она базируется на линейном стационарном уравнении Шрёдингера и применяется в гл. 6 для решения задачи туннелирования электронов через потенциальный барьер на

границе твердое тело – вакуум. Условно назовем эту модель линейной моделью электронного туннельного транспорта (ЛМЭТТ). В размерном виде ее можно записать следующим образом:

$$\frac{\partial^2 \psi_\varepsilon}{\partial x^2} + \frac{2m}{\hbar^2} [\varepsilon - V(x)] \psi_\varepsilon = 0, \quad x \in (0, a), \quad \varepsilon \in (0, \infty). \quad (1.14)$$

Здесь $\psi_\varepsilon = \psi_\varepsilon(x)$ – волновая функция электронов с энергией ε , $V(x)$ – потенциальный барьер, сосредоточенный в области $0 < x < a$, m – эффективная масса электрона, \hbar – постоянная Планка. Для определенности положим, что перенос происходит в положительном направлении слева направо. Положим также, что слева и справа от барьера волновая функция имеет вид плоской волны:

$$\begin{aligned} \psi_\varepsilon(x) = \psi_L(x) &= \exp[ik_L x] + R \cdot \exp[-ik_L x], \quad x < 0; \\ \psi_\varepsilon(x) = \psi_R(x) &= T \cdot \exp[ik_R(x - a)], \quad x > a; \\ k_L &= \sqrt{\frac{2m(\varepsilon - V_L)}{\hbar^2}}, \quad k_R = \sqrt{\frac{2m(\varepsilon - V_R)}{\hbar^2}}. \end{aligned} \quad (1.15)$$

Здесь амплитуда падающей на барьер волны принята равной единице, что не ограничивает общности модели. В общей постановке задачи, когда барьер нельзя считать сосредоточенным на некотором конечном интервале, волновые амплитуды определяются решениями уравнения (1.14) с асимптотикой (1.15).

Смешанные краевые условия определяются непрерывностью волновой функции и ее первой производной на границах барьера:

$$\begin{aligned} \psi_\varepsilon(0) = \psi_L(0), \quad \psi'_\varepsilon(0) = \psi'_L(0); \\ \psi_\varepsilon(a) = \psi_R(a), \quad \psi'_\varepsilon(a) = \psi'_R(a). \end{aligned} \quad (1.16)$$

Коэффициент туннелирования $D(\varepsilon)$, являющийся основной искомой характеристикой квантового переноса, по определению [159] равен отношению плотности потока в прошедшей волне к плотности потока в падающей волне:

$$D(\varepsilon) = \frac{j_\varepsilon(a)}{j_\varepsilon(0)} = \frac{j_R}{j_L} = \frac{k_R}{k_L} |T|^2 = \sqrt{\frac{\varepsilon - V_R}{\varepsilon - V_L}} |T|^2, \quad (1.17)$$

$$j_\varepsilon(x) = \frac{i\hbar}{m_e} \left(\psi_\varepsilon \frac{d\psi_\varepsilon^*}{dx} - \psi_\varepsilon^* \frac{d\psi_\varepsilon}{dx} \right).$$

Третья модель описывает квазистационарный электронный транспорт в квантовом канале полупроводниковой наноструктуры. Возникающая здесь задача туннелирования является нелинейной и многочастичной. Однако при использовании подхода Слэтера [163] и приближения Хартри-Фока [162] данная модель также формулируется в терминах одночастичных волновых функций и учитывает изменение эффективного потенциального барьера за счет потенциалов Хартри и обменного электрон-электронного взаимодействия. Также модель учитывает разделение электронных потоков по направлению и спину. В диссертации данная модель рассмотрена в одномерном случае для цилиндрически симметричной геометрии канала. Для данной геометрии потенциал самосогласованного электрического поля можно учесть в уравнениях Шрёдингера с помощью одномерной функции Грина.

Данную модель назовем условно нелинейной моделью электронного туннельного транспорта (НМЭТТ). Запишем нелинейные уравнения Шрёдингера в операторной форме без подробной расшифровки конкретных слагаемых:

$$\frac{\partial^2 \psi_{\varepsilon s}^{(\alpha)}}{\partial x^2} + \frac{2m}{\hbar^2} \left[\varepsilon - V(x) + \mathbf{U}_s^{(\alpha)}(\Psi) \right] \psi_{\varepsilon s}^{(\alpha)} = 0, \quad x \in (0, a), \quad (1.18)$$

$$\varepsilon \in (0, \infty), \quad s = \pm \frac{1}{2}, \quad \alpha = "+", "-".$$

Здесь $\psi_{\varepsilon s}^{(\alpha)}(x)$ – волновая функция электронов с энергией ε , спином s и направлением движения α , $\mathbf{U}_s^{(\alpha)}(\Psi)$ – нелинейный интегральный оператор, зависящий от всего набора волновых функций Ψ . Краевые задачи для уравнения (1.18) формулируются аналогично (1.15), (1.16).

Рассмотренные три квантовые модели исследовались в пространственно нульмерном или одномерном квазистационарном случае и

имели дополнительную координату в энергетическом пространстве. В этом смысле модель Фоккера-Планка была одномерной, а обе модели электронного туннельного транспорта – квазидвумерные.

Скажем также несколько слов о смешанных моделях. Во-первых, квазигидродинамическая модель рассматривалась в диссертации как отдельно, так и в комплексе с линейной моделью электронного туннельного транспорта при изучении процессов электронной эмиссии из кремниевого острейного эмиттера в вакуум (гл. 6). Во втором случае итоговая модель была смешанной.

Во-вторых, при решении многомерных задач туннелирования приходится искать распределение потенциала самосогласованного электрического поля путем решения уравнения Пуассона соответствующей размерности. В этом случае задача становится смешанной, поскольку потенциал электрического поля рассчитывается во всей области структуры, активный квантовый слой которой имеет нанометровые размеры, а сама структура может иметь микронные и даже миллиметровые размеры. В такой ситуации ввиду сильной разномасштабности задачи методы решения уравнения Пуассона в активном слое обычно отличаются от методов решения, применяемых на макромасштабах. Для сшивки решения на границе активного слоя и остальной части расчетной области ставятся условия сопряжения на потенциал или скачок электрического поля.

В области макромасштабов для решения уравнения Пуассона обычно применяется либо аппарат функций Грина, либо некоторый численный подход, например, метод сеток. В области микромасштабов обычно применяются полуаналитические модели распределения поля или потенциала, содержащие несколько неизвестных параметров. Например, в квантовом слое часто задается квазиравновесное распределение разности потенциалов электронной подсистемы и экранирующей ее ионной подсистемы. Распределение потенциала ионной подсистемы известно и задается, например, в форме потенциала Леннарда-Джонса [169],

осредненного по ансамблю атомов или молекул, составляющих квантовый слой. Распределение потенциала электронной подсистемы является искомой функцией, которая при отсутствии внешнего поля подчиняется принципу локального равновесия и совпадает с суммарным потенциалом ионов, а в его присутствии удовлетворяет условиям сопряжения поля на границе квантового слоя и внешней части структуры. Для этой функции подбирается некоторое полиномиальное представление поперек квантового слоя, неизвестные коэффициенты которого удовлетворяют выше указанным условиям.

1.2 Численные методы для анализа ДД и КГД моделей

В данном пункте рассмотрим основные численные алгоритмы, применявшиеся для решения поставленных в диссертации прикладных задач, использующих ДД и КГД модели. Прежде всего отметим, что обсуждающиеся ниже численные методы базируются в основном на методе сеток (по которому имеется обширнейшая библиография [170-236]) и рассматриваются в данной главе на примере решения отдельных уравнений, составляющих типовые компоненты используемых математических моделей. При этом часть модельных уравнений анализируется в стационарном случае (рассматриваются краевые задачи), часть – в нестационарном (начально-краевые задачи).

При решении дифференциальных уравнений с помощью метода сеток используются два его варианта: метод конечных разностей (МКР) (см., например, [170-212]) и метод конечных элементов (МКЭ) (см., например, [213-226]). Обобщением метода конечных разностей на нерегулярных сетках является метод конечных объёмов (МКО) (см. [188, 198, 200, 225, 227-236]). Метод конечных элементов является вариантом вариационных методов Рэлея-Рица и Бубнова-Галёркина, в котором используются конечномерные пространства с базисом, состоящим из финитных функций. Методы конечных разностей и конечных объёмов совпадают с методом Бубнова-

Галёркина в случае линейных базисных функций и медианных контрольных объёмов (см. [237-246]). По существу в МКЭ дискретизируется только расчетная область, в МКР и МКО дополнительно дискретизируются дифференциальные операторы.

В настоящее время метод конечных элементов наиболее широко используется при решении стационарных задач механики и теории упругости, поскольку позволяет использовать аппроксимации очень высокого порядка. В тоже время все большее число нестационарных эволюционных задач в областях со сложной геометрией решается методами конечных разностей и конечных объёмов ввиду устойчивости, простоты и экономичности этих методов. Эти обстоятельства позволяют ограничиться в данной работе рассмотрением схем, полученных в рамках МКР и МКО.

Ниже рассматриваются численные алгоритмы решения эволюционных уравнений и уравнения Пуассона в областях различной размерности и формы на сетках различного типа, составляющие основу рассматриваемых в работе математических моделей механики сплошной среды.

1.2.1 Проблема численного решения краевых и начально-краевых задач для эволюционного уравнения общего вида

Традиционной проблемой математического моделирования неравновесных процессов переноса заряженных частиц в нелинейных средах является сильный перепад электрического и/или магнитного полей в отдельных подобластях расчётной области. В результате этого перепада концентрации частиц изменяются на порядки и даже на десятки порядков. Вследствие этого физического эффекта многие численные подходы сталкиваются с фундаментальным ограничением на величину приложенного к среде внешнего электрического и/или магнитного поля. Получение приемлемых по точности численных результатов в условиях сильно неоднородного распределения поля достигается несколькими способами.

Первый способ состоит в получении аналитического решения в областях простой формы в условиях слабой нелинейности и использовании набора таких решений в качестве базиса для представления искомой функции в более сложных ситуациях. Второй способ связан с построением адаптивной локально сгущающейся пространственной сетки, позволяющей выделить области сильного изменения электрического и/или магнитного полей. При этом в нестационарной задаче может применяться перестроение сетки при переходе на очередной слой по времени. В дополнение к этим двум способам может применяться увеличение размерности сетки в расчёте на распараллеливание вычислений.

Последние два способа (использование подробной адаптивной сетки и параллельных вычислений) представляются наиболее универсальными, поскольку имеют ограничения лишь по величине доступных вычислительных ресурсов. Однако они предполагают, что вычисления проводятся по устойчивым сеточным схемам.

В случае расчётных областей прямоугольной формы известно множество конечно-разностных методов решения уравнений типа конвекция-диффузия. Основной задачей при построении таких методов является получение на сетке всего спектра свойств, которыми обладает дифференциальное решение. То есть разностная схема должна быть не только устойчивой и сходящейся к дифференциальному решению, но и проявлять такие фундаментальные свойства как консервативность и монотонность (в сильном или слабом смысле в зависимости от вида дифференциального уравнения). Для эволюционных уравнений параболического типа и их стационарных вариантов примером таких схем могут служить однородные консервативные монотонные схемы А.А. Самарского [247], а также слабо монотонные консервативные схемы Е.И. Голанта [248] и Н.В. Кареткиной [249]. В настоящей работе предложены их обобщения на случай различной размерности и конкретного вида эволюционных уравнений, а также применения сеток различного типа.

Рассмотрим в некоторой ограниченной области D трехмерного евклидова пространства модельное эволюционное уравнение общего вида

$$\frac{\partial u}{\partial t} = Lu + f, \quad \mathbf{r} \in D, \quad t > 0, \quad (1.19)$$

$$Lu \equiv \operatorname{div}(\mathbf{K}\nabla u + \mathbf{E}u) + (\mathbf{F}, \nabla u) - qu, \quad (1.20_1)$$

матричные, векторные и скалярные коэффициенты которого $\mathbf{K} = \{K_{\alpha\beta}\}_{\alpha,\beta=1,2,3}$,

$\mathbf{E} = (E_\alpha)^T$, $\mathbf{F} = (F_\alpha)^T$ ($\alpha = 1, 2, 3$), q и f зависят от пространственных

координат $\mathbf{r} = (x_1, x_2, x_3)$, времени t и неизвестной функции u . В (1.19) div и

∇ – операторы дивергенции и градиента в декартовых координатах, (\cdot, \cdot) –

скалярное произведение в трехмерном пространстве. Будем предполагать,

что уравнение (1.19) сохраняет параболический тип в области $D \times (0, t_{\max}]$.

Для этого достаточно равномерной эллиптичности оператора L (см.,

например, [250, 251]). В частности, если выполнены условия

$$(\mathbf{K}\xi, \xi) \geq k_0 |\xi|^2 > 0, \quad \xi \neq 0, \quad \xi \in \mathbb{R}^3,$$

(где k_0 – некоторая константа, которая не зависит от координат, времени и

значений искомой функции), то равномерная эллиптичность L имеет место,

и уравнение (1.19) сохраняет параболическость во всей области.

Для уравнения (1.19) ставится следующая начально-краевая задача:

$$u|_{t=0} = u_0(\mathbf{r}), \quad \mathbf{r} \in D; \quad (1.21)$$

$$g_1(\mathbf{K}\nabla u + \mathbf{E}u, \mathbf{n}) + g_2 u = g_3, \quad \mathbf{r} \in \partial D, \quad t > 0. \quad (1.22_1)$$

Здесь $u_0(\mathbf{r})$ – начальное распределение искомой функции $u(\mathbf{r}, t)$,

коэффициенты g_i могут зависеть от u и удовлетворяют условию

$g_1^2 + g_2^2 > 0$, $\mathbf{r} \in \partial D$; ∂D – кусочно-гладкая граница области D , \mathbf{n} – вектор

внешней нормали к границе. В случае прямоугольной области D вместо

условий (1.22₁) на границе области могут использоваться периодические

условия (обозначим их условно (1.22₂)) или обобщенные дополнительные

условия вида

$$\Phi(\mathbf{r}, t; u) = g, \quad \mathbf{r} \in \partial D, \quad t > 0, \quad (1.22_3)$$

где $\Phi(\mathbf{r}, t; u)$ – некоторый линейный или нелинейный функционал от u , а g – функция координат, времени и решения, определенная на границе области D . Примером условий (1.22₃) могут служить так называемые интегральные условия:

$$\int_D \phi(\mathbf{r}, \mathbf{r}', t; u) d\mathbf{r}' = g(\mathbf{r}, t; u), \quad \mathbf{r} \in \partial D, \quad t > 0. \quad (1.22_4)$$

Основным требованием к задаче (1.19)-(1.22) является существование классического единственного решения на временном интервале $(0, t_{\max}]$. Для этого достаточно кусочной непрерывности по совокупности переменных всех исходных данных задачи [250, 251].

Перед обсуждением дискретизации уравнения (1.19) и для учёта экспоненциального характера его решения, определяющегося полями \mathbf{E} и \mathbf{F} , преобразуем пространственный оператор L . Для этого введем следующие векторные, матричные и скалярные переменные:

$$\begin{aligned} \tilde{\mathbf{E}} &\equiv (\tilde{E}_\alpha)^T = \mathbf{K}^{-1} \mathbf{E}, \quad \tilde{\mathbf{F}} \equiv (\tilde{F}_\alpha)^T = (\mathbf{K}^{-1})^T \mathbf{F}, \\ \mathbf{V} &\equiv (V_\alpha)^T, \quad V_\alpha = G_\alpha u, \quad G_\alpha = \exp \left[\int_{x_\alpha^0}^{x_\alpha} \tilde{E}_\alpha dx \right], \quad \alpha = 1, 2, 3, \\ \tilde{\mathbf{K}} &= \left\{ \begin{array}{c} K_{\alpha\beta} \\ G_\beta \end{array} \right\}_{\alpha, \beta=1, 2, 3}, \quad \mathbf{D} = \left\{ \delta_{\alpha\beta} \frac{\partial}{\partial x_\alpha} \right\}_{\alpha, \beta=1, 2, 3}, \\ \mathbf{W} &= \tilde{\mathbf{K}} \mathbf{D} \mathbf{V}, \quad \tilde{q} = q + (\mathbf{F}, \tilde{\mathbf{E}}), \end{aligned} \quad (1.23)$$

где (x_1^0, x_2^0, x_3^0) – произвольная конечная точка пространства, в том числе одна из точек области D , $\delta_{\alpha\beta}$ – δ -функция Кронекера. Тогда оператор (1.20₁) можно переписать в следующем виде:

$$Lu \equiv \operatorname{div} \mathbf{W} + (\tilde{\mathbf{F}}, \mathbf{W}) - \tilde{q}u \equiv \operatorname{div}(\tilde{\mathbf{K}} \mathbf{D} \mathbf{V}) + (\tilde{\mathbf{F}}, \tilde{\mathbf{K}} \mathbf{D} \mathbf{V}) - \tilde{q}u, \quad (1.20_2)$$

Это представление будет использоваться ниже при дискретизации задачи (1.19)-(1.22). Нетрудно показать, что преобразования (1.23) не накладывают дополнительных ограничений на коэффициенты задачи.

При разработке сеточных численных методов решения задачи (1.19)-(1.22) независимо от пространственной размерности и наличия или отсутствия нелинейности используется интегро-интерполяционный метод [188, 200], который применяется как на ортогональных декартовых сетках (в том числе неравномерных), так и на нерегулярных треугольных и тетраэдральных сетках (как квазиравномерных, так и локально-сгущающихся). Рассмотрим последовательно все варианты предлагаемого численного алгоритма.

1.2.2 Схемы экспоненциальной подгонки на декартовых сетках

Как уже отмечалось, сеточные аппроксимации уравнений типа «конвекция-диффузия», к которым относится (1.19), известны давно. Так, в работе А.А. Самарского [247] рассмотрена методика построения консервативных монотонных разностных схем на ортогональной декартовой сетке для стационарного и нестационарного вариантов уравнения (1.19) для диагонального тензора \mathbf{K} и $\mathbf{E} = 0$. В этой работе предложена так называемая регуляризованная монотонная схема, имеющая второй порядок аппроксимации по пространственным переменным. С помощью принципа максимума доказана абсолютная устойчивость и сходимость регуляризованной схемы к дифференциальному решению со вторым порядком точности по пространству. В [188, 200] регуляризованная схема обобщена на случай цилиндрически и сферически симметричной геометрии задачи.

В работе Е.И. Голанта [248] рассматривались обобщения регуляризованной схемы А.А. Самарского на ортогональной сетке для диагонального тензора \mathbf{K} и двух вариантов одномерного уравнения (1.19): когда $\mathbf{E} \equiv 0, \mathbf{F} \neq 0$ и когда $\mathbf{E} \neq 0, \mathbf{F} \equiv 0$. Для этих вариантов были предложены варианты схемы А.А. Самарского в исходном и сопряженном пространствах. Методика исследования устойчивости и сходимости предложенных схем опиралась на использование принципа максимума для сопряженного

разностного уравнения. Кроме того, было предложено обобщение построенных схем на произвольную размерность пространства и общий вид сеточного уравнения 2-го порядка.

Отметим далее, что подход, разработанный А.А. Самарским и Е.И. Голантом не использовал преобразования (1.23). В отличие от этих работ в статье Н.В. Кареткиной [249] такое преобразование проводилось. В ней был рассмотрен случай нестационарного уравнения (1.19) с диагональным тензором \mathbf{K} и $\mathbf{F} \equiv 0$. Предложенные в работе Н.В. Кареткиной разностные схемы фактически являются обобщением на нестационарный и многомерный случай схем экспоненциальной подгонки [252], широко применяющихся при решении краевых задач для обыкновенных дифференциальных уравнений. Построенные в [249] аппроксимации отличаются от [247, 248] и удовлетворяют лишь слабому принципу максимума. Однако этого достаточно, чтобы доказать существование и единственность разностного решения, а также устойчивость и сходимость схем к дифференциальному решению со вторым порядком по пространственным переменным. Дополнительно в [249] был рассмотрен вопрос реализации построенных схем с помощью метода немонотонной прогонки (он будет обсуждаться ниже в п.1.3 в связи с параллельной реализацией).

В настоящей диссертации было предложено естественное и очевидное объединение схем А.А. Самарского и Н.В. Кареткиной на случай $\mathbf{E} \neq 0$, $\mathbf{F} \neq 0$ (см. [A27]). При этом аппроксимация экспоненциальных членов несколько отличалась от предложенной в [249]. Кроме того, было предложено в случае диагонального тензора \mathbf{K} использовать локально-одномерные схемы обобщенной экспоненциальной подгонки. В работе [A42] было также показано, что схемы обобщенной экспоненциальной подгонки можно реализовать и на нерегулярных сетках, например, треугольных и тетраэдральных (см. п. 1.2.1.2), и этому не препятствует наличие смешанных производных.

Для иллюстрации разработанного численного подхода в случае ортогональных декартовых сеток рассмотрим стационарное уравнение (1.19) в области $D = \{(x_1, x_2, x_3) : 0 < x_\alpha < 1, \alpha = 1, 2, 3\}$:

$$Lu = -f, \quad \mathbf{r} \in D. \quad (1.24)$$

В качестве граничных условий рассмотрим условия Дирихле:

$$u = g(\mathbf{r}), \quad \mathbf{r} \in \partial D. \quad (1.25)$$

Для аппроксимации задачи (1.24), (1.25) на произвольной ортогональной неравномерной сетке $\Omega = \prod_{\alpha=1,2,3} \hat{\omega}_{x_\alpha}$ будем использовать

представление оператора L в форме (1.20₂). Его можно записать подробно:

$$Lu \equiv \sum_{\alpha=1,2,3} \frac{\partial}{\partial x_\alpha} \left(\sum_{\beta=1,2,3} \tilde{K}_{\alpha\beta} \frac{\partial V_\beta}{\partial x_\beta} \right) + \sum_{\alpha=1,2,3} \tilde{F}_\alpha \sum_{\beta=1,2,3} \tilde{K}_{\alpha\beta} \frac{\partial V_\beta}{\partial x_\beta} - \tilde{q}u, \quad (1.26)$$

Используя методику [198] для аппроксимации смешанных производных, методику [247, 248] для аппроксимации недивергентных слагаемых и методику [249] для аппроксимации экспоненциальных представлений, можно получить сеточную задачу вида

$$L_h y_h = -f_h, \quad \mathbf{r}_h \in \Omega \setminus \partial\Omega, \quad (1.27)$$

$$y_h = g(\mathbf{r}_h), \quad \mathbf{r}_h \in \partial\Omega. \quad (1.28)$$

Здесь y_h , f_h и L_h – сеточные аналоги функций u , f и оператора L на Ω , \mathbf{r}_h – узлы сетки, $\partial\Omega$ – граничные узлы сетки. Для L_h на полном 27-ми точечном нерегулярном шаблоне получаем следующее выражение, записанное в безиндексной форме:

$$L_h y_h = \sum_{\alpha=1,2,3} \frac{1}{2} \left[\left(\bar{K}_{h,\alpha\alpha} V_{h,\alpha,\bar{x}_\alpha} \right)_{\hat{x}_\alpha} + \left(\bar{K}_{h,\alpha\alpha} V_{h,\alpha,x_\alpha} \right)_{\bar{x}_\alpha} \right] + \sum_{\alpha,\beta=1,2,3,\alpha \neq \beta} \frac{1}{4} \left[\left(\bar{K}_{h,\alpha\beta} V_{h,\beta,\bar{x}_\beta} \right)_{\hat{x}_\alpha} + \left(\bar{K}_{h,\alpha\beta} V_{h,\beta,\hat{x}_\beta} \right)_{\bar{x}_\alpha} + \left(\bar{K}_{h,\alpha\beta} V_{h,\beta,\hat{x}_\beta} \right)_{\hat{x}_\alpha} + \left(\bar{K}_{h,\alpha\beta} V_{h,\beta,\bar{x}_\beta} \right)_{\bar{x}_\alpha} \right] - \tilde{q}_h y_h, \quad (1.29)$$

где $\tilde{K}_{h,\alpha\beta}$, $V_{h,\alpha} = G_{h,\alpha} y_h$ и \tilde{q}_h – разностные аналоги соответствующих непрерывных функций, $\bar{K}_{h,\alpha\beta} = \chi_\alpha^\pm \tilde{K}_{h,\alpha\beta}$, $\chi_\alpha^\pm = (1 + R_\alpha)^{-1} \pm \hbar_\alpha \tilde{F}_{h,\alpha}^\pm$ – поправки

к диагональным компонентам тензора, полученные по аналогии с [247, 248] в которых $R_\alpha = 0.5(\tilde{F}_{h,\alpha}^+ h_\alpha^{(+1)} - \tilde{F}_{h,\alpha}^- h_\alpha)$, $\tilde{F}_{h,\alpha}^\pm = 0.5(\tilde{F}_{h,\alpha} \pm |\tilde{F}_{h,\alpha}|)$. Функции $G_{h,\alpha}$ в отличие от [249] аппроксимируются по формуле трапеций:

$$G_{h,\alpha} \equiv G_{h,\alpha}^{(i_\alpha)} = \exp \left[\sum_{j_\alpha=0}^{i_\alpha} \tilde{E}_{h,\alpha}^{(j_\alpha)} \tilde{h}_\alpha^{(j_\alpha)} \right].$$

Заметим, что в качестве точки (x_1^0, x_2^0, x_3^0) выбрано начало координат.

Сделаем далее замечание относительно аппроксимации на границе в случае других типов граничных условий. Условия Неймана и Ньютона (входят в (1.22₁)) обычно аппроксимируются со вторым порядком по пространственным координатам. Для этого на границе записывается аналог (1.29), учитывающий граничные условия. Если задача периодическая, то никаких отличий от задачи Дирихле не возникает. Если используются обобщенные граничные условия (1.22₃), содержащие функционалы, то здесь возникает вопрос об аппроксимации функционалов со вторым порядком точности по пространственным переменным. Например, если эти условия можно записать в виде интегралов (1.22₄), то для их аппроксимации используются квадратурные формулы необходимого порядка точности.

Реализация схемы (1.27), (1.28) в линейном случае осуществляется методами решения линейных алгебраических систем, обсуждаемыми в гл. 2. В нелинейном случае для реализации схемы (1.27), (1.28) предлагается использовать метод простой итерации по нелинейности:

$$\begin{aligned} y_h^{s+1} &= y_h^s + \tau_s \left(L_h \left[y_h^s \right]^s y_h^s + f_h \right), \quad \mathbf{r}_h \in \Omega \setminus \partial\Omega, \quad s = 0, 1, 2, \dots; \\ y_h^s &= g(\mathbf{r}_h), \quad \mathbf{r}_h \in \partial\Omega, \quad s \geq 0. \end{aligned} \tag{1.30}$$

Здесь τ_s – параметры метода, $L_h \left[y_h^s \right]^s$ – оператор L_h на s -ой итерации. В качестве начального приближения можно выбрать любую ограниченную функцию, удовлетворяющую граничным условиям задачи. На каждой

итерации (1.30) возникает линейная алгебраическая задача, решение которой также рассматривается в гл. 2.

Из общей теории решения систем нелинейных алгебраических уравнений следует (см., например, [253, 254]) утверждение:

Утверждение 1.1. *При наличии у исходной задачи (1.27), (1.28) единственного ограниченного решения и выполнения условий*

$$\left\| E - \tau_s^s A_h \right\|_C \leq q < 1, \quad s \geq 0, \quad (1.31)$$

$$A_h \equiv -L_h \left[\begin{matrix} s \\ y_h \end{matrix} \right] - \left(\frac{\partial}{\partial y_h} L_h [y_h] \right) \Big|_{y_h = \xi_h^s} y_h^*,$$

итерационный процесс (1.30) сходится в норме $C(\Omega)$ к решению задачи (1.27), (1.28) со скоростью геометрической прогрессии со знаменателем q .

В (1.31) y_h^* – точное решение сеточной задачи, $\frac{\partial}{\partial y_h} L_h [y_h]$ – оператор

производных от $L_h [y_h]$, A_h – положительно определенный оператор вблизи

корня y_h^* , ξ_h^s – вектор, обращающий приближенное разложение в ряд

Тейлора

$$L_h \left[\begin{matrix} s \\ y_h \end{matrix} \right] \approx L_h \left[\begin{matrix} * \\ y_h \end{matrix} \right] + \left(\frac{\partial}{\partial y_h} L_h [y_h] \right) \left(\begin{matrix} s \\ y_h - y_h^* \end{matrix} \right)$$

в равенство.

Доказательство утверждения 1.1 следует из принципа сжимающих отображений [253, 254].

Заметим, что использование метода Ньютона при решении задач рассматриваемого класса не всегда оправдано, поскольку он очень трудоемок в реализации и может иметь более жесткие по сравнению с (1.31) условия сходимости.

Рассмотрим вопрос о порядке аппроксимации схемы. Действуя аналогично [198] можно показать, что разностная схема (1.27), (1.28) с

сеточным оператором (1.29) аппроксимирует задачу (1.24), (1.25) с непрерывным оператором (1.26) с порядком $O(\hbar_1^2 + \hbar_2^2 + \hbar_3^2)$. Если учесть сказанное про методику аппроксимации при других типах граничных условий, то легко понять, что и в этих случаях порядок аппроксимации не изменится.

Рассмотрим далее вопрос об устойчивости и сходимости построенной разностной схемы. Прежде всего, отметим, что устойчивость и сходимость схемы (1.27), (1.28) зависит от вида нелинейности. В частности, если исходная задача (1.24), (1.25) линейная, и все коэффициенты являются ограниченными кусочно-непрерывными функциями своих аргументов, то с помощью объединения методик [198] и [248] можно показать, что разностная схема (1.27), (1.28) устойчива и сходится к решению дифференциальной задачи (1.24), (1.25) со скоростью $O(\hbar_1^2 + \hbar_2^2 + \hbar_3^2)$ в норме $W_2^1(\Omega)$. Можно доказать такую же скорость сходимости в норме $C(\Omega)$, если использовать теоремы вложения [198] или принцип максимума для сопряженного уравнения [248]. Результат можно распространить на случай граничных условий других типов (Неймана, Ньютона, смешанных, периодических, интегральных).

При наличии ограниченной нелинейности коэффициентов дифференциальной задачи (1.24), (1.25) результат предыдущих рассуждений не изменится, однако доказать его в каждом конкретном случае будет достаточно сложно. Здесь не будем рассматривать данный вопрос, поскольку ниже он исследуется для более общего случая нерегулярных сеток.

Суммируя сказанное можно сформулировать следующую теорему.

Теорема 1.1. *Разностная схема (1.27) с граничными условиями общего вида и сеточным оператором (1.29) устойчива и сходится к точному решению дифференциальной задачи (1.24), (1.21) с пространственным*

оператором (1.26) со скоростью $O(\hbar_1^2 + \hbar_2^2 + \hbar_3^2)$ в норме $W_2^1(\Omega)$, если выполнены следующие условия:

1) коэффициенты исходной дифференциальной задачи (1.24), (1.21) ограничены и кусочно-непрерывны по совокупности переменных в рассматриваемой области D , а их производные в области непрерывности ограничены;

2) решение дифференциальной задачи (1.24), (1.21) существует, единственно и является достаточно гладким в области D ;

3) шаги сетки удовлетворяют неравенствам:

$$0 < h_{\alpha, \max} < h_{\alpha}^0, \quad \alpha = 1, 2, 3, \quad (1.32)$$

где h_{α}^0 – положительные константы, независящие от шагов сетки.

Заметим, что под достаточной гладкостью решения подразумевается существование у него непрерывных производных такого порядка, чтобы погрешность аппроксимации имела указанный в теореме вид. В данном случае достаточно существования в D ограниченных четвертых производных искомой функции по совокупности пространственных переменных.

По указанным выше причинам доказательство теоремы проводить не будем. Отметим только, что оно проводится с помощью комбинации априорных оценок погрешности разностного решения и погрешности аппроксимации в сеточных нормах $W_2^1(\Omega)$ и $C(\Omega)$ [198]. Ограничения на шаги связаны с тем, что возмущенная квадратичная форма $(\bar{\mathbf{K}}\xi, \xi)$ (где $\bar{\mathbf{K}} = \{K_{\alpha, \beta} / G_{\beta}\}_{\alpha, \beta=1,2,3}$ должна быть равномерно положительно определена в узлах сетки Ω .

Перейдем к конкретным применениям построенной схемы.

Рассмотрим **одномерный вариант схемы экспоненциальной подгонки**. Для этого возьмем в качестве D отрезок $[0,1]$ и запишем краевую задачу для одномерного стационарного уравнения конвекции-диффузии:

$$\frac{d}{dx} \left(k \frac{du}{dx} + Eu \right) + F \frac{du}{dx} - qu = -f, \quad 0 < x < 1, \quad (1.33)$$

с тремя типами граничных условий:

$$\eta_m u(x_m) + \theta_m u'(x_m) = \mu_m, \quad \eta_m^2 + \theta_m^2 \neq 0, \quad x_m = m, \quad m = 0, 1; \quad (1.34_1)$$

$$u(0) = u(1), \quad u'(0) = u'(1); \quad (1.34_2)$$

$$\Phi_0(u) = c_0, \quad \Phi_1(u) = c_1. \quad (1.34_3)$$

Здесь k, E, F, q, f – функции, которые могут зависеть от x и u , η_m, θ_m, μ_m – параметры, которые могут зависеть от решения, $\Phi_m(u)$ – линейные или нелинейные функционалы по u .

Результирующая конечно-разностная схема экспоненциальной подгонки во внутренних узлах неравномерной сетки $\hat{\omega}_x$ имеет следующий вид:

$$L_h y_i \equiv \frac{1}{\tilde{h}_i} \left(\tilde{k}_{i+1/2} \frac{y_{i+1} G_{i+1} - y_i G_i}{G_{i+1/2} h_{i+1}} - \tilde{k}_{i-1/2} \frac{y_i G_i - y_{i-1} G_{i-1}}{G_{i-1/2} h_i} \right) - \tilde{q}_i y_i = -f_i. \quad (1.35)$$

Здесь используются следующие стандартные обозначения: i – индекс узлов сетки ($0 < i < N$), $h_i, h_{i+1}, \tilde{h}_i = 0.5(h_i + h_{i+1})$ – шаги сетки. Коэффициенты уравнений (1.35) имеют следующий вид:

$$\begin{aligned} \tilde{k}_{i\pm 1/2} &= \chi_i^\pm \frac{k_{i\pm 1/2}}{G_{i\pm 1/2}}, \quad \chi_i^\pm = (1 + R_i)^{-1} \pm \tilde{h}_i \tilde{F}_i^\pm, \quad R_i = 0.5(\tilde{F}_i^+ h_{i+1} - \tilde{F}_i^- h_i), \\ \tilde{F}_i^\pm &= 0.5(\tilde{F}_i \pm |\tilde{F}_i|), \quad \tilde{F}_i = \frac{F_i}{k_i}, \quad G_{i\pm 1/2} = 0.5(G_{i\pm 1} + G_i), \end{aligned} \quad (1.36)$$

$$G_i = \exp \left\{ \sum_{j=0}^i \frac{E_j}{k_j} \tilde{h}_j \right\}, \quad k_{i\pm 1/2} = \frac{2k_i k_{i\pm 1}}{k_{i\pm 1} + k_i}, \quad \tilde{q}_i = q_i + \frac{F_i E_i}{k_i},$$

где $f_i = f(x_i, y_i)$, $q_i = q(x_i, y_i)$, $k_i = k(x_i, y_i)$, $E_i = E(x_i, y_i)$, $F_i = F(x_i, y_i)$ – значения соответствующих функций на сетке с учетом нелинейности. Отметим, что при реализации вычисление функций G_i не требуется. Вместо этого в расчетных формулах фигурируют отношения G_{i+1} / G_i , которые легко вычисляются:

$$\frac{G_{i+1}}{G_i} = \exp \left[\frac{E_{i+1}}{k_{i+1}} \tilde{h}_{i+1} \right], \quad i = 0, \dots, N-1.$$

Схема (1.35) дополняется сеточными аналогами условий (1.34). При этом в случае условий 2-го или 3-го рода в соответствующем граничном узле записывается уравнение (1.33) с учетом этих условий, чтобы получить второй порядок аппроксимации и в граничном узле. В случае функциональных условий (1.34₃) используются сеточные аналоги функционалов. Вычисление решения производится методом прогонки (подробнее см. п. 1.3).

Далее рассмотрим нестационарный вариант задачи (1.19)-(1.22) с оператором (1.26). В этом случае можно построить следующую *нестационарную схему экспоненциальной подгонки с весами*

$$\begin{aligned} \frac{\hat{y}_h - y_h}{\tau} &= \sigma \left[\hat{L}_h \hat{y}_h + \hat{f}_h \right] + (1 - \sigma) [L_h y_h + f_h], \quad \mathbf{r}_h \in \Omega \setminus \partial\Omega, \quad t > 0, \\ y_h|_{t=0} &= u_0(\mathbf{r}_h), \quad \mathbf{r}_h \in \Omega, \end{aligned} \quad (1.37)$$

дополненную соответствующими граничными условиями. Здесь $\hat{y}_h = y_h(t + \tau)$, $y_h \equiv y_h(t)$ (то же относится и к другим функциям), $\sigma \in [0, 1]$ – вес схемы, оператор L_h определен в (1.29).

Для реализации нелинейного варианта схемы с весами (также как и для стационарной задачи) предлагается использовать метод простой итерации:

$$\begin{aligned} \frac{\hat{y}_h^{s+1} - y_h}{\tau} &= \sigma \left[L_h \left[\hat{y}_h^s \right] \hat{y}_h^{s+1} + \hat{f}_h \right] + (1 - \sigma) [L_h [y_h] y_h + f_h], \\ s = 0, 1, 2, \dots, \quad \hat{y}_h^0 &= y_h, \end{aligned} \quad (1.38)$$

где в качестве параметра метода выступает шаг по времени τ .

Исследование сходимости итераций (1.38) приводит к следующему утверждению.

Утверждение 1.2. *При наличии у задачи (1.37) единственного ограниченного решения на каждом временном слое и выполнения условий*

$$\left\| \left(E - \tau \sigma L_h \left[\begin{smallmatrix} s \\ \hat{y}_h \end{smallmatrix} \right] \right)^{-1} \begin{smallmatrix} s \\ A_h \end{smallmatrix} \right\|_C \leq q < 1, \quad s \geq 0, \quad (1.39)$$

$$\begin{smallmatrix} s \\ A_h \end{smallmatrix} \equiv \tau \sigma \left(\frac{\partial}{\partial y_h} L_h [y_h] \right) \Big|_{y_h = \begin{smallmatrix} s \\ \xi_h \end{smallmatrix}} \begin{smallmatrix} * \\ \hat{y}_h \end{smallmatrix},$$

итерационный процесс (1.38) сходится в норме $C(\Omega)$ к решению задачи (1.37) на каждом временном слое со скоростью геометрической прогрессии со знаменателем q .

В (1.39) $\begin{smallmatrix} * \\ \hat{y}_h \end{smallmatrix}$ – точное решение задачи (1.37) на верхнем слое, $\begin{smallmatrix} s \\ \xi_h \end{smallmatrix}$ – вектор, обращающий приближенное разложение в ряд Тейлора

$$L_h \left[\begin{smallmatrix} s \\ \hat{y}_h \end{smallmatrix} \right] \approx L_h \left[\begin{smallmatrix} * \\ \hat{y}_h \end{smallmatrix} \right] + \left(\frac{\partial}{\partial y_h} L_h [y_h] \right) \left(\begin{smallmatrix} s \\ \hat{y}_h \end{smallmatrix} - \begin{smallmatrix} * \\ \hat{y}_h \end{smallmatrix} \right)$$

в равенство. Доказательство сходимости, как и выше, опирается на принцип сжимающих отображений [253, 254].

Для схемы (1.37) можно доказать следующую теорему.

Теорема 1.2. *Разностная схема (1.37) с граничными условиями общего вида и сеточным оператором (1.29) устойчива и сходится в норме $L_2(\Omega) \times C(\omega_t)$ к точному решению дифференциальной задачи (1.19)-(1.22) с пространственным оператором (1.26) со скоростью $O(\hbar_1^2 + \hbar_2^2 + \hbar_3^2 + \tau^\gamma)$ (где $\gamma = 1$, если $\sigma \neq 0.5$, и $\gamma = 2$, если $\sigma = 0.5$), если выполнены следующие условия:*

- 1) коэффициенты исходной дифференциальной задачи (1.18), (1.20), (1.21) ограничены и кусочно-непрерывны по совокупности переменных в рассматриваемой области $D \times (0, t_{\max}]$, а их производные в области непрерывности ограничены;
- 2) решение дифференциальной задачи (1.19)-(1.22) существует, единственно и является достаточно гладким в области $D \times (0, t_{\max}]$;
- 3) шаги сетки удовлетворяют неравенствам:

$$\begin{aligned}
0 < h_{\alpha, \max} < h_{\alpha}^0, \quad \alpha = 1, 2, 3; \\
0 < \tau < C_{\sigma} \min_{\alpha} h_{\alpha, \min}^{\beta}, \quad \beta = \begin{cases} 1, & \sigma = 1, \\ 2, & 0 \leq \sigma < 1, \end{cases}
\end{aligned} \tag{1.40}$$

где h_{α}^0, C_{σ} – положительные константы, независящие от шагов сетки.

Доказательство теоремы в линейном случае можно провести методом энергетических неравенств [188, 198, 200]. Для этого необходимо записать задачу для погрешности разностного решения и провести необходимые оценки, используя ограниченность разностного и дифференциального решения, а также соответствующих производных последнего.

В нелинейном случае для явной схемы применяется методика, использующаяся в линейном случае. Для значений $\sigma > 0$ необходимо сначала доказать ограниченность разностного решения на новом слое, а затем рассмотреть задачу для погрешности разностного решения с учетом нелинейности. При этом также можно использовать энергетический метод. Такая комбинированная методика применялась автором в работах [255-259].

В случае диагонального тензора \mathbf{K} можно предложить использовать **локально-одномерные схемы экспоненциальной подгонки**. Приведем пример ЛОС на базе неявной схемы первого порядка точности по времени. В этом случае можно использовать два варианта – полностью нелинейные и линейные полуявные схемы:

$$\begin{aligned}
\frac{\hat{y}_h^{(1)} - y_h}{\tau} &= L_{h,1} [\sigma \hat{y}_h^{(1)} + (1 - \sigma) y_h] \hat{y}_h^{(1)} + \frac{1}{3} \hat{f}_h, \\
\frac{\hat{y}_h^{(2)} - \hat{y}_h^{(1)}}{\tau} &= L_{h,2} [\sigma \hat{y}_h^{(2)} + (1 - \sigma) y_h] \hat{y}_h^{(2)} + \frac{1}{3} \hat{f}_h, \\
\frac{\hat{y}_h^{(3)} - \hat{y}_h^{(2)}}{\tau} &= L_{h,3} [\sigma \hat{y}_h^{(3)} + (1 - \sigma) y_h] \hat{y}_h^{(3)} + \frac{1}{3} \hat{f}_h, \\
\hat{y}_h &= \hat{y}_h^{(3)}, \quad \mathbf{r}_h \in \Omega \setminus \partial\Omega, \quad t > 0,
\end{aligned} \tag{1.41}$$

где функции $y_h^{(\alpha)}$ играют роль промежуточных значений решения и находятся с помощью решения серии одномерных задач, операторы $L_{h,\alpha}[\cdot]$ имеют вид (1.34) по соответствующей координате и в сумме составляют

оператор $L_h[\cdot]$, вес $\sigma = 0$ или 1. Начальные условия для схемы (1.41) совпадают с условиями для схемы (1.37).

Схема с весом $\sigma = 0$ – линейная и реализуется с помощью комбинации прогонок. Схема с весом $\sigma = 1$ – нелинейная. Для каждого из этапов нелинейной схемы приходится использовать итерационный процесс, например, аналогичный (1.38). Сходимость итераций гарантируется утверждением, аналогичным Утв. 1.2. Заметим также, что для обеспечения лучшей устойчивости и сходимости порядок применения одномерных операторов следует менять от шага к шагу (например, 1-2-3 на нечетном шаге и 3-2-1 – на четном) [210].

Обе схемы (1.41) имеют порядок суммарной аппроксимации $O(\hbar_1^2 + \hbar_2^2 + \hbar_3^2 + \tau)$. Для них справедлива следующая теорема.

Теорема 1.3. *Разностные схемы (1.41) с граничными условиями общего вида и сеточным оператором (1.29) устойчивы и сходятся в норме $L_2(\Omega) \times C(\omega_t)$ к точному решению дифференциальной задачи (1.18), (1.20), (1.21) с пространственным оператором (1.26) со скоростью $O(\hbar_1^2 + \hbar_2^2 + \hbar_3^2 + \tau)$, если выполнены следующие условия:*

1) *коэффициенты исходной дифференциальной задачи (1.18), (1.20), (1.21) ограничены и кусочно-непрерывны по совокупности переменных в рассматриваемой области $D \times (0, t_{\max}]$, а их производные в области непрерывности ограничены;*

2) *решение дифференциальной задачи (1.18), (1.20), (1.21) существует, единственно и является достаточно гладким в области $D \times (0, t_{\max}]$;*

3) *шаги сетки удовлетворяют неравенствам:*

$$\begin{aligned} 0 < h_{\alpha, \max} < h_{\alpha}^0, \quad \alpha = 1, 2, 3; \\ 0 < \tau < C_{\sigma} \min_{\alpha} h_{\alpha, \min}, \end{aligned} \tag{1.42}$$

где h_{α}^0, C_{σ} – положительные константы, независящие от шагов сетки.

Если необходимо рассчитать существенно нестационарный процесс, вместо локально одномерной схемы (1.41), имеющей первый порядок точности по времени, лучше всего выбрать семиэтапную схему двуциклического расщепления [210]:

$$\begin{aligned} \frac{y_h^{j+\alpha/8} - y_h^{j+(\alpha-1)/8}}{\tau} &= \frac{1}{4} L_{h,\alpha} \left[\frac{1}{2} (\hat{y}_h + y_h) \right] (y_h^{j+\alpha/8} + y_h^{j+(\alpha-1)/8}), \quad \alpha = 1, 2, 3, \\ \frac{y_h^{j+5/8} - y_h^{j+3/8}}{\tau} &= \frac{1}{2} (\hat{f}_h + f_h), \\ \frac{y_h^{j+(5+\alpha)/8} - y_h^{j+(4+\alpha)/8}}{\tau} &= \frac{1}{4} L_{h,4-\alpha} \left[\frac{1}{2} (\hat{y}_h + y_h) \right] (y_h^{j+(5+\alpha)/8} + y_h^{j+(4+\alpha)/8}), \quad \alpha = 1, 2, 3, \end{aligned} \quad (1.43)$$

имеющую второй порядок аппроксимации по времени и безусловно устойчивую в норме $L_2(\Omega \times \omega_t)$. Реализация и анализ сходимости схемы (1.43) проводятся также, как и для схемы (1.41).

Рассмотрим кратко случай криволинейной области D и применения аппроксимаций на нерегулярной сетке Ω , не являющейся произведением сеток по отдельным пространственным направлениям. В этой ситуации можно использовать методику аппроксимации оператора (1.29) на нерегулярном шаблоне, предложенную в [188, 198, 200]. В итоге мы получим *схемы экспоненциальной подгонки на нерегулярной сетке*. При этом необязательно выбирать точку (x_1^0, x_2^0, x_3^0) внутри области D , поскольку соответствующая часть интеграла в реальных вычислениях не понадобится.

Альтернативным подходом является метод фиктивных областей (см., например, [209]). Для реализации схем экспоненциальной подгонки в рамках данного подхода достаточно доопределить в фиктивных областях уравнение (1.18) уравнением типа Лапласа с соответствующими ненулевыми диагональными компонентами тензора \mathbf{K} .

В заключение пункта отметим, что предложенные обобщенные схемы экспоненциальной подгонки имеют большие перспективы при решении линейных и нелинейных задач электро- и магнитодинамики в параболическом приближении. Преимуществом схем является то, что

ограничение сверху на величину $\delta = \max(h|E|)$ (максимум произведения шага пространственной сетки на величину нормированного модуля электрического или магнитного поля), которое имеют любые разностные схемы, для схем экспоненциальной подгонки существенно ниже. Например, при увеличении δ до единицы и более большинство схем начинает быстро деградировать по точности, а некоторые теряют устойчивость. Экспоненциальные же схемы устойчиво работают и при больших δ (до 150-300 единиц при вычислениях с двойной точностью) ввиду их консервативности и слабой монотонности. Последнее было продемонстрировано в работе [A7] при решении задачи о динамике фотоиндуцированных зарядов в полупроводниковой гетероструктуре (см. гл. 3). Указанный предел величины δ можно повысить до 30000 и более, если проводить вычисления с четверной точностью, которая аппаратно реализована в рамках новой 64-битной платформы вычислительных систем.

Недостатком представленных схем экспоненциальной подгонки было отсутствие обобщения на случай нерегулярных областей и нерегулярной сетки. В частности, автору не были известны их аналоги для треугольных и тетраэдральных сеток. Восполнить этот пробел удалось в работе [A42], в которой построены схемы экспоненциальной подгонки для случая произвольной нерегулярной треугольной сетки и отмечена возможность распространения результата на случай тетраэдральной сетки, а также проведён теоретический анализ схем и определены условия их устойчивости и сходимости. Эти результаты рассматриваются в следующем пункте.

Следует также отметить, что представленные варианты экспоненциальных схем на ортогональных декартовых сетках можно применить и в случае недекартовых систем координат (цилиндрической, сферической, обобщенной ортогональной) и соответствующих сеток. Принципиальным моментом при этом является свойство ортогональности используемых сеток.

Случай неортогональных криволинейных координат и соответственно неортогональных сеток примыкает к вопросу о реализации предложенных экспоненциальных схем на нерегулярных сетках, рассматриваемому ниже.

1.2.3 Схемы экспоненциальной подгонки на нерегулярных треугольных сетках

В данном пункте представлены варианты схем экспоненциальной подгонки для случая нерегулярной расчетной области и использования для аппроксимаций нерегулярных треугольных сеток. Остановимся сначала на стационарной постановке задачи.

Рассмотрим двумерный вариант уравнения (1.24) в произвольной замкнутой двумерной области D с кусочно-гладкой границей ∂D . Для упрощения описания предлагаемого численного подхода удобно перейти от координат (x_1, x_2) к координатам (x, y) . Оператор L в форме (1.26) в этом случае будет иметь вид

$$\begin{aligned} Lu \equiv & \frac{\partial}{\partial x} \left(\tilde{K}_{xx} \frac{\partial V_x}{\partial x} + \tilde{K}_{xy} \frac{\partial V_y}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\tilde{K}_{yx} \frac{\partial V_x}{\partial x} + \tilde{K}_{yy} \frac{\partial V_y}{\partial y} \right) + \\ & + \tilde{F}_x \left(\tilde{K}_{xx} \frac{\partial V_x}{\partial x} + \tilde{K}_{xy} \frac{\partial V_y}{\partial y} \right) + \tilde{F}_y \left(\tilde{K}_{yx} \frac{\partial V_x}{\partial x} + \tilde{K}_{yy} \frac{\partial V_y}{\partial y} \right) - \tilde{q}u. \end{aligned} \quad (1.44)$$

Компоненты вектора \mathbf{V} в (1.44) имеют вид:

$$V_x = G_x u, \quad G_x = \exp \left[\int_{x_0}^x \tilde{E}_x dx' \right]; \quad V_y = G_y u, \quad G_y = \exp \left[\int_{y_0}^y \tilde{E}_y dy' \right]. \quad (1.45)$$

Граничное условие зададим с помощью вектора потока \mathbf{W} с компонентами

$$W_x = \tilde{K}_{xx} \frac{\partial V_x}{\partial x} + \tilde{K}_{xy} \frac{\partial V_y}{\partial y}, \quad W_y = \tilde{K}_{yx} \frac{\partial V_x}{\partial x} + \tilde{K}_{yy} \frac{\partial V_y}{\partial y}, \quad (1.46)$$

в следующем виде

$$(\mathbf{W}, \mathbf{n}) = W_n, \quad (x, y) \in \partial D. \quad (1.47)$$

Здесь W_n – некоторая функция, зависящая от координат и решения u .

Как и выше предполагается, что двумерная краевая задача (1.24), (1.44), (1.47) имеет единственное решение, обладающее в D достаточной гладкостью. Искомая функция $u(x, y)$ удовлетворяет принципу максимума и следующему интегральному тождеству

$$\oint_{\partial D} (\mathbf{W}, \mathbf{n}) dl + \iint_D [(\tilde{\mathbf{F}}, \mathbf{W}) - \tilde{q}u] dx dy = - \iint_D f dx dy, \quad (1.48)$$

которое легко получить, проинтегрировав уравнение (1.24) по области D и применив формулу Остроградского (см., например, [260]).

Перейдем к построению *конечно-объемной схемы экспоненциальной подгонки на треугольной сетке* для задачи (1.24), (1.44), (1.47), предполагая, что область D может иметь произвольно сложную форму, в том числе невыпуклую и/или многосвязную, с конечным числом точек разрыва гладкости границы.

Пусть в области D задана сетка $\bar{\omega}_p = \{ P_i = (x_i, y_i), i = 1, \dots, N \}$, содержащая как внутренние точки области D , так и точки ее границы ∂D . Множеством ω_p будем обозначать все внутренние точки $\bar{\omega}_p$. На $\bar{\omega}_p$ построена триангуляция $T(\bar{\omega}_p) = \{ T_m = \Delta(P_{i_m}, P_{j_m}, P_{k_m}), P_{i_m}, P_{j_m}, P_{k_m} \in \omega_p, m = 1, \dots, M \}$, про которую известно следующее:

- 1) $T(\bar{\omega}_p)$ содержит все узлы $\bar{\omega}_p$;
- 2) образующие $T(\bar{\omega}_p)$ треугольники T_m имеют ненулевую площадь и пересекаются не более чем по образующим их вершинам или ребрам;
- 3) объединение треугольников $D_h = \bigcup_{m=1}^M T_m$ имеет ту же связность, что и область D ;
- 4) отношение площадей $\gamma = S(D_h) / S(D) = 1 - \varepsilon$ ($0 \leq \varepsilon < 1$).
- 5) в случае $\varepsilon > 0$ величина γ стремится к 1 при бесконечном измельчении $T(\bar{\omega}_p)$ с учетом криволинейности границы;
- 6) центр масс каждого треугольника проектируется на каждую его сторону (см. рис.1.1).

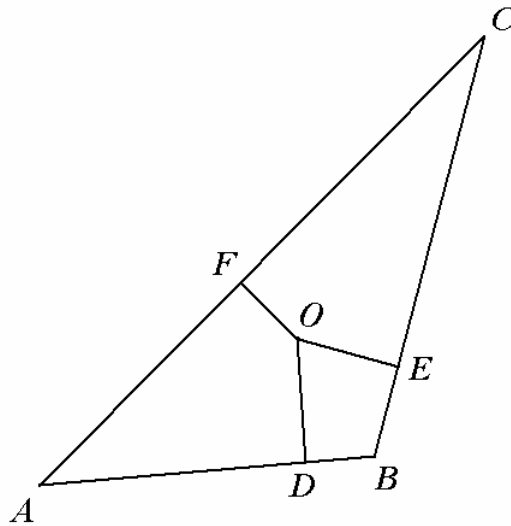


Рисунок 1.1. Пример тупоугольного треугольника, центр масс которого проектируется на все три его стороны.

Вопрос построения сетки, удовлетворяющей указанным требованиям, в данной работе подробно не рассматривается, хотя один из возможных подходов предложен автором в работе [261].

В общем случае триангуляция $T(\bar{\omega}_p)$ может не удовлетворять критерию Делоне, и в ней могут быть треугольники с тупыми углами. Однако такие треугольники являются граничными.

Дополнительно введем множество граничных узлов сетки $\partial\bar{\omega}_p = \bar{\omega}_p \setminus \omega_p$, а также множество граничных ребер треугольников $E(\bar{\omega}_p)$. Количество граничных ребер обозначим L .

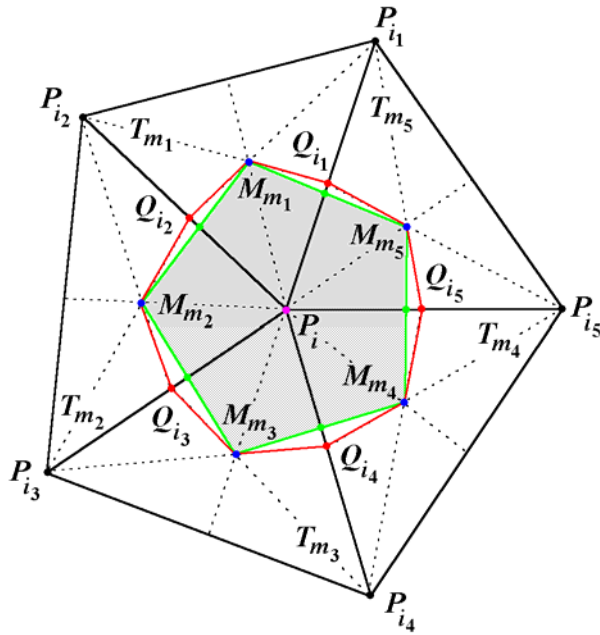
Для построения конечно-объемной схемы введем в области D дуальную к $\bar{\omega}_p$ сетку $\bar{\omega}_v = \{V_i = V(P_i), i = 1, \dots, N\}$, состоящую из контрольных объемов. Для этого в каждой точке сетки $P_i \in \bar{\omega}_p$ определим множество всех треугольников, вершинами которых она является, $H_i = \{T_m \in T(\bar{\omega}_p) : P_i \in T_m\}$, и назовем его шаблоном в точке P_i . Пусть количество точек в шаблоне равно $N_i + 1$ (включая точку P_i), а количество треугольников равно M_i . Пронумеруем точки и треугольники в смежном порядке в направлении

против часовой стрелки: $P_i, P_i, \dots, P_{i_{N_i}}, T_{m_1}, \dots, T_{m_{M_i}}$. При этом каждый треугольник T_{m_j} образован точками $P_i, P_{i_j}, P_{i_{j+1}}$ (см. рис. 1.2), которые удобно также переименовать в $P_i, P_{m_j}^{(-)}, P_{m_j}^{(+)}$ (см. рис. 1.3). Заметим также, если точка P_i – внутренняя, то шаблон H_i полный, и $M_i = N_i$, при этом $N_i \geq 3$. Если точка P_i – граничная, то шаблон H_i неполный, и $M_i < N_i$, при этом $N_i \geq 2$.

В каждом из треугольников шаблона определим точку пересечения медиан (центр масс треугольника) M_{m_j} ($j = 1, \dots, M_i$). Соединим эти точки последовательно и получим замкнутую ломаную L_i , окружающую точку P_i . Фигура, ограниченная ломаной L_i (зеленые линии на рис. 1.2), составляет контрольный объем V_i (заштрихованная область на рис. 1.2) в точке P_i с площадью $|V_i|$. Если точка P_i является граничной, то ломаную L_i замыкается через проекции точек M_j на соответствующие граничные ребра и саму точку P_i (см. рис. 1.2б). Последнее можно сделать ввиду выполнения условия б) для триангуляции.

Введенный контрольный объём называется **медианным контрольным объёмом**. Его достоинство состоит в том, что он всегда существует, является выпуклым и пересекается с соседними объёмами только по границе. Такие контрольные объёмы используются при решении задач МСС методом конечных элементов. Недостаток медианных объёмов в рамках МКО – несимметричная аппроксимация самосопряженных дифференциальных операторов. Поэтому в рамках МКО используется **барицентрический контрольный объём**. Он отличается от медианного тем, что все звенья ломаных разбиваются на две части, каждая из которых лежит на медиане соответствующего треугольника. Новая ломаная \tilde{L}_i состоит из $2M_i$ звеньев (отмечены красным на рис. 1.2), каждое из которых соединяет центр масс M_{m_j} (синие точки на рис. 1.2) одного из треугольников с серединой Q_{i_k} (красные точки на рис. 1.2) одной из сторон этого треугольника.

a)



б)

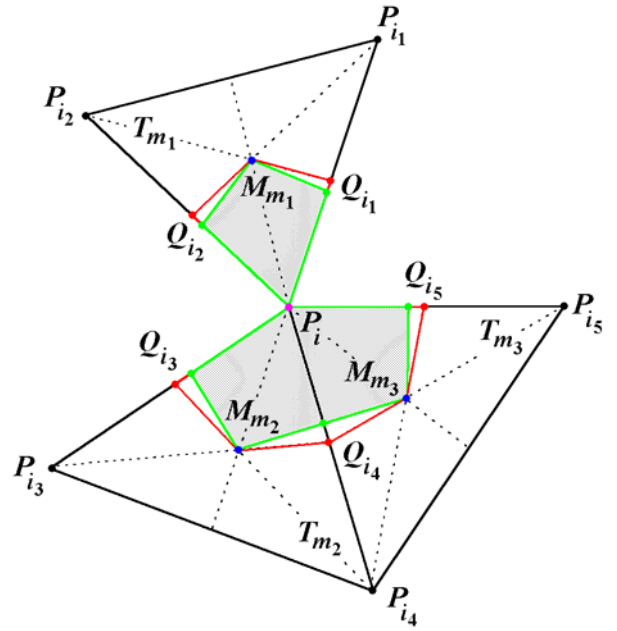


Рисунок 1.2. Схема определения медианного и барицентрического контрольных объёмов для внутренних (а) и граничных точек (б). Синие точки – центры масс треугольников, красные – середины ребер треугольников, зеленые – пересечения ребер и отрезков, соединяющих смежные центры масс. Зелеными линиями и штриховкой выделен медианный объём, красными линиями – барицентрический объём.

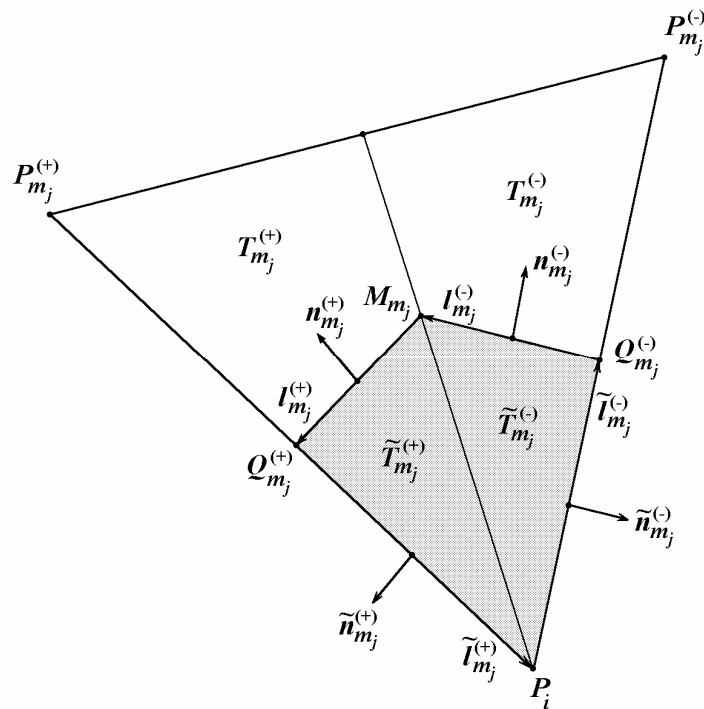


Рисунок 1.3. Составные части барицентрического контрольного объёма в треугольнике T_{m_j} и направления нормалей и конормалей на их границах.

Заметим, что в качестве контрольных объёмов можно также рассмотреть *ячейки Дирихле*, в которых вместо центров масс берутся точки пересечения серединных перпендикуляров. Однако использование таких контрольных объёмов существенно ограничивает класс триангуляций, на которых проводится решение задачи. А именно, все треугольники триангуляции должны быть строго остроугольными. Иначе контрольные объёмы могут пересекаться или вовсе не существуют. Построенная на них схема в случае слабо тупоугольных треугольников может быть не консервативной.

В дальнейшем предполагается, что используются барицентрические контрольные объёмы V_i . Их преимущество состоит в том, что они могут быть построены на широком классе триангуляций, удовлетворяющих условиям 1)-6), и попарно не пересекаются.

Рассмотрим подробнее составные части барицентрического контрольного объёма, представленные на рис. 1.2, 1.3. Как видно из рисунков, пересечение контрольного объёма V_i и любого треугольника T_{m_j} шаблона H_i даёт четырехугольник $\tilde{T}_{m_j} \equiv V_i \cap T_{m_j} = \tilde{T}_{m_j}^{(-)} \cup \tilde{T}_{m_j}^{(+)}$, состоящий из двух смежных треугольных частей $\tilde{T}_{m_j}^{(-)}$ и $\tilde{T}_{m_j}^{(+)}$.

В дальнейшем используются обозначения: $P_i = (x_i, y_i)$, $P_{m_j}^{(-)} = (x_{m_j}^{(-)}, y_{m_j}^{(-)})$, $P_{m_j}^{(+)} = (x_{m_j}^{(+)}, y_{m_j}^{(+)})$ – вершины треугольника T_{m_j} , упорядоченные в направлении против часовой стрелки; $Q_{m_j}^{(-)}, Q_{m_j}^{(+)}$ – середины сторон, исходящих из точки P_i ; S_{m_j} , $\tilde{S}_{m_j}^{(\pm)}$ и \tilde{S}_{m_j} – площади T_{m_j} , $\tilde{T}_{m_j}^{(\pm)}$ и \tilde{T}_{m_j} (см. рис. 1.3). На границе \tilde{T}_{m_j} , состоящей из четырех направленных отрезков

$$\tilde{\mathbf{I}}_{m_j}^{(-)} = \overrightarrow{P_i Q_{m_j}^{(-)}}, \quad \mathbf{I}_{m_j}^{(-)} = \overrightarrow{Q_{m_j}^{(-)} M_{m_j}}, \quad \mathbf{I}_{m_j}^{(+)} = \overrightarrow{M_{m_j} Q_{m_j}^{(+)}}, \quad \tilde{\mathbf{I}}_{m_j}^{(+)} = \overrightarrow{Q_{m_j}^{(+)} P_i}, \quad (1.49)$$

определим векторы конормалей и нормалей к этим отрезкам по следующим формулам:

$$\mathbf{v}_{m_j}^{(\pm)} = \mathbf{I}_{m_j}^{(\pm)} / |\mathbf{I}_{m_j}^{(\pm)}|, \quad \tilde{\mathbf{v}}_{m_j}^{(\pm)} = \tilde{\mathbf{I}}_{m_j}^{(\pm)} / |\tilde{\mathbf{I}}_{m_j}^{(\pm)}|, \quad \mathbf{n}_{m_j}^{(\pm)} = \Theta \mathbf{v}_{m_j}^{(\pm)}, \quad \tilde{\mathbf{n}}_{m_j}^{(\pm)} = \Theta \tilde{\mathbf{v}}_{m_j}^{(\pm)}, \quad (1.50)$$

где $\Theta = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix}$ – оператор поворота на 90 градусов по часовой стрелке.

Также удобно использовать векторы

$$\begin{aligned} \Delta P_{m_j}^{(\pm)} &= \overline{P_i P_{m_j}^{(\pm)}} = \left(x_{m_j}^{(\pm)} - x_i, y_{m_j}^{(\pm)} - y_i \right)^T = \left(\Delta x_{m_j}^{(\pm)}, \Delta y_{m_j}^{(\pm)} \right)^T, \\ \Delta Q_{m_j}^{(\pm)} &= \overline{P_i Q_{m_j}^{(\pm)}} = \frac{1}{2} \Delta P_{m_j}^{(\pm)} = \frac{1}{2} \left(\Delta x_{m_j}^{(\pm)}, \Delta y_{m_j}^{(\pm)} \right)^T, \\ \Delta M_{m_j} &= \overline{P_i M_{m_j}} = \frac{1}{3} \left(\Delta x_{m_j}^{(+)} + \Delta x_{m_j}^{(-)}, \Delta y_{m_j}^{(+)} + \Delta y_{m_j}^{(-)} \right)^T, \end{aligned} \quad (1.51)$$

и следующие соотношения:

$$\begin{aligned} \tilde{\mathbf{I}}_{m_j}^{(-)} &= \Delta Q_{m_j}^{(-)} = \frac{1}{2} \left(\Delta x_{m_j}^{(-)}, \Delta y_{m_j}^{(-)} \right)^T, \quad \tilde{\mathbf{I}}_{m_j}^{(+)} = -\Delta Q_{m_j}^{(+)} = -\frac{1}{2} \left(\Delta x_{m_j}^{(+)}, \Delta y_{m_j}^{(+)} \right)^T, \\ \mathbf{I}_{m_j}^{(-)} &= \Delta M_{m_j} - \Delta Q_{m_j}^{(-)} = \frac{1}{6} \left(2\Delta x_{m_j}^{(+)} - \Delta x_{m_j}^{(-)}, 2\Delta y_{m_j}^{(+)} - \Delta y_{m_j}^{(-)} \right)^T, \\ \mathbf{I}_{m_j}^{(+)} &= \Delta Q_{m_j}^{(+)} - \Delta M_{m_j} = \frac{1}{6} \left(\Delta x_{m_j}^{(+)} - 2\Delta x_{m_j}^{(-)}, \Delta y_{m_j}^{(+)} - 2\Delta y_{m_j}^{(-)} \right)^T, \\ S_{m_j} &= \frac{1}{2} \left[\Delta P_{m_j}^{(-)} \times \Delta P_{m_j}^{(+)} \right] = \frac{1}{2} \left(\Delta x_{m_j}^{(-)} \Delta y_{m_j}^{(+)} - \Delta x_{m_j}^{(+)} \Delta y_{m_j}^{(-)} \right), \\ |V_i| &= \sum_{j=1}^{M_i} \tilde{S}_{m_j}, \quad \tilde{S}_{m_j}^{(-)} = \frac{1}{2} \left[\Delta Q_{m_j}^{(-)} \times \Delta M_{m_j} \right] = \frac{1}{6} S_{m_j}, \\ \tilde{S}_{m_j}^{(+)} &= \frac{1}{2} \left[\Delta M_{m_j} \times \Delta Q_{m_j}^{(+)} \right] = \frac{1}{6} S_{m_j}, \quad \tilde{S}_{m_j} = \tilde{S}_{m_j}^{(-)} + \tilde{S}_{m_j}^{(+)} = \frac{1}{3} S_{m_j}. \end{aligned} \quad (1.52)$$

Также для каждого треугольника $T_m \in T(\bar{\omega}_p)$ удобно ввести независимую локальную нумерацию вершин, рёбер и их длин, а также обозначения сеточной функции в вершинах:

$$\begin{aligned} P_m^{(\alpha)} &= \left(x_m^{(\alpha)}, y_m^{(\alpha)} \right), \quad \alpha = 1, 2, 3; \\ \mathbf{I}_m^{(\alpha\alpha+1)} &\equiv \overline{P_m^{(\alpha)} P_m^{(\alpha+1)}} \equiv \left(x_m^{(\alpha+1)} - x_m^{(\alpha)}, y_m^{(\alpha+1)} - y_m^{(\alpha)} \right)^T \equiv \left(\Delta x_m^{(\alpha\alpha+1)}, \Delta y_m^{(\alpha\alpha+1)} \right)^T; \\ l_m^{(\alpha\alpha+1)} &\equiv |\mathbf{I}_m^{(\alpha\alpha+1)}| = \sqrt{\left(x_m^{(\alpha+1)} - x_m^{(\alpha)} \right)^2 + \left(y_m^{(\alpha+1)} - y_m^{(\alpha)} \right)^2}, \\ l_{\min} &= \min_{m,\alpha} l_m^{(\alpha\alpha+1)}, \quad l_{\max} = \max_{m,\alpha} l_m^{(\alpha\alpha+1)}; \\ u \left(P_m^{(\alpha)} \right) &= u \left(x_m^{(\alpha)}, y_m^{(\alpha)} \right) \equiv u_m^{(\alpha)}, \quad \alpha = 1, 2, 3. \end{aligned} \quad (1.53)$$

Нумерация вершин производится в направлении против часовой стрелки. Увеличение параметра α на единицу производится циклически в рамках множества $\{1,2,3\}$, то есть $3+1=1$.

Определения и соотношения (1.49)-(1.53) будут использованы для компактной записи разрабатываемой схемы.

Методика построения конечно-объёмной схемы состоит в том, что исходное уравнение разделяется на два с помощью введения вектора потока \mathbf{W} , и каждое из них аппроксимируется отдельно путем интегрирования по элементарному объёму и интерполяции подинтегральных функций, например, многочленами Лагранжа. Такой подход применяется обычно для построения разностных схем на ортогональных четырехугольных сетках [188, 200, 230]. При этом искомая функция u задается внутри четырёхугольной ячейки, а значения вектора потока \mathbf{W} определяются на сторонах ячейки. В данной работе предлагается использовать эту же методику для построения схем на нерегулярных треугольных и тетраэдральных сетках. Причем, как и в [229], предлагается значения неизвестной функции искать в узлах сетки $\bar{\omega}_p$, а потоки аппроксимировать специальным образом по этим значениям. Такой подход имеет определенное преимущество, в том числе позволяет решать задачу с граничными условиями любого типа (1-го, 2-го, 3-го рода или смешанными, периодическими и функциональными).

Перейдем к построению схемы. Для этого проинтегрируем уравнение (1.24) по контрольному объёму V_i и разделим на его площадь S_i все части полученного равенства:

$$\begin{aligned} \frac{1}{|V_i|} \iint_{V_i} Lu \, dx dy &\equiv \frac{1}{|V_i|} \iint_{V_i} \operatorname{div} \mathbf{W} \, dx dy + \frac{1}{|V_i|} \iint_{V_i} (\tilde{\mathbf{F}}, \mathbf{W}) \, dx dy - \frac{1}{|V_i|} \iint_{V_i} \tilde{q} u \, dx dy = \\ &= -\frac{1}{|V_i|} \iint_{V_i} f \, dx dy. \end{aligned}$$

Интегралы от функций $\tilde{q}u$ и f заменим их средними значениями в контрольном объёме V_i , умноженными на $|V_i|$. В результате получим следующее приближенное соотношение:

$$\frac{1}{|V_i|} \iint_{V_i} \operatorname{div} \mathbf{W} dx dy + \frac{1}{|V_i|} \iint_{V_i} (\tilde{\mathbf{F}}, \mathbf{W}) dx dy - \overline{\tilde{q}u_i} \approx -\overline{f_i}, \quad (1.54)$$

где использованы обозначения $u_i = u(x_i, y_i)$, $f_i = f(x_i, y_i, u_i)$, $\tilde{q}_i = \tilde{q}(x_i, y_i, u_i)$.

Порядок аппроксимации произведенной замены зависит от способа осреднения. Рассмотрим его подробнее на примере произвольной гладкой функции $\varphi(x, y)$.

В простейшем случае можно положить $\overline{\varphi_i} = \varphi(P_i)$. Тогда в случае произвольной треугольной сетки получаем ошибку порядка $O(\bar{l})$, где \bar{l} – величина наибольшего ребра треугольников ($\bar{l} \equiv l_{\max}$), входящих в шаблон H_i . Если точка P_i совпадает с центром масс контрольного объёма V_i , а многоугольник V_i – правильный, то порядок аппроксимации повышается до $O(\bar{l}^2)$. Также, порядок аппроксимации можно считать приближенно вторым, если положение точки P_i мало отличается от центра масс, а V_i – почти правильный многоугольник.

Последние два утверждения следуют из того факта, что следующие приближенные формулы

$$\begin{aligned} \iint_{\Delta ABC} \varphi(P) dx dy &\approx \varphi(M_{ABC}) S_{ABC}, \\ \iint_{\Delta ABC} \varphi(P) dx dy &\approx \frac{1}{3} (\varphi(A) + \varphi(B) + \varphi(C)) S_{ABC}, \end{aligned}$$

являются обобщениями формул средних прямоугольников и трапеций для треугольника и имеют порядок точности $O(\bar{l}^2)$. В них M_{ABC} – центр масс треугольника, S_{ABC} – его площадь.

Для того чтобы аппроксимация имела порядок $O(\bar{l}^2)$ независимо от качества триангуляции, необходимо использовать соответствующее

осреднение. В частности, в каждом треугольнике шаблона T_{m_j} можно приближать подинтегральную функцию плоскостью, построенной по трем её значениям в вершинах треугольника:

$$\begin{aligned}\varphi(x, y) &\approx \varphi_i + A_{m_j}(x - x_i) + B_{m_j}(y - y_i), \quad (x, y) \in T_{m_j}, \\ A_{m_j} &= \left[\Delta\varphi_{m_j}^{(-)}\Delta y_{m_j}^{(+)} - \Delta\varphi_{m_j}^{(+)}\Delta y_{m_j}^{(-)} \right] / D_{m_j}, \\ B_{m_j} &= \left[\Delta\varphi_{m_j}^{(+)}\Delta x_{m_j}^{(-)} - \Delta\varphi_{m_j}^{(-)}\Delta x_{m_j}^{(+)} \right] / D_{m_j}, \\ D_{m_j} &= \Delta x_{m_j}^{(-)}\Delta y_{m_j}^{(+)} - \Delta x_{m_j}^{(+)}\Delta y_{m_j}^{(-)}, \quad \Delta x_{m_j}^{(\pm)} = x_{m_j}^{(\pm)} - x_i, \quad \Delta y_{m_j}^{(\pm)} = y_{m_j}^{(\pm)} - y_i, \\ \Delta\varphi_{m_j}^{(\pm)} &= \varphi_{m_j}^{(\pm)} - \varphi_i, \quad \varphi_i = \varphi(P_i) = \varphi(x_i, y_i), \quad \varphi_{m_j}^{(\pm)} = \varphi(P_{m_j}^{(\pm)}) = \varphi(x_{m_j}^{(\pm)}, y_{m_j}^{(\pm)}).\end{aligned}$$

Если использовать эти выражения при интегрировании, получим

$$\begin{aligned}\frac{1}{|V_i|} \iint_{V_i} \varphi dx dy &= \frac{1}{|V_i|} \sum_{j=1}^{M_i} \left(\iint_{T_{m_j}^{(-)}} \varphi dx dy + \iint_{T_{m_j}^{(+)}} \varphi dx dy \right) \approx \frac{1}{|V_i|} \sum_{j=1}^{M_i} (I_{m_j}^{(-)} + I_{m_j}^{(+)}), \\ I_{m_j}^{(\pm)} &= \iint_{T_{m_j}^{(\pm)}} \left[\varphi_i + A_{m_j}(x - x_i) + B_{m_j}(y - y_i) \right] dx dy = (\varphi_i + A_{m_j}^{(\pm)} + B_{m_j}^{(\pm)}) \tilde{S}_{m_j}^{(\pm)}, \\ A_{m_j}^{(-)} &= A_{m_j} \frac{1}{18} (5\Delta x_{m_j}^{(-)} + 2\Delta x_{m_j}^{(+)}), \quad B_{m_j}^{(-)} = B_{m_j} \frac{1}{18} (5\Delta y_{m_j}^{(-)} + 2\Delta y_{m_j}^{(+)}), \\ A_{m_j}^{(+)} &= A_{m_j} \frac{1}{18} (2\Delta x_{m_j}^{(-)} + 5\Delta x_{m_j}^{(+)}), \quad B_{m_j}^{(+)} = B_{m_j} \frac{1}{18} (2\Delta y_{m_j}^{(-)} + 5\Delta y_{m_j}^{(+)}).\end{aligned}$$

Тогда результирующая аппроксимация будет иметь вид:

$$\frac{1}{|V_i|} \iint_{V_i} \varphi dx dy \approx \varphi_i + \frac{1}{|V_i|} \sum_{j=1}^{M_i} (\alpha_{m_j}^{(-)} \Delta\varphi_{m_j}^{(-)} + \alpha_{m_j}^{(+)} \Delta\varphi_{m_j}^{(+)}) \equiv \bar{\varphi}_i, \quad (1.55_1)$$

$$\alpha_{m_j}^{(-)} = \frac{5\tilde{S}_{m_j}^{(-)} + 2\tilde{S}_{m_j}^{(+)}}{18} = \frac{7}{36} \tilde{S}_{m_j}, \quad \alpha_{m_j}^{(+)} = \frac{2\tilde{S}_{m_j}^{(-)} + 5\tilde{S}_{m_j}^{(+)}}{18} = \frac{7}{36} \tilde{S}_{m_j}. \quad (1.55_2)$$

Выражение для $\bar{\varphi}_i$ в (1.55₁) можно также записать в виде

$$\begin{aligned}\bar{\varphi}_i &\equiv \frac{1}{|V_i|} \sum_{j=1}^{M_i} (\alpha_{m_j} \varphi_i + \alpha_{m_j}^{(-)} \varphi_{m_j}^{(-)} + \alpha_{m_j}^{(+)} \varphi_{m_j}^{(+)}), \\ \alpha_{m_j} &\equiv \tilde{S}_{m_j} - \alpha_{m_j}^{(-)} - \alpha_{m_j}^{(+)} = \frac{11}{18} \tilde{S}_{m_j}.\end{aligned} \quad (1.55_3)$$

В дальнейшем удобно ввести параметр θ , равный либо 0, либо 1, и умножить коэффициенты $\alpha_{m_j}^{(-)}$ и $\alpha_{m_j}^{(+)}$ на него. Этот приём позволяет выбрать аппроксимацию того или иного типа:

$$\begin{aligned}\bar{\varphi}_i &\equiv \frac{1}{|V_i|} \sum_{j=1}^{M_i} \left(\alpha_{m_j} \varphi_i + \alpha_{m_j}^{(-)} \varphi_{m_j}^{(-)} + \alpha_{m_j}^{(+)} \varphi_{m_j}^{(+)} \right), \\ \alpha_{m_j} &= \frac{11+7\theta}{18} \tilde{S}_{m_j}, \quad \alpha_{m_j}^{(-)} = \frac{7\theta}{36} \tilde{S}_{m_j}, \quad \alpha_{m_j}^{(+)} = \frac{7\theta}{36} \tilde{S}_{m_j}.\end{aligned}\tag{1.554}$$

Для аппроксимации правой части будем использовать формулы (1.55):

$$\bar{f}_i = \frac{1}{|V_i|} \iint_{V_i} f \, dx dy \approx f_i + \frac{1}{|V_i|} \sum_{j=1}^{M_i} \left(\alpha_{m_j}^{(-)} \Delta f_{m_j}^{(-)} + \alpha_{m_j}^{(+)} \Delta f_{m_j}^{(+)} \right).$$

Для аппроксимации интеграла от функции $\tilde{q}u$ удобно взять произведение различных средних:

$$\begin{aligned}\frac{1}{|V_i|} \iint_{V_i} \tilde{q}u \, dx dy &\approx \bar{\tilde{q}}_i \frac{1}{|V_i|} \iint_{V_i} u \, dx dy \approx \bar{\tilde{q}}_i \bar{u}_i, \\ \bar{\tilde{q}}_i &\equiv \tilde{q}_i + \frac{1}{|V_i|} \sum_{j=1}^{M_i} \frac{\theta}{3} \left(\Delta \tilde{q}_{m_j}^{(-)} + \Delta \tilde{q}_{m_j}^{(+)} \right) \tilde{S}_{m_j}, \quad \bar{u}_i \equiv u_i + \frac{1}{|V_i|} \sum_{j=1}^{M_i} \left(\alpha_{m_j}^{(-)} \Delta u_{m_j}^{(-)} + \alpha_{m_j}^{(+)} \Delta u_{m_j}^{(+)} \right).\end{aligned}$$

Дальнейшая разработка схемы связана с аппроксимацией первого и второго слагаемых в (1.54). Рассмотрим сначала первое слагаемое (1.54). Применим к нему по аналогии с (1.48) формулу Остроградского:

$$\frac{1}{|V_i|} \iint_{V_i} \operatorname{div} \mathbf{W} \, dx dy = \frac{1}{|V_i|} \oint_{\partial V_i} (\mathbf{W}, \mathbf{n}) \, dl.$$

Здесь ∂V_i – граница контрольного объема (то есть ломаная \tilde{L}_i). Контурный интеграл в правой части этого равенства разобьём на составляющие части вдоль звеньев ломаной и учтем, что векторы нормали на них не зависят от переменной интегрирования:

$$\begin{aligned}\oint_{\partial V_i} (\mathbf{W}, \mathbf{n}) \, dl &= \sum_{j=1}^{M_i} \left[\int_{Q_{m_j}^{(-)}}^{M_{m_j}} (\mathbf{W}, \mathbf{n}_{m_j}^{(-)}) \, dl + \int_{M_{m_j}}^{Q_{m_j}^{(+)}} (\mathbf{W}, \mathbf{n}_{m_j}^{(+)}) \, dl + \gamma_{m_j}^{(-)} + \gamma_{m_j}^{(+)} \right], \\ \gamma_{m_j}^{(-)} &= \int_{P_i}^{Q_{m_j}^{(-)}} (\mathbf{W}, \tilde{\mathbf{n}}_{m_j}^{(-)}) \, dl, \quad \gamma_{m_j}^{(+)} = \int_{Q_{m_j}^{(+)}}^{P_i} (\mathbf{W}, \tilde{\mathbf{n}}_{m_j}^{(+)}) \, dl.\end{aligned}\tag{1.56}$$

Здесь $\gamma_{m_j}^{(\pm)}$ – интегралы, возникающие только в граничных точках сетки. Во внутренних узлах сетки они отсутствуют, то есть $\gamma_{m_j}^{(\pm)} = 0$.

На каждом отрезке ломаной введем средние значения вектора потока $\mathbf{W}_{m_j}^{(\pm)}$. Контурные интегралы в (1.56) будем аппроксимировать по формуле:

$$\oint_{\partial V_i} (\mathbf{W}, \mathbf{n}) dl \approx \sum_{j=1}^{M_i} \left[\left(\mathbf{W}_{m_j}^{(-)}, \mathbf{n}_{m_j}^{(-)} \right) \left| \mathbf{l}_{m_j}^{(-)} \right| + \left(\mathbf{W}_{m_j}^{(+)}, \mathbf{n}_{m_j}^{(+)} \right) \left| \mathbf{l}_{m_j}^{(+)} \right| + \gamma_{m_j}^{(-)} + \gamma_{m_j}^{(+)} \right],$$

$$\gamma_{m_j}^{(\pm)} \approx \begin{cases} \left(\mathbf{W}_{m_j}^{(\pm)}, \tilde{\mathbf{n}}_{m_j}^{(\pm)} \right) \left| \tilde{\mathbf{l}}_{m_j}^{(\pm)} \right|, & P_i, P_{m_j}^{(\pm)} \in \partial D, \\ 0, & P_i \vee P_{m_j}^{(\pm)} \notin \partial D. \end{cases}$$

Отсюда с учётом граничных условий (1.47) получим:

$$\oint_{\partial V_i} (\mathbf{W}, \mathbf{n}) dl \approx \sum_{j=1}^{M_i} \left[\left(\mathbf{W}_{m_j}^{(-)}, \mathbf{n}_{m_j}^{(-)} \right) \left| \mathbf{l}_{m_j}^{(-)} \right| + \left(\mathbf{W}_{m_j}^{(+)}, \mathbf{n}_{m_j}^{(+)} \right) \left| \mathbf{l}_{m_j}^{(+)} \right| + \gamma_{m_j}^{(-)} + \gamma_{m_j}^{(+)} \right],$$

$$\gamma_{m_j}^{(\pm)} \approx \begin{cases} W_{n,m_j}^{(\pm)} \left| \tilde{\mathbf{l}}_{m_j}^{(\pm)} \right|, & P_i, P_{m_j}^{(\pm)} \in \partial D, \\ 0, & P_i \vee P_{m_j}^{(\pm)} \notin \partial D. \end{cases} \quad (1.57)$$

Средние значения нормальной производной потока $W_{n,m_j}^{(\pm)}$ на границе области возьмем в виде

$$W_{n,m_j}^{(\pm)} = \frac{1}{2} \left[W_n(P_i) + W_n(Q_{m_j}^{(\pm)}) \right],$$

где $W_n(Q_{m_j}^{(\pm)})$ можно вычислять либо непосредственно, либо аппроксимировать полусуммой значений W_n на концах ребра $P_i Q_{m_j}^{(\pm)}$.

Средние значения потока $\mathbf{W}_{m_j}^{(\pm)}$ внутри области можно получить, если задать некоторую модель (аппроксимацию) вектора потока \mathbf{W} в каждом треугольнике T_{m_j} сетки. Если строить схему второго порядка точности, то достаточно предположить, что вектор потока \mathbf{W} является постоянным в каждом треугольнике. Тогда $\mathbf{W}_{m_j}^{(-)} = \mathbf{W}_{m_j}^{(+)} \equiv \mathbf{W}_{m_j}$. Конкретное выражение для \mathbf{W}_{m_j} в треугольнике T_{m_j} и порядок такой аппроксимации уточним ниже.

Ввиду сказанного, аппроксимация первого слагаемого в (1.54) будет иметь вид

$$\frac{1}{|V_i|} \iint_{V_i} \operatorname{div} \mathbf{W} dx dy \approx \frac{1}{|V_i|} \sum_{j=1}^{M_i} \left[\left(\mathbf{W}_{m_j}, \mathbf{n}_{m_j}^{(-)} \left| \mathbf{l}_{m_j}^{(-)} \right| + \mathbf{n}_{m_j}^{(+)} \left| \mathbf{l}_{m_j}^{(+)} \right| \right) + \gamma_{m_j}^{(-)} + \gamma_{m_j}^{(+)} \right], \quad (1.58)$$

$$\gamma_{m_j}^{(\pm)} \approx \begin{cases} W_{n,m_j}^{(\pm)} \left| \tilde{\mathbf{l}}_{m_j}^{(\pm)} \right|, & P_i, P_{m_j}^{(\pm)} \in \partial D, \\ 0, & P_i \vee P_{m_j}^{(\pm)} \notin \partial D, \end{cases} \quad W_{n,m_j}^{(\pm)} = \frac{1}{2} \left[W_n(P_i) + W_n(Q_{m_j}^{(\pm)}) \right].$$

Аппроксимацию вектора потока \mathbf{W} в треугольнике T_{m_j} можно построить по аналогии со случаем декартовой сетки. Поскольку $\mathbf{W} = \tilde{\mathbf{K}} \mathbf{D} \mathbf{V}$, то $\tilde{\mathbf{K}}^{-1} \mathbf{W} = \mathbf{D} \mathbf{V}$. Это равенство можно проинтегрировать покомпонентно по треугольнику T_{m_j} и воспользоваться формулой Грина [260]. Тогда получим:

$$\iint_{T_{m_j}} (\tilde{\mathbf{K}}^{-1})_{xx} W_x dx dy + \iint_{T_{m_j}} (\tilde{\mathbf{K}}^{-1})_{xy} W_y dx dy = \iint_{T_{m_j}} \frac{\partial V_x}{\partial x} dx dy = + \oint_{\partial T_{m_j}} V_x dy,$$

$$\iint_{T_{m_j}} (\tilde{\mathbf{K}}^{-1})_{yx} W_x dx dy + \iint_{T_{m_j}} (\tilde{\mathbf{K}}^{-1})_{yy} W_y dx dy = \iint_{T_{m_j}} \frac{\partial V_y}{\partial y} dx dy = - \oint_{\partial T_{m_j}} V_y dx.$$

В левой части полученных равенств применим формулы средних для компонент потока:

$$(W_x)_{m_j} \iint_{T_{m_j}} (\tilde{\mathbf{K}}^{-1})_{xx} dx dy + (W_y)_{m_j} \iint_{T_{m_j}} (\tilde{\mathbf{K}}^{-1})_{xy} dx dy \approx + \oint_{\partial T_{m_j}} V_x dy, \quad (1.59)$$

$$(W_x)_{m_j} \iint_{T_{m_j}} (\tilde{\mathbf{K}}^{-1})_{yx} dx dy + (W_y)_{m_j} \iint_{T_{m_j}} (\tilde{\mathbf{K}}^{-1})_{yy} dx dy \approx - \oint_{\partial T_{m_j}} V_y dx.$$

Равенства (1.59) разделим на S_{m_j} площадь треугольника T_{m_j} .

Контурные интегралы в правых частях (1.59) заменим по формуле трапеций с помощью значений $(V_\alpha)_i$, $(V_\alpha)_{m_j}^{(-)}$, $(V_\alpha)_{m_j}^{(+)}$ функций V_α в вершинах треугольника:

$$+ \frac{1}{S_{m_j}} \oint_{\partial T_{m_j}} V_x dy \approx + \frac{1}{2S_{m_j}} \left[\begin{aligned} & \left((V_{x,m_j}^{(-)} + V_{x,i}) (y_{m_j}^{(-)} - y_i) + \right. \\ & \left. + (V_{x,m_j}^{(+)} + V_{x,m_j}^{(-)}) (y_{m_j}^{(+)} - y_{m_j}^{(-)}) + \right. \\ & \left. + (V_{x,i} + V_{x,m_j}^{(+)}) (y_i - y_{m_j}^{(+)}) \right) \equiv b_{m_j}^{(1)}, \end{aligned} \right] \quad (1.60_1)$$

$$-\frac{1}{S_{m_j}} \oint_{\partial T_{m_j}} V_y dx \approx -\frac{1}{2S_{m_j}} \left[\begin{aligned} & \left(V_{y,m_j}^{(-)} + V_{y,i} \right) \left(x_{m_j}^{(-)} - x_i \right) + \\ & + \left(V_{y,m_j}^{(+)} + V_{y,m_j}^{(-)} \right) \left(x_{m_j}^{(+)} - x_{m_j}^{(-)} \right) + \\ & + \left(V_{y,i} + V_{y,m_j}^{(+)} \right) \left(x_i - x_{m_j}^{(+)} \right) \end{aligned} \right] \equiv b_{m_j}^{(2)}. \quad (1.60_2)$$

Значения $V_{\alpha,i}$, $V_{\alpha,m_j}^{(\pm)}$ ($\alpha = x, y$) аппроксимируются следующим образом:

$$V_{x,i} = G_{x,i} u_i, \quad G_{x,i} = \exp \left[\int_{x_0}^{x_i} \tilde{E}_x dx' \right]; \quad (1.61_1)$$

$$V_{y,i} = G_{y,i} u_i, \quad G_{y,i} = \exp \left[\int_{y_0}^{y_i} \tilde{E}_y dy' \right];$$

$$V_{x,m_j}^{(\pm)} = G_{x,i} \frac{G_{x,m_j}^{(\pm)}}{G_{x,i}} u_{m_j}^{(\pm)} \approx G_{x,i} \exp \left[\frac{1}{2} \left(\tilde{E}_{x,i} + \tilde{E}_{x,m_j}^{(\pm)} \right) \left(x_{m_j}^{(\pm)} - x_i \right) \right] u_{m_j}^{(\pm)}; \quad (1.61_2)$$

$$V_{y,m_j}^{(\pm)} = G_{y,i} \frac{G_{y,m_j}^{(\pm)}}{G_{y,i}} u_{m_j}^{(\pm)} \approx G_{y,i} \exp \left[\frac{1}{2} \left(\tilde{E}_{y,i} + \tilde{E}_{y,m_j}^{(\pm)} \right) \left(y_{m_j}^{(\pm)} - y_i \right) \right] u_{m_j}^{(\pm)}.$$

Аппроксимация значений $G_{\alpha,i}$ не требуется, поскольку в последующих расчетных формулах схемы они сокращаются.

Интегральные коэффициенты в левой части (1.59) обозначим как элементы матрицы размерности 2×2 и также заменим с помощью двумерной формулы трапеций в треугольнике:

$$\begin{aligned} a_{m_j}^{(xx)} &\equiv \frac{1}{S_{m_j}} \iint_{T_{m_j}} (\tilde{\mathbf{K}}^{-1})_{xx} dx dy = + \frac{1}{S_{m_j}} \iint_{T_{m_j}} \frac{\tilde{K}_{yy}}{\Delta} dx dy \approx + \frac{1}{3} \left[(\cdot)_i + (\cdot)_{m_j}^{(-)} + (\cdot)_{m_j}^{(+)} \right], \\ a_{m_j}^{(xy)} &\equiv \frac{1}{S_{m_j}} \iint_{T_{m_j}} (\tilde{\mathbf{K}}^{-1})_{xy} dx dy = - \frac{1}{S_{m_j}} \iint_{T_{m_j}} \frac{\tilde{K}_{xy}}{\Delta} dx dy \approx - \frac{1}{3} \left[(\cdot)_i + (\cdot)_{m_j}^{(-)} + (\cdot)_{m_j}^{(+)} \right], \\ a_{m_j}^{(yx)} &\equiv \frac{1}{S_{m_j}} \iint_{T_{m_j}} (\tilde{\mathbf{K}}^{-1})_{yx} dx dy = - \frac{1}{S_{m_j}} \iint_{T_{m_j}} \frac{\tilde{K}_{yx}}{\Delta} dx dy \approx - \frac{1}{3} \left[(\cdot)_i + (\cdot)_{m_j}^{(-)} + (\cdot)_{m_j}^{(+)} \right], \\ a_{m_j}^{(yy)} &\equiv \frac{1}{S_{m_j}} \iint_{T_{m_j}} (\tilde{\mathbf{K}}^{-1})_{yy} dx dy = + \frac{1}{S_{m_j}} \iint_{T_{m_j}} \frac{\tilde{K}_{xx}}{\Delta} dx dy \approx + \frac{1}{3} \left[(\cdot)_i + (\cdot)_{m_j}^{(-)} + (\cdot)_{m_j}^{(+)} \right], \\ \Delta &= \tilde{K}_{xx} \tilde{K}_{yy} - \tilde{K}_{xy} \tilde{K}_{yx}. \end{aligned} \quad (1.62)$$

В правой части (1.62) использована символическая запись.

Приближенные равенства (1.59) с учётом (1.60), (1.61), (1.62) приводят к следующей системе приближенных уравнений для аппроксимации компонент вектора потока \mathbf{W} в треугольнике T_{m_j} :

$$a_{m_j}^{(xx)} W_{x,m_j} + a_{m_j}^{(xy)} W_{y,m_j} \approx b_{m_j}^{(x)}, \quad a_{m_j}^{(yx)} W_{x,m_j} + a_{m_j}^{(yy)} W_{y,m_j} \approx b_{m_j}^{(y)}. \quad (1.63)$$

Система уравнений (1.63) совместна в силу выполнения условий равномерной эллиптичности оператора L во всех точках области D (что предполагается при выводе схемы) и при условии, что возмущенный тензор $\tilde{\mathbf{K}}$ мало отличается от \mathbf{K} . Последнее действительно так, если треугольники сетки достаточно малы (что легко обеспечить при ее построении) и в каждом сеточном уравнении можно выбрать стартовую точку интегрирования (x_0, y_0) при определении функций G_α независимо от других (это требование выполняется, поскольку, как и в случае ортогональной сетки, в реальных вычислениях будут участвовать лишь отношения значений функций G_α в соседних точках шаблона).

В итоге, значения компонент потока \mathbf{W} приближаются формулами:

$$W_{x,m_j} \approx \frac{a_{m_j}^{(yy)} b_{m_j}^{(x)} - a_{m_j}^{(xy)} b_{m_j}^{(y)}}{a_{m_j}^{(xx)} a_{m_j}^{(yy)} - a_{m_j}^{(xy)} a_{m_j}^{(yx)}}, \quad W_{y,m_j} \approx \frac{b_{m_j}^{(y)} a_{m_j}^{(xx)} - b_{m_j}^{(x)} a_{m_j}^{(yx)}}{a_{m_j}^{(xx)} a_{m_j}^{(yy)} - a_{m_j}^{(xy)} a_{m_j}^{(yx)}}. \quad (1.64)$$

Рассмотрим кратко вопрос о порядке аппроксимации приближенных значений вектора потока. Для этого заметим, что если функцию u заменить в каждом треугольнике T_{m_j} частью плоскости с использованием трех ее значений в вершинах треугольника (как это предложено выше), то погрешность такой аппроксимации будет иметь второй порядок. Градиент от аппроксимирующей функции будет постоянным в треугольнике. Аппроксимация градиента при интегрировании по треугольнику или по любому контуру, лежащему внутри треугольника, также будет иметь второй порядок. Если теперь рассмотреть вектор-функцию \mathbf{V} , то для ее компонент можно получить такой же результат, если интегралы в экспоненте аппроксимировать по формуле трапеций. Наконец, если рассмотреть

аппроксимацию вектора \mathbf{W} , то и в этом случае получим второй порядок ввиду того, что интегралы от компонент тензора $\tilde{\mathbf{K}}^{-1}$ аппроксимируются по обобщенной формуле трапеций в треугольнике. Таким образом, формулы (1.58) и (1.64) аппроксимируют первое слагаемое в (1.54) с точностью $O(\bar{l}^2)$.

Рассмотрим далее второе слагаемое (1.54). Заменим в нем интеграл по контрольному объёму на сумму интегралов по его составным частям \tilde{T}_{m_j} , принадлежащим отдельным треугольникам шаблона (см. рис. 1.3):

$$\frac{1}{|V_i|} \iint_{V_i} (\tilde{\mathbf{F}}, \mathbf{W}) dx dy = \frac{1}{|V_i|} \sum_{j=1}^{M_i} \iint_{\tilde{T}_{m_j}} (\tilde{\mathbf{F}}, \mathbf{W}) dx dy.$$

Мы приняли, что в каждом треугольнике T_{m_j} вектор потока постоянен, и его можно найти из (1.64). Поэтому можем записать цепочку приближенных равенств:

$$\begin{aligned} \frac{1}{|V_i|} \iint_{V_i} (\tilde{\mathbf{F}}, \mathbf{W}) dx dy &\approx \frac{1}{|V_i|} \sum_{j=1}^{M_i} \iint_{\tilde{T}_{m_j}} (\tilde{\mathbf{F}}, \mathbf{W}_{m_j}) dx dy = \\ &= \frac{1}{|V_i|} \sum_{j=1}^{M_i} \left(W_{x,m_j} \iint_{\tilde{T}_{m_j}} \tilde{F}_x dx dy + W_{y,m_j} \iint_{\tilde{T}_{m_j}} \tilde{F}_y dx dy \right) \approx \frac{1}{|V_i|} \sum_{j=1}^{M_i} (W_{x,m_j} \tilde{F}_{x,i} + W_{y,m_j} \tilde{F}_{y,i}) \tilde{S}_{m_j}. \end{aligned}$$

Из последнего приближенного равенства вытекает аппроксимация второго слагаемого в (1.54):

$$\frac{1}{|V_i|} \iint_{V_i} (\tilde{\mathbf{F}}, \mathbf{W}) dx dy \approx \frac{1}{|V_i|} \sum_{j=1}^{M_i} (\tilde{\mathbf{F}}_i, \mathbf{W}_{m_j}) \tilde{S}_{m_j}. \quad (1.65)$$

Объединим теперь (1.58) и (1.65) и подставим в (1.54):

$$\frac{1}{|V_i|} \sum_{j=1}^{M_i} \left[\left(\mathbf{W}_{m_j}, \mathbf{n}_{m_j}^{(-)} \left| \mathbf{l}_{m_j}^{(-)} \right| + \mathbf{n}_{m_j}^{(+)} \left| \mathbf{l}_{m_j}^{(+)} \right| + \tilde{\mathbf{F}}_i \tilde{S}_{m_j} \right) + \gamma_{m_j}^{(-)} + \gamma_{m_j}^{(+)} \right] - \overline{\tilde{q}_i u_i} \approx -\overline{f_i}, \quad (1.66)$$

Для монотонизации уравнений (1.66) в случае $\mathbf{F} \neq 0$ используем тот же приём, который применялся в случае ортогональных сеток [188, 200]. Для этого заметим, что вектор $\tilde{\mathbf{F}}_i \tilde{S}_{m_j}$ можно разложить по аффинному базису

$\{\mathbf{n}_{m_j}^{(-)}, \mathbf{n}_{m_j}^{(+)}\}$ (который никогда не будет вырожденным в силу того, что угол между нормальными больше 0 и меньше π):

$$\begin{aligned} \tilde{\mathbf{F}}_i \tilde{\mathcal{S}}_{m_j} &= \delta_{m_j}^{(-)} \mathbf{n}_{m_j}^{(-)} \left| \mathbf{l}_{m_j}^{(-)} \right| + \delta_{m_j}^{(+)} \mathbf{n}_{m_j}^{(+)} \left| \mathbf{l}_{m_j}^{(+)} \right|, \\ \delta_{m_j}^{(-)} &= \frac{\tilde{\mathcal{S}}_{m_j} \left(\tilde{F}_{x,i} n_{y,m_j}^{(+)} - \tilde{F}_{y,i} n_{x,m_j}^{(+)} \right)}{\left| \mathbf{l}_{m_j}^{(-)} \right| \left(n_{x,m_j}^{(-)} n_{y,m_j}^{(+)} - n_{y,m_j}^{(-)} n_{x,m_j}^{(+)} \right)}, \quad \delta_{m_j}^{(+)} = \frac{\tilde{\mathcal{S}}_{m_j} \left(\tilde{F}_{x,i} n_{y,m_j}^{(-)} - \tilde{F}_{y,i} n_{x,m_j}^{(-)} \right)}{\left| \mathbf{l}_{m_j}^{(+)} \right| \left(n_{x,m_j}^{(-)} n_{y,m_j}^{(+)} - n_{y,m_j}^{(-)} n_{x,m_j}^{(+)} \right)}. \end{aligned} \quad (1.67)$$

Поэтому

$$\mathbf{n}_{m_j}^{(-)} \left| \mathbf{l}_{m_j}^{(-)} \right| + \mathbf{n}_{m_j}^{(+)} \left| \mathbf{l}_{m_j}^{(+)} \right| + \tilde{\mathbf{F}}_i \tilde{\mathcal{S}}_{m_j} = \left(1 + \delta_{m_j}^{(-)} \right) \mathbf{n}_{m_j}^{(-)} \left| \mathbf{l}_{m_j}^{(-)} \right| + \left(1 + \delta_{m_j}^{(+)} \right) \mathbf{n}_{m_j}^{(+)} \left| \mathbf{l}_{m_j}^{(+)} \right|.$$

Очевидно, что коэффициенты $\delta_{m_j}^{(\pm)}$ стремятся к нулю при измельчении сетки со скоростью $O(\bar{l})$. Схема (1.66) будет монотонной (устойчивой), если все величины $1 + \delta_{m_j}^{(\pm)} > 1 - \varepsilon$, где $\varepsilon < 1$ – некоторое число, зависящее от параметров сетки. Если задать конкретное значение ε и подчинить размеры треугольников указанному выше условию, то схема (1.66) будет условно монотонной (условно устойчивой в норме $C(\bar{\omega}_p)$).

Для построения монотонной (устойчивой в норме $C(\bar{\omega}_p)$) схемы введем приближенное преобразование:

$$1 + \delta_{m_j}^{(\pm)} = 1 - \left| \delta_{m_j}^{(\pm)} \right| + \left(\left| \delta_{m_j}^{(\pm)} \right| + \delta_{m_j}^{(\pm)} \right) \approx \frac{1}{1 + \left| \delta_{m_j}^{(\pm)} \right|} + \left(\left| \delta_{m_j}^{(\pm)} \right| + \delta_{m_j}^{(\pm)} \right) \equiv \chi_{m_j}^{(\pm)}. \quad (1.68)$$

Если учесть, что $\left| \delta_{m_j}^{(\pm)} \right| \leq C\bar{l}$ ($C = const > 0$ не зависит от параметров сетки), то величина в правой части последних равенств оценивается снизу величиной

$$\frac{1}{1 + C\bar{l}} \geq \frac{1}{1 + C} \quad \text{при естественном условии } \bar{l} \leq 1. \quad \text{Таким образом,}$$

преобразование (1.67), (1.68) позволяет монотонизировать схему (1.66).

Завершая обсуждение аппроксимации уравнений (1.54), заметим, что и второе слагаемое в (1.54) было заменено на сеточный аналог с точностью $O(\bar{l}^2)$. То есть уравнения (1.66) имеют второй порядок аппроксимации.

Далее, если вместо функции u в (1.66) подставить сеточную функцию $U_h = \{U_i \equiv U(x_i, y_i) \equiv U(P_i), P_i \in \omega_P\}$ и перейти к равенствам, получим искомую **конечно-объёмную схему экспоненциальной подгонки на треугольной сетке** для двумерной краевой задачи (1.24), (1.44), (1.47):

$$L_h[U_h]U_i = -\bar{f}_i, \quad i = 1, \dots, N, \quad (1.70_1)$$

$$L_h[U_h]U_i \equiv \frac{1}{|V_i|} \sum_{j=1}^{M_i} \left[\left(\mathbf{W}_{m_j}, \chi_{m_j}^{(-)} \Theta \mathbf{I}_{m_j}^{(-)} + \chi_{m_j}^{(+)} \Theta \mathbf{I}_{m_j}^{(+)} \right) + \gamma_{m_j}^{(-)} + \gamma_{m_j}^{(+)} \right] - \bar{q}_i U_i, \quad (1.70_2)$$

$$W_{x, m_j} = \frac{a_{m_j}^{(yy)} b_{m_j}^{(x)} - a_{m_j}^{(xy)} b_{m_j}^{(y)}}{a_{m_j}^{(xx)} a_{m_j}^{(yy)} - a_{m_j}^{(xy)} a_{m_j}^{(yx)}}, \quad W_{y, m_j} = \frac{b_{m_j}^{(y)} a_{m_j}^{(xx)} - b_{m_j}^{(x)} a_{m_j}^{(yx)}}{a_{m_j}^{(xx)} a_{m_j}^{(yy)} - a_{m_j}^{(xy)} a_{m_j}^{(yx)}}, \quad (1.70_3)$$

$$\begin{aligned} a_{m_j}^{(xx)} &= +\frac{1}{3} \left[\left(\frac{K_{yy} \bar{G}_x}{\Delta} \right)_i + \left(\frac{K_{yy} \bar{G}_x}{\Delta} \right)_{m_j}^{(-)} + \left(\frac{K_{yy} \bar{G}_x}{\Delta} \right)_{m_j}^{(+)} \right], \\ a_{m_j}^{(xy)} &= -\frac{1}{3} \left[\left(\frac{K_{xy} \bar{G}_x}{\Delta} \right)_i + \left(\frac{K_{xy} \bar{G}_x}{\Delta} \right)_{m_j}^{(-)} + \left(\frac{K_{xy} \bar{G}_x}{\Delta} \right)_{m_j}^{(+)} \right], \\ a_{m_j}^{(yx)} &= -\frac{1}{3} \left[\left(\frac{K_{yx} \bar{G}_y}{\Delta} \right)_i + \left(\frac{K_{yx} \bar{G}_y}{\Delta} \right)_{m_j}^{(-)} + \left(\frac{K_{yx} \bar{G}_y}{\Delta} \right)_{m_j}^{(+)} \right], \\ a_{m_j}^{(yy)} &= +\frac{1}{3} \left[\left(\frac{K_{xx} \bar{G}_y}{\Delta} \right)_i + \left(\frac{K_{xx} \bar{G}_y}{\Delta} \right)_{m_j}^{(-)} + \left(\frac{K_{xx} \bar{G}_y}{\Delta} \right)_{m_j}^{(+)} \right], \end{aligned} \quad (1.70_4)$$

$$\Delta = K_{xx} K_{yy} - K_{xy} K_{yx},$$

$$\begin{aligned} b_{m_j}^{(x)} &= +\frac{1}{2S_{m_j}} \left[\left(\bar{G}_{x, m_j}^{(-)} U_{m_j}^{(-)} + \bar{G}_{x, i} U_i \right) \Delta y_{m_j}^{(-)} + \right. \\ &\quad \left. + \left(\bar{G}_{x, m_j}^{(+)} U_{m_j}^{(+)} + \bar{G}_{x, m_j}^{(-)} U_{m_j}^{(-)} \right) \left(\Delta y_{m_j}^{(+)} - \Delta y_{m_j}^{(-)} \right) - \right. \\ &\quad \left. - \left(\bar{G}_{x, i} U_i + \bar{G}_{x, m_j}^{(+)} U_{m_j}^{(+)} \right) \Delta y_{m_j}^{(+)} \right], \\ b_{m_j}^{(y)} &= -\frac{1}{2S_{m_j}} \left[\left(\bar{G}_{y, m_j}^{(-)} U_{m_j}^{(-)} + \bar{G}_{y, i} U_i \right) \Delta x_{m_j}^{(-)} + \right. \\ &\quad \left. + \left(\bar{G}_{y, m_j}^{(+)} U_{m_j}^{(+)} + \bar{G}_{y, m_j}^{(-)} U_{m_j}^{(-)} \right) \left(\Delta x_{m_j}^{(+)} - \Delta x_{m_j}^{(-)} \right) - \right. \\ &\quad \left. - \left(\bar{G}_{y, i} U_i + \bar{G}_{y, m_j}^{(+)} U_{m_j}^{(+)} \right) \Delta x_{m_j}^{(+)} \right]. \end{aligned} \quad (1.70_5)$$

$$\chi_{m_j}^{(\pm)} = \frac{1}{1 + |\delta_{m_j}^{(\pm)}|} + \left(|\delta_{m_j}^{(\pm)}| + \delta_{m_j}^{(\pm)} \right), \quad \delta_{m_j}^{(\pm)} = \frac{\tilde{S}_{m_j} \left(\tilde{F}_{x,i} n_{y,m_j}^{(\pm)} - \tilde{F}_{y,i} n_{x,m_j}^{(\pm)} \right)}{|\mathbf{I}_{m_j}^{(\pm)}| \left(n_{x,m_j}^{(-)} n_{y,m_j}^{(+)} - n_{y,m_j}^{(-)} n_{x,m_j}^{(+)} \right)}, \quad (1.70_6)$$

$$\gamma_{m_j}^{(\pm)} = \begin{cases} \frac{1}{2} \left[W_n(P_i) + W_n(Q_{m_j}^{(\pm)}) \right] |\tilde{\mathbf{I}}_{m_j}^{(\pm)}|, & P_i, P_{m_j}^{(\pm)} \in \partial D, \\ 0, & P_i \vee P_{m_j}^{(\pm)} \notin \partial D, \end{cases} \quad (1.70_7)$$

$$\bar{G}_{x,i} = 1, \quad \bar{G}_{x,m_j}^{(\pm)} = \exp \left[\frac{1}{2} \left(\tilde{E}_{x,i} + \tilde{E}_{x,m_j}^{(\pm)} \right) \Delta x_{m_j}^{(\pm)} \right], \quad (1.70_8)$$

$$\bar{G}_{y,i} = 1, \quad \bar{G}_{y,m_j}^{(\pm)} = \exp \left[\frac{1}{2} \left(\tilde{E}_{y,i} + \tilde{E}_{y,m_j}^{(\pm)} \right) \Delta y_{m_j}^{(\pm)} \right],$$

$$\bar{q}_i = \tilde{q}_i + \frac{1}{|V_i|} \sum_{j=1}^{M_i} \frac{\theta}{3} \left(\Delta \tilde{q}_{m_j}^{(-)} + \Delta \tilde{q}_{m_j}^{(+)} \right) \tilde{S}_{m_j},$$

$$\bar{U}_i = U_i + \frac{1}{|V_i|} \sum_{j=1}^{M_i} \left(\alpha_{m_j}^{(-)} \Delta U_{m_j}^{(-)} + \alpha_{m_j}^{(+)} \Delta U_{m_j}^{(+)} \right), \quad (1.70_9)$$

$$\bar{f}_i = f_i + \frac{1}{|V_i|} \sum_{j=1}^{M_i} \left(\alpha_{m_j}^{(-)} \Delta f_{m_j}^{(-)} + \alpha_{m_j}^{(+)} \Delta f_{m_j}^{(+)} \right),$$

$$\alpha_{m_j}^{(-)} = \frac{7\theta}{36} \tilde{S}_{m_j}, \quad \alpha_{m_j}^{(+)} = \frac{7\theta}{36} \tilde{S}_{m_j}, \quad \theta = 0 \vee 1.$$

Сделаем замечание относительно аппроксимации различных типов граничных условий.

Во-первых, граничное условие (1.47) включает в себя условие Неймана $W_n = 0$. В этом случае величины $\gamma_{m_j}^{(\pm)} = 0$ во всех точках сетки. Эта же ситуация возникает в случае условий Дирихле, поскольку уравнения (1.70₁) рассматриваются только во внутренних точках сетки.

Во-вторых, (1.47) может быть условием Ньютона, если $W_n = -\eta u$.

Тогда величины $\gamma_{m_j}^{(\pm)} = -\frac{1}{2} \left[(\eta U)_i + \frac{1}{2} \left[(\eta U)_i + (\eta U)_{m_j}^{(\pm)} \right] \right] |\tilde{\mathbf{I}}_{m_j}^{(\pm)}|$. В случае условий смешанного типа, на каждой части границы получаем соответствующее типу выражение для $\gamma_{m_j}^{(\pm)}$.

В-третьих, при аппроксимации интегральных граничных условий величины $\gamma_{m_j}^{(\pm)} = \sum_{k=1}^N C_{m_j,k}^{(\pm)} U_k$, то есть они могут выражаться через значения искомой функции в любых точках сетки (нелокальная аппроксимация). Похожая ситуация реализуется в случае периодических граничных условий.

Следует также отметить, что в нелинейном случае для реализации схемы (1.70) следует использовать итерационный процесс, аналогичный (1.30). Каждая его итерация реализуется с помощью решения системы линейных алгебраических уравнений с разреженной матрицей нерегулярной структуры. Методы решения таких систем рассматриваются в п. 1.3.

Рассмотрим далее некоторые варианты построенной схемы. Для простоты анализа остановимся на линейных граничных условиях Ньютона ($W_n = -\eta u$, $\eta = const > 0$).

Аналог однородной схемы А.А. Самарского. Исследуем случай диагонального тензора \mathbf{K} и $\mathbf{E} \equiv \mathbf{0}$, $\mathbf{F} \equiv \mathbf{0}$. Тогда схема (1.70) переходит в конечно-объёмный аналог на треугольной сетке двумерной однородной консервативной схемы А.А. Самарского:

$$L_h[U_h]U_i \equiv \frac{1}{|V_i|} \sum_{j=1}^{M_i} \left[(\mathbf{W}_{m_j}, \bar{\mathbf{I}}_{m_j}) + \gamma_{m_j}^{(-)} + \gamma_{m_j}^{(+)} \right] - \bar{q}_i \bar{U}_i = -\bar{f}_i, \quad (1.71_1)$$

$$W_{x,m_j} = + \frac{a_{x,m_j}}{2S_{m_j}} \times \left[(U_{m_j}^{(-)} + U_i) \Delta y_{m_j}^{(-)} + (U_{m_j}^{(+)} + U_{m_j}^{(-)}) (\Delta y_{m_j}^{(+)} - \Delta y_{m_j}^{(-)}) - (U_i + U_{m_j}^{(+)}) \Delta y_{m_j}^{(+)} \right], \quad (1.71_2)$$

$$W_{y,m_j} = - \frac{a_{y,m_j}}{2S_{m_j}} \times \left[(U_{m_j}^{(-)} + U_i) \Delta x_{m_j}^{(-)} + (U_{m_j}^{(+)} + U_{m_j}^{(-)}) (\Delta x_{m_j}^{(+)} - \Delta x_{m_j}^{(-)}) - (U_i + U_{m_j}^{(+)}) \Delta x_{m_j}^{(+)} \right],$$

$$a_{x,m_j} = \frac{3}{\left[\frac{1}{K_{xx,i}} + \frac{1}{K_{xx,m_j}^{(-)}} + \frac{1}{K_{xx,m_j}^{(+)}} \right]}, \quad a_{y,m_j} = \frac{3}{\left[\frac{1}{K_{yy,i}} + \frac{1}{K_{yy,m_j}^{(-)}} + \frac{1}{K_{yy,m_j}^{(+)}} \right]}, \quad (1.71_3)$$

$$\mathbf{l}_{m_j} = \mathbf{l}_{m_j}^{(-)} + \mathbf{l}_{m_j}^{(+)} = \frac{1}{2} \left(\Delta x_{m_j}^{(+)} - \Delta x_{m_j}^{(-)}, \Delta y_{m_j}^{(+)} - \Delta y_{m_j}^{(-)} \right)^T, \quad (1.71_4)$$

$$\bar{\mathbf{l}}_{m_j} = \Theta \mathbf{l}_{m_j} = \frac{1}{2} \left(\Delta y_{m_j}^{(+)} - \Delta y_{m_j}^{(-)}, - \left(\Delta x_{m_j}^{(+)} - \Delta x_{m_j}^{(-)} \right) \right)^T,$$

$$\gamma_{m_j}^{(\pm)} = \begin{cases} -\eta \left(\frac{3}{4} U_i + \frac{1}{4} U_{m_j}^{(\pm)} \right) |\tilde{\mathbf{l}}_{m_j}^{(\pm)}|, & P_i, P_{m_j}^{(\pm)} \in \partial D, \\ 0, & P_i \vee P_{m_j}^{(\pm)} \notin \partial D, \end{cases} \quad (1.71_5)$$

$$\bar{q}_i = q_i + \frac{1}{|V_i|} \sum_{j=1}^{M_i} \frac{\theta}{3} \left(\Delta q_{m_j}^{(-)} + \Delta q_{m_j}^{(+)} \right) \tilde{S}_{m_j},$$

$$\bar{U}_i = U_i + \frac{1}{|V_i|} \sum_{j=1}^{M_i} \left(\alpha_{m_j}^{(-)} \Delta U_{m_j}^{(-)} + \alpha_{m_j}^{(+)} \Delta U_{m_j}^{(+)} \right), \quad (1.71_6)$$

$$\bar{f}_i = f_i + \frac{1}{|V_i|} \sum_{j=1}^{M_i} \left(\alpha_{m_j}^{(-)} \Delta f_{m_j}^{(-)} + \alpha_{m_j}^{(+)} \Delta f_{m_j}^{(+)} \right).$$

Схема (1.71) имеет второй (или почти второй, в зависимости от значения параметра θ) порядок аппроксимации по пространству, $O(\bar{l}^2)$, поскольку является частным случаем (1.70).

Для сеточного оператора $L_h[U_h]$, заданного во внутренних точках сетки, выполняется принцип максимума.

Утверждение 1.3. *Если сеточная функция U_h отлична от константы и удовлетворяет условиям*

$$L_h[U_h]U_i \geq 0, \quad P_i \notin \partial D, \quad (1.72)$$

то при $\bar{l} \leq l_0$ она не может принимать положительного максимального значения во внутренних точках сетки.

Для доказательства этого факта рассмотрим тождества

$$\begin{aligned} & \left(\mathbf{W}_{m_j}, \bar{\mathbf{l}}_{m_j} \right) + \gamma_{m_j}^{(-)} + \gamma_{m_j}^{(+)} - \bar{q}_i \left[\alpha_{m_j} U_i + \alpha_{m_j}^{(-)} U_{m_j}^{(-)} + \alpha_{m_j}^{(+)} U_{m_j}^{(+)} \right] \equiv \\ & \equiv C_{m_j}^{(-)} U_{m_j}^{(-)} + C_{m_j}^{(+)} U_{m_j}^{(+)} - C_{m_j} U_i, \end{aligned} \quad (1.73)$$

$$|V_i| L_h[U_h]U_i \equiv \sum_{j=1}^{M_i} \left[C_{m_j}^{(-)} U_{m_j}^{(-)} + C_{m_j}^{(+)} U_{m_j}^{(+)} \right] - \left(\sum_{j=1}^{M_i} C_{m_j} \right) U_i,$$

где

$$C_{m_j}^{(\pm)} = \frac{a_{x,m_j}}{4S_{m_j}} \left(\left(\Delta y_{m_j}^{(\mp)} \right)^2 - \Delta y_{m_j}^{(+)} \Delta y_{m_j}^{(-)} \right) + \frac{a_{y,m_j}}{4S_{m_j}} \left(\left(\Delta x_{m_j}^{(\mp)} \right)^2 - \Delta x_{m_j}^{(+)} \Delta x_{m_j}^{(-)} \right) - \alpha_{m_j}^{(\pm)} \bar{q}_i - \frac{1}{4} \eta_{m_j}^{(\pm)} \left| \tilde{\mathbf{i}}_{m_j}^{(\pm)} \right|,$$

$$C_{m_j} = \frac{a_{x,m_j}}{4S_{m_j}} \left(\Delta y_{m_j}^{(+)} - \Delta y_{m_j}^{(-)} \right)^2 + \frac{a_{y,m_j}}{4S_{m_j}} \left(\Delta x_{m_j}^{(+)} - \Delta x_{m_j}^{(-)} \right)^2 + \alpha_{m_j} \bar{q}_i + \frac{3}{4} \eta_{m_j}^{(-)} \left| \tilde{\mathbf{i}}_{m_j}^{(-)} \right| + \frac{3}{4} \eta_{m_j}^{(+)} \left| \tilde{\mathbf{i}}_{m_j}^{(+)} \right|,$$

$$\eta_{m_j}^{(\pm)} = \begin{cases} \eta, & P_i, P_{m_j}^{(\pm)} \in \partial D, \\ 0, & P_i \vee P_{m_j}^{(\pm)} \notin \partial D. \end{cases}$$

Во внутренних точках сетки значения $\eta_{m_j}^{(\pm)} = 0$ и выполнены условия

$$C_{m_j} > 0, \quad C_{m_j} - C_{m_j}^{(-)} - C_{m_j}^{(+)} = \tilde{S}_{m_j} \bar{q}_i \geq 0. \quad (1.74)$$

Следует также заметить, что во внутренних точках сетки шаблон схемы будет полным. Поэтому $U_{m_j}^{(+)} \equiv U_{m_{j+1}}^{(-)}$, $U_{m_{M_i}}^{(+)} \equiv U_{m_1}^{(-)}$ и суммы

$$\begin{aligned} C_{m_j}^{(+)} + C_{m_{j+1}}^{(-)} &\equiv \bar{C}_{m_j}^{(+)} = \\ &= \frac{a_{x,m_j}}{4S_{m_j}} \left(\left(\Delta y_{m_j}^{(-)} \right)^2 - \Delta y_{m_j}^{(+)} \Delta y_{m_j}^{(-)} \right) + \frac{a_{y,m_j}}{4S_{m_j}} \left(\left(\Delta x_{m_j}^{(-)} \right)^2 - \Delta x_{m_j}^{(+)} \Delta x_{m_j}^{(-)} \right) - \alpha_{m_j}^{(+)} \bar{q}_i + \\ &+ \frac{a_{x,m_{j+1}}}{4S_{m_{j+1}}} \left(\left(\Delta y_{m_{j+1}}^{(+)} \right)^2 - \Delta y_{m_{j+1}}^{(+)} \Delta y_{m_{j+1}}^{(-)} \right) + \frac{a_{y,m_{j+1}}}{4S_{m_{j+1}}} \left(\left(\Delta x_{m_{j+1}}^{(+)} \right)^2 - \Delta x_{m_{j+1}}^{(+)} \Delta x_{m_{j+1}}^{(-)} \right) - \alpha_{m_{j+1}}^{(-)} \bar{q}_i, \end{aligned}$$

составляют внедиагональные коэффициенты схемы. Тогда

$$\begin{aligned} |V_i| L_h [U_h] U_i &= \sum_{j=1}^{M_i} \left[C_{m_j}^{(-)} U_{m_j}^{(-)} + C_{m_j}^{(+)} U_{m_j}^{(+)} \right] - \left(\sum_{j=1}^{M_i} C_{m_j} \right) U_i \equiv \\ &\equiv \sum_{j=1}^{M_i} \bar{C}_{m_j}^{(+)} U_{m_j}^{(+)} - \bar{C}_i U_i. \end{aligned} \quad (1.75)$$

В силу (1.74) имеем:

$$\bar{C}_i > 0, \quad \bar{C}_i - \sum_{j=1}^{M_i} \bar{C}_{m_j}^{(+)} \geq 0. \quad (1.76)$$

Теперь предположим противное доказываемому утверждению: положительный максимум функции U_h достигается в некоторой внутренней точке сетки P_{i_0} :

$$\max_{1 \leq i \leq N} U_i = U_{i_0} > 0, \quad P_{i_0} \notin \partial D. \quad (1.77)$$

Поскольку функция U_h не константа, а сетка $\bar{\omega}_p$ связная, то можно найти такой полный контрольный объём V_{i_1} , в котором

$$U_{i_1} = U_{i_0}, \quad \exists 0 < U_{m_j}^{(+)} \equiv U_{m_j}^{(*)} < U_{i_0}, \quad \forall U_{m_j}^{(+)} \geq 0. \quad (1.78)$$

Последнее вытекает из того, что искомая функция $u(x, y)$, по крайней мере, непрерывна в D . В случае сходимости схемы (которая доказывается ниже без использования оценок принципа максимума) её сеточный аналог U_h наследует это свойство на сетке. Поэтому можно построить сетку такого малого размера ($\bar{l} \leq l_0$), что в окрестности положительного максимума будут находиться только неотрицательные значения U_h .

Запишем теперь тождество (1.75) в точке P_{i_1} и проведем в правой его части следующие замены:

$$\begin{aligned} \bar{C}_{m_j}^{(+)} U_{m_j}^{(+)} &\rightarrow 0, \quad \text{если} \quad \bar{C}_{m_j}^{(+)} \leq 0; \\ \bar{C}_{m_j}^{(+)} U_{m_j}^{(+)} &\rightarrow \bar{C}_{m_j}^{(+)} U_{i_1}, \quad \text{если} \quad \bar{C}_{m_j}^{(+)} > 0. \end{aligned} \quad (1.79)$$

Тогда тождество (1.75) превратится в неравенство

$$|V_{i_1}| L_h[U_h] U_{i_1} \leq \sum_j \bar{C}_{m_j}^{(+)} U_{i_1} - \bar{C}_{i_1} U_{i_1} = - \left(\bar{C}_{i_1} - \sum_j \bar{C}_{m_j}^{(+)} \right) U_{i_1}. \quad (1.80)$$

В сумме в правой части (1.80) может остаться как одно или несколько слагаемых (в силу (1.78)), так и все. Если остались все слагаемые, то в силу того, что $U_{m_j}^{(*)} < U_{i_1}$, неравенство (1.80) строгое, но $\bar{C}_{i_1} - \sum_j \bar{C}_{m_j}^{(+)} \geq 0$. Если остались не все слагаемые, то неравенство (1.80) не строгое, но $\bar{C}_{i_1} - \sum_j \bar{C}_{m_j}^{(+)} > 0$. Поэтому в любом из этих вариантов в силу того, что $U_{i_1} > 0$,

получаем, что $|V_i|L_h[U_h]U_i < 0$. Этот факт противоречит условию (1.72) и доказывает утверждение 1.3.

В заключение доказательства заметим, что ограничение на размер ребер треугольников не возникает, если узлы $\bar{\omega}_p$ совпадают с узлами ортогональной декартовой сетки, а также в некоторых других специальных случаях. Указать точное значение максимальной длины ребра в общем случае достаточно сложно. Однако на практике это и не требуется, поскольку задачи решаются на последовательности вложенных сеток для получения оценки реальной точности. При этом самая мелкая сетка, как правило, удовлетворяет условиям принципа максимума.

Замечание. Аналогичным образом можно доказать принцип минимума, а также принцип экстремума для случая третьей краевой задачи и теоремы сравнения [188, 200]. На основе этих принципов можно было бы доказать существование единственного решения линейной сеточной задачи (1.71), получить его оценку в сеточной норме $C(\bar{\omega}_p)$ при условии, что функция $q(x, y, u) \geq q_0 = \text{const} > 0$, и на основе этой оценки получить сходимость схемы (1.71) к точному решению линейной дифференциальной задачи в норме $C(\bar{\omega}_p)$ с точностью $O(\bar{l}^2)$ в данном частном случае. Однако нас интересует более общий квазилинейный случай, и к тому же, при доказательстве принципа максимума уже был использован факт сходимости схемы (1.71). Поэтому докажем сходимость другим способом.

Рассмотрим общий квазилинейный случай и докажем сходимость схемы (1.71) в норме $W_2^1(\bar{\omega}_p)$. Для этого введем в пространстве функций, заданных на сетке $\bar{\omega}_p$, скалярное произведение и подчиненную ему норму

$$(u_h, v_h)_0 = \sum_{i=1}^N u_i v_i |V_i|, \quad \|u_h\|_0 = \sqrt{(u_h, u_h)_0}. \quad (1.81_1)$$

Ограниченные по данной норме сеточные функции составляют пространство $L_2(\bar{\omega}_p)$. Далее можно ввести скалярное произведение и норму в $W_2^1(\bar{\omega}_p)$:

$$(\nabla u_h, \nabla v_h)_1 = \sum_{m=1}^M (\nabla u_m, \nabla v_m) S_m, \quad \|u_h\|_1 = \sqrt{(\nabla u_h, \nabla u_h)_1}, \quad (1.81_2)$$

где

$$\begin{aligned} \nabla u_m &= \frac{1}{2S_m} \left(\begin{aligned} &(u_m^{(1)} + u_m^{(2)}) \Delta y_m^{(21)} + (u_m^{(2)} + u_m^{(3)}) \Delta y_m^{(32)} + (u_m^{(3)} + u_m^{(1)}) \Delta y_m^{(13)} \\ &(u_m^{(1)} + u_m^{(2)}) \Delta x_m^{(12)} + (u_m^{(2)} + u_m^{(3)}) \Delta x_m^{(23)} + (u_m^{(3)} + u_m^{(1)}) \Delta x_m^{(31)} \end{aligned} \right) = \\ &= \frac{1}{2S_m} \left(\begin{aligned} &\Delta y_m^{(23)} u_m^{(1)} + \Delta y_m^{(31)} u_m^{(2)} + \Delta y_m^{(12)} u_m^{(3)} \\ &\Delta x_m^{(32)} u_m^{(1)} + \Delta x_m^{(13)} u_m^{(2)} + \Delta x_m^{(21)} u_m^{(3)} \end{aligned} \right), \end{aligned}$$

и использованы обозначения (1.53).

Будем также учитывать следующие тождества:

$$\begin{aligned} (u_h, v_h)_0 &= \sum_{i=1}^N u_i v_i |V_i| = \sum_{i=1}^N u_i v_i \sum_{j=1}^{M_i} \tilde{S}_{m_j} \equiv \sum_{m=1}^M (u_m^{(1)} v_m^{(1)} + u_m^{(2)} v_m^{(2)} + u_m^{(3)} v_m^{(3)}) \frac{S_m}{3}, \\ \|u_h\|_0 &= \sqrt{(u_h, u_h)_0} \equiv \sqrt{\sum_{m=1}^M ((u_m^{(1)})^2 + (u_m^{(2)})^2 + (u_m^{(3)})^2) \frac{S_m}{3}}. \end{aligned} \quad (1.81_3)$$

Нам понадобится также норма L_2 на множестве граничных ребер $E(\bar{\omega}_p)$. Её можно ввести в следующем виде:

$$(u_h, v_h)_E = \sum_{k=1}^L \frac{1}{2} (u_k^{(\alpha)} v_k^{(\alpha)} + u_k^{(\beta)} v_k^{(\beta)}) |\mathbf{I}_k^{(\alpha\beta)}|, \quad \|u_h\|_E = \sqrt{(u_h, v_h)_E}. \quad (1.81_4)$$

Получим теперь априорную энергетическую оценку сеточной функции U_h . Для этого умножим скалярно уравнение (1.71₁) на $-U_h$:

$$(L_h[U_h]U_h, -U_h)_0 = (-\bar{f}_h, -U_h)_0.$$

Это тождество можно записать подробнее в следующем виде:

$$\begin{aligned} \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^{M_i} (\mathbf{w}_{m_j}, -\bar{\mathbf{I}}_{m_j}) U_i + \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^{M_i} [-\gamma_{m_j}^{(-)} - \gamma_{m_j}^{(+)}] U_i + \sum_{i=1}^N \bar{q}_i \bar{U}_i U_i |V_i| = \\ = \sum_{i=1}^N \bar{f}_i U_i |V_i|. \end{aligned} \quad (1.82)$$

Первое слагаемое в левой части (1.82) можно преобразовать следующим образом:

$$\sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^{M_i} (\mathbf{w}_{m_j}, -\bar{\mathbf{I}}_{m_j}) U_i = \sum_{m=1}^M (\mathbf{w}_m, -\Theta \mathbf{I}_m^{(32)} U_m^{(1)} - \Theta \mathbf{I}_m^{(13)} U_m^{(2)} - \Theta \mathbf{I}_m^{(13)} U_m^{(3)}),$$

где $-\Theta_m^{(\alpha\beta)} = -\frac{1}{2}(\Delta y_m^{(\alpha\beta)}, -\Delta x_m^{(\alpha\beta)}) = \frac{1}{2}(\Delta y_m^{(\beta\alpha)}, \Delta x_m^{(\alpha\beta)})$. Если подставить в скалярные произведения выражения для компонент потока и векторов $-\Theta_m^{(\alpha\beta)}$, то после несложных преобразований получим:

$$\begin{aligned} & (W_m, -\Theta_m^{(32)}U_m^{(1)} - \Theta_m^{(13)}U_m^{(2)} - \Theta_m^{(13)}U_m^{(3)}) = \\ & = \frac{a_{x,m}}{4S_m} (\Delta y_m^{(23)}U_m^{(1)} + \Delta y_m^{(31)}U_m^{(2)} + \Delta y_m^{(12)}U_m^{(3)})^2 + \\ & + \frac{a_{y,m}}{4S_m} (\Delta x_m^{(32)}U_m^{(1)} + \Delta x_m^{(13)}U_m^{(2)} + \Delta x_m^{(21)}U_m^{(3)})^2. \end{aligned}$$

Отсюда и в силу равномерной эллиптичности дифференциального оператора получаем неравенство:

$$\sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^{M_i} (\mathbf{w}_{m_j}, -\bar{\mathbf{l}}_{m_j}) U_i \geq k_0 \|u_h\|_1^2. \quad (1.83)$$

Для второго слагаемого в левой части (1.82) получим оценку

$$\begin{aligned} & \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^{M_i} [-\gamma_{m_j}^{(-)} - \gamma_{m_j}^{(+)}] U_i = \\ & = \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^{M_i} \left[\eta_{m_j}^{(-)} \left(\frac{3}{4}U_i + \frac{1}{4}U_{m_j}^{(-)} \right) |\tilde{\mathbf{l}}_{m_j}^{(-)}| + \eta_{m_j}^{(+)} \left(\frac{3}{4}U_i + \frac{1}{4}U_{m_j}^{(+)} \right) |\tilde{\mathbf{l}}_{m_j}^{(+)}| \right] U_i = \\ & = \sum_{m=1}^M \left[\sum_{\alpha=1,2,3} \frac{\eta_m^{(\alpha\alpha+1)} |\mathbf{l}_m^{(\alpha\alpha+1)}|}{2} \left(\frac{3}{4}(U_m^{(\alpha)})^2 + \frac{3}{4}(U_m^{(\alpha+1)})^2 + \frac{1}{2}U_m^{(\alpha)}U_m^{(\alpha+1)} \right) \right] \geq \\ & \geq \sum_{m=1}^M \left[\sum_{\alpha=1,2,3} \frac{\eta_m^{(\alpha\alpha+1)} |\mathbf{l}_m^{(\alpha\alpha+1)}|}{4} \left((U_m^{(\alpha)})^2 + (U_m^{(\alpha+1)})^2 \right) \right] = \frac{\eta}{2} \|U_h\|_E^2. \end{aligned} \quad (1.84)$$

Здесь использовано следующее переобозначение

$$\eta_m^{(\alpha\alpha+1)} = \begin{cases} \eta, & P_m^{(\alpha)}, P_m^{(\alpha+1)} \in \partial D, \\ 0, & P_m^{(\alpha)} \vee P_m^{(\alpha+1)} \notin \partial D. \end{cases}$$

Оценим третье слагаемое в левой части (1.82). В случае $\theta = 0$ тривиальным образом получаем:

$$\sum_{i=1}^N \overline{q_i U_i} U_i |V_i| \equiv \sum_{i=1}^N q_i U_i^2 |V_i| \geq q_0 \|U_h\|_0^2. \quad (1.85_1)$$

В случае $\theta = 1$ применим свойства средних и ε -неравенство [198]:

$$\begin{aligned}
\sum_{i=1}^N \overline{q_i} \overline{U_i} U_i |V_i| &= \sum_{i=1}^N \overline{q_i} \left(\sum_{j=1}^{M_i} \left(\alpha_{m_j} U_i^2 + \alpha_{m_j}^{(-)} U_{m_j}^{(-)} U_i + \alpha_{m_j}^{(+)} U_{m_j}^{(+)} U_i \right) \right) \geq \\
&\geq \sum_{i=1}^N \overline{q_i} \left(\sum_{j=1}^{M_i} \left(U_i^2 \left(\alpha_{m_j} - \frac{1}{4\varepsilon_{m_j}} \left(\alpha_{m_j}^{(-)} + \alpha_{m_j}^{(+)} \right) \right) - \varepsilon_{m_j} \alpha_{m_j}^{(-)} \left(U_{m_j}^{(-)} \right)^2 - \varepsilon_{m_j} \alpha_{m_j}^{(+)} \left(U_{m_j}^{(+)} \right)^2 \right) \right) = \\
&= \sum_{i=1}^N \overline{q_i} \left(\sum_{j=1}^{M_i} \frac{7\tilde{S}_{m_j}}{36} \left(U_i^2 \left(\frac{22}{7} - \frac{1}{2\varepsilon_{m_j}} \right) - \varepsilon_{m_j} \left(U_{m_j}^{(-)} \right)^2 - \varepsilon_{m_j} \left(U_{m_j}^{(+)} \right)^2 \right) \right).
\end{aligned}$$

Здесь $\varepsilon_{m_j} > 0$ – произвольные числа. Перегруппируем слагаемые по треугольникам, и учтем аппроксимацию \overline{q} в каждом треугольнике:

$$\begin{aligned}
&\sum_{i=1}^N \overline{q_i} \left(\sum_{j=1}^{M_i} \frac{7\tilde{S}_{m_j}}{36} \left(U_i^2 \left(\frac{22}{7} - \frac{1}{2\varepsilon_{m_j}} \right) - \varepsilon_{m_j} \left(U_{m_j}^{(-)} \right)^2 - \varepsilon_{m_j} \left(U_{m_j}^{(+)} \right)^2 \right) \right) = \\
&= \frac{7}{36} \sum_{m=1}^M \overline{q}_m \frac{S_m}{3} \left[\begin{aligned} &\left(U_m^{(1)} \right)^2 \left(\frac{22}{7} - \frac{1}{2\varepsilon_m^{(1)}} - \varepsilon_m^{(2)} - \varepsilon_m^{(3)} \right) + \\ &+ \left(U_m^{(2)} \right)^2 \left(\frac{22}{7} - \frac{1}{2\varepsilon_m^{(2)}} - \varepsilon_m^{(1)} - \varepsilon_m^{(3)} \right) + \\ &+ \left(U_m^{(3)} \right)^2 \left(\frac{22}{7} - \frac{1}{2\varepsilon_m^{(3)}} - \varepsilon_m^{(1)} - \varepsilon_m^{(2)} \right) \end{aligned} \right].
\end{aligned}$$

Отсюда видно, что параметры $\varepsilon_m^{(\alpha)}$ можно взять одинаковыми: $\varepsilon_m^{(\alpha)} \equiv \varepsilon$, и потребовать, чтобы выполнялось неравенство $\frac{22}{7} - \frac{1}{2\varepsilon} - 2\varepsilon \geq \delta > 0$. Оно будет

выполнено, если взять, например, $\varepsilon = \frac{1}{2}$. Тогда $\delta \in \left(0, \frac{8}{7} \right]$, и

$$\begin{aligned}
&\sum_{i=1}^N \overline{q_i} \left(\sum_{j=1}^{M_i} \frac{7\tilde{S}_{m_j}}{36} \left(U_i^2 \left(\frac{22}{7} - \frac{1}{2\varepsilon_{m_j}} \right) - \varepsilon_{m_j} \left(U_{m_j}^{(-)} \right)^2 - \varepsilon_{m_j} \left(U_{m_j}^{(+)} \right)^2 \right) \right) \geq \\
&\geq \frac{7\delta}{36} \sum_{m=1}^M \overline{q}_m \frac{S_m}{3} \left[\left(U_m^{(1)} \right)^2 + \left(U_m^{(2)} \right)^2 + \left(U_m^{(3)} \right)^2 \right] \geq \frac{7}{36} \delta q_0 \|U_h\|_0^2.
\end{aligned}$$

Отсюда при $\delta = \frac{8}{7}$ можно получить

$$\sum_{i=1}^N \overline{q_i U_i} U_i |V_i| \geq \frac{2}{9} q_0 \|U_h\|_0^2. \quad (1.85_2)$$

В результате общая оценка третьего слагаемого в левой части (1.82) для обоих значений θ имеет вид

$$\sum_{i=1}^N \overline{q_i U_i} U_i |V_i| \geq \frac{9-7\theta}{9} q_0 \|U_h\|_0^2. \quad (1.85_3)$$

Для оценки правой части (1.82) в случае $\theta=0$ получаем оценку с помощью неравенства Коши-Буняковского:

$$\sum_{i=1}^N \overline{f_i} U_i |V_i| = \sum_{i=1}^N f_i U_i |V_i| = (f_h, U_h)_0 \leq |(f_h, U_h)_0| \leq \|f_h\|_0 \|U_h\|_0. \quad (1.86_1)$$

В случае $\theta=1$ имеем

$$\begin{aligned} \sum_{i=1}^N \overline{f_i} U_i |V_i| &\leq \sum_{i=1}^N |\overline{f_i}| |U_i| |V_i| = \sum_{i=1}^N \left| \sum_{j=1}^{M_i} (\alpha_{m_j} f_i + \alpha_{m_j}^{(-)} f_{m_j}^{(-)} + \alpha_{m_j}^{(+)} f_{m_j}^{(+)}) \right| |U_i| \leq \\ &\leq \frac{11}{18} \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^{M_i} \frac{S_{m_j}}{3} (|f_i| + |f_{m_j}^{(-)}| + |f_{m_j}^{(+)}|) |U_i| \leq \frac{11}{18} \sum_{m=1}^M \frac{S_m}{3} \left(\sum_{\alpha=1,2,3} |f_m^{(\alpha)}| \right) \left(\sum_{\alpha=1,2,3} |U_m^{(\alpha)}| \right) \leq \\ &\leq \frac{22}{18} \sqrt{\sum_{m=1}^M \frac{S_m}{3} \left(\sum_{\alpha=1,2,3} |f_m^{(\alpha)}|^2 \right)} \sqrt{\sum_{m=1}^M \frac{S_m}{3} \left(\sum_{\alpha=1,2,3} |U_m^{(\alpha)}|^2 \right)} \equiv \frac{11}{9} \|f_h\|_0 \|U_h\|_0. \end{aligned}$$

Тогда в силу (1.81₃) получаем

$$\sum_{i=1}^N \overline{f_i} U_i |V_i| \leq \frac{11}{9} \|f_h\|_0 \|U_h\|_0. \quad (1.86_2)$$

Объединяя обе оценки в одну, окончательно имеем:

$$\left(\overline{f_h}, U_h \right)_0 \equiv \sum_{i=1}^N \overline{f_i} U_i |V_i| \leq \frac{9+2\theta}{9} \|f_h\|_0 \|U_h\|_0. \quad (1.86_3)$$

В итоге из (1.82) с помощью оценок (1.83), (1.84), (1.85₃) и (1.86₃) получаем априорную оценку сеточной функции U_h :

$$k_0 \|u_h\|_1^2 + \frac{\eta}{2} \|U_h\|_E^2 + \frac{9-7\theta}{9} q_0 \|U_h\|_0^2 \leq \frac{9+2\theta}{9} \|f_h\|_0 \|U_h\|_0. \quad (1.87_1)$$

Отсюда можно получить оценку в комбинированной норме:

$$\begin{aligned} \gamma_1 \left(\|u_h\|_1^2 + \|U_h\|_0^2 + \|U_h\|_E^2 \right) &\leq \gamma_2 \|f_h\|_0 \|U_h\|_0 \leq \\ &\leq \frac{\gamma_2}{4\varepsilon} \|f_h\|_0^2 + \varepsilon \gamma_2 \left(\|u_h\|_1^2 + \|U_h\|_0^2 + \|U_h\|_E^2 \right), \end{aligned}$$

или (при $\varepsilon = \frac{\delta\gamma_1}{\gamma_2}$)

$$\|u_h\|_1^2 + \|U_h\|_0^2 + \|U_h\|_E^2 \leq \frac{\gamma_2^2}{4\delta(1-\delta)\gamma_1^2} \|f_h\|_0^2, \quad (1.87_2)$$

где $\delta \in (0,1)$ – произвольное число, $\gamma_1 = \min\left(k_0, \frac{9-7\theta}{9}q_0, \frac{\eta}{2}\right)$, $\gamma_2 = \frac{9+2\theta}{9}$.

Из оценки (1.87₂) в линейном случае следует устойчивость сеточного решения в комбинированной норме и, следовательно, в норме $W_2^1(\bar{\omega}_p)$, а также в норме $C(\bar{\omega}_p)$ в силу теоремы вложения [198]. В квазилинейном случае этот факт имеет место, если предположить ограниченность нелинейных коэффициентов дифференциальной задачи по $u \in (-\infty, +\infty)$.

Изученный выше вопрос о порядке аппроксимации в совокупности с априорными оценками в нормах $W_2^1(\bar{\omega}_p)$ и $C(\bar{\omega}_p)$ позволяют доказать следующую теорему.

Теорема 1.4. *Разностная схема (1.71) устойчива по правой части в комбинированной норме, удовлетворяет принципу максимума и сходится со скоростью $O(\bar{l}^2)$ в норме $W_2^1(\bar{\omega}_p)$ к точному решению двумерной дифференциальной задачи (1.24) с пространственным оператором (1.44) и граничными условиями общего вида, если выполнены следующие условия:*

- 1) тензор \mathbf{K} диагональный, $\mathbf{E} \equiv \mathbf{0}$, $\mathbf{F} \equiv \mathbf{0}$;
- 2) коэффициенты исходной дифференциальной задачи (1.24), (1.21) ограничены и кусочно-непрерывны по совокупности переменных в рассматриваемой области D , а их производные в области непрерывности ограничены;

3) решение дифференциальной задачи (1.24), (1.21) существует, единственно и является достаточно гладким в области D ;

4) треугольная сетка удовлетворяют условиям 1)-6) и ограничению принципа максимума $\bar{l} \leq l_0$, где l_0 – некоторый максимально возможный размер рёбер треугольников.

Другие варианты схемы. Рассмотрим теперь вариант схемы (1.70) для случая диагонального тензора \mathbf{K} и $\mathbf{E} \equiv \mathbf{0}$, $\mathbf{F} \neq \mathbf{0}$ (схема для оператора недивергентного вида – аналог регуляризированной схемы А.А. Самарского). В этом случае по сравнению со схемой (1.71) изменяется вид лишь одного слагаемого

$$\left(\mathbf{W}_{m_j}, \Theta \mathbf{I}_{m_j}^{(-)} + \Theta \mathbf{I}_{m_j}^{(+)} \right) \rightarrow \left(\mathbf{W}_{m_j}, \chi_{m_j}^{(-)} \Theta \mathbf{I}_{m_j}^{(-)} + \chi_{m_j}^{(+)} \Theta \mathbf{I}_{m_j}^{(+)} \right), \quad (1.88_1)$$

где множители $\chi_{m_j}^{(\pm)}$ определены в (1.70₄) и положительны. Их выбор был осуществлен из условий сохранения порядка аппроксимации и монотонности схемы. Для этого требуется лишь дополнительное ограничение на максимальное ребро треугольников. Фактически в этом случае может измениться лишь конкретное значение параметра l_0 , которое теперь дополнительно зависит от вида компонент вектора \mathbf{F} . В итоге можно показать, что и в данном случае справедливы принцип максимума (Утв. 1.3) и теорема 1.4.

Далее рассмотрим вариант схемы (1.70) для случая диагонального тензора \mathbf{K} и $\mathbf{E} \neq \mathbf{0}$, $\mathbf{F} \neq \mathbf{0}$ (схема экспоненциальной подгонки). Здесь помимо замены (1.88₁) изменяются также выражения для компонент потока:

$$W_{x,m_j} = + \frac{a_{x,m_j}}{2S_{m_j}} \times \left[\begin{aligned} & \left(\bar{G}_{x,m_j}^{(-)} U_{m_j}^{(-)} + U_i \right) \Delta y_{m_j}^{(-)} + \left(\bar{G}_{x,m_j}^{(+)} U_{m_j}^{(+)} + \bar{G}_{x,m_j}^{(-)} U_{m_j}^{(-)} \right) \left(\Delta y_{m_j}^{(+)} - \Delta y_{m_j}^{(-)} \right) - \\ & - \left(U_i + \bar{G}_{x,m_j}^{(+)} U_{m_j}^{(+)} \right) \Delta y_{m_j}^{(+)} \end{aligned} \right], \quad (1.88_2)$$

$$W_{y,m_j} = -\frac{a_{y,m_j}}{2S_{m_j}} \times \left[\left(\bar{G}_{y,m_j}^{(-)} U_{m_j}^{(-)} + U_i \right) \Delta x_{m_j}^{(-)} + \left(\bar{G}_{y,m_j}^{(+)} U_{m_j}^{(+)} + \bar{G}_{y,m_j}^{(-)} U_{m_j}^{(-)} \right) \left(\Delta x_{m_j}^{(+)} - \Delta x_{m_j}^{(-)} \right) - \right. \\ \left. \times \left[- \left(U_i + \bar{G}_{y,m_j}^{(+)} U_{m_j}^{(+)} \right) \Delta x_{m_j}^{(+)} \right] \right], \quad (1.883)$$

$$a_{x,m_j} = \frac{3}{\left[\frac{1}{K_{xx,i}} + \frac{\bar{G}_{x,m_j}^{(-)}}{K_{xx,m_j}^{(-)}} + \frac{\bar{G}_{x,m_j}^{(+)}}{K_{xx,m_j}^{(+)}} \right]}, \quad a_{y,m_j} = \frac{3}{\left[\frac{1}{K_{yy,i}} + \frac{\bar{G}_{y,m_j}^{(-)}}{K_{yy,m_j}^{(-)}} + \frac{\bar{G}_{y,m_j}^{(+)}}{K_{yy,m_j}^{(+)}} \right]}, \quad (1.884)$$

а также заменяется q на \tilde{q} .

В этой ситуации все свойства схемы остаются в силе за исключением того, что теперь справедлив лишь слабый принцип максимума, гарантирующий существование и единственность решения схемы, но не дающий оценку сверху. Оценка сеточного решения сверху даёт аналог энергетической оценки (1.87₂). Этого оказывается достаточно, чтобы доказать сходимость схемы с тем же порядком точности. В принципе, как и в случае ортогональной сетки [248], можно доказать сильный принцип максимума для сопряженного сеточного оператора, однако эти выкладки достаточно громоздки, и здесь не рассматриваются.

Наконец можно рассмотреть наиболее общий вариант схемы (1.70) для случая произвольного симметричного положительноопределенного тензора \mathbf{K} и $\mathbf{E} \neq \mathbf{0}, \mathbf{F} \neq \mathbf{0}$ (*обобщённая схема экспоненциальной подгонки*). В этой ситуации компоненты вектора потока рассчитываются по более сложным формулам, что сильно затрудняет проведение анализа схемы. Однако и здесь можно установить все заявленные свойства предложенной схемы, так что справедлива более общая теорема аналогичная 1.4 с поправками на слабый принцип максимума.

Нестационарный случай. Рассмотрим теперь кратко двумерную нестационарную задачу (1.18), (1.20) в области произвольной формы и граничными условиями общего вида. В отличие от случая ортогональных сеток здесь невозможно предложить локально-одномерный алгоритм.

Поэтому мы рассмотрим лишь схему с весами на равномерной сетке по времени $\bar{\omega}_t$:

$$\frac{\hat{U}_h - U_h}{\tau} = \sigma \left(L_h [\hat{U}_h] \hat{U}_h + \hat{f}_h \right) + (1 - \sigma) \left(L_h [U_h] U_h + f_h \right), \quad (1.89)$$

$$\mathbf{r}_h \in \bar{\omega}_P, \quad t > 0, \quad t \in \bar{\omega}_t;$$

$$U_h|_{t=0} = u_0(\mathbf{r}_h), \quad \mathbf{r}_h \in \bar{\omega}_P. \quad (1.90)$$

Аппроксимации оператора $L_h [U_h]$ и f_h возьмём из (1.70) при $\theta = 0$. Порядок аппроксимации такой схемы можно условно считать вторым по пространству (см. выше). Порядок аппроксимации по времени зависит от веса σ . Как обычно, мы рассмотрим только три варианта схемы: явную, неявную и симметричную.

Схема (1.89), (1.90) при любом типе граничных условий является консервативной и удовлетворяет принципу максимума (в сильном или слабом смысле) на каждом слое по времени. Сходимость схемы к точному решению нестационарной задачи гарантирует следующая теорема [A42].

Теорема 1.5. *Разностная схема (1.89), (1.90) устойчива и сходится к точному решению двумерной нестационарной дифференциальной задачи (1.18), (1.20) с пространственным оператором (1.44) и граничными условиями (1.21) общего вида со скоростью $O(\bar{T}^2 + \tau^\gamma)$ (где $\gamma = 1$, если $\sigma \neq 0.5$, и $\gamma = 2$, если $\sigma = 0.5$), в норме $L_2(\bar{\omega}_P) \times C(\bar{\omega}_t)$, если выполнены следующие условия:*

1) *коэффициенты исходной нестационарной дифференциальной задачи (1.18), (1.44), (1.20), (1.21) ограничены и кусочно-непрерывны по совокупности переменных в рассматриваемой области $D \times (0, t_{\max}]$, а их производные в области непрерывности ограничены;*

2) *решение дифференциальной задачи (1.18), (1.44), (1.20), (1.21) существует, единственно и является достаточно гладким в области $D \times (0, t_{\max}]$;*

3) треугольная сетка удовлетворяют условиям 1)-6) и ограничению принципа максимума $\bar{l} \leq l_0$, где l_0 – некоторый максимально возможный размер рёбер треугольников.

4) шаг сетки по времени удовлетворяет условию устойчивости:

$$0 < \tau < C_\sigma l_{\min}^\beta, \quad \beta = \begin{cases} 1, & \sigma = 1, \\ 2, & 0 \leq \sigma < 1, \end{cases} \quad (1.91)$$

где C_σ – положительные константы, независящие от шагов сетки, l_{\min} – минимальное значение длины ребра треугольников из T .

Доказательство теоремы проводится энергетическим методом с привлечением оценок принципа максимума и использования факта ограниченной нелинейности коэффициентов дифференциальной задачи. В нелинейном случае для реализации схемы на каждом слое по времени необходимо использовать итерационный процесс аналогичный (1.39). Доказательство его сходимости потребует ограничений на шаг по времени вида (1.91).

1.2.4 Схемы экспоненциальной подгонки на нерегулярных тетраэдральных сетках

В данном пункте рассмотрим кратко трехмерный вариант стационарной задачи (1.24), (1.21) в области D произвольного вида с кусочно-гладкой границей ∂D . Дифференциальный оператор L будет иметь вид

$$Lu \equiv \frac{\partial W_x}{\partial x} + \frac{\partial W_y}{\partial y} + \frac{\partial W_z}{\partial z} + \tilde{F}_x W_x + \tilde{F}_y W_y + \tilde{F}_z W_z - \tilde{q}u, \quad (1.92_1)$$

$$W_x \equiv \tilde{K}_{xx} \frac{\partial V_x}{\partial x} + \tilde{K}_{xy} \frac{\partial V_y}{\partial y} + \tilde{K}_{xz} \frac{\partial V_z}{\partial z},$$

$$W_y \equiv \tilde{K}_{yx} \frac{\partial V_x}{\partial x} + \tilde{K}_{yy} \frac{\partial V_y}{\partial y} + \tilde{K}_{yz} \frac{\partial V_z}{\partial z}, \quad (1.92_2)$$

$$W_z \equiv \tilde{K}_{zx} \frac{\partial V_x}{\partial x} + \tilde{K}_{zy} \frac{\partial V_y}{\partial y} + \tilde{K}_{zz} \frac{\partial V_z}{\partial z},$$

$$\begin{aligned}
V_x &= G_x u, & G_x &= \exp \left[\int_{x_0}^x \tilde{E}_x dx' \right]; & V_y &= G_y u, & G_y &= \exp \left[\int_{y_0}^y \tilde{E}_y dy' \right]; \\
V_z &= G_z u, & G_z &= \exp \left[\int_{z_0}^z \tilde{E}_z dz' \right].
\end{aligned}
\tag{1.92}$$

Граничное условие в виде

$$(\mathbf{W}, \mathbf{n}) = W_n, \quad (x, y, z) \in \partial D.
\tag{1.93}$$

Здесь W_n – некоторая функция, зависящая от координат и решения u .

Пусть в области D задана сетка $\bar{\omega}_p = \{P_i = (x_i, y_i, z_i), i = 1, \dots, N\}$, содержащая как внутренние точки области D , так и точки ее границы ∂D . Множеством ω_p обозначим все внутренние точки $\bar{\omega}_p$. Пусть на сетке $\bar{\omega}_p$ построено множество $T(\bar{\omega}_p) = \{T_m = \Delta(P_{i_m}, P_{j_m}, P_{k_m}, P_{l_m}), P_{i_m}, P_{j_m}, P_{k_m}, P_{l_m} \in \bar{\omega}_p, m = 1, \dots, M\}$ тетраэдров, про которое известно следующее:

- 1) $T(\bar{\omega}_p)$ содержит все узлы $\bar{\omega}_p$;
- 2) образующие $T(\bar{\omega}_p)$ тетраэды T_m имеют ненулевой объём и пересекаются не более чем по образующим их вершинам или рёбрам, или граням;
- 3) объединение тетраэдров $D_h = \bigcup_{m=1}^M T_m$ имеет ту же связность, что и область D ;
- 4) отношение объёмов $\gamma = |D_h| / |D| = 1 - \varepsilon$ ($0 \leq \varepsilon < 1$).
- 5) в случае $\varepsilon > 0$ величина γ стремится к 1 при бесконечном измельчении $T(\bar{\omega}_p)$ с учетом криволинейности граничной поверхности ∂D ;
- 6) центр масс каждого тетраэдра проектируется на каждую его грань;
- 7) центр масс каждой грани тетраэдра проектируется на все её рёбра.

Вопросы построения такой сетки выходят за рамки настоящей работы.

На $T(\bar{\omega}_p)$ определим также множество барицентрических контрольных объёмов $V(\bar{\omega}_p) = \{V_i \equiv V(P_i), P_i \in \bar{\omega}_p, i = 1, \dots, N\}$. Каждый контрольный объём

$V(P_i)$ имеет центр в точке P_i и строится следующим образом. Сначала определяется множество тетраэдров, имеющих в качестве одной из вершин точку P_i . Затем в каждом таком тетраэдре T_{m_j} (см. рис. 1.4) выбирается локальная правая аффинная система координат с центром в точке P_i и направляющими векторами $\overrightarrow{P_i P_{m_j}^{(\alpha)}}$ (здесь $P_{m_j}^{(\alpha)}$ – остальные вершины тетраэдра, занумерованные так, чтобы векторы $\overrightarrow{P_i P_{m_j}^{(\alpha)}}$ образовали правую тройку). Далее определяются центр масс M_{m_j} тетраэдра, центры масс $Q_{m_j}^{(\alpha)}$ граней, опирающихся на точку P_i , и центры рёбер $R_{m_j}^{(\alpha)}$, исходящих из точки P_i :

$$M_{m_j} = \frac{1}{4} \left[P_i + \sum_{\alpha=1}^3 P_{m_j}^{(\alpha)} \right], \quad Q_{m_j}^{(\alpha)} = \frac{1}{3} \left(P_i + P_{m_j}^{(\alpha)} + P_{m_j}^{(\alpha+1)} \right),$$

$$R_{m_j}^{(\alpha)} = \frac{1}{2} \left(P_i + P_{m_j}^{(\alpha)} \right), \quad \alpha = 1, 2, 3.$$

Вводятся также объём тетраэдра $|T_{m_j}|$

$$|T_{m_j}| = \begin{vmatrix} 1 & x_i & y_i & z_i \\ 1 & x_{m_j}^{(1)} & y_{m_j}^{(1)} & z_{m_j}^{(1)} \\ 1 & x_{m_j}^{(2)} & y_{m_j}^{(2)} & z_{m_j}^{(2)} \\ 1 & x_{m_j}^{(3)} & y_{m_j}^{(3)} & z_{m_j}^{(3)} \end{vmatrix} = \frac{1}{6} \begin{vmatrix} \Delta x_{m_j}^{(1)} & \Delta y_{m_j}^{(1)} & \Delta z_{m_j}^{(1)} \\ \Delta x_{m_j}^{(2)} & \Delta y_{m_j}^{(2)} & \Delta z_{m_j}^{(2)} \\ \Delta x_{m_j}^{(3)} & \Delta y_{m_j}^{(3)} & \Delta z_{m_j}^{(3)} \end{vmatrix},$$

$$\Delta \xi_{m_j}^{(\alpha)} \equiv \xi_{m_j}^{(\alpha)} - \xi_i, \quad \xi = x, y, z, \quad \alpha = 1, 2, 3;$$

площади $\bar{S}_{m_j}^{(\alpha)}$ его боковых граней и основания относительно точки P_i и нормали $\bar{\mathbf{n}}_{m_j}^{(\alpha)}$ к этим граням:

$$\bar{S}_{m_j}^{(\alpha)} \equiv \left| \Delta \left(P_i, P_{m_j}^{(\alpha)}, P_{m_j}^{(\alpha+1)} \right) \right| = \frac{1}{2} \left| \left[\overrightarrow{P_i P_{m_j}^{(\alpha)}} \times \overrightarrow{P_i P_{m_j}^{(\alpha+1)}} \right] \right|,$$

$$\bar{\mathbf{n}}_{m_j}^{(\alpha)} = \left[\overrightarrow{P_i P_{m_j}^{(\alpha)}} \times \overrightarrow{P_i P_{m_j}^{(\alpha+1)}} \right] / \left(2 \bar{S}_{m_j}^{(\alpha)} \right), \quad \alpha = 1, 2, 3;$$

$$\bar{S}_{m_j}^{(0)} \equiv \left| \Delta \left(P_{m_j}^{(1)}, P_{m_j}^{(2)}, P_{m_j}^{(3)} \right) \right| = \frac{1}{2} \left| \left[\overrightarrow{P_{m_j}^{(1)} P_{m_j}^{(2)}} \times \overrightarrow{P_{m_j}^{(2)} P_{m_j}^{(3)}} \right] \right|,$$

$$\bar{\mathbf{n}}_{m_j}^{(0)} = \left[\overrightarrow{P_{m_j}^{(1)} P_{m_j}^{(2)}} \times \overrightarrow{P_{m_j}^{(2)} P_{m_j}^{(3)}} \right] / \left(2 \bar{S}_{m_j}^{(0)} \right).$$

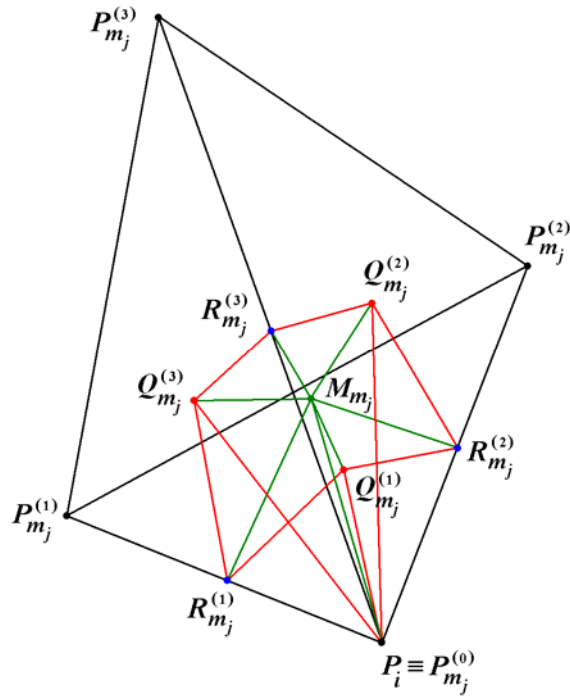


Рисунок 1.4. Составные части барицентрического контрольного объёма V_i в тетраэдре T_{m_j} , примыкающем к точке P_i .

Наконец рассматривается множество тетраэдров

$$T_{m_j}^{(1)} = \Delta(P_i, R_{m_j}^{(1)}, Q_{m_j}^{(1)}, M_{m_j}), \quad T_{m_j}^{(2)} = \Delta(P_i, Q_{m_j}^{(1)}, R_{m_j}^{(2)}, M_{m_j}),$$

$$T_{m_j}^{(3)} = \Delta(P_i, R_{m_j}^{(2)}, Q_{m_j}^{(2)}, M_{m_j}), \quad T_{m_j}^{(4)} = \Delta(P_i, Q_{m_j}^{(2)}, R_{m_j}^{(3)}, M_{m_j}),$$

$$T_{m_j}^{(5)} = \Delta(P_i, R_{m_j}^{(3)}, Q_{m_j}^{(3)}, M_{m_j}), \quad T_{m_j}^{(6)} = \Delta(P_i, Q_{m_j}^{(3)}, R_{m_j}^{(1)}, M_{m_j}),$$

которые составляют множество $\tilde{T}_{m_j} = \bigcup_{\alpha=1}^6 T_{m_j}^{(\alpha)}$, являющееся пересечением

контрольного объёма V_i с тетраэдром T_{m_j} : $V_i \cap T_{m_j} = \tilde{T}_{m_j}$. Объединение всех

таких тетраэдров составляет контрольный объём: $V_i = \bigcup_{j=1}^{M_i} \tilde{T}_{m_j} = \bigcup_{j=1}^{M_i} \bigcup_{\alpha=1}^6 T_{m_j}^{(\alpha)}$.

Величина контрольного объёма равна $|V_i| = \sum_{j=1}^{M_i} |\tilde{T}_{m_j}| = \sum_{j=1}^{M_i} \sum_{\alpha=1}^6 |T_{m_j}^{(\alpha)}|$.

В дальнейшем нам понадобятся площади $S_{m_j}^{(\alpha)}$ оснований тетраэдров $T_{m_j}^{(\alpha)}$, противолежащих точке P_i , то есть площади треугольников

$$\Delta_{m_j}^{(1)} = \Delta(R_{m_j}^{(1)}, Q_{m_j}^{(1)}, M_{m_j}), \quad \Delta_{m_j}^{(2)} = \Delta(Q_{m_j}^{(1)}, R_{m_j}^{(2)}, M_{m_j}), \quad \Delta_{m_j}^{(3)} = \Delta(R_{m_j}^{(2)}, Q_{m_j}^{(2)}, M_{m_j}),$$

$$\Delta_{m_j}^{(4)} = \Delta(Q_{m_j}^{(2)}, R_{m_j}^{(3)}, M_{m_j}), \quad \Delta_{m_j}^{(5)} = \Delta(R_{m_j}^{(3)}, Q_{m_j}^{(3)}, M_{m_j}), \quad \Delta_{m_j}^{(6)} = \Delta(Q_{m_j}^{(3)}, R_{m_j}^{(1)}, M_{m_j})$$

(нумеруются в том же порядке, что и $T_{m_j}^{(\alpha)}$, см. рис.1.5а), а также площади $\tilde{S}_{m_j}^{(\alpha)}$ боковых граней этих тетраэдров, выходящих на границу тетраэдра T_{m_j} , то есть площади треугольников $\tilde{\Delta}_{m_j}^{(1)} = \Delta(P_i, Q_{m_j}^{(1)}, R_{m_j}^{(1)})$, $\tilde{\Delta}_{m_j}^{(2)} = \Delta(P_i, R_{m_j}^{(2)}, Q_{m_j}^{(1)})$, $\tilde{\Delta}_{m_j}^{(3)} = \Delta(P_i, Q_{m_j}^{(2)}, R_{m_j}^{(2)})$, $\tilde{\Delta}_{m_j}^{(4)} = \Delta(P_i, R_{m_j}^{(3)}, Q_{m_j}^{(2)})$, $\tilde{\Delta}_{m_j}^{(5)} = \Delta(P_i, Q_{m_j}^{(3)}, R_{m_j}^{(3)})$, $\tilde{\Delta}_{m_j}^{(6)} = \Delta(P_i, R_{m_j}^{(1)}, Q_{m_j}^{(3)})$ (см. рис. 1.5б). Также понадобятся нормали $\mathbf{n}_{m_j}^{(\alpha)}$ и $\tilde{\mathbf{n}}_{m_j}^{(\alpha)}$ к выше указанным треугольникам, направленные во внешность \tilde{T}_{m_j} .

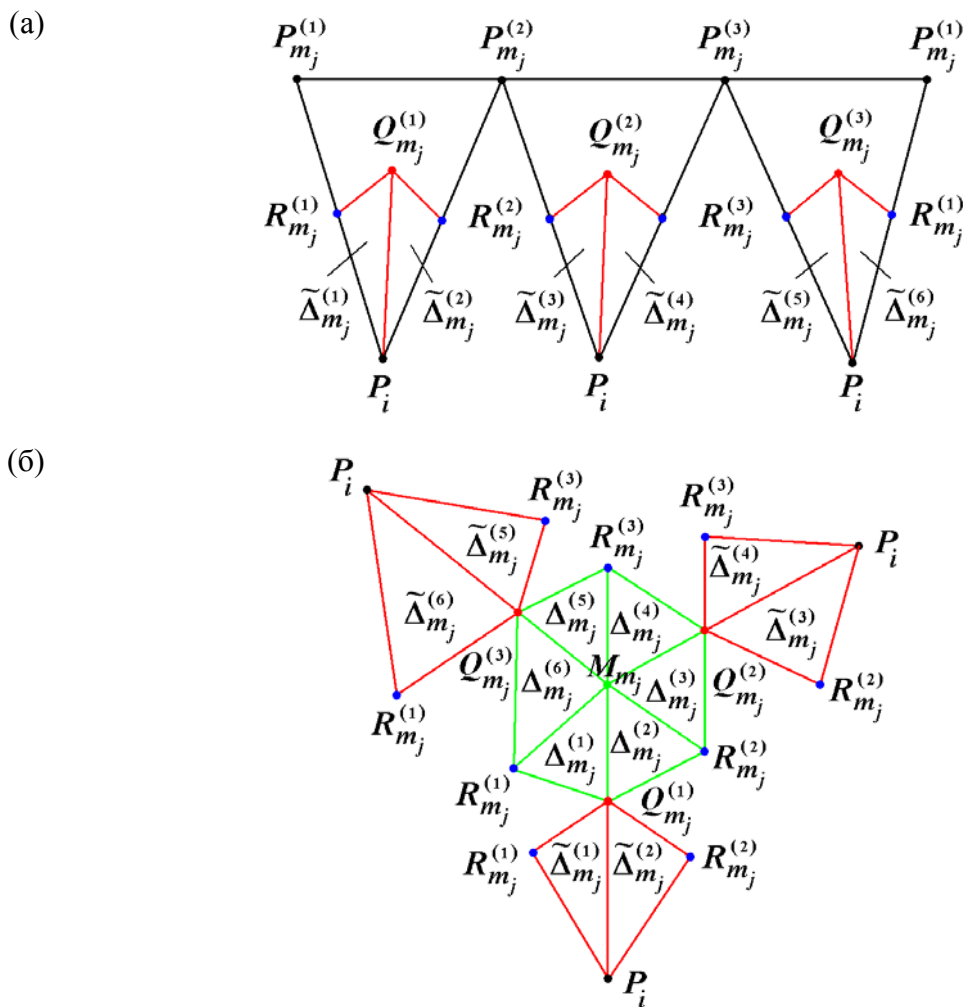


Рисунок 1.5. Развертка боковой поверхности тетраэдра T_{m_j} (а) и развертка поверхности объединения тетраэдров \tilde{T}_{m_j} (б).

С помощью введённых контрольных объёмов и варианта интегро-интерполяционного метода, изложенного выше для случая треугольной сетки, можно построить следующую **конечно-объёмную схему экспоненциальной подгонки на тетраэдральной сетке** аналогичную (1.70):

$$L_h[U_h]U_i = -\bar{f}_i, \quad i = 1, \dots, N, \quad (1.94_1)$$

$$L_h[U_h]U_i \equiv \frac{1}{|V_i|} \sum_{j=1}^{M_i} \left[\left(\mathbf{W}_{m_j}, \sum_{\alpha=1}^6 \chi_{m_j}^{(\alpha)} \mathbf{n}_{m_j}^{(\alpha)} S_{m_j}^{(\alpha)} \right) + \sum_{\alpha=1}^6 \gamma_{m_j}^{(\alpha)} \right] - \bar{q}_i U_i, \quad (1.94_2)$$

$$W_{x,m_j} = \begin{vmatrix} b_{m_j}^{(x)} & a_{m_j}^{(xy)} & a_{m_j}^{(xz)} \\ b_{m_j}^{(y)} & a_{m_j}^{(yy)} & a_{m_j}^{(yz)} \\ b_{m_j}^{(z)} & a_{m_j}^{(zy)} & a_{m_j}^{(zz)} \end{vmatrix} / d_{m_j}, \quad W_{y,m_j} = \begin{vmatrix} a_{m_j}^{(xx)} & b_{m_j}^{(x)} & a_{m_j}^{(xz)} \\ a_{m_j}^{(yx)} & b_{m_j}^{(y)} & a_{m_j}^{(yz)} \\ a_{m_j}^{(zx)} & b_{m_j}^{(z)} & a_{m_j}^{(zz)} \end{vmatrix} / d_{m_j}, \quad (1.94_3)$$

$$W_{z,m_j} = \begin{vmatrix} a_{m_j}^{(xx)} & a_{m_j}^{(xy)} & b_{m_j}^{(x)} \\ a_{m_j}^{(yx)} & a_{m_j}^{(yy)} & b_{m_j}^{(y)} \\ a_{m_j}^{(zx)} & a_{m_j}^{(zy)} & b_{m_j}^{(z)} \end{vmatrix} / d_{m_j}, \quad d_{m_j} = \begin{vmatrix} a_{m_j}^{(xx)} & a_{m_j}^{(xy)} & a_{m_j}^{(xz)} \\ a_{m_j}^{(yx)} & a_{m_j}^{(yy)} & a_{m_j}^{(yz)} \\ a_{m_j}^{(zx)} & a_{m_j}^{(zy)} & a_{m_j}^{(zz)} \end{vmatrix};$$

$$a_{m_j}^{(\beta\gamma)} = \frac{1}{4} \left[(\tilde{\mathbf{K}}^{-1})_{\beta\gamma,i} + \sum_{\alpha=1}^3 (\tilde{\mathbf{K}}^{-1})_{\beta\gamma,m_j}^{(\alpha)} \right], \quad \beta, \gamma = x, y, z; \quad (1.94_4)$$

$$b_{m_j}^{(\beta)} = \frac{1}{3|T_{m_j}|} \left[\left(\bar{G}_{\beta,m_j}^{(1)} U_{m_j}^{(1)} + \bar{G}_{\beta,m_j}^{(2)} U_{m_j}^{(2)} + \bar{G}_{\beta,m_j}^{(3)} U_{m_j}^{(3)} \right) \bar{n}_{\beta,m_j}^{(0)} \bar{S}_{m_j}^{(0)} + \sum_{\alpha=1}^3 \left(\bar{G}_{\beta,i} U_i + \bar{G}_{\beta,m_j}^{(\alpha)} U_{m_j}^{(\alpha)} + \bar{G}_{\beta,m_j}^{(\alpha+1)} U_{m_j}^{(\alpha+1)} \right) \bar{n}_{\beta,m_j}^{(\alpha)} \bar{S}_{m_j}^{(\alpha)} \right], \quad (1.94_5)$$

$$\beta = x, y, z;$$

$$\chi_{m_j}^{(\alpha)} = \frac{1}{1 + |\delta_{m_j}^{(\alpha)}|} + \left(|\delta_{m_j}^{(\alpha)}| + \delta_{m_j}^{(\alpha)} \right), \quad \delta_{m_j}^{(\alpha)} = \frac{|\tilde{T}_{m_j}|}{S_{m_j}^{(\alpha)}} \cdot \frac{\tilde{\delta}_{m_j}^{(\alpha)}}{\tilde{\delta}_{m_j}}, \quad \alpha = 1, \dots, 6, \quad (1.94_6)$$

$$\tilde{\delta}_{m_j}^{(1)} = \tilde{\delta}_{m_j}^{(2)} = \begin{vmatrix} \tilde{F}_{x,i} & n_{x,m_j}^{(3)} + n_{x,m_j}^{(4)} & n_{x,m_j}^{(5)} + n_{x,m_j}^{(6)} \\ \tilde{F}_{y,i} & n_{y,m_j}^{(3)} + n_{y,m_j}^{(4)} & n_{y,m_j}^{(5)} + n_{y,m_j}^{(6)} \\ \tilde{F}_{z,i} & n_{z,m_j}^{(3)} + n_{z,m_j}^{(4)} & n_{z,m_j}^{(5)} + n_{z,m_j}^{(6)} \end{vmatrix},$$

$$\tilde{\delta}_{m_j}^{(3)} = \tilde{\delta}_{m_j}^{(4)} = \begin{vmatrix} n_{x,m_j}^{(1)} + n_{x,m_j}^{(2)} & \tilde{F}_{x,i} & n_{x,m_j}^{(5)} + n_{x,m_j}^{(6)} \\ n_{y,m_j}^{(1)} + n_{y,m_j}^{(2)} & \tilde{F}_{y,i} & n_{y,m_j}^{(5)} + n_{y,m_j}^{(6)} \\ n_{z,m_j}^{(1)} + n_{z,m_j}^{(2)} & \tilde{F}_{z,i} & n_{z,m_j}^{(5)} + n_{z,m_j}^{(6)} \end{vmatrix},$$

$$\tilde{\delta}_{m_j}^{(5)} = \tilde{\delta}_{m_j}^{(6)} = \begin{vmatrix} n_{x,m_j}^{(1)} + n_{x,m_j}^{(2)} & n_{x,m_j}^{(3)} + n_{x,m_j}^{(4)} & \tilde{F}_{x,i} \\ n_{y,m_j}^{(1)} + n_{y,m_j}^{(2)} & n_{y,m_j}^{(3)} + n_{y,m_j}^{(4)} & \tilde{F}_{y,i} \\ n_{z,m_j}^{(1)} + n_{z,m_j}^{(2)} & n_{z,m_j}^{(3)} + n_{z,m_j}^{(4)} & \tilde{F}_{z,i} \end{vmatrix},$$

$$\tilde{\delta}_{m_j} = \begin{vmatrix} n_{x,m_j}^{(1)} + n_{x,m_j}^{(2)} & n_{x,m_j}^{(3)} + n_{x,m_j}^{(4)} & n_{x,m_j}^{(5)} + n_{x,m_j}^{(6)} \\ n_{y,m_j}^{(1)} + n_{y,m_j}^{(2)} & n_{y,m_j}^{(3)} + n_{y,m_j}^{(4)} & n_{y,m_j}^{(5)} + n_{y,m_j}^{(6)} \\ n_{z,m_j}^{(1)} + n_{z,m_j}^{(2)} & n_{z,m_j}^{(3)} + n_{z,m_j}^{(4)} & n_{z,m_j}^{(5)} + n_{z,m_j}^{(6)} \end{vmatrix};$$

$$\gamma_{m_j}^{(\alpha)} = \begin{cases} \frac{1}{3} \left[W_n(P_i) + W_n(Q_{m_j}^{(\alpha^*)}) + W_n(R_{m_j}^{(\alpha^{**})}) \right] \tilde{S}_{m_j}^{(\alpha)}, & \tilde{\Delta}_{m_j}^{(\alpha)} \in \partial D, \\ 0, & \tilde{\Delta}_{m_j}^{(\alpha)} \notin \partial D, \end{cases} \quad (1.94_5)$$

$$\alpha = 1, \dots, 6, \quad \alpha^* = \left\lfloor \frac{\alpha + 1}{2} \right\rfloor, \quad \alpha^{**} = \left\lfloor \frac{\alpha + 2}{2} \right\rfloor;$$

$$\bar{G}_{\beta,i} = 1, \quad \bar{G}_{\beta,m_j}^{(\alpha)} = \exp \left[\frac{1}{2} \left(\tilde{E}_{\beta,i} + \tilde{E}_{\beta,m_j}^{(\alpha)} \right) \Delta \beta_{m_j}^{(\alpha)} \right], \quad (1.94_6)$$

$$\beta = x, y, z, \quad \alpha = 1, 2, 3;$$

$$\bar{q}_i = \tilde{q}_i + \frac{1}{|V_i|} \sum_{j=1}^{M_i} \frac{\theta}{4} \left(\Delta \tilde{q}_{m_j}^{(1)} + \Delta \tilde{q}_{m_j}^{(2)} + \Delta \tilde{q}_{m_j}^{(3)} \right) \left| \tilde{T}_{m_j} \right|,$$

$$\bar{U}_i = U_i + \frac{1}{|V_i|} \sum_{j=1}^{M_i} \left(\alpha_{m_j}^{(1)} \Delta U_{m_j}^{(1)} + \alpha_{m_j}^{(2)} \Delta U_{m_j}^{(2)} + \alpha_{m_j}^{(3)} \Delta U_{m_j}^{(3)} \right), \quad (1.94_7)$$

$$\bar{f}_i = f_i + \frac{1}{|V_i|} \sum_{j=1}^{M_i} \left(\alpha_{m_j}^{(1)} \Delta f_{m_j}^{(1)} + \alpha_{m_j}^{(2)} \Delta f_{m_j}^{(2)} + \alpha_{m_j}^{(3)} \Delta f_{m_j}^{(3)} \right),$$

$$\alpha_{m_j}^{(1)} = \alpha_{m_j}^{(2)} = \alpha_{m_j}^{(3)} = \frac{23\theta}{144} \left| \tilde{T}_{m_j} \right|, \quad \theta = 0 \vee 1.$$

Свойства схемы (1.94) полностью аналогичны свойствам схемы (1.70), в том числе: порядок аппроксимации, условная устойчивость в равномерной норме (принцип максимума в сильном или слабом смысле), устойчивость по правой части в комбинированной норме, сходимость в $W_2^1(\bar{\omega}_p)$. На основе схемы (1.94) по аналогии с предыдущим легко построить схему с весами для нестационарной начально-краевой задачи.

1.3 Численные методы решения одномерных уравнений Фоккера-Планка и Шрёдингера

В данном пункте кратко рассмотрим численные методы решения уравнений Фоккера-Планка и Шрёдингера на ортогональных сетках.

Начнём рассмотрение с уравнения Фоккера-Планка (1.12) с нелокальными граничными условиями (1.13). В его основе лежит обыкновенное дифференциальное уравнение 2-го порядка с интегральными коэффициентами, зависящими от решения. Для численного решения такого рода задач предлагается применить метод конечных разностей на неравномерной сетке по энергетической координате ε . Структура уравнения позволяет построить нелинейную схему экспоненциальной подгонки вида (1.35), рассмотренную выше.

Ввиду нелинейности краевой задачи (1.12), (1.13) необходимо использование итерационного процесса, для чего предлагается использовать метод Ньютона, поскольку он существенно ускоряет процедуру решения. При его реализации ввиду нелокального характера нелинейности матрица перехода от итерации к итерации получается полностью заполненной. В результате решение линейной алгебраической задачи на каждой итерации проводится методом Гаусса с выбором главного элемента по строке. Для того, чтобы сходимость итераций по Ньютону имела место в широком диапазоне изменения параметров задачи, матрица нелинейной алгебраической задачи масштабируется таким образом, чтобы обеспечить диагональное преобладание матрицы перехода. Другие детали предложенного численного алгоритма рассматриваются в гл. 3.

Для решения задачи линейного туннельного транспорта (1.14)-(1.16) предложено несколько подходов.

Первый подход предлагается для случая, когда уравнение (1.14) не является сингулярным (параметр $\gamma^2 = \frac{2mL^2}{\hbar^2} \max(eV_{\max}, \varepsilon_{\max}) \leq 1$) и конкретный вид волновых функций не используется, а вычисляется лишь коэффициент

туннелирования (1.17) в диапазоне энергий $(0, \varepsilon_{\max})$. В этой ситуации применяется *метод передаточных матриц* (МПМ) [262, 263]: вся область туннелирования $[0, L]$ покрывается сегментами одинаковой или различной длины, на каждом из которых потенциальный профиль $V(x)$ аппроксимируется либо константой $\bar{V}_j = 0.5(V_j + V_{j+1})$, либо линейной функцией $V_j + (x - x_j)(V_{j+1} - V_j)$. На каждом сегменте уравнение (1.14) решается аналитически: его решениями являются либо полиномы второго порядка, либо функции Эйри. Решения на соседних сегментах сшиваются с помощью условий сопряжения типа (1.16).

Такая методика позволяет быстро рассчитать коэффициенты прохождения T и отражения R , а также коэффициент туннелирования D , по произведению передаточных матриц Q_j . Данный подход однако имеет недостатки. Если используется кусочно-постоянная аппроксимация барьера, то возникают мелкомасштабные осцилляции решения (что приводит к ряби на кривой коэффициента туннелирования), а некоторые передаточные матрицы могут быть вырожденными (при $\varepsilon = \bar{V}_j$). Если же используется кусочно-линейная аппроксимация барьера, то возникают проблемы с вычислением функций Эйри, расчёты которых имеют высокую арифметическую сложность, а погрешность тем больше, чем больше угол наклона аппроксимирующей прямой.

В диссертации предложено было объединить оба варианта МПМ так, чтобы на сегментах, где угол наклона кривой барьера мал (порядка нескольких градусов) или велик (близок к 90°) использовать кусочно-постоянную аппроксимацию нижним или верхним значением потенциала, а в остальных случаях использовать кусочно-линейное приближение. Данный *объединённый вариант МПМ* был реализован и подтвердил свою эффективность [A44, A48]. Однако ещё более универсальным оказался МПМ

на основе симметричной схемы Адамса. Для этого уравнение (1.14) было приведено к системе уравнений 1-го порядка

$$\frac{d\psi}{dx} = p, \quad \frac{dp}{dx} = -a(x)\psi, \quad a(x) \equiv \gamma^2 [E - V(x)]. \quad (1.95)$$

Применяя к (1.95) схему Адамса на равномерной сетке, были получены рекуррентные соотношения для определения передаточных матриц

$$\begin{pmatrix} 1 & -0.5h \\ 0.5ha_{j+1/2} & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_{j+1} \\ p_{j+1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0.5h \\ -0.5ha_{j+1/2} & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_j \\ p_j \end{pmatrix} \Leftrightarrow \begin{pmatrix} \psi_{j+1} \\ p_{j+1} \end{pmatrix} = Q_{j+1} \begin{pmatrix} \psi_j \\ p_j \end{pmatrix},$$

и связь между значениями неизвестных функций в граничных точках:

$$\begin{pmatrix} \psi_N \\ p_N \end{pmatrix} = \prod_{j=1}^N Q_j \cdot \begin{pmatrix} \psi_0 \\ p_0 \end{pmatrix} = Q \begin{pmatrix} \psi_0 \\ p_0 \end{pmatrix} \Leftrightarrow \begin{pmatrix} T \\ ik_L T \end{pmatrix} = Q \begin{pmatrix} 1 + R \\ ik_R (1 - R) \end{pmatrix}.$$

МПМ на основе схемы Адамса сравнивался с объединённым МПМ. Тестирование показало, что на разбиениях отрезка интегрирования одинакового размера, МПМ на основе схемы Адамса выполняется в несколько раз быстрее, чем объединённый МПМ [А48].

Второй подход был предложен для случая, когда безразмерное уравнение (1.14) является сингулярным: $\gamma^2 \gg 1$. В этой ситуации метод передаточных матриц даёт ошибочные результаты ввиду быстрого накопления ошибок округления. Поэтому предложено было искать численное решение (например, методом комплексной прогонки) сеточного аналога следующей безразмерной краевой задачи:

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} - \gamma^2 a(x, \varepsilon) \psi &= 0, \quad 0 < x < 1, \quad \varepsilon \in (0, \varepsilon_M], \\ \frac{\partial \psi}{\partial x}(0) &= i\gamma_L (2 - \psi(0)), \quad \frac{\partial \psi}{\partial x}(1) = i\gamma_R \psi(1); \\ R &= \psi(0) - 1, \quad T = \psi(1) e^{-i\gamma_R}. \end{aligned} \quad (1.96)$$

(Здесь $\gamma_L = k_L L$, $\gamma_R = k_R L$). Задача (1.96) эквивалентная задаче (1.14)-(1.16).

Предложенный подход даёт правильные результаты, если выполняется естественное условие на шаг сетки: $h\gamma \ll 1$. При этом безусловно приходится вычислять волновую функцию ψ во всех точках сетки, а для этого вводить

дополнительные массивы для хранения её значений и значений комплексных коэффициентов прогонки. Тем не менее, алгоритм оказывается достаточно быстрым и экономичным, даже с учётом того, что задачу вида (1.96) приходится решать для большого числа значений энергии ε .

Для решения одномерного нелинейного уравнения Шрёдингера типа (1.18) также формулируется краевая задача вида (1.96):

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 \psi_{\varepsilon s}^{(\alpha)}}{\partial x^2} + \frac{2m}{\hbar^2} \left[\varepsilon - V(x) + \mathbf{U}_s^{(\alpha)}(\Psi) \right] \psi_{\varepsilon s}^{(\alpha)} &= 0, \quad x \in (0, a), \\ \frac{\partial \psi_{\varepsilon s}^{(\alpha)}}{\partial x}(0) &= i\gamma_{\varepsilon L}^{(\alpha)} \left(2 - \psi_{\varepsilon s}^{(\alpha)}(0) \right), \quad \frac{\partial \psi_{\varepsilon s}^{(\alpha)}}{\partial x}(1) = i\gamma_{\varepsilon R}^{(\alpha)} \psi_{\varepsilon s}^{(\alpha)}(1); \\ \varepsilon &\in (0, \varepsilon_M], \quad s = \pm \frac{1}{2}, \quad \alpha = "+", "-". \end{aligned} \quad (1.97)$$

Однако суммарный оператор, действующий на каждую волновую функцию, является сильно нелокально нелинейным. Матрица сеточного гамильтониана оказывается полностью заполненной. Поэтому базовым алгоритмом решения является итерационный процесс по нелинейности (причём используются простые итерации), а на каждой итерации применяется комплексное LU-разложение. Детали метода изложены в гл. 5. Отметим только, что применение здесь итераций по Ньютону неприемлемо ввиду сильной нелокальной нелинейности большого количества связанных сеточных задач.

1.4 Разрешение проблемы некорректности одномерных краевых задач для уравнений Фоккера-Планка и Шрёдингера

В данном пункте рассматривается проблема некорректности одномерных краевых задач для стационарных уравнений Фоккера-Планка и Шрёдингера. Дифференциальная задача в этих случаях часто не является корректной ввиду нелинейности интегрального закона Ома. Применительно к задачам туннелирования это означает, что если на внешних электродах структуры задано напряжение больше критического, то развивается неустойчивость, при которой прохождение электронных волн через структуру осуществляется несколькими способами, то есть имеет место

неоднозначность решения. Один из возможных путей разрешения этой проблемы состоит в использовании геометрического метода.

Как известно, в пространственно одномерных системах величина тока не зависит от пространственной координаты. Следствием этого является непрерывность вольт-амперной характеристики (ВАХ) системы, в том числе для бистабильной или мультистабильной одномерной системы. В последнем случае на ВАХ имеются участки S и/или N типа (см. рис. 1.6а). Каждой точке ВАХ соответствует стабильное или нестабильное состояние системы. Для нахождения всех решений для заданного значения напряжения (или тока) необходимо провести дополнительную линию нагрузки и локализовать точки пересечения. Другими словами, для поиска всех ветвей решения математической задачи при заданном значении параметра (напряжения или тока), необходимо задать дополнительное условие, выделяющее однозначно каждую из точек пересечения ВАХ с линией нагрузки. Для известной формы ВАХ проведение линии нагрузки – простая задача. Если же исходная задача нелинейна, и ее ВАХ неизвестна (то есть определяется только вместе с решением), то проведение линии нагрузки становится большой проблемой.

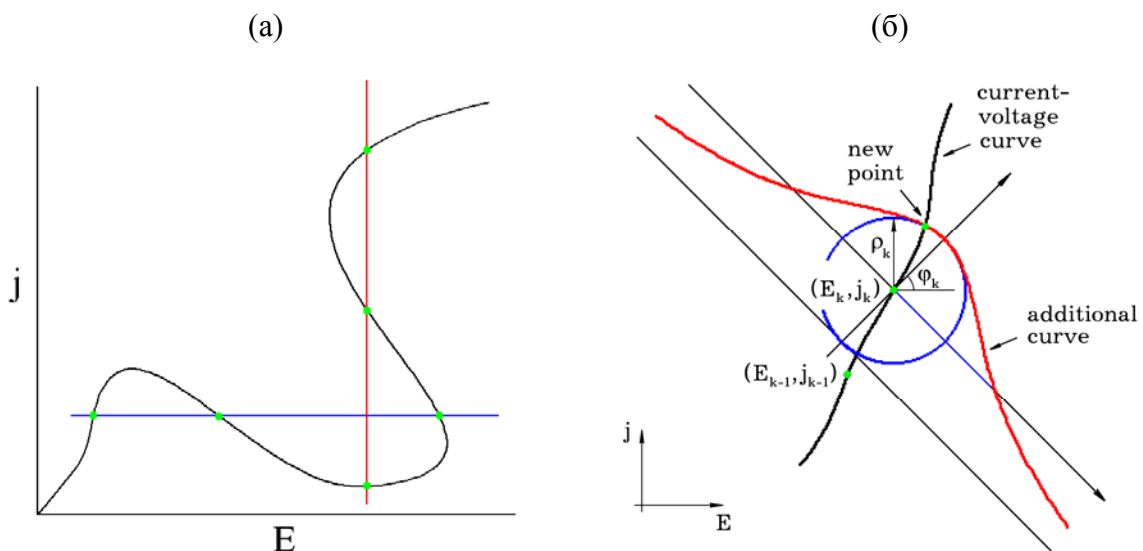


Рисунок 1.6. Пример нелинейной вольт-амперной характеристики (черная кривая) и проведения к ней линий нагрузки (синяя и красная прямые) (а) и иллюстрация применения геометрического метода (б). Зелеными точками помечены различные ветви решения.

Для преодоления указанной проблемы предлагается при решении задачи в области неустойчивости добавлять к основной системе уравнений дополнительное, описывающее линию нагрузки и выделяющее уникальную ветвь решения. Для этого необходимо, чтобы линия нагрузки пересекала ВАХ только в одной точке. Обеспечить выполнение этого условия на всей плоскости невозможно. Однако если рассмотреть малую окрестность вблизи некоторой точки ВАХ, такое проведение линии нагрузки возможно. В варианте предложенного метода используется следующая процедура задания линии нагрузки. ВАХ по определению задается интегральным соотношением

$$j = \sigma E, \quad (1.98)$$

где j и σ в общем случае могут быть функционалами. Вычисления ВАХ начинаются с точки равновесия ($E_0=0, j_0=0$), в которой решение исходной задачи известно или легко вычисляется. Обычно, равновесное (основное) состояние электронной системы единственно. Начальная часть ВАХ вблизи точки равновесия близка к линейной функции (всегда можно выбрать такую малую окрестность, где это справедливо). Поэтому, нахождение нескольких следующих точек на кривой ВАХ с малым шагом по обеим координатам (E, j) не вызывает сложностей.

Будем считать, что последней вычисленной точкой была (E_k, j_k). При этом решение задачи оставалось единственным. В плоскости (E, j) перейдем к локальной полярной системе координат (ρ, φ) с центром в точке (E_k, j_k):

$$E = E_k + \rho \cos(\varphi - \varphi_k), \quad j = j_k + \rho \sin(\varphi - \varphi_k). \quad (1.99)$$

Здесь ρ – расстояние, отсчитываемое от точки (E_k, j_k), φ – угол, отсчитываемый против часовой стрелки от оси ($0, E$). Для вычисления новой точки ВАХ (E_{k+1}, j_{k+1}) вокруг нового начала координат проведём окружность малого радиуса ρ_k и через точку пересечения этой окружности с осью $\varphi=\varphi_k$ (где φ_k – угол наклона касательной к ВАХ в точке (E_k, j_k) или близкий к нему) провести линию нагрузки.

Линия нагрузки может быть произвольной функцией, например, прямой перпендикулярной оси $\varphi = \varphi_k$. Удобнее, чтобы она была близка к проведенной окружности, но пересекала ВАХ только в одной точке. В предлагаемом алгоритме выбрана Верзьера Аньези (красная линия на рис. 1.6б):

$$\begin{aligned} (E - E_k) \cos \varphi_k + (j - j_k) \sin \varphi_k &= \\ = \rho_k \frac{4\rho_k^2 - [(E - E_k) \sin \varphi_k - (j - j_k) \cos \varphi_k]^2}{4\rho_k^2 + [(E - E_k) \sin \varphi_k - (j - j_k) \cos \varphi_k]^2}. \end{aligned} \quad (1.100)$$

При достаточно малом радиусе ρ_k кривая (1.100) пересекает ВАХ только в одной точке вблизи проведенной окружности. Уравнения (1.98)-(1.100) замыкают исходную задачу так, что ее решение и новая точка ВАХ (E_{k+1}, j_{k+1}) находятся единственным образом. Применяя этот подход, можно рассчитать ВАХ любой конфигурации.

Другой подход, который также использовался в диссертации, основан на выделении «нижней» и «верхней» устойчивых ветвей решения. В рамках этого подхода ставится задача минимизации (максимизации) функционала тока (1.98). Решение задачи минимизации производится одним из известных методов (см., например, [264, 265]).

В заключение главы отметим, что в ней были рассмотрены основные математические модели и разработаны или выбраны основные численные методы и подходы, применяемые для анализа прикладных задач микро- и наноэлектроники, рассматриваемых в гл. 3-7. Результаты главы 1 опубликованы в работах [А2, А4, А7, А27, А29, А31, А39, А42, А44, А45, А47-А49].

ГЛАВА 2

Параллельные алгоритмы и технологии

В данной главе предложены параллельные алгоритмы и технологии программирования для реализации численных методов, разработанных в гл. 1 и используемых при решении выбранных прикладных задач. При распараллеливании предполагается гибридная архитектура МВС, предполагающая на внешнем уровне распределённую модель вычислений, а на внутреннем – параллельные вычисления на общей памяти. Завершается глава описанием программных моделей и платформ, которые использовались для создания программ и комплексов компьютерного моделирования конкретных задач в выбранных предметных областях.

2.1 Параллельные алгоритмы на основе преобразования Фурье

В данном пункте рассмотрим алгоритмы на основе преобразования Фурье (ПФ или FT) [266-294]. Такие алгоритмы используются при решении многих практических задач, в том числе, в рамках численного анализа методом сеток уравнений в частных производных [283, 284, 289-291, 293, 294]. В этом контексте они применяются для численного решения краевых задач для эллиптических и параболических уравнений с постоянными коэффициентами на ортогональных равномерных сетках. Как известно, в этом случае для применения алгоритмов на основе ПФ необходимо, чтобы собственные значения и собственные функции дифференциальной и/или разностной задачи были известны или легко вычислялись. Обычно рассматриваются краевые задачи, имеющие в качестве собственных функций синусы, косинусы, комплексные экспоненты и некоторые другие тригонометрические полиномы.

В данной работе рассматривается дискретное преобразование Фурье, которое применяется для решения уравнения Пуассона на равномерных ортогональных сетках в декартовых координатах, когда один или несколько

коэффициентов при старших производных тождественно равны 1. В последовательном варианте численного алгоритма применяется так называемое быстрое преобразование Фурье (БПФ или FFT), детали которого изложены в [283-288]. Параллельная реализация БПФ в различных вариантах обсуждается в [284, 289-294].

Безотносительно области применения последовательное и параллельное БПФ наиболее эффективно реализуются в специализированных процессорах с внутренней многопоточной архитектурой. Однако при этом длина обрабатываемого массива не превосходит некоторой фиксированной степени 2. Устаревшие модели Фурье процессоров оперировали с массивами длиной от 16 до 256 чисел с плавающей запятой одинарной точности (см., например, [295]). Современные Фурье и графические процессоры могут обрабатывать как линейные массивы вещественных и комплексных данных с одинарной и двойной точностью, так и многомерные массивы. Их максимальная длина зависит от объёма и структуры кэша и основной оперативной памяти процессора.

При использовании параллельных кластерных систем с распределённой или гибридной архитектурой, не имеющей встроенной реализации БПФ, приходится обращаться к его программным реализациям. В этой ситуации возникают определённые проблемы. Если речь идёт о модели общей памяти и многопоточных вычислениях внутри узла кластера, то здесь известны эффективные реализации БПФ на базе варианта Кули-Тьюки [285, 287-291]. Однако для задач большой размерности приходится переходить либо к гибридной архитектуре (то есть использовать всё большее число узлов кластера), либо к архитектуре графических или специальных вычислителей, находящихся внутри узла. В первом случае память становится распределённой и возникают коллективные обмены по сети. Во втором случае память становится иерархической, а количество потоков слишком большим. В результате эффективность распараллеливания БПФ становится очень низкой.

Данная работа не претендует на первенство в эффективности распараллеливания БПФ. Целью автора было лишь получить собственную более менее эффективную параллельную реализацию БПФ в рамках гибридной модели вычислений, соответствующей архитектуре современных кластеров, состоящих из узлов с несколькими многоядерными процессорами на общей памяти и связанными с соседями высокоскоростной сетью. Идея распараллеливания БПФ состояла в следующем. Во-первых, для конструирования впоследствии сложных алгоритмов на базе БПФ следует при распараллеливании использовать самый простой его вариант, которым является БПФ на основе прореживания по времени по модулю 2. Во-вторых, следует отталкиваться от исходного (не быстрого) преобразования Фурье, чтобы сохранить ресурс параллелизма. В-третьих, на каждом конкретном процессоре или ядре в конечном итоге необходимо выполнять только последовательное БПФ пониженной размерности и процедуры слияния. В-четвертых, желательно сохранить асимптотику БПФ. Ниже излагается алгоритм, который удовлетворяет этим требованиям и условно назван оптимизированным преобразованием Фурье (ОПФ).

Для иллюстрации разработанного подхода рассмотрим следующую модельную краевую задачу:

$$\sum_{\alpha=1}^m \frac{\partial}{\partial x_{\alpha}} \left(k_{\alpha}(\mathbf{r}) \frac{\partial u}{\partial x_{\alpha}} \right) = -f(\mathbf{r}), \quad \mathbf{r} \in D \subset E^m, \quad (2.1)$$

$$u(\mathbf{r}) = g(\mathbf{r}), \quad \mathbf{r} \in \partial D,$$

где D – область евклидова пространства E^m размерности $m=1,2,3$, $\mathbf{r} = (x_1, \dots, x_m)$. Для определённости рассмотрим простейший её вариант:

$$D = \prod_{\alpha=1}^m (0,1); \quad k_{\alpha}(\mathbf{r}) \equiv 1, \quad \mathbf{r} \in D; \quad g(\mathbf{r}) \equiv 0, \quad \mathbf{r} \in \partial D. \quad (2.2)$$

Численное решение задачи (2.1), (2.2) будем проводить на равномерной ортогональной декартовой сетке

$$\bar{\Omega} = \prod_{\alpha=1}^m \bar{\omega}_{x_{\alpha}}, \quad \bar{\omega}_{x_{\alpha}} = \left\{ x_{\alpha} = x_{\alpha, i_{\alpha}} = i_{\alpha} h_{\alpha}, \quad i_{\alpha} = 0, \dots, N_{\alpha}, \quad h_{\alpha} = \frac{1}{N_{\alpha}} \right\}, \quad \alpha = 1, \dots, m.$$

по известной разностной схеме «крест»:

$$\Lambda_h y_h \equiv \sum_{\alpha=1}^m \left(y_{\bar{x}_\alpha} \right)_{x_\alpha} = -f_h, \quad \mathbf{r}_h \in \Omega; \quad y_h = 0, \quad \mathbf{r}_h \in \partial\Omega. \quad (2.3)$$

Здесь Ω и $\partial\Omega$ – совокупности внутренних и граничных узлов сетки $\bar{\Omega}$.

Реализация схемы (2.3) методом дискретного преобразования Фурье приводит к цепочке формул (см. [283]):

$$\begin{aligned} \varphi_{k_1 \dots k_m} &= \prod_{\alpha=1}^m (2h_\alpha) \times \sum_{i_1=1, \dots, i_m=1}^{N_1-1, \dots, N_m-1} f(x_{i_1}, \dots, x_{i_m}) \times \prod_{\alpha=1}^m \sin(\pi k_\alpha x_{i_\alpha}), \\ S_{k_1 \dots k_m} &= \frac{\varphi_{k_1 \dots k_m}}{\lambda_{k_1 \dots k_m}}, \quad \lambda_{k_1 \dots k_m} = \sum_{\alpha=1}^m \frac{4}{h_\alpha^2} \left(\sin\left(\frac{\pi k_\alpha h_\alpha}{2}\right) \right)^2, \quad k_\alpha = 1, \dots, N_\alpha - 1, \\ y_{i_1 \dots i_m} &= \sum_{k_1=1, \dots, k_m=1}^{N_1-1, \dots, N_m-1} S_{k_1 \dots k_m} \times \prod_{\alpha=1}^m \sin(\pi k_\alpha x_{i_\alpha}), \quad i_\alpha = 1, \dots, N_\alpha - 1, \quad \alpha = 1, \dots, m. \end{aligned} \quad (2.4)$$

Данный алгоритм имеет арифметическую сложность $O(N^2)$, где

$N = \prod_{\alpha=1}^m (N_\alpha - 1)$ – размерность алгебраической задачи. Быстрое

преобразование Фурье при реализации формул (2.4) имеет арифметическую сложность $O(N \log_2 N)$. Следуя [283, 293, 294], стоит комбинировать БПФ с алгоритмом полной редукции или прогонки по одной из переменных (назовём условно этот алгоритм – КБПФ). Тогда арифметическая сложность реализации формул (2.4) понижается до $O(N \log_2 N^{m-1/m})$ (если все размерности N_α совпадают).

При параллельной реализации алгоритма КБПФ можно распараллеливать как этап редукции (прогонки), так и алгоритм целиком. В любом случае при размерности $m \geq 2$ может понадобиться параллельный алгоритм БПФ по одной или нескольким координатам. Поэтому рассмотрим один из возможных вариантов такого распараллеливания на примере одномерного варианта формул (2.4):

$$\begin{aligned}\varphi_k &= \sum_{j=1}^{N-1} f_j(x_j) \sin\left(\frac{\pi kj}{N}\right), \quad S_k = \frac{2h\varphi_k}{\lambda_k}, \quad k=1, \dots, N-1, \\ y_l &= \sum_{k=1}^{N-1} S_k \sin\left(\frac{\pi kl}{N}\right), \quad l=1, \dots, N-1.\end{aligned}\tag{2.5}$$

Здесь введены обозначения $j = i_j$, $k = k_1$, $h = h_1$, $x_j = hj = \frac{j}{N}$, $f_j = f(x_j)$.

Формулы (2.5) обычно приводят к комплексному Фурье-преобразованию длины $2N$, N или $N/2$. Наиболее простым при распараллеливании будет первый вариант, поскольку он содержит лишь одно обращение к комплексному БПФ на полном периоде:

$$\begin{aligned}\varphi_k &= \sum_{j=1}^{N-1} f(x_j) \sin\left(\frac{\pi kj}{N}\right) = \\ &= \frac{1}{2} \operatorname{Im} \left(\sum_{j=1}^{N-1} f(x_j) \exp\left(i \frac{2\pi kj}{2N}\right) - \sum_{j=1}^{N-1} f(x_{N-j}) \exp\left(i \frac{2\pi kj}{2N}\right) \right), \quad k=1, \dots, N-1, \\ y_l &= \sum_{k=1}^{N-1} S_k \sin\left(\frac{\pi ki}{N}\right) = \\ &= \frac{1}{2} \operatorname{Im} \left(\sum_{k=1}^{N-1} S_k \exp\left(i \frac{2\pi kl}{2N}\right) - \sum_{k=1}^{N-1} S_{N-k} \exp\left(i \frac{2\pi kl}{2N}\right) \right), \quad l=1, \dots, N-1.\end{aligned}$$

Если ввести обозначения:

$$\begin{aligned}f_j \oplus (-f_{N-j}) &= (f_0, f_1, \dots, f_{N-1}, -f_N, -f_{N-1}, \dots, -f_1)^T, \\ S_k \oplus (-S_{N-k}) &= (S_0, S_1, \dots, S_{N-1}, -S_N, -S_{N-1}, \dots, -S_1)^T, \\ F_{M,p}^{(\pm)} &= \sum_{j=0}^{M-1} f_j \exp\left(\pm i \frac{2\pi pj}{M}\right), \quad k=0, \dots, M-1,\end{aligned}\tag{2.6}$$

и учесть, что $f_0 = f_N = 0$, $S_0 = S_N = 0$, то формулы (2.5) можно записать в компактном виде

$$\begin{aligned}\varphi_k &= \frac{1}{2} \operatorname{Im} \left(F_{2N,k}^{(+)} [f_j \oplus (-f_{N-j})] \right), \quad S_k = \frac{2h\varphi_k}{\lambda_k}, \quad k=1, \dots, N-1, \\ y_l &= \frac{1}{2} \operatorname{Im} \left(F_{2N,l}^{(+)} [S_k \oplus (-S_{N-k})] \right), \quad l=1, \dots, N-1.\end{aligned}\tag{2.7}$$

С учётом соотношений (2.7) легко видеть, что распараллеливание алгоритма (2.5) эквивалентно распараллеливанию дискретного преобразования Фурье по комплексным экспонентам:

$$F_{N,k}^{(\pm)}[f_j] = \sum_{j=0}^{N-1} f_j \exp\left(\pm i \frac{2\pi k j}{N}\right) = E_k^{(\pm)}, \quad k = 0, \dots, N-1, \quad (2.8)$$

$$f_l = \frac{1}{N} \sum_{j=0}^{N-1} E_k^{(\pm)} \exp\left(\pm i \frac{2\pi k l}{N}\right) = \frac{1}{N} F_{N,l}^{(\pm)}[E_k^{(\pm)}], \quad l = 0, \dots, N-1.$$

Преобразуем прямое преобразование из (2.8) к виду, используемому при реализации БПФ:

$$F_{N,k}^{(\pm)}[f_j] = \sum_{j=0}^{N-1} f_j \exp\left(\pm i \frac{2\pi k j}{N}\right) =$$

$$= \sum_{j=0}^{N/2-1} f_{2j} \exp\left(\pm i \frac{2\pi k (2j)}{N}\right) + \sum_{j=1}^{N/2-1} f_{2j-1} \exp\left(\pm i \frac{2\pi k (2j-1)}{N}\right) =$$

$$= \sum_{j=0}^{N/2-1} f_{2j} \exp\left(\pm i \frac{2\pi k j}{N/2}\right) + \exp\left(\mp i \frac{2\pi k}{N}\right) \sum_{j=1}^{N/2-1} f_{2j-1} \exp\left(\pm i \frac{2\pi k j}{N/2}\right), \quad k = 0, \dots, N-1.$$

Если положить $f_{2j-1} = 0$ при $j = 0$, то во второй сумме нижний предел можно заменить на 0. Тогда, разбив коэффициенты на две части по k , получим:

$$F_{N,k}^{(\pm)}[f_j] = \sum_{j=0}^{N/2-1} f_{2j} \exp\left(\pm i \frac{2\pi k j}{N/2}\right) + \exp\left(\mp i \frac{2\pi k}{N}\right) \sum_{j=0}^{N/2-1} f_{2j-1} \exp\left(\pm i \frac{2\pi k j}{N/2}\right) =$$

$$= F_{N/2,k}^{(\pm)}[f_{2j}] + \exp\left(\mp i \frac{2\pi k}{N}\right) F_{N/2,k}^{(\pm)}[f_{2j-1}], \quad k = 0, \dots, N/2-1;$$

$$F_{N,N/2+k}^{(\pm)}[f_j] = \sum_{j=0}^{N/2-1} f_{2j} \exp\left(\pm i \frac{2\pi(N/2+k)j}{N/2}\right) +$$

$$+ \exp\left(\mp i \frac{2\pi(N/2+k)}{N}\right) \sum_{j=0}^{N/2-1} f_{2j-1} \exp\left(\pm i \frac{2\pi(N/2+k)j}{N/2}\right) =$$

$$= \sum_{j=0}^{N/2-1} f_{2j} \exp\left(\pm i \frac{2\pi k j}{N/2}\right) - \exp\left(\mp i \frac{2\pi k}{N}\right) \sum_{j=0}^{N/2-1} f_{2j-1} \exp\left(\pm i \frac{2\pi k j}{N/2}\right) =$$

$$= F_{N/2,k}^{(\pm)}[f_{2j}] - \exp\left(\mp i \frac{2\pi k}{N}\right) F_{N/2,k}^{(\pm)}[f_{2j-1}], \quad k = 0, \dots, N/2-1.$$

В итоге:

$$\begin{aligned}
F_{N,k}^{(\pm)}[f_j] &= F_{N/2,k}^{(\pm)}[f_{2j}] + W_N^k \cdot F_{N/2,k}^{(\pm)}[f_{2j-1}], \\
F_{N,N/2+k}^{(\pm)}[f_j] &= F_{N/2,k}^{(\pm)}[f_{2j}] - W_N^k \cdot F_{N/2,k}^{(\pm)}[f_{2j-1}], \\
W_N^k &= \exp\left(\mp i \frac{2\pi k}{N}\right), \quad k = 0, \dots, N/2 - 1.
\end{aligned} \tag{2.9_1}$$

Преобразование (2.9) носит название «бабочка». БПФ на основе преобразования (2.9) носит название «БПФ на основе прореживания по времени по основанию 2». Дальнейшее применение формул (2.9) для $N' = N/2$ приводит к соотношениям:

$$\begin{aligned}
F_{N/2,k}^{(\pm)}[f_{2j}] &= F_{N/4,k}^{(\pm)}[f_{4j}] + W_{N/2}^k \cdot F_{N/4,k}^{(\pm)}[f_{4j-1}], \\
F_{N/2,N/4+k}^{(\pm)}[f_{2j}] &= F_{N/4,k}^{(\pm)}[f_{4j}] - W_{N/2}^k \cdot F_{N/4,k}^{(\pm)}[f_{4j-1}], \\
F_{N/2,k}^{(\pm)}[f_{2j-1}] &= F_{N/4,k}^{(\pm)}[f_{4j-2}] + W_{N/2}^k \cdot F_{N/4,k}^{(\pm)}[f_{4j-3}], \\
F_{N/2,N/4+k}^{(\pm)}[f_{2j-1}] &= F_{N/4,k}^{(\pm)}[f_{4j-2}] - W_{N/2}^k \cdot F_{N/4,k}^{(\pm)}[f_{4j-3}], \\
k &= 0, \dots, N/4 - 1.
\end{aligned} \tag{2.9_2}$$

Применение формул для $N' = N/2^{m-1}$ приводит к соотношениям:

$$\begin{aligned}
F_{N/2^{m-1},k}^{(\pm)}[f_{2^{m-1}j}] &= F_{N/2^m,k}^{(\pm)}[f_{2^m j}] + W_{N/2^{m-1}}^k \cdot F_{N/2^m,k}^{(\pm)}[f_{2^m j-1}], \\
F_{N/2^{m-1},N/2^m+k}^{(\pm)}[f_{2^{m-1}j}] &= F_{N/2^m,k}^{(\pm)}[f_{2^m j}] - W_{N/2^{m-1}}^k \cdot F_{N/2^m,k}^{(\pm)}[f_{2^m j-1}], \\
&\dots \\
F_{N/2^{m-1},k}^{(\pm)}[f_{2^{m-1}j-(2^{m-1}-1)}] &= F_{N/2^m,k}^{(\pm)}[f_{2^m j-(2^m-2)}] + W_{N/2^{m-1}}^k \cdot F_{N/2^m,k}^{(\pm)}[f_{2^m j-(2^m-1)}], \\
F_{N/2^{m-1},N/2^m+k}^{(\pm)}[f_{2^{m-1}j-(2^{m-1}-1)}] &= F_{N/2^m,k}^{(\pm)}[f_{2^m j-(2^m-2)}] - W_{N/2^{m-1}}^k \cdot F_{N/2^m,k}^{(\pm)}[f_{2^m j-(2^m-1)}], \\
k &= 0, \dots, N/2^m - 1.
\end{aligned} \tag{2.9_m}$$

Рекурсивные формулы (2.9) являются основой БПФ. В последовательном варианте они применяются до тех пор, пока размерность очередного преобразования не станет равной 1. При распараллеливании такого алгоритма в рамках модели общей памяти производится одновременное вычисление «бабочек» на каждом шаге рекурсии. Такое распараллеливание имеет смысл, пока все вектора укладываются в кэш многоконвейерного процессора или видеопроцессора. Иначе тесная связь вычислений и выборки из оперативной памяти делают алгоритм

неэффективным. Выходом из положения является блочный алгоритм, учитывающий размеры кэша каждого вычислителя. Более подробно эти алгоритмы рассматриваются в фундаментальном обзоре [289].

В рамках модели распределённых параллельных вычислений наиболее эффективным будет алгоритм, в котором рекурсия БПФ выполняется до уровня $m = \log_2 p$, где p – количество вычислителей, связанных в МВС какой-либо сетью. На последнем уровне m все преобразования Фурье вычисляются по последовательному алгоритму БПФ, причём их количество коррелирует с числом вычислителей и позволяет выполнить их в полностью параллельном режиме. Это обстоятельство является посылкой для излагаемого ниже параллельного алгоритма.

Итак, пусть мы имеем МВС с распределённой симметричной архитектурой, состоящей из $p = 2^m$ вычислителей, имеющих возможность обмениваться данными между собой с помощью достаточно скоростной сети. Для выполнения БПФ над массивом комплексных чисел размерности $N = 2^n$ ($n \gg m$), линейно распределённым по вычислителям, необходимо сначала вычислить последовательные БПФ размерности $N / 2^m$ (уровень m):

$$\varphi_k = F_{N/2^m, k}^{(\pm)} \left[f_{2^m j-l} \right], \quad k = 0, \dots, N / 2^m - 1, \quad l = 0, \dots, p - 1. \quad (2.10)$$

Для этого процессоры должны сделать выборку $\left\{ f_{2^m j-l} \right\}_{j=0}^{N/2^m}$ нужных им

элементов из общего распределённого массива $\left\{ f_j \right\}_{j=0}^{N-1}$, и вычислить каждый

$$\text{свой вектор } \Phi_m^{(l)} = \left(\varphi_0^{(l)}, \dots, \varphi_{N/2^m-1}^{(l)} \right) = \left\{ F_{N/2^m, k}^{(\pm)} \left[f_{2^m j-l} \right] \right\}_{k=0}^{N/2^m-1}.$$

Далее каждые два смежных процессора $2l$ и $2l+1$ должны обмениваться векторами $\Phi_m^{(2l)}$ и $\Phi_m^{(2l+1)}$ и вычислить новые векторы по формулам (2.9_m):

$$\Phi_{m-1}^{(0)} = \Phi_m^{(0)} + \mathbf{W}_{N/2^{m-1}} \cdot \Phi_m^{(1)}, \quad \Phi_{m-1}^{(1)} = \Phi_m^{(0)} - \mathbf{W}_{N/2^{m-1}} \cdot \Phi_m^{(1)},$$

(2.11)

$$\dots$$

$$\Phi_{m-1}^{(p-2)} = \Phi_m^{(p-2)} + \mathbf{W}_{N/2^{m-1}} \cdot \Phi_m^{(p-1)}, \quad \Phi_{m-1}^{(p-1)} = \Phi_m^{(p-2)} - \mathbf{W}_{N/2^{m-1}} \cdot \Phi_m^{(p-1)}.$$

Здесь $\mathbf{W}_{N/2^{m-1}} = \{W_{N/2^{m-1}}^k \cdot \delta_{kj}\}_{k,j=0}^{N/2^{m-1}}$ – диагональная матрица, δ_{kj} – символ Кронекера.

На следующем этапе изменится порядок смежности процессоров при обменах. Обмены будут производиться по схеме $0 \leftrightarrow 2, 1 \leftrightarrow 3$, и т.д.. Это позволит сохранить упорядочение вектора коэффициентов преобразования. После обмена необходимо провести вычисления по формулам (2.9_{m-1}):

$$\begin{aligned}
 \Phi_{m-2}^{(0)} &= \Phi_{m-1}^{(0)} + \mathbf{W}_{N/2^{m-2}} \cdot \Phi_{m-1}^{(2)}, & \Phi_{m-2}^{(1)} &= \Phi_{m-1}^{(1)} + \mathbf{W}_{N/2^{m-2}} \cdot \Phi_{m-1}^{(3)}, \\
 \Phi_{m-2}^{(2)} &= \Phi_{m-1}^{(0)} - \mathbf{W}_{N/2^{m-2}} \cdot \Phi_{m-1}^{(2)}, & \Phi_{m-2}^{(3)} &= \Phi_{m-1}^{(1)} - \mathbf{W}_{N/2^{m-2}} \cdot \Phi_{m-1}^{(3)}, \\
 &\dots & & \\
 \Phi_{m-1}^{(p-4)} &= \Phi_m^{(p-4)} + \mathbf{W}_{N/2^{m-2}} \cdot \Phi_m^{(p-2)}, & \Phi_{m-1}^{(p-3)} &= \Phi_m^{(p-3)} + \mathbf{W}_{N/2^{m-2}} \cdot \Phi_m^{(p-1)}, \\
 \Phi_{m-1}^{(p-2)} &= \Phi_m^{(p-4)} - \mathbf{W}_{N/2^{m-2}} \cdot \Phi_m^{(p-2)}, & \Phi_{m-1}^{(p-1)} &= \Phi_m^{(p-3)} - \mathbf{W}_{N/2^{m-2}} \cdot \Phi_m^{(p-1)}.
 \end{aligned} \tag{2.12}$$

В итоге таких переходов получим коэффициенты прямого преобразования (2.8), упорядоченные в естественном порядке и линейно расположенные по процессорам. Аналогично делается обратное преобразование (2.8). Этот алгоритм не является классическим параллельным быстрым преобразованием Фурье, поскольку он не является однородным (при $p=1$ используется один алгоритм, при $p>1$ – другой). Поэтому назовём его для любого p дискретным оптимизированным преобразованием Фурье или ОПФ.

Оценим арифметическую сложность и объём оперативной памяти, которые потребуются для реализации изложенного алгоритма ОПФ. Для этого заметим, что реализация последовательного БПФ на одном вычислителе имеет оценку сложности $Q_1 = C_1 N \log_2 N + C_0 \log_2 N$ комплексных операций с плавающей точкой. Константа $C_1 = \frac{3}{2}$ при реализации БПФ по алгоритму Кули-Тьюки (см. [289, 296]) при наличии у процессора аппаратной реализации комплексной арифметики. При эмуляции комплексной арифметики $C_1 = 5$. Константа C_0 отвечает за расчёты

коэффициентов W_M^k . При массовых расчётах эту часть алгоритма можно опустить, поскольку она выполняется один раз при инициализации. Требуемая память – массив для хранения N комплексных чисел преобразования и массив для хранения комплексных коэффициентов поворота W_M^k размерности $\log_2 N$. Последний впрочем можно не учитывать по тем же причинам.

Для выполнения ОПФ в параллельном режиме на каждом вычислителе производится выполнение одного последовательного БПФ размерности $\frac{N}{p} = \frac{N}{2^m}$ и m этапов линейной обработки комплексных массивов длины $\frac{N}{p}$.

Эти затраты оценим величиной $C_1 \frac{N}{2^m} \log_2 \frac{N}{2^m} + C_2 \frac{N}{2^m} m$. При наличии аппаратной комплексной арифметики $C_2 = 2$, при её эмуляции – $C_2 = 8$.

Также следует добавить затраты на коллективный обмен на начальном этапе алгоритма и двухсторонние обмены на последующих этапах. Можем считать, что двухсторонний обмен вычислителей массивами длины $\frac{N}{p}$ оценивается

величиной $C_3 \frac{N}{p}$, тогда оценка затрат на обмены каждого процессора будет

величиной порядка $C_3 \frac{N}{p^2} (p-1) + C_3 \frac{N}{p} m$. Константа C_3 есть отношение

скорости передачи данных комплексного типа к скорости обработки данных этого типа на элементарных операциях. Она зависит как от конкретных характеристик сети, так и от производительности процессора и может быть много больше, порядка или много меньше 1. В итоге арифметическая сложность параллельного ОПФ будет равна

$$Q_p = C_1 \frac{N}{p} \log_2 \frac{N}{p} + C_2 \frac{N}{p} \log_2 p + C_3 \frac{N}{p} \left(\frac{p-1}{p} + \log_2 p \right). \quad (2.13)$$

Ускорение и эффективность ОПФ определяются стандартным образом (см. например, [297]) и могут быть оценены по следующим формулам

$$S_p = \frac{Q_1}{Q_p} = \frac{p}{1 + \left(\frac{C_2}{C_1} - 1 + \frac{C_3}{C_1} \left(1 + \frac{p-1}{p \log_2 p} \right) \right) \frac{\log_2 p}{\log_2 N}},$$

$$E_p = \frac{S_p}{p} = \frac{1}{1 + \left(\frac{C_2}{C_1} - 1 + \frac{C_3}{C_1} \left(1 + \frac{p-1}{p \log_2 p} \right) \right) \frac{\log_2 p}{\log_2 N}}.$$
(2.14)

Из формул (2.14) следует, что представленный параллельный алгоритм ОПФ будет эффективен, если выполнено условие $\log_2 p \ll C \log_2 N$.

Оперативная память, которая потребуется для реализации ОПФ на каждом процессоре потребует 2 массива комплексных чисел размерности $\frac{N}{p}$.

Возвратимся теперь к исходному одномерному преобразованию Фурье по синусам (2.7), применяемому к решению краевой задачи. Для экономии памяти его можно привести к виду

$$\varphi_k = \frac{1}{2} \operatorname{Im} \left(F_{N,k}^{(+)} \left[f_{2j} \oplus (-f_{N-2j}) \right] + W_{2N}^k \cdot F_{N,k}^{(+)} \left[f_{2j-1} \oplus (-f_{N-(2j-1)}) \right] \right),$$

$$S_k = \frac{2h\varphi_k}{\lambda_k}, \quad k = 1, \dots, N-1,$$

$$y_l = \frac{1}{2} \operatorname{Im} \left(F_{N,l}^{(+)} \left[S_{2k} \oplus (-S_{N-2k}) \right] + W_{2N}^k \cdot F_{N,l}^{(+)} \left[S_{2k-1} \oplus (-S_{N-(2j-1)}) \right] \right),$$

$$l = 1, \dots, N-1.$$
(2.14)

В заключение пункта сделаем несколько замечаний.

Во-первых, если число процессоров $p \neq 2^m$, то алгоритм ОПФ можно эффективно применять, если выбрать $m = \log_2 p + k$, где $k = 1, 2, \dots$. При этом, чем больше k , тем выше будет эффективность, поскольку в этом случае возникнет возможность балансировки загрузки процессоров. Однако брать $k > 10$ не выгодно вследствие возрастания накладных расходов при обменах.

Во-вторых, таким же способом можно реализовать решение задачи Неймана, использующее преобразование Фурье по косинусам:

$$\begin{aligned}
\varphi_k &= \frac{1}{2} \operatorname{Re} \left(F_{N,k}^{(+)} [f_{2j} \oplus f_{N-2j}] + W_{2N}^k \cdot F_{N,k}^{(+)} [f_{2j-1} \oplus f_{N-(2j-1)}] \right), \\
C_k &= \frac{2h\varphi_k}{\lambda_k}, \quad k = 0, \dots, N, \\
y_l &= \frac{1}{2} \operatorname{Re} \left(F_{N,l}^{(+)} [C_{2k} \oplus C_{N-2k}] + W_{2N}^k \cdot F_{N,l}^{(+)} [C_{2k-1} \oplus C_{N-(2j-1)}] \right), \\
l &= 0, \dots, N,
\end{aligned} \tag{2.15}$$

а также некоторых краевых задач для стационарного уравнения Шрёдингера, использующих преобразования по комплексным экспонентам.

В-третьих, реализация многомерных преобразований вида (2.4) может основываться на изложенном одномерном преобразовании и, очевидно, будет более эффективной при блочной стратегии распараллеливания.

2.2 Параллельные алгоритмы на основе метода прогонки

В данном пункте рассматриваются параллельные алгоритмы на основе метода прогонки. Они применяются для численного решения на ортогональных пространственных сетках линейных и нелинейных краевых задач для обыкновенных дифференциальных уравнений 2-го порядка и двух- и трёхмерных эллиптических уравнений (либо в комбинации с БПФ или ОПФ, либо в рамках итерационного метода переменных направлений), а также начально-краевых задач для одномерных и многомерных параболических уравнений (при применении локально одномерных схем расщепления). Параллельные алгоритмы для краевых задач 1-го, 2-го и 3-го рода, а также для периодических граничных условий тривиальны и были известны ещё с работ Н.Н. Яненко [175, 182], А.Н. Коновалова [184, 298], В.П. Ильина [299] и других авторов. В данной работе они распространены на случай немонотонных операторов (параллельная немонотонная прогонка) и нелокальных граничных условий (параллельная «интегральная» прогонка) [A27, A30] и использованы для реализации экспоненциальных схем на ортогональных сетках [A7, A17, A23, A25, A34].

Рассмотрим сначала линейную алгебраическую задачу, которая возникает в результате построения выше указанных разностных схем и представляет собой систему уравнений с трехдиагональной матрицей (или близкую к ней). Такую задачу записывают обычно в следующем каноническом виде (см., например, [188, 189, 200, 283]):

$$A_i y_{i-1} - C_i y_i + B_i y_{i+1} = -F_i, \quad 1 \leq i \leq N-1. \quad (2.16)$$

На границе в случае 1-ой, 2-ой, 3-ей или смешанной краевых задач получаются уравнения

$$-C_0 y_0 + B_0 y_1 = -F_0, \quad -C_N y_N + A_N y_{N-1} = -F_N. \quad (2.17_1)$$

В случае периодических граничных условий уравнения (2.16) имеют место для всех $i = 2, \dots, N-1$, а в узлах $i = 1$ и $i = N$ справедливы уравнения, записанные с учётом периодичности функции и её производной:

$$A_1 y_N - C_1 y_1 + B_1 y_2 = -F_1, \quad A_N y_{N-1} - C_N y_N + B_N y_1 = -F_N. \quad (2.17_2)$$

В случае нелокальных граничных условий первое и последнее уравнения системы принимают вид

$$-C_0 y_0 + \sum_{i=1}^N B_{0,i} y_i = -F_0, \quad \sum_{i=0}^{N-1} A_{N,i} y_i - C_N y_N = F_N. \quad (2.17_3)$$

Относительно свойств коэффициентов системы (2.16)-(2.17) предполагается следующее:

$$A_i, B_i \geq 0, \quad C_i > 0, \quad i = 0, \dots, N, \quad (2.18)$$

и либо выполняются условия

$$C_i = A_i + B_i + D_i, \quad D_i > 0, \quad i = 0, \dots, N, \quad (2.19_1)$$

либо условия

$$C_i = A_{i+1} + B_{i-1} + D_i, \quad D_i > 0, \quad i = 1, \dots, N-1. \quad (2.19_2)$$

Последнее условие возникает в случае немонотонного сеточного оператора (например, при использовании схем экспоненциальной подгонки, обсуждавшихся в гл. 1) во внутренних узлах сетки. На границе в этом случае должны быть выполнены условия (2.19₁). Если краевая задача является нелокальной, то должны выполняться также условия её разрешимости.

Далее приведём последовательные варианты алгоритма прогонки, взятые из [188, 189, 200, 283] и записанные в единой системе обозначений.

Правая прогонка:

$$\begin{aligned}\alpha_0 &= \frac{B_0}{C_0}, \quad \beta_0 = \frac{F_0}{C_0}, \\ \alpha_i &= \frac{B_i}{C_i - A_i \alpha_{i-1}}, \quad \beta_i = \frac{F_i + A_i \beta_{i-1}}{C_i - A_i \alpha_{i-1}}, \quad i = 1, \dots, N; \\ y_N &= \beta_N, \quad y_i = \alpha_i y_{i+1} + \beta_i, \quad i = N-1, \dots, 0.\end{aligned}\tag{2.20_1}$$

Левая прогонка:

$$\begin{aligned}\alpha_N &= \frac{A_N}{C_N}, \quad \beta_N = \frac{F_N}{C_N}, \\ \alpha_i &= \frac{A_i}{C_i - B_i \alpha_{i+1}}, \quad \beta_i = \frac{F_i + B_i \beta_{i+1}}{C_i - B_i \alpha_{i+1}}, \quad i = N-1, \dots, 0; \\ y_0 &= \beta_0, \quad y_i = \alpha_i y_{i-1} + \beta_i, \quad i = 1, \dots, N.\end{aligned}\tag{2.20_2}$$

Встречная прогонка:

$$\begin{aligned}\alpha_0 &= \frac{B_0}{C_0}, \quad \beta_0 = \frac{F_0}{C_0}, \quad \alpha_i = \frac{B_i}{C_i - A_i \alpha_{i-1}}, \\ \beta_i &= \frac{F_i + A_i \beta_{i-1}}{C_i - A_i \alpha_{i-1}}, \quad i = 1, \dots, M; \quad \alpha_N = \frac{A_N}{C_N}, \quad \beta_N = \frac{F_N}{C_N}, \\ \alpha_i &= \frac{A_i}{C_i - B_i \alpha_{i+1}}, \quad \beta_i = \frac{F_i + B_i \beta_{i+1}}{C_i - B_i \alpha_{i+1}}, \quad i = N-1, \dots, M+1; \\ y_M &= \frac{\beta_M + \alpha_M \beta_{M+1}}{1 - \alpha_M \alpha_{M+1}}, \quad y_i = \alpha_i y_{i+1} + \beta_i, \quad i = M-1, \dots, 0, \\ y_i &= \alpha_i y_{i-1} + \beta_i, \quad i = M+1, \dots, N.\end{aligned}\tag{2.20_3}$$

Правая циклическая прогонка:

$$\begin{aligned}\alpha_1 &= \frac{B_1}{C_1}, \quad \beta_1 = \frac{F_1}{C_1}, \quad \gamma_1 = \frac{A_1}{C_1}, \\ \alpha_i &= \frac{B_i}{C_i - A_i \alpha_{i-1}}, \quad \beta_i = \frac{F_i + A_i \beta_{i-1}}{C_i - A_i \alpha_{i-1}}, \quad \gamma_i = \frac{A_i \gamma_{i-1}}{C_i - A_i \alpha_{i-1}}, \quad i = 1, \dots, N; \\ p_{N-1} &= \beta_{N-1}, \quad q_{N-1} = \alpha_{N-1} + \gamma_{N-1}, \\ p_i &= \alpha_i p_{i+1} + \beta_i, \quad q_i = \alpha_i q_{i+1} + \gamma_i, \quad i = N-2, \dots, 1; \\ y_N &= \frac{\beta_N + \alpha_N p_1}{1 - \alpha_N q_1 - \gamma_N}, \quad y_i = p_i + y_N q_i, \quad i = N-1, \dots, 1, \quad y_0 = y_N.\end{aligned}\tag{2.20_4}$$

Интегральная прогонка:

$$\alpha_{1n} = C_0 y_0^{(n)} - \sum_{i=1}^N B_{0,i} y_i^{(n)}, \quad \alpha_{2n} = C_N y_N^{(n)} - \sum_{i=0}^{N-1} A_{N,i} y_i^{(n)}, \quad n=1,2,3,$$

$$y_0 = \frac{\alpha_{12}(F_N - \alpha_{21}) - \alpha_{22}(F_0 - \alpha_{11})}{\alpha_{12}\alpha_{23} - \alpha_{22}\alpha_{13}},$$

$$y_N = \frac{\alpha_{23}(F_0 - \alpha_{11}) - \alpha_{13}(F_N - \alpha_{21})}{\alpha_{12}\alpha_{23} - \alpha_{22}\alpha_{13}},$$

$$y_i = y_i^{(1)} + y_N y_i^{(2)} + y_0 y_i^{(3)}, \quad i=1, \dots, N-1.$$
(2.20₅)

Здесь $y_i^{(n)}$ – решения следующих краевых задач:

- (1): $A_i y_{i-1} - C_i y_i + B_i y_{i+1} = -F_i, \quad 1 \leq i \leq N-1, \quad y_0 = 0, \quad y_N = 0;$
 (2): $A_i y_{i-1} - C_i y_i + B_i y_{i+1} = 0, \quad 1 \leq i \leq N-1, \quad y_0 = 0, \quad y_N = 1;$
 (3): $A_i y_{i-1} - C_i y_i + B_i y_{i+1} = 0, \quad 1 \leq i \leq N-1, \quad y_0 = 1, \quad y_N = 0.$

Правая немонотонная прогонка:

$$\alpha_0 = \frac{A_0 A_1}{B_0 C_0}, \quad \beta_0 = \frac{F_0}{C_0}, \quad \alpha_i = \frac{A_{i+1}}{C_i - B_{i-1} \alpha_{i-1}},$$

$$\beta_i = \frac{F_i + A_i \beta_{i-1}}{C_i - B_{i-1} \alpha_{i-1}}, \quad i=1, \dots, N-1;$$

$$y_N = \frac{F_N + B_N \beta_{N-1}}{C_N - (B_N / A_N) B_{N-1} \alpha_{N-1}}, \quad y_i = \frac{B_i}{A_{i+1}} \alpha_i y_{i+1} + \beta_i, \quad i=N-1, \dots, 0.$$
(2.20₆)

В этом случае предполагается, что $C_i = A_{i+1} + B_{i-1} + D_i$ и выполняется условие

$$\frac{B_i}{A_{i+1}} \leq 1 \quad \text{для } i = N-1, \dots, 0. \quad \text{Если выполнено условие } \frac{A_i}{B_{i-1}} \leq 1 \quad \text{для } i = 1, \dots, N, \quad \text{то}$$

используют **левую немонотонную прогонку** (её нетрудно выписать по аналогии с (2.20₆)). Если в какой-то точке сетки происходит смена одного из этих условий на другое (в дальнейшем назовём их **условия (*)**), то следует применить алгоритм **встречной немонотонной прогонки** (записывается аналогично (2.20₃) с учётом немонотонности). Если смена условий (*) происходит k раз, то используется **обобщённая немонотонная прогонка** (она обсуждается ниже). В частности, такой алгоритм прогонки используется тогда, когда алгебраическая задача (2.16) получается в результате

применения схем экспоненциальной подгонки вида (1.35) с ненулевой функцией E , несколько раз меняющей знак на отрезке интегрирования (см. также [A27]).

В диссертации все указанные выше алгоритмы были реализованы в последовательном и параллельном вариантах. Реализация параллельных вариантов обсуждается ниже.

2.2.1 Базовый алгоритм распараллеливания

Рассмотрим параллельный алгоритм решения алгебраической задачи на примере системы (2.16)-(2.17₁), предполагая использование МВС с распределенной архитектурой, имеющей p вычислителей. Для этого введем равномерное линейное разбиение множества номеров узлов сетки $\Omega = \{0, 1, \dots, N\}$ на связные подмножества $\Omega_m = \{i_1^{(m)}, \dots, i_2^{(m)}\}$ ($m = 0, \dots, p-1$), соответствующие разбиению вектора неизвестных по процессорам (см. рис. 2.1).

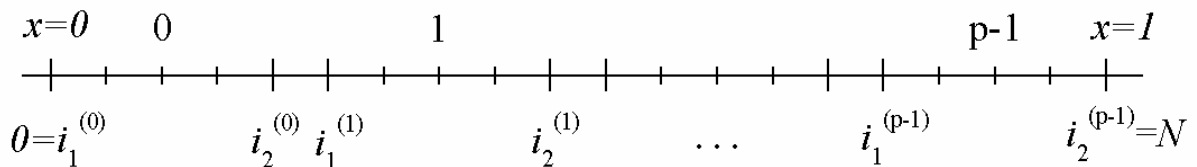


Рисунок 2.1. Разбиение расчетной области по вычислителям.

В результате такого разбиения вычислитель с номером m будет обрабатывать $(i_2^{(m)} - i_1^{(m)} + 1)$ точек. Представим далее решение на каждом внутреннем ($0 < m < p-1$) вычислителе в виде следующей линейной комбинации:

$$y_i \equiv y_i^{(m)} = y_i^{(I,m)} + y_{i_1^{(m)}}^{(III,m)} + y_{i_2^{(m)}}^{(II,m)}, \quad (2.21_1)$$

где функции $y_i^{(\alpha,m)}$ ($\alpha = I, II, III$) полностью определены на множестве узлов Ω_m и играют роль базиса (см. рис. 2.2), а значения искомой функции на границе $\Omega_m - y_{i_1^{(m)}}$ и $y_{i_2^{(m)}}$ – пока не известны. Во внутренних узлах Ω_m

функция $y_i^{(I,m)}$ находится из уравнений (2.16), а функции $y_i^{(II,m)}$, $y_i^{(III,m)}$ из уравнений (2.16) с нулевой правой частью.

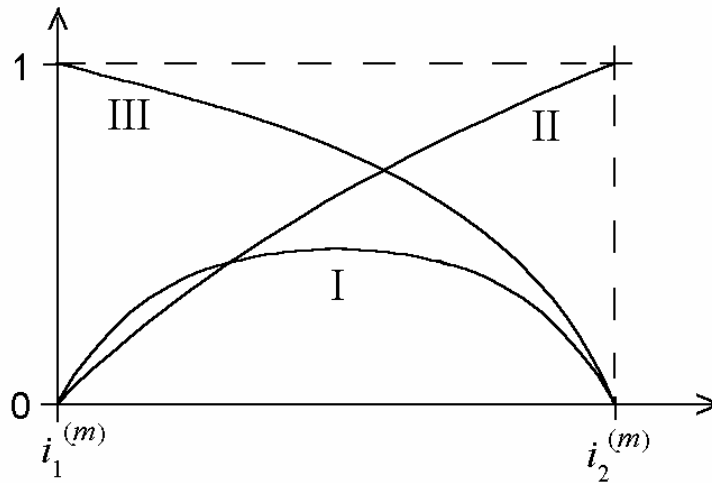


Рисунок 2.2. Базисные функции $y_i^{(\alpha,m)}$ на вычислителе с номером m .

Граничные условия для $y_i^{(\alpha,m)}$ ставятся следующим образом:

$$y_{i_1^{(m)}}^{(I,m)} = 0, y_{i_2^{(m)}}^{(I,m)} = 0; \quad y_{i_1^{(m)}}^{(II,m)} = 0, y_{i_2^{(m)}}^{(II,m)} = 1; \quad y_{i_1^{(m)}}^{(III,m)} = 1, y_{i_2^{(m)}}^{(III,m)} = 0. \quad (2.22_1)$$

Очевидно, что на нулевом и последнем вычислителях можно использовать неполные линейные комбинации:

$$y_i^{(0)} = y_i^{(I,0)} + y_{i_2^{(0)}}^{(II,0)} y_i^{(II,0)}, \quad (2.21_2)$$

$$y_i^{(p-1)} = y_i^{(I,p-1)} + y_{i_1^{(p-1)}}^{(III,p-1)} y_i^{(III,p-1)}. \quad (2.21_3)$$

Из левого граничного условия исходной задачи для базисных функций нулевого вычислителя получаем:

$$\begin{aligned} C_0 y_0^{(I,0)} - B_0 y_1^{(I,0)} &= F_0, & y_{i_2^{(0)}}^{(I,0)} &= 0; \\ C_0 y_0^{(II,0)} - B_0 y_1^{(II,0)} &= 0, & y_{i_2^{(0)}}^{(II,0)} &= 1. \end{aligned} \quad (2.22_2)$$

Из правого граничного условия исходной задачи для базисных функций последнего вычислителя получаем:

$$\begin{aligned} y_{i_1^{(p-1)}}^{(I,p-1)} &= 0, & C_N y_N^{(I,p-1)} - A_N y_{N-1}^{(I,p-1)} &= F_N; \\ y_{i_1^{(p-1)}}^{(III,p-1)} &= 1, & C_N y_N^{(III,p-1)} - A_N y_{N-1}^{(III,p-1)} &= 0. \end{aligned} \quad (2.22_3)$$

Отметим, что базисные функции при выполнении условий (2.18), (2.19) удовлетворяют оценкам принципа максимума [188, 200]:

$$\|y^{(I,m)}\|_C \leq \|D^{-1}F\|_C, \quad 0 \leq y^{(II,m)} \leq 1, \quad 0 \leq y^{(III,m)} \leq 1, \quad m = 0, \dots, p-1, \quad (2.23_1)$$

$$0 \leq y_i^{(II,m)} + y_i^{(III,m)} \leq 1, \quad \text{для всех } i \text{ и } m. \quad (2.23_2)$$

Эти свойства обеспечивают устойчивость вычислений по формулам (2.21).

Для нахождения неизвестных значений искомой функции в граничных узлах подобластей Ω_m запишем исходные уравнения (2.16) в двух соседних точках, принадлежащих вычислителям с номерами m и $m+1$:

$$\begin{aligned} A_{i_2^{(m)}} y_{i_2^{(m)}-1} - C_{i_2^{(m)}} y_{i_2^{(m)}} + B_{i_2^{(m)}} y_{i_2^{(m)}+1} &= -F_{i_2^{(m)}}, \\ A_{i_1^{(m+1)}} y_{i_1^{(m+1)}-1} - C_{i_1^{(m+1)}} y_{i_1^{(m+1)}} + B_{i_1^{(m+1)}} y_{i_1^{(m+1)}+1} &= -F_{i_1^{(m+1)}}. \end{aligned}$$

Если учесть в этих уравнениях очевидные связи

$$\begin{aligned} y_{i_2^{(m)}-1} &= y_{i_2^{(m)}-1}^{(I,m)} + y_{i_1^{(m)}} y_{i_2^{(m)}-1}^{(III,m)} + y_{i_2^{(m)}} y_{i_2^{(m)}-1}^{(II,m)}, \quad y_{i_2^{(m)}+1} = y_{i_1^{(m+1)}}, \\ y_{i_1^{(m+1)}-1} &= y_{i_2^{(m)}}, \quad y_{i_1^{(m+1)}+1} = y_{i_1^{(m+1)}+1}^{(I,m)} + y_{i_1^{(m+1)}} y_{i_1^{(m+1)}+1}^{(III,m)} + y_{i_2^{(m+1)}} y_{i_1^{(m+1)}+1}^{(II,m)}, \end{aligned}$$

то несложно получить следующие уравнения

$$\begin{aligned} \tilde{A}_{i_2^{(m)}} y_{i_1^{(m)}} - \tilde{C}_{i_2^{(m)}} y_{i_2^{(m)}} + \tilde{B}_{i_2^{(m)}} y_{i_1^{(m+1)}} &= -\tilde{F}_{i_2^{(m)}}, \\ \tilde{A}_{i_1^{(m+1)}} y_{i_2^{(m)}} - \tilde{C}_{i_1^{(m+1)}} y_{i_1^{(m+1)}} + \tilde{B}_{i_1^{(m+1)}} y_{i_2^{(m+1)}} &= -\tilde{F}_{i_1^{(m+1)}}, \end{aligned}$$

с коэффициентами

$$\begin{aligned} \tilde{A}_{i_2^{(m)}} &= A_{i_2^{(m)}} y_{i_2^{(m)}-1}^{(III,m)}, \quad \tilde{B}_{i_2^{(m)}} = B_{i_2^{(m)}}, \\ \tilde{C}_{i_2^{(m)}} &= C_{i_2^{(m)}} - A_{i_2^{(m)}} y_{i_2^{(m)}-1}^{(II,m)}, \quad \tilde{F}_{i_2^{(m)}} = F_{i_2^{(m)}} + A_{i_2^{(m)}} y_{i_2^{(m)}-1}^{(I,m)}, \\ \tilde{A}_{i_1^{(m+1)}} &= A_{i_1^{(m+1)}}, \quad \tilde{B}_{i_1^{(m+1)}} = B_{i_1^{(m+1)}} y_{i_1^{(m+1)}+1}^{(II,m+1)}, \\ \tilde{C}_{i_1^{(m+1)}} &= C_{i_1^{(m+1)}} - B_{i_1^{(m+1)}} y_{i_1^{(m+1)}+1}^{(III,m+1)}, \quad \tilde{F}_{i_1^{(m+1)}} = F_{i_1^{(m+1)}} + B_{i_1^{(m+1)}} y_{i_1^{(m+1)}+1}^{(I,m+1)}. \end{aligned}$$

Действуя аналогично для каждой пары вычислителей, получим следующую систему из $2p-2$ уравнений для искомого $2p-2$ неизвестных

$$\tilde{A}_i y_{i-1} - \tilde{C}_i y_i + \tilde{B}_i y_{i+1} = -\tilde{F}_i, \quad i \in \tilde{\Omega} = \{i_2^{(0)}, i_1^{(1)}, i_2^{(1)}, \dots, i_1^{(p-1)}\}, \quad (2.24)$$

где под индексом $i \pm 1$ понимается переход к соответствующему соседнему

элементу из множества $\tilde{\Omega}$.

Нетрудно проверить, что в граничных узлах $i_2^{(0)}$ и $i_1^{(p-1)}$ уравнения (2.24) принимают вид (2.17₁). Кроме того, в силу свойств (2.23) коэффициенты новой “короткой” системы уравнений также удовлетворяют условиям принципа максимума вида (2.18), (2.19). Таким образом, решение системы (2.24) существует и является единственным. Определив его методом обычной (скалярной) прогонки, можно с помощью формул (2.21), вычислить решение исходной задачи (2.16), (2.17₁).

Приведем теперь полную последовательность действий в алгоритме параллельной прогонки. На первом этапе на каждом вычислителе с помощью алгоритма скалярной прогонки решаются три (или две) задачи для нахождения базисных функций $y^{(\alpha, m)}$. Затем находятся коэффициенты для новой задачи относительно неизвестных $y_{i_1}^{(m)}, y_{i_2}^{(m)}$ ($m = 0, \dots, p-1$). На втором этапе эти коэффициенты пересылаются одному из вычислителей, например, нулевому. Этот вычислитель осуществляет решение короткой системы уравнений (2.24) и рассылает полученные пары значений $y_{i_1}^{(m)}, y_{i_2}^{(m)}$ соответствующим вычислителям. Получив эти данные, каждый вычислитель восстанавливает свою часть искомого решения по формулам (2.21). На этом процедура решения заканчивается. Альтернативным и вполне приемлемым вариантом второй части алгоритма является решение короткой системы на всех вычислителях.

Рассмотрим теперь вопрос об ускорении и эффективности изложенного параллельного алгоритма. Оценим эти характеристики через количества обобщенных арифметических операций Q_1 и Q_p , необходимые для реализации вычислений соответственно на одном и на p вычислителях.

Как известно, при решении исходной задачи с помощью скалярного алгоритма прогонки приходится выполнить $Q_1 = C_1 N$ обобщенных арифметических действий. При решении задачи по изложенному

параллельному алгоритму производится $Q_p = 3C_2 \frac{N}{p} + 2C_1(p-1) + 10C_3(p-1)$ обобщённых действий (последнее слагаемое отвечает за обмен 10-ю числами каждого вычислителя с нулевым, константа C_3 , как и выше, есть отношение скорости передачи данных вещественного типа к скорости элементарных арифметических операций над этими данными). Последняя оценка следует из того, что на каждом вычислителе, кроме нулевого и последнего, решаются три задачи размерности $\frac{N}{p}$, а нулевой вычислитель решает еще и короткую задачу размерности $2p-2$. Константы C_1, C_2 не зависят от N и p и близки по величине ($C_2/C_1 \sim 1.2$).

Теперь оценим величину ускорения и эффективность рассмотренного параллельного алгоритма:

$$S_p = \frac{p}{3 \frac{C_2}{C_1} + 2 \left(1 + \frac{5C_3}{C_1} \right) \frac{p(p-1)}{N}}, \quad E_p = \frac{S_p}{p} \cdot 100\%. \quad (2.25)$$

Эта формула показывает, что при $p \ll \sqrt{N}$ ускорение S_p близко к величине $p/3$, а эффективность E_p составляет примерно 33 %. Безусловно, полученные оценки можно уточнить, если рассмотреть подробно структуру вычислений и учесть соотношения между различными видами арифметических операций. Однако полученная асимптотика не сильно изменится.

2.2.2 Обобщения базового параллельного алгоритма

Рассмотрим теперь особенности использования изложенного выше базового алгоритма для параллельной реализации других вариантов прогонки. Прежде всего отметим, что изложенный алгоритм без изменений подходит для параллельной реализации правой и левой монотонной прогонки.

В случае параллельной реализации *встречной монотонной прогонки* возможно разбиение множества индексов Ω не на p смежных интервалов, а на $\frac{p}{2}$. Тогда каждые два смежных вычислителя выполняют алгоритм встречной прогонки для определения общих базисных функций $y_i^{(\alpha, m)}$. Выигрыш от такого объединения состоит во вдвое меньших накладных расходах, связанных с коллективными обменами, а также вдвое меньшей длиной «короткой» задачи. Количество арифметических операций в параллельном варианте составляет $Q_p = 3C_2 \frac{N}{p} + C_1(p-1) + 5C_3(p-1) + 6C_3$. Отсюда нетрудно заключить, что асимптотика ускорения и эффективности такого алгоритма остается такой же, как и в базовом варианте. Однако при реальных вычислениях определённый выигрыш имеет место.

В случае периодической задачи (2.16), (2.17₂) в последовательном варианте используется алгоритм циклической прогонки (2.20₄). В нём фактически вводится аналогичный базис из двух функций на всём множестве индексов, а короткая система содержит 2 неизвестных. В параллельном варианте *циклической прогонки*, как и выше, на каждом вычислителе вводится базис из трех функций, а короткая система содержит $2p-1$ неизвестных и решается с помощью скалярного алгоритма циклической прогонки. Количество операций скалярного алгоритма циклической прогонки оценим величиной $Q_1 = 2C_1N$. Количество операций параллельной циклической прогонки составляет $Q_p = 3C_2 \frac{N}{p} + 2C_1(2p-1) + 10C_3(p-1)$. Тогда ускорение (и эффективность) получается вдвое выше, чем у базового варианта. В итоге эффективность параллельного варианта циклической прогонки при $p \ll \sqrt{N}$ может достигать 67%.

В случае нелокальной задачи (2.16), (2.17₃) в последовательном варианте используется интегральная прогонка (2.20₅). В этом случае уже в последовательном варианте применяется приём, который позволил

распараллелить базовый алгоритм. В результате число арифметических действий последовательного алгоритма с учётом самих формул (2.20₅) равно примерно $Q_1 = 4C_1N$. В параллельном алгоритме *интегральной прогонки* в отличие от базового «короткая» система уравнений содержит $2p$ неизвестных и может решаться с помощью любого варианта скалярной прогонки. Количество арифметических действий в параллельном варианте составляет $Q_p = 4C_2 \frac{N}{p} + 2C_1 p + 10C_3(p-1)$. Таким образом, эффективность параллельного варианта «интегральной» прогонки при $p \ll \sqrt{N}$ близка к 100%.

При параллельной реализации алгоритмов *немонотонной прогонки* ситуация подобна случаю монотонной прогонки (левой, правой или встречной), если условия (*) выполняются на всём множестве узлов Ω или имеет место их смена только в одной из внутренних точек этого множества. Соответственно, максимальная эффективность алгоритма не превосходит 33% при условии $p \ll \sqrt{N}$.

Если количество перемен условий (*) равно $k \geq 2$, то как в последовательном, так и в параллельном случаях приходится вводить базис из функций $y_i^{(\alpha, m)}$. Тогда последовательный вариант *обобщённой немонотонной прогонки* почти эквивалентен параллельному базовому алгоритму при $p = k$. Отличие состоит лишь в том, что он выполняется одним вычислителем и интервалы, где выполняется фиксированное условие (*) не являются одинаковыми. В параллельном варианте к точкам смены условия (*) добавляются точки разбиения множества Ω по вычислителям. Поэтому «короткая» система имеет в общем случае имеет размерность $2p + 2k$. В обоих вариантах она решается ленточным методом Гаусса с выбором главного элемента ввиду отсутствия у матрицы диагонального преобладания (это свойство основной системы передаётся «короткой» системе). Оценка числа арифметических действий в последовательном

варианте даёт величину $Q_1 = 3\tilde{C}_2 \frac{N}{k} k + \tilde{C}_1 2k$ (Константы $\tilde{C}_{1,2}$ чуть больше, чем в алгоритме монотонной прогонки). Оценки числа арифметических действий в параллельном варианте даёт величину $Q_p = 3\tilde{C}_2 \frac{N}{p} + 2\tilde{C}_1(p+k) + 10C_3(p+k-1)$. Тогда ускорение имеет вид:

$$S_p = p \left(1 + \frac{2\tilde{C}_1 k}{3\tilde{C}_2 N} \right) \left(1 + \frac{2\tilde{C}_1 p(p+k) + 10C_3 p(p+k-1)}{3\tilde{C}_2 N} \right)^{-1}.$$

Отсюда следует, что эффективность параллельного алгоритма обобщённой немонотонной прогонки при $k \geq 2$ и $p \ll \sqrt{N}$ может достигать 100% за счет того, что его последовательный аналог является более трудоемким по сравнению с алгоритмом обычной немонотонной прогонки.

Скажем несколько слов о квазилинейной задаче. В этом случае коэффициенты (2.16), (2.17) зависят от вектора решения y . Для решения такой задачи используется итерационный процесс. Обычно используется либо метод простой итерации (МПИ), либо метод Ньютона (МН). Запишем общую процедуру этих методов на примере задачи (2.16), (2.17₁):

$$A_i(y) y_{i-1} - C_i(y) y_i + B_i(y) y_{i+1} + \theta \sum_{j=0}^N \left[\frac{\partial A_i}{\partial y_j}(y) y_{i-1} - \frac{\partial C_i}{\partial y_j}(y) y_i + \frac{\partial B_i}{\partial y_j}(y) y_{i+1} + \frac{\partial F_i}{\partial y_j}(y) \right]^{s+1} y_j = -F_i(y) + \quad (2.26_1)$$

$$+ \theta \sum_{j=0}^N \left[\frac{\partial A_i}{\partial y_j}(y) y_{i-1} - \frac{\partial C_i}{\partial y_j}(y) y_i + \frac{\partial B_i}{\partial y_j}(y) y_{i+1} + \frac{\partial F_i}{\partial y_j}(y) \right]^s y_j, \quad 1 \leq i \leq N-1,$$

$$-C_0(y) y_0 + B_0(y) y_1 + \theta \sum_{j=0}^N \left[-\frac{\partial C_0}{\partial y_j}(y) y_0 + \frac{\partial B_0}{\partial y_j}(y) y_1 + \frac{\partial F_0}{\partial y_j}(y) \right]^{s+1} y_j = \quad (2.26_2)$$

$$= -F_0(y) + \theta \sum_{j=0}^N \left[-\frac{\partial C_0}{\partial y_j}(y) y_0 + \frac{\partial B_0}{\partial y_j}(y) y_1 + \frac{\partial F_0}{\partial y_j}(y) \right]^s y_j,$$

$$\begin{aligned}
& A_N(y) y_{N-1} - C_N(y) y_N + \\
& + \theta \sum_{j=0}^N \left[\frac{\partial A_N}{\partial y_j}(y) y_{N-1} - \frac{\partial C_N}{\partial y_j}(y) y_N + \frac{\partial F_N}{\partial y_j}(y) \right]^{s+1} y_j = \\
& = -F_N(y) + \theta \sum_{j=0}^N \left[\frac{\partial A_N}{\partial y_j}(y) y_{N-1} - \frac{\partial C_N}{\partial y_j}(y) y_N + \frac{\partial F_N}{\partial y_j}(y) \right]^s y_j, \\
& s = 0, 1, \dots, \quad 0 \leq \theta \leq 1, \quad 0 \leq k \leq s.
\end{aligned} \tag{2.26_3}$$

Начальное приближение для процесса (2.26) выбирается из условия близости к искомому решению. Параметр θ отвечает за вариант метода: при $\theta = 0$ получаем МПИ, при $\theta = 1$ – МН, при $0 < \theta < 1$ – МН с регуляризацией. Параметр k отвечает за пересчёт производных в методе Ньютона. При $k = s$ получаем стационарный МН, при $k > 0$ – МН с запаздыванием. Скорость сходимости метода (2.26) при $\theta = 0$ – линейная, при $\theta > 0$ – квадратичная [200, 253, 254, 300].

Параллельная реализация процесса (2.26) зависит от характера нелинейности. При условии локальной нелинейности (Ньютоновский оператор перехода от одной итерации к другой не выходит за рамки шаблона разностной схемы, за исключением быть может граничных узлов) на каждой итерации получаем задачу вида (2.16), (2.17) и можем использовать базовый алгоритм параллельной прогонки. При этом, если оператор перехода меняется не на каждой итерации (можно «замораживать» также и основные коэффициенты задачи), то пересчитывать вторую и третью базисные функции на каждой итерации не нужно. В этом случае число операций в параллельном алгоритме существенно сокращается, и есть возможность получить эффективность распараллеливания близкую к 100%.

Если же имеет место нелокальная нелинейность задачи, то итерационный процесс Ньютона приводит к полностью заполненной матрице перехода, обращение которой прямыми или итерационными методами требует как минимум $O(N^2)$ арифметических операций. Распараллеливание процесса в этом случае проводится методами пригодными для полностью

заполненных матриц, например, с помощью параллельного полного (прямое обращение матрицы) или неполного (итерационное обращение матрицы) LU-разложения.

Аналогичная ситуация имеет место в нестационарном случае, когда система (2.16), (2.17) возникает при решении нестационарной задачи при переходе с одного слоя по времени на другой. В этом случае коэффициенты алгебраической задачи либо зависят от времени, либо нет. Если зависимость от времени отсутствует или является слабой (например, при выходе процесса на стационарный режим), то приходим к аналогу стационарного итерационного процесса (2.26), распараллелить который можно с высокой эффективностью потенциально близкой к 100%. Если же рассчитывается существенно нестационарный процесс, то все три базисные функции в параллельном алгоритме пересчитываются на каждом слое по времени и эффективность параллельного алгоритма зависит от типа краевой задачи (см. выше).

В случае многомерной краевой задачи в областях прямоугольной формы возможно эффективное использование базового параллельного алгоритма на этапах реализации итерационных или нестационарных схем с факторизованным оператором. В качестве примера можно привести решение многомерного уравнения Пуассона с помощью метода переменных направлений или решение многомерного уравнения теплопроводности с помощью локально-одномерных разностных схем (см. ниже п. 2.3, 2.4). Нетрудно показать, что эффективность получаемых здесь параллельных реализаций также может достигать 100%.

В случае систем уравнений вида (2.16), (2.17) можно воспользоваться алгоритмом параллельной матричной прогонки, который строится на изложенных выше принципах. Очевидно, что во многих случаях и здесь удаётся получить высокую эффективность распараллеливания. К тому же, в этом случае можно реализовать дополнительное распараллеливание на

общей памяти вычислителя в рамках многопоточной технологии (при условии, что вычислитель является мультитредовым устройством).

В заключение данного пункта можно сформулировать следующие выводы.

1. Рассмотренный базовый алгоритм параллельной прогонки обладает асимптотическим свойством, которое позволяет эффективно использовать его, как непосредственно, так и в комбинациях с другими методами.

2. Эффективность базового алгоритма прогонки составляет от 33 до 100% в зависимости от вычислительной сложности исходной задачи в скалярном случае и способа агрегирования параллельной прогонки с другими алгоритмами.

2.3 Параллельные итерационные методы решения уравнения Пуассона и стационарных схем экспоненциальной подгонки

В данном пункте кратко рассмотрим параллельные итерационные методы решения уравнения Пуассона и стационарных экспоненциальных схем на ортогональных и на нерегулярных сетках. Рассмотрим сначала методы для решения сеточного уравнения Пуассона. В п. 2.1, 2.2 были рассмотрены прямые методы решения этого уравнения на ортогональных сетках на основе преобразования Фурье и ленточного метода Гаусса. Альтернативой этим методам являются методы разностных функций Грина и разностных потенциалов [188, 200, 301-304]. Однако область применимости этих методов несколько ограничена, например, формой расчётной области (функция Грина может быть конструктивно построена лишь для ограниченного числа областей простой формы) и большими затратами по времени и оперативной памяти при расчётах на компьютере. Поэтому очень часто краевые задачи для линейных и квазилинейных эллиптических и параболических уравнений с различными видами граничных условий решаются на сетке с помощью итерационных методов.

По итерационным методам решения линейных уравнений имеется обширная литература [177, 188, 189, 193, 200-202, 209, 232, 236, 283, 305-337]. Большинство исследований, справочных и учебных пособий так или иначе ориентировано на применение параллельных вычислений. Особенно интересны в этом плане обобщающие накопленный опыт работы Дж. Ортеги [308, 322], В.В. Воеводина [312, 313], В.П. Ильина [232, 319, 324], Дж. Голуба [322, 329], Дж. Донгарры [320, 334], Й. Саада [330], Е.Е. Тыртышникова [335, 337] и других авторов. В 1970-1990-х годах сложились два мощных направления итерационных алгоритмов: методы разделения областей Шварца (Domain Decomposition Methods) [338-361] и многосеточные методы (Multigrid Methods) [212, 362-370]. Параллелизм этих методик был основной их особенностью и удачно вписался в развивающиеся параллельные платформы и технологии.

В настоящей работе были использованы отдельные разработки из указанного множества методов и алгоритмов. В начале работы для решения двумерного уравнения Пуассона на ортогональных сетках умеренного объёма были использованы прямой метод, комбинирующий параллельную прогонку и БПФ (см. [371]). Затем использовался известный $(\alpha - \beta)$ -алгоритм [372, 373] и метод симметричной верхней релаксации с красно-чёрным упорядочением [308]. Однако впоследствии предпочтение было отдано двум другим итерационным методам.

Первый из них это метод переменных направлений (см., например, [200, 283]), реализация которого базируется на параллельных алгоритмах прогонки, представленных в п. 2.2. Этот метод применяется в том случае, когда исходное сеточное уравнение Пуассона дополняется граничными условиями Дирихле, смешанными или периодическими, так что каждая локально одномерная задача, возникающая на итерациях, имеет хорошую обусловленность. Такая методика, но с меньшей эффективностью, также применялась и для реализации стационарной двумерной экспоненциальной схемы на ортогональной сетке.

В случае решения краевой задачи Неймана или плохо обусловленной краевой задачи произвольного вида было предложено использовать стабилизированные методы сопряжённых или бисопряжённых градиентов с предобуславливанием в виде неполного разложения Холецкого [330, 332, 334]. В случае сильно несимметричных матриц использовался переход от исходной системы $Ax = b$ к симметризованной системе $A^*Ax = A^*b$ [283]. В комбинации с техникой разбиения расчётной области на подобласти по числу распределённых узлов МВС эта методика позволила решить задачи, представленные в гл. 6, 7. При предобуславливании использовались идеи, предложенные в работах О.Ю. Милюковой (см., например, [374, 375]).

При переходе к решению задач в областях сложной формы на нерегулярных треугольных и тетраэдральных сетках методика на базе стабилизированных схем сопряжённых и бисопряжённых градиентов оказалась единственно возможной. Детали параллельных итерационных алгоритмов сходны с предложенными в [376-378]. При этом понадобилось развить собственные алгоритмы разбиения нерегулярных сеток по процессорам. Дело в том, что известные библиотеки разбиения графов сетки (например, METIS/PARMETIS [379-385]) стали доступны лишь с начала 2000х годов и с их помощью можно построить лишь предварительное разбиение, иногда содержащее вырожденные домены. Поэтому необходимо было создать собственные программы разбиения.

Основные идеи и подходы к реализации разбиения графов нерегулярных сеток автор почерпнул из работ М.В. Якобовского [386, 387] и Е.Н. Головченко [388]. При разбиении любого графа сетки помимо минимальной длины границ доменов необходимо учитывать суммарную вычислительную нагрузку на точки домена и соблюдать принцип компактности доменов. Разбиение сетки, удовлетворяющее этим требованиям, может быть построена только в рамках иерархического итерационного алгоритма [386-388].

В настоящей работе применялся *упрощённый алгоритм иерархического упорядочения*. Он состоит в следующем. В методе конечных объёмов (который используется в диссертации) сетка $\Omega = \{P_i, i = 1, \dots, N_p\}$ объединяет N_p пространственных точек и независимо от типа состоит из N_c

непересекающихся ячеек: $\Omega = \bigcup_{j=1}^{N_c} C_j$. Для каждой ячейки C_j , являющейся

выпуклым или невыпуклым многогранником, легко определить центр масс M_j . Условием, накладываемым на сетку, является попадание центра масс строго внутрь соответствующей ячейки. По центрам масс можно определить центр масс расчётной области и главные её оси, и ввести таким образом главную систему координат. Далее относительно этой системы координат можно упорядочить все центры масс ячеек по-координатно так, чтобы получить некоторое подобие прямоугольной структуры. Младшей координатой упорядочения должна быть та, вдоль которой область в главной системе координат имеет максимальный размер. В результате упорядочения

получим $\Omega = \bigcup_{k=1}^{N_c} \bar{C}_k$, $\bar{C}_k \equiv C_j$.

Далее можно начать разбиение множества ячеек сетки по вычислителям. Разделим количество ячеек на количество вычислителей p и получим величину $M = \frac{N_c}{p}$ – среднее число ячеек, обрабатываемое одним вычислителем. Теперь можно начать формировать домены.

Возьмём ячейку с номером 1 в рамках построенного упорядочения и добавим в домен с номером 1: $\bar{C}_1 \equiv \tilde{C}_1 \rightarrow \Omega_1$. Далее необходимо определить всех соседей первого уровня этой ячейки (желательно упорядочить их в направлении правого винта) и также включить их в домен Ω_1 . Затем необходимо найти соседей 2-го уровня, 3-го и т.д. Процесс формирования первого домена заканчивается, как только количество содержащихся в нём точек достигает M .

Далее приступаем к формированию домена с номером 2: Ω_2 . Для этого берём одну из оставшихся упорядоченных точек, находящуюся на расстоянии $\frac{d_1}{2}$ (d_1 – диаметр домена Ω_1) по младшей координате (если таковых нет, то берём с учётом других координат). Добавляем её в домен 2: $\bar{C}_k \equiv \tilde{C}_{M+1} \rightarrow \Omega_2$. Далее опять включаем её соседей 1-го, 2-го и последующих уровней в домен. Процесс заканчивается когда в домене Ω_2 будет M ячеек.

Процедура формирования доменов заканчивается, когда сформированы домены $\Omega_1, \dots, \Omega_{p-1}$. В последний домен Ω_p добавляем оставшиеся точки. Результирующее разбиение обладает двумя свойствами: количество точек в доменах $\Omega_1, \dots, \Omega_{p-1}$ одинаково, и они почти компактны. Домен Ω_p может содержать меньшее количество точек (если $N_C \neq M \cdot p$) и не является компактным. Для разрешения этой проблемы можно скорректировать алгоритм следующим образом. Можно взять в качестве $M = \frac{N_C}{p+k}$, где $k = 1, 2, \dots$ – некоторое небольшое число. Тогда можно построить разбиение, состоящее из p доменов с нужными свойствами, а оставшиеся $N_C - M \cdot p$ точек распределить между построенными доменами по принципу геометрической близости. При выполнении условия $p+k \ll N$ полученное итоговое разбиение будет почти равномерным, а домены будут компактными. Неравномерность распределения вычислительной загрузки по узлам сетки можно учесть в разбиении по доменам, если снабдить каждую ячейку весом, рассчитанным как математическое ожидание от весов точек, входящих в ячейку. Тогда формирование очередного домена заканчивается, если сумма весов ячеек достигает заданной расчётной величины.

Еще более продуктивный и надёжный алгоритм можно предложить для случая областей с особенностями. Например, пусть имеется область в виде двух шаров с тонкой и длинной перемычкой. Если построить в ней адаптивную к границе сетку и провести по центрам ячеек кривую Пеано (см.

например, [291]) толщины d , чуть меньшей толщины перемычки, то эта кривая покрывает все множество ячеек, причем, по перемычке пройдет один раз. Тогда достаточно упорядочить ячейки вдоль кривой Пеано и разделить их количество на p смежных непересекающихся и компактных в смысле Пеано множеств. Метод кривых Пеано также позволяет скорректировать неравномерность распределения вычислительной нагрузки по узлам сетки, если ввести веса ячеек.

Ещё одна проблема, которая возникла при решении задач микро- и наноэлектроники, это учёт многослойности расчётной области и многокомпонентности и/или многофазности математической модели. Дело в том, что в этом случае в каждом материале приходится решать свой набор уравнений для фиксированного подмножества неизвестных функций. В частности, в многослойной электронной структуре очень часто соседствуют друг с другом слои металла, полупроводника, диэлектрика и вакуума. Всеобъемлющей функцией, которая интегрирует структуру, является электрическое и/или магнитное поле. Однако уравнение, их описывающие, имеют специфику в каждом слое. К тому же, в слоях металла и полупроводника возникают движения заряженных и нейтральных частиц, в диэлектрике может сильно изменяться поляризация электрического поля, во всех трёх субстанциях может изменяться температура и механические напряжения. Соответственно в этих слоях появляются другие неизвестные функции, которые необходимо рассчитывать. Таким образом, при решении задач в неоднородной многослойной многокомпонентной среде необходимо сначала построить граф подобластей, затем построить в каждой подобласти базовую в общем случае нерегулярную сетку, состыкованную по границам, и далее решать задачу разбиения расчётной области по вычислителям.

В настоящей работе было предложено в подобном случае проводить расщепление по физическим процессам так, чтобы на каждом этапе решения задачи или на каждой итерации глобального итерационного процесса решалась подзадача для фиксированной группы неизвестных функций в

фиксированных подобластях расчётной области. При этом необходимо построить отдельное разбиение графа сетки для каждого такого этапа расчёта. Если границы подобластей, отвечающих различным компонентам структуры не изменяются в процессе расчёта, то такие разбиения строятся на начальном этапе решения задачи, и мы получаем *статическое многослойное разбиение* расчётной области. В противном случае разбиения придётся пересчитывать на каждом этапе заново и производить перераспределение узлов сетки по вычислителям, и мы получим *динамическое многослойное разбиение* расчётной области.

Построение многослойных разбиений расчётной области производится следующим образом. Сначала находится минимальный размер расчётной области. Для этого для каждого этапа расщепления производится подсчёт участвующих в нём подобластей. По этим данным определяется «минимальный» этап (затрагивающий наименьшее количество подобластей). Для него строится первое разбиение на p доменов указанным выше способом. В общем случае оно содержит только часть узлов сетки.

Затем среди оставшихся этапов опять определяется «минимальный». Если используемые на данном этапе подобласти не пересекаются с уже разбитыми подобластями, то множество составляющих их ячеек, присоединяется к уже построенным доменам по принципу геометрической близости. При этом сохраняется как граф начального разбиения, так и дополнительный граф. Если же подобласти частично пересекаются, то общие ячейки изымаются из обработки, но не из дополнительного графа.

Далее процедура повторяется вплоть до исчерпания этапов расщепления. В результате если их было K , то получаем такое же количество графов $G_p^{(k)}(\Omega) = \{\Omega_i^{(k)}, i=1, \dots, p\}$, $k=1, \dots, K$.

В гл. 6 предложенный подход был применён для численного решения задачи об электронной эмиссии из кремниевого катода реальной геометрии на нерегулярной треугольной сетке. Процедура расщепления содержала четыре этапа. На первом решалось уравнение Пуассона во всей расчётной

области, содержащей полупроводниковый катод, слои диэлектрика, металлические контакты и вакуумный слой. На втором этапе решалась задача туннелирования электронов через поверхность раздела кремний–вакуум. На третьем этапе решались квазигидродинамические уравнения в слое кремния. На четвёртом этапе решалось уравнение теплопроводности для слоёв кремния, диэлектрика и металлического контакта на диэлектрике.

Для реализации расчётов были построены три объёмных разбиения треугольной сетки. Минимальное разбиение использовалось в слое кремния. Среднее разбиение захватывало дополнительно диэлектрик и контакт на нём. Максимальное разбиение захватывало всю расчётную область. Дополнительно разбивалась граница раздела кремний–вакуум, составляющая эмиссионный слой. Такое статическое многослойное разбиение позволило решить задачу достаточно эффективно.

В заключение данного пункта отметим, что использованный алгоритм разбиения безусловно не оптимален и не является параллельным. В частности, в [388] предлагается выращивать домены из специально вычисленных «зародышей» в параллельном режиме. Однако в предложенном здесь алгоритме предполагается, что задача «развёртывается» по вычислителям иерархическим способом. То есть сначала распределяется по вычислителям базовая сетка, содержащая минимальное число узлов, достаточное лишь для адекватного представления геометрической модели расчётной области. Затем в параллельном режиме происходит измельчение сетки до заданного в расчёте размера. При этом исходные графы разбиений также дробятся в параллельно режиме и уточняются на границах. Именно это позволяет получить более эффективные и компактные разбиения.

2.4 Параллельная реализация нестационарных схем экспоненциальной подгонки

В данном пункте рассмотрим алгоритмы параллельной реализации нестационарных схем экспоненциальной подгонки и общий подход к

решению задачи, включающей уравнения различных типов. Безусловно, многие идеи уже были реализованы (см., например, [389, 390]). Однако с появлением очередной генерации МВС и новых вариантов численных методов всё приходится переосмысливать заново.

Ниже рассмотрим сначала численное решение задач на ортогональных сетках, а затем на нерегулярных треугольных и тетраэдральных сетках.

2.4.1 Параллельные алгоритмы решения нестационарных задач на ортогональных сетках

Рассмотрим сначала параллельные алгоритмы численного решения модельной начально-краевой задачи для трехмерного параболического уравнения общего вида в прямоугольной области $D = [0,1] \times [0,1] \times [0,1]$:

$$\frac{\partial U}{\partial t} = \sum_{\alpha=1}^3 \left[\frac{\partial}{\partial x_{\alpha}} \left(\sum_{\beta=1}^3 K_{\alpha\beta} \frac{\partial U}{\partial x_{\beta}} + E_{\alpha} U \right) + F_{\alpha} \frac{\partial U}{\partial x_{\alpha}} \right] - qU + f, \quad (2.27_1)$$

$$\mathbf{x} \in D, \quad 0 < t \leq t_{\max},$$

$$U(\mathbf{r}, 0) = U_0(\mathbf{r}), \quad (2.27_2)$$

$$\sum_{\alpha=1}^3 \left(\sum_{\beta=1}^3 K_{\alpha\beta} \frac{\partial U}{\partial x_{\beta}} \right) \cdot n_{\alpha} = -\eta(U - U_1), \quad \mathbf{r} \in \partial D. \quad (2.27_3)$$

Предположим сначала, что задача (2.27) линейная.

Задачу (2.27) будем решать на произвольной неравномерной сетке Ω по пространству и равномерной сетке по времени $\bar{\omega}_t$ по экспоненциальным схемам, предложенным в гл. 1. В случае недиагонального тензора \mathbf{K} выберем схему с весами (1.37) с экспоненциальной аппроксимацией пространственного оператора (1.29) при $\sigma = 0, 0.5, 1$. В случае диагонального тензора \mathbf{K} возьмём локально одномерную трёхэтапную схему (1.41) при $\sigma = 1$ или семиэтапную схему двуциклического расщепления (1.43).

В обоих случаях нашей целью был выбор схем пригодных для решения поставленной задачи с помощью МВС с распределённой архитектурой и по возможности достаточно экономичных. Обсудим детали этого выбора.

Явная схема (1.37₀) из первого семейства наиболее проста в реализации (в том числе параллельной) и экономична (то есть при ее использовании число арифметических действий Q необходимое для нахождения решения на очередном временном слое пропорционально количеству узлов пространственной сетки $N = \prod_{\alpha=1}^3 N_{\alpha}$). Наряду с этим, явная схема не является абсолютно устойчивой, и для проведения корректных вычислений необходимо соблюдать условие согласования шагов сетки вида $\tau \leq C_0 h^2$, что существенно снижает другие преимущества схемы.

Неявная схема (1.37₁) является более трудоемкой в реализации (особенно параллельной) и в общем случае не экономична. Однако она абсолютно устойчива, то есть вычисления по ней будут корректными при любых $\tau > 0$ и $h_{\alpha} > 0$, и асимптотически устойчива при выполнении условия $\tau \leq C_1 h$. При нахождении решения на очередном слое по времени в зависимости от выбранного метода (прямого или итерационного) и свойств тензора \mathbf{K} может потребоваться от $O(N \log_2 N)$ до $O(N^{7/3})$ арифметических действий. Отметим также, что при выполнении условия согласования шагов для явной схемы точность решений, полученных по явной и неявной схемам, практически совпадает.

Симметричная схема (1.37_{1/2}) по трудоемкости реализации близка к неявной, а по условию устойчивости аналогична явной схеме. Поэтому единственным ее преимуществом по сравнению с этими схемами является второй порядок точности по времени.

Неявная локально-одномерная схема (1.41) имеет первый порядок суммарной аппроксимации по времени и второй – по пространству. Условия устойчивости схемы (1.41) аналогичны условиям для неявной схемы (1.37₁). Схема (1.41) экономична и легко может быть реализована с помощью алгоритма параллельной прогонки на каждом основном и промежуточном этапе по времени.

Неявная схема двуциклического расщепления (1.43) позволяет повысить порядок суммарной аппроксимации по времени до второго. Условия её устойчивости в норме L_2 аналогичны условиям для неявной ЛОС (1.43), а в норме C – симметричной схеме (1.37_{1/2}). Схема (1.43) экономична и реализуется также с помощью параллельного алгоритма прогонки.

Очевидно, что у каждой из перечисленных схем имеется своя ниша, которая оправдывает её использование. В частности, схемы (1.37) следует рассматривать в случае недиагонального тензора \mathbf{K} , а локально-одномерные схемы – в случае диагонального. Схемы первого порядка по времени вполне подходят, если задача имеет стационарное решение. Схемы второго порядка по времени необходимо использовать в том случае, если моделируемый процесс является существенно нестационарным. Явная схема имеет два преимущества: она очень точно характеризует конечную скорость распространения возмущений и является эталоном распараллеливания.

В работе [А30] был проведён подробный анализ алгоритмов распараллеливания указанных выше схем для случая монотонного сеточного оператора L_h . Ниже рассмотрим некоторые детали этого анализа, ограничившись двумя схемами – явной (1.37₀) и неявной ЛОС (1.41). Мотивацией для этого послужило то обстоятельство, что параллельная реализация неявной и симметричной схем (1.37) на каждом слое по времени аналогична решению сеточного уравнения Пуассона с помощью параллельного варианта итерационного метода сопряженных градиентов с предобусловливателем в виде неполного разложения Холецкого (см. п. 2.3). Параллельная реализация схемы двуциклического расщепления (1.43) аналогична реализации неявной ЛОС (1.41).

Для реализации выбранных схем на МВС с распределённой архитектурой применялся принцип геометрического параллелизма, который предполагает проведение декомпозиции расчетной области на равные (по числу узлов сетки) подобласти соответственно числу процессоров.

Фактически при этом разбивается индексное пространство узлов сетки Ω , которое в данном случае можно записать в виде

$$I = \{(i_1, i_2, i_3), i_1 = 0, \dots, N_1, i_2 = 0, \dots, N_2, i_3 = 0, \dots, N_3\} \equiv I_1 \times I_2 \times I_3.$$

Учитывая геометрические свойства исходной расчетной области (а именно, ее прямоугольность), можно применить декомпозицию трех типов: линейную, квадратную и кубическую. Первая предполагает разбиение области по одной из трех координат, вторая – по двум координатам, третья – по трем (примеры различных типов разбиения показаны на рис. 2.3). В соответствии с типами декомпозиции возникают три различных алгоритма распараллеливания, а также три типа топологии связей между отдельными вычислителями, которые условно называют «линейка», «квадратная решетка» и «кубическая решетка» соответственно типу декомпозиции.

Поясним сказанное на примере *параллельной реализации явной схемы* (1.37₀). При линейном разбиении области по одной из координат (например, по координате x_2 , как показано на рис. 2.3а) k -ый вычислитель рассчитывает решение на верхнем слое по времени в диапазоне узлов

$$I^{(k)} = \{(i_1, i_2, i_3), i_1 = 0, \dots, N_1, i_2 = i_{20}^{(k)}, \dots, i_{21}^{(k)}, i_3 = 0, \dots, N_3\} \equiv I_1 \times I_2^{(k)} \times I_3.$$

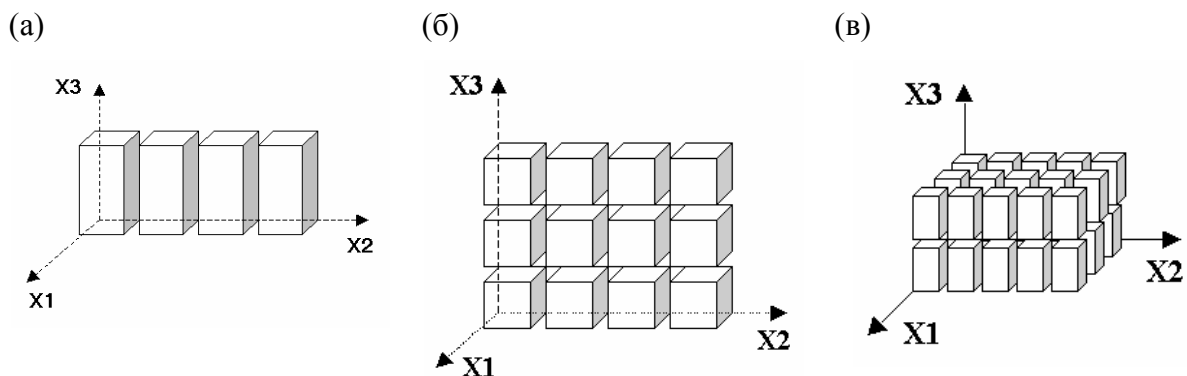


Рисунок 2.3. Разбиение расчетной области по одной (а), двум (б) и трем координатам (в).

Для получения равномерной загрузки вычислителей количества точек $N^{(k)} = (N_1 + 1)(i_{21}^{(k)} - i_{20}^{(k)} + 1)(N_3 + 1)$ в диапазонах $I^{(k)}$ должны быть примерно

одинаковы. Расчетные формулы схемы (1.37₀) для вычисления решения на верхнем слое выглядят следующим образом:

$$U_{h,i_1,i_2,i_3}^{j+1} = U_{h,i_1,i_2,i_3}^j + \tau \left(L_{h,i_1,i_2,i_3}^j U_{h,i_1,i_2,i_3}^j + f_{h,i_1,i_2,i_3}^j \right), \quad (i_1, i_2, i_3) \in I^{(k)}. \quad (2.28)$$

Топология связей между вычислителями в этом случае будет линейной, поскольку в формуле (2.28) для процессора k участвуют значения функции U_h в точках $(i_1, i_{20}^{(k)} - 1, i_3) \equiv (i_1, i_{21}^{(k-1)}, i_3)$ и $(i_1, i_{21}^{(k)} + 1, i_3) \equiv (i_1, i_{20}^{(k+1)}, i_3)$, лежащие в области данных вычислителей $(k-1)$ и $(k+1)$. Перед началом очередного шага вычислений по формулам (2.28) на вычислителе k необходимо получить требующиеся значения U_h от соседних вычислителей. Для этого лучше всего произвести один групповой обмен данными для всех индексов i_1, i_3 . Этот обмен легко организуется в рамках линейной топологии. Количество передаваемых данных одним вычислителем в общем случае равно $M^{(k)} = 2(N_1 + 1)(N_3 + 1) \approx 2N_1N_3$ и не зависит от количества вычислителей. В случае равного количества узлов сетки по различным направлениям ($N_1 = N_2 = N_3 = \sqrt[3]{N}$) величина $M^{(k)} \approx 2N^{2/3}$.

В случае "квадратного" разбиения области, пример которого показан на рис. 2.3б, формулы (2.28) остаются в силе, но изменяются диапазон индексов $I^{(k)}$ и количество точек $N^{(k)}$, обрабатываемых вычислителем k :

$$I^{(k)} = \{(i_1, i_2, i_3), i_1 = 0, \dots, N_1, i_2 = i_{20}^{(k)}, \dots, i_{21}^{(k)}, i_3 = i_{30}^{(k)}, \dots, i_{31}^{(k)}\} \equiv I_1 \times I_2^{(k)} \times I_3^{(k)},$$

$$N^{(k)} = (N_1 + 1)(i_{21}^{(k)} - i_{20}^{(k)} + 1)(i_{31}^{(k)} - i_{30}^{(k)} + 1).$$

Соответственно изменяется и топология обменов между вычислителями, которые объединяются теперь в решетку.

Для определения соседей вычислителя k , с которыми ему придется обмениваться данными, можно ввести двойную нумерацию вычислителей и установить взаимно однозначное соответствие исходных и двойных номеров:

$$k = p_3 k_2 + k_3, \quad k_2 = 0, \dots, p_2 - 1, \quad k_3 = 0, \dots, p_3 - 1,$$

$$k_2 = \lfloor k / p_3 \rfloor, \quad k_3 = k \bmod p_3, \quad k = 0, \dots, p - 1, \quad p = p_2 p_3.$$

Здесь p – общее число вычислителей, связанных в решетку $p_2 \times p_3$. В этих обозначениях вычислитель $k \leftrightarrow (k_2, k_3)$ перед началом очередного шага схемы будет обмениваться недостающими данными с четырьмя соседями $k^{left} \leftrightarrow (k_2 - 1, k_3)$, $k^{right} \leftrightarrow (k_2 + 1, k_3)$, $k^{down} \leftrightarrow (k_2, k_3 - 1)$, $k^{up} \leftrightarrow (k_2, k_3 + 1)$ в рамках топологии "решетка". Размер передаваемых данных $M^{(k)} \approx \frac{2N_1N_2}{p_2} + \frac{2N_1N_3}{p_3}$ теперь зависит от p . При равном числе узлов сетки по различным направлениям и квадратной решетке ($p_2 = p_3 = \sqrt{p}$) величина $M^{(k)} \approx 4N^{2/3} p^{-1/3}$.

В случае "кубического" разбиения области (см. пример на рис. 2.3в) также получим расчетные формулы (2.28), в которых

$$I^{(k)} = \{(i_1, i_2, i_3), i_1 = i_{10}^{(k)}, \dots, i_{11}^{(k)}, i_2 = i_{20}^{(k)}, \dots, i_{21}^{(k)}, i_3 = i_{30}^{(k)}, \dots, i_{31}^{(k)}\} \equiv I_1^{(k)} \times I_2^{(k)} \times I_3^{(k)},$$

$$N^{(k)} = (i_{11}^{(k)} - i_{10}^{(k)} + 1)(i_{21}^{(k)} - i_{20}^{(k)} + 1)(i_{31}^{(k)} - i_{30}^{(k)} + 1).$$

Для определения соседей и обмена с ними данными вводится новая тройная нумерация вычислителей:

$$k = p_2 p_3 k_1 + p_3 k_2 + k_3, \quad k_1 = 0, \dots, p_1 - 1, \quad k_2 = 0, \dots, p_2 - 1,$$

$$k_3 = 0, \dots, p_3 - 1, \quad k_1 = [k / (p_2 p_3)], \quad k_2 = [(k - p_2 p_3 k_1) / p_3],$$

$$k_3 = (k - p_2 p_3 k_1) \bmod p_3, \quad k = 0, \dots, p - 1, \quad p = p_1 p_2 p_3.$$

В соответствии с ней каждый вычислитель имеет в общем случае 6 соседей, с которыми обменивается необходимыми данными в начале каждого шага схемы. Размер передаваемых данных $M^{(k)} \approx \frac{2N_1N_2}{p_1 p_2} + \frac{2N_1N_3}{p_1 p_3} + \frac{2N_2N_3}{p_2 p_3}$. При равном числе узлов сетки по различным направлениям и равномерной кубической решетке ($p_1 = p_2 = p_3 = \sqrt[3]{p}$) $M^{(k)} \approx 6N^{2/3} p^{-2/3}$.

Оценим эффективность рассмотренных трех вариантов параллельного алгоритма. Для этого заметим, что в последовательном варианте алгоритм расчета по явной схеме на каждом временном шаге имеет арифметическую

сложность $Q_1 = C_1 N$. При параллельном выполнении получаем соответственно величины

$$Q_p^{(1)} \approx C_1 \frac{N}{p} + C_2 \cdot 2N_1 N_3, \quad Q_p^{(2)} \approx C_1 \frac{N}{p} + C_2 \cdot \left(2N_1 \frac{N_2}{p_2} + 2N_1 \frac{N_3}{p_3} \right),$$

$$Q_p^{(3)} \approx C_1 \frac{N}{p} + C_2 \cdot \left(2 \frac{N_1 N_2}{p_1 p_2} + 2 \frac{N_1 N_3}{p_1 p_3} + \frac{N_2 N_3}{p_2 p_3} \right),$$

где C_2 – (как и выше) отношение скорости передачи данных к скорости вычислений. Ускорение в этих трёх случаях выражаются формулами

$$S_p^{(1)} \approx \frac{p}{1 + 2 \frac{C_2}{C_1} \frac{p}{N} N_1 N_3} = \frac{p}{1 + 2 \frac{C_2}{C_1} \frac{p}{N_2}},$$

$$S_p^{(2)} \approx \frac{p}{1 + 2 \frac{C_2}{C_1} \frac{p}{N} \left(\frac{N_1 N_2}{p_2} + \frac{N_1 N_3}{p_3} \right)} = \frac{p}{1 + 2 \frac{C_2}{C_1} \left(\frac{p_3}{N_3} + \frac{p_2}{N_2} \right)}, \quad (2.29)$$

$$S_p^{(3)} \approx \frac{p}{1 + 2 \frac{C_2}{C_1} \frac{p}{N} \left(\frac{N_1 N_2}{p_1 p_2} + \frac{N_1 N_3}{p_1 p_3} + \frac{N_2 N_3}{p_2 p_3} \right)} = \frac{p}{1 + 2 \frac{C_2}{C_1} \left(\frac{p_3}{N_3} + \frac{p_2}{N_2} + \frac{p_1}{N_1} \right)}.$$

Анализ формул (2.29) показывает, что при выполнении условий $p_\beta \ll N_\beta$ ($\beta = 1, 2, 3$) эффективность рассмотренных трех алгоритмов близка к 100%. На практике реальная эффективность алгоритмов зависит от качества сети МВС, схемы обменов и количества вычислителей (фактически $C_2 = C_2(p)$). При прочих равных условиях использование линейной топологии при большом количестве вычислителей будет менее эффективно, чем использование топологий типа «решетка», поскольку у последних размер передаваемых данных снижается с ростом количества вычислителей.

Рассмотрим кратко *параллельную реализацию неявной ЛОС* (1.41). Для этого также можно использовать три типа разбиения расчетной области и три типа топологии межпроцессорных связей.

При линейном разбиении области, например, по координате x_2 , получается следующий параллельный алгоритм. Для вычисления решения на

новом временном слое каждый процессор последовательно решает три одномерные задачи:

$$\left(E - \tau L_{h,\alpha}^{j+\alpha/3}\right) U_h^{j+\alpha/3} = U_h^{j+(\alpha-1)/3} + \frac{\tau}{3} f_h^{j+1}, \quad \alpha = 1, 2, 3, \quad (2.30)$$

в своем диапазоне индексов $I^{(k)}$. При этом оказывается, что первый и третий этапы ЛОС можно реализовать независимо от данных на других процессорах и использовать для этого последовательный алгоритм прогонки. На втором этапе ЛОС данные оказываются распределенными между вычислителями. Поэтому на данном этапе необходимо использовать параллельный алгоритм прогонки. Он применяется по индексу i_2 для всех фиксированных i_1 и i_3 .

При использовании этого алгоритма возникают обмены данными, связанные с формированием массивов коэффициентов "коротких задач" (количество которых примерно равно $N_1 N_3$), а также при передаче значений решения этих задач на все процессоры (см. п. 2.3). В обоих случаях обмены производятся либо в рамках топологии "звезда" (обмены всех вычислителей с вычислителем-мастером), либо в рамках топологии "клика" (обмены "каждый с каждым") (Заметим, что линейная топология при такой организации обменов фактически не используется, однако она лежит в основе разбиения области.).

При использовании стандарта коммуникаций MPI лучше всего использовать функцию "коллективное суммирование" (MPI_Reduce или MPI_Allreduce) для сбора информации со всех процессов и функцию "разбрызгивания" (MPI_Broadcast) для распределения информации по всем процессам. Количество передаваемых данных с одного вычислителя в данном случае равно $M^{(k)} = O(N_1 N_3 p)$ и растет с увеличением количества процессов. При равном числе узлов сетки по различным направлениям $M^{(k)} = O(N^{2/3} p)$.

В случае "квадратного" разбиения области, например, по координатам x_2, x_3 , первый этап схемы реализуется с помощью последовательной

прогонки, второй и третий – с помощью параллельной. Обмены данными между вычислителями на каждом параллельном этапе организуются описанным выше способом. Общее количество передаваемых данных (по двум параллельным этапам) равно $M^{(k)} = O\left(N_1 N_2 \frac{p_3}{p_2} + N_1 N_3 \frac{p_2}{p_3}\right)$ или $M^{(k)} = O(N^{2/3})$ – при равном количестве узлов сетки по различным направлениям и квадратной решетке.

В случае ”кубического” разбиения области все этапы схемы реализуются с помощью параллельного алгоритма прогонки. Обмены данных производятся с помощью коллективных процедур на каждом этапе. Общее количество передаваемых данных с одного вычислителя равно $M^{(k)} = O\left(\frac{N_1 N_2 p_3}{p_1 p_2} + \frac{N_1 N_3 p_2}{p_1 p_3} + \frac{N_2 N_3 p_1}{p_2 p_3}\right)$. При равном количестве узлов сетки и количестве вычислителей по различным направлениям $M^{(k)} = O(N^{2/3} p^{-1/3})$ и убывает с увеличением p .

Оценим эффективность рассмотренных трех вариантов алгоритма. Для этого заметим, что в последовательном варианте алгоритм расчета по неявной ЛОС на каждом временном шаге имеет арифметическую сложность $Q_1 \approx (C_1 + 3C_2)N$. Здесь C_1 – количество арифметических операций, связанное с вычислением коэффициентов уравнений в одном узле пространственной сетки, C_2 – количество операций, связанное с вычислениями по алгоритму прогонки на каждом этапе схемы, приходящееся на один узел сетки. На практике обычно выполняется соотношение $C_1 \gg C_2$.

При параллельной реализации на МВС с p вычислителями получаем следующие оценки арифметической сложности $Q_p^{(\alpha)}$ ($\alpha = 1, 2, 3$):

$$\begin{aligned}
Q_p^{(1)} &\approx (C_1 + 2C_2) \frac{N}{p} + C_2 N_1 N_3 \left(3 \frac{N_2}{p} + 2p \right) + C_3 10 N_1 N_3 p = \\
&= \frac{N}{p} \left(C_1 + 5C_2 + (2C_2 + 10C_3) \frac{p^2}{N_2} \right), \\
Q_p^{(2)} &\approx \frac{N}{p} \left(C_1 + 7C_2 + (2C_2 + 10C_3) \left(\frac{p_2^2}{N_2} + \frac{p_3^2}{N_3} \right) \right), \\
Q_p^{(3)} &\approx \frac{N}{p} \left(C_1 + 9C_2 + (2C_2 + 10C_3) \left(\frac{p_1^2}{N_1} + \frac{p_2^2}{N_2} + \frac{p_3^2}{N_3} \right) \right).
\end{aligned}$$

Здесь константа C_3 характеризует относительную скорость передачи данных.

Для ускорения получаем следующие оценки:

$$\begin{aligned}
S_p^{(1)} &\approx \frac{p}{\left(\frac{C_1 + 5C_2}{C_1 + 3C_2} + \frac{2C_2 + 10C_3}{C_1 + 3C_2} \frac{p^2}{N_2} \right)}, \\
S_p^{(2)} &\approx \frac{p}{\left(\frac{C_1 + 7C_2}{C_1 + 3C_2} + \frac{2C_2 + 10C_3}{C_1 + 3C_2} \left(\frac{p_2^2}{N_2} + \frac{p_3^2}{N_3} \right) \right)}, \\
S_p^{(3)} &\approx \frac{p}{\left(\frac{C_1 + 9C_2}{C_1 + 3C_2} + \frac{2C_2 + 10C_3}{C_1 + 3C_2} \left(\frac{p_1^2}{N_1} + \frac{p_2^2}{N_2} + \frac{p_3^2}{N_3} \right) \right)}.
\end{aligned} \tag{2.31}$$

Анализируя (2.31) в предположениях $C_1 \sim C_2$ (наихудшая ситуация) и

$p_\beta^2 \ll N_\beta$ ($\beta = 1, 2, 3$) получаем оценки для ускорения $S_p^{(\alpha)}$ и эффективности

$E_p^{(\alpha)}$ приближенно равные $\frac{4p}{6}$, $\frac{4p}{8}$, $\frac{4p}{10}$ и 67, 50, 40 % для $\alpha = 1, 2, 3$.

Сравнивая алгоритмы параллельной реализации явной схемы (1.37) и неявной ЛОС (1.41), можно сделать вывод, что первые существенно лучше.

Однако учитывая ограничения на шаг по времени для явной схемы, в реальных расчётах при одинаковых пространственных размерах задачи неявная ЛОС выигрывает по основному критерию – времени расчётов до конкретного момента t_{\max} .

В [А30] были также проанализированы параллельные реализации схемы двуциклического расщепления (1.43). Они оказались чуть менее эффективными (соответствующие оценки ускорения и эффективности составили $\frac{7p}{11}, \frac{7p}{15}, \frac{7p}{19}$ и 64, 47, 37 % для $\alpha = 1, 2, 3$), чем алгоритмы для неявной ЛОС ввиду того, что схема (1.43) содержит семь этапов, шесть из которых могут быть параллельными. Однако, так как схема (1.43) имеет второй порядок точности по времени, в ней можно увеличить шаг τ таким образом, чтобы добиться существенного сокращения общего времени расчётов по сравнению с неявной ЛОС.

Приведём результаты тестовых расчётов, полученных в [А30] и проведённых по явной схеме (1.37₀) и неявной ЛОС (1.41) на сетках, указанных в Таблице 2.1. Расчёты проводились на однородной вычислительной системе МВС-1000М в МСЦ РАН, имевшей 768 одноядерных процессоров. Результаты расчетов представлены на рисунках 2.4-2.8. Проанализируем приведенные данные.

Таблица 2.1. Конфигурации расчетных сеток.

Номер сетки	1	2	3
Число узлов	100x100x100	200x200x200	300x300x300

Первая серия расчетов была проведена по **явной схеме** (рис. 2.4, 2.5) для трех обсуждавшихся выше типов разбиения области и трех сеток. Расчеты в целом выявили высокую эффективность распараллеливания. Вместе с тем были обнаружены следующие тенденции, которые необходимо учитывать при решении конкретных задач.

Во-первых, реальная эффективность распараллеливания тем выше, чем больше узлов расчетной сетки попадает на процессор, то есть для более подробной сетки загрузка процессоров получается более равномерной.

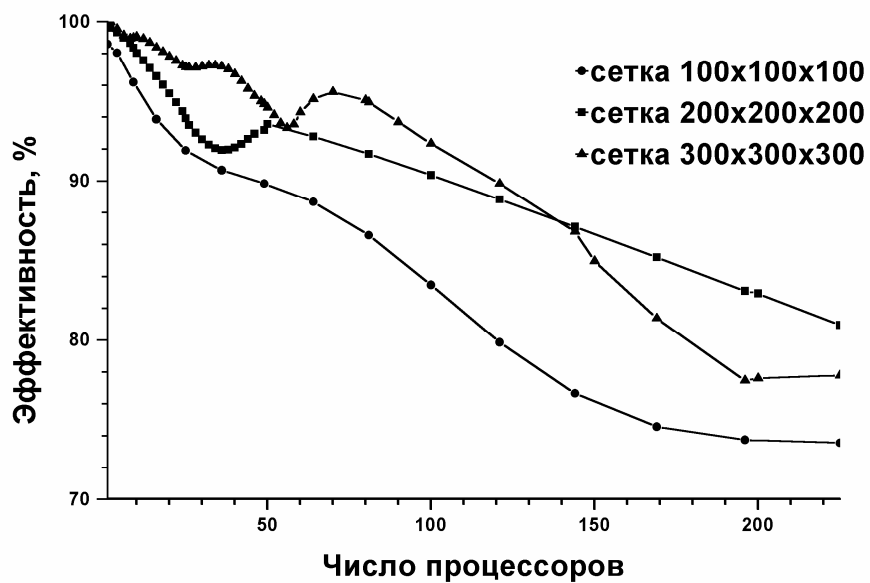
Во-вторых, эффективность при линейном разбиении ниже, чем на квадратной или кубической решетке, что определяется уменьшением

накладных расходов при пересылках с ростом числа процессоров на конфигурациях типа «решетка». Преимущества кубической решетки по сравнению с квадратной проявляются лишь при умеренном числе процессоров. Это связано с тем, что количество обменов для кубической решетки больше, чем для квадратной, а также с тем, что при большом числе процессоров характеристики МВС, на которой проводились расчеты, заметно ухудшаются. Однако при очень больших размерах сетки ситуация должна измениться в пользу кубической решетки вследствие того, что уменьшение размера пересылаемых данных с ростом числа процессоров происходит для этой топологии существенно быстрее.

В-третьих, применение линейной топологии сильно ограничено числом точек по одному из направлений (на практике, можно брать число процессоров не более, чем $N_\alpha/2$). Более гибкими в этом смысле оказываются «квадратная» и «кубическая» решетки. Однако при их использовании следует следить за тем, чтобы величины N_α/p_α были примерно одинаковы. На сетке с одинаковым числом узлов по всем направлениям это требование можно интерпретировать как уменьшение коэффициента «неквадратности» решетки.

В-четвертых, при проведении массовых расчетов на сетке фиксированного размера следует определить оптимальные топологию и число процессоров, при которых задача решается максимально быстро и эффективно. Например, для сеток 2 (3) оптимальной конфигурацией оказалась квадратная решетка процессоров $14 \times 14 = 196$ ($19 \times 19 = 361$), дающая ускорение 167.6 (327.2) и эффективность 85.5 (90.6) %.

(a)



(б)

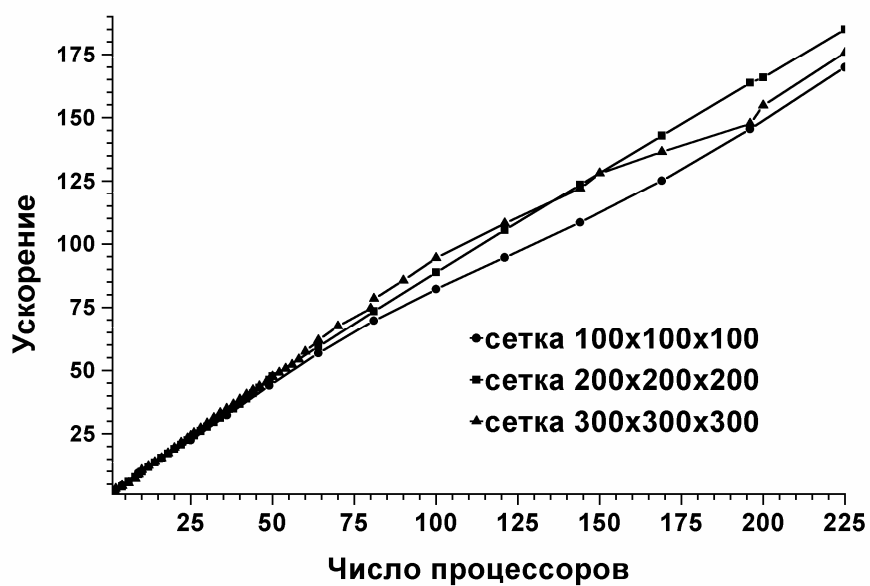
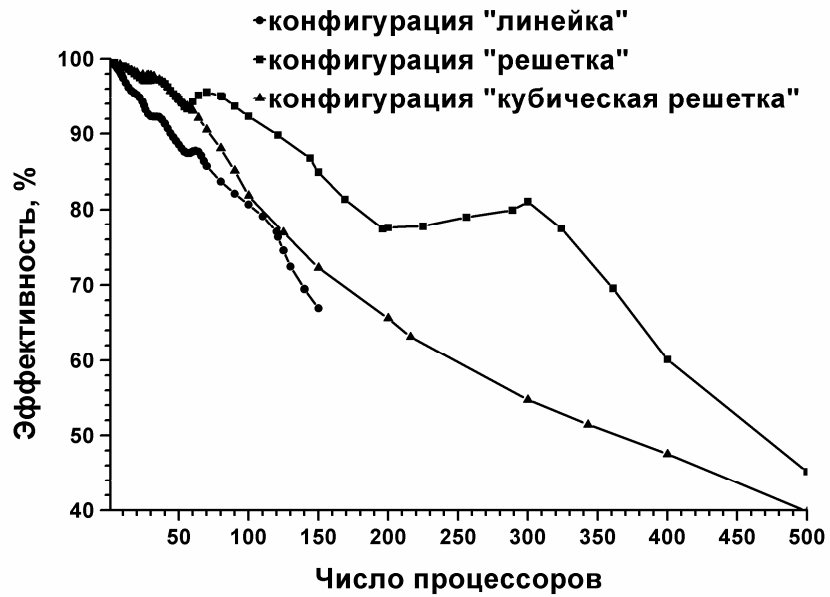


Рисунок 2.4. Эффективность (а) и ускорение (б) в расчетах по явной схеме на различных сетках для топологии “решетка”.

(а)



(б)

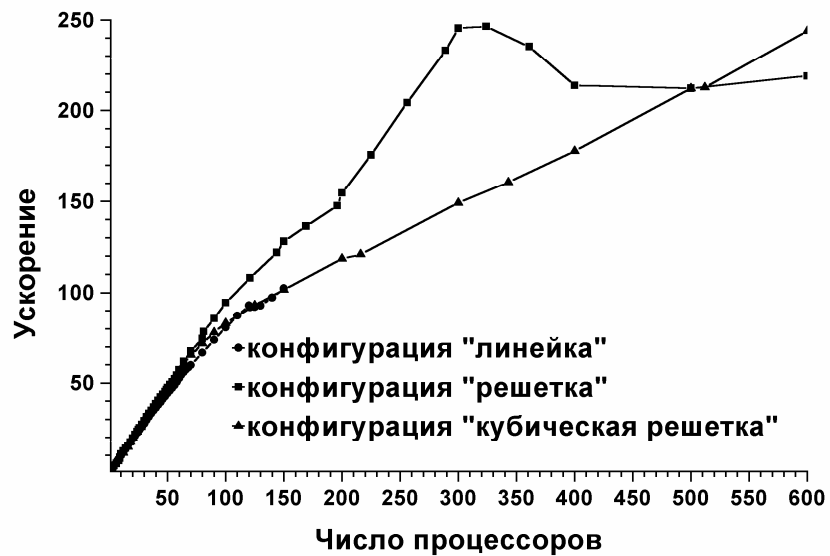


Рисунок 2.5. Эффективность (а) и ускорение (б) на сетке 3 для различных топологий обменов в расчетах по явной схеме.

Вторая серия расчетов была проведена по *неявной ЛОС* (рис. 2.6-2.8). При их анализе можно сделать следующие выводы.

Во-первых, эффективность расчетов с ростом числа процессоров здесь падает быстрее, чем в случае явной схемы. Это связано с тем, что накладные расходы (отношение суммарного времени обменов данными к общему времени расчета в %), связанные с обменами данных здесь растут быстрее и могут быть близки к 100% при большом числе процессоров (см. рис. 2.6).

Во-вторых, ввиду более сложной и объемной процедуры обменов, преимущества кубической решетки по сравнению с «линейкой» и «квадратной» решеткой процессоров проявляются сразу во всем диапазоне процессорных конфигураций (от 1 до 500), несмотря на ухудшение характеристик МВС при большом числе процессоров.

В-третьих, при малом и умеренном числе процессоров (1-100) очень сильно проявляется фактор «неквадратности» решетки (см. рис. 2.6, пики на графиках накладных расходов), который следует учитывать в расчетах.

В-четвертых, по сравнению с явной схемой эффективность расчетов по неявной ЛОС оказывается в 2-3 раза ниже. Учитывая это, а также различие расчетных формул, получаем, что при одинаковых: размере пространственной сетки, шаге по времени и числе процессоров неявный алгоритм работает в 1.5-3 раза медленнее. Однако, если рассчитывается стационарное решение, то шаг в неявной схеме можно взять в N_α раз больший, что в десятки раз окупает ее более низкую эффективность распараллеливания.

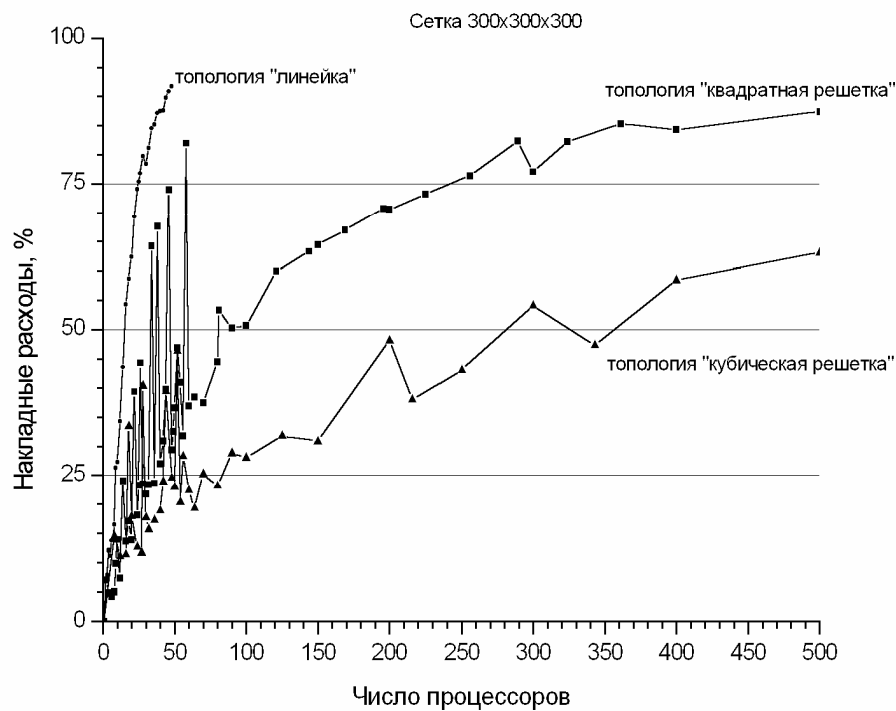
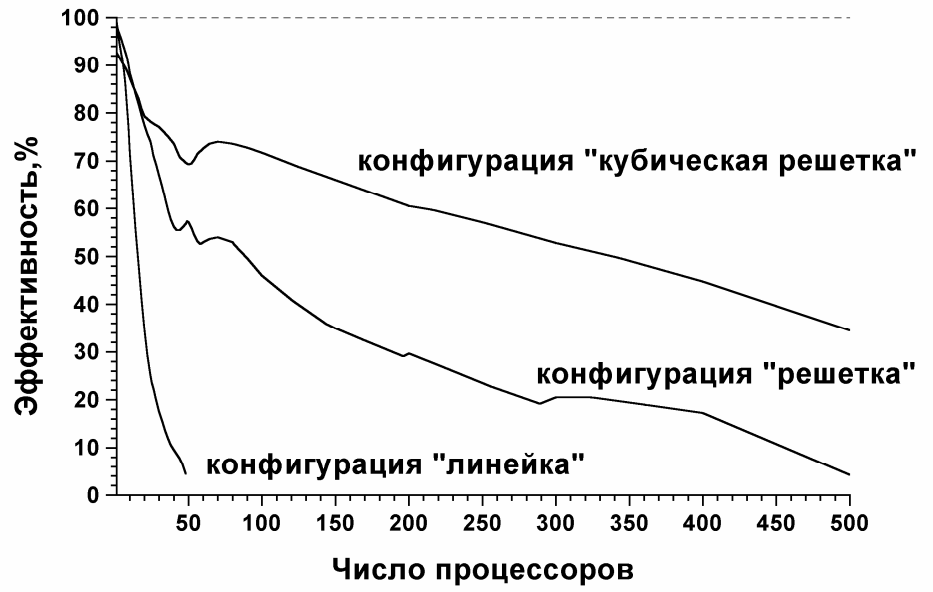


Рисунок 2.6. Доля накладных расходов по обмену данными между процессорами во времени решения задачи.

(a)



(б)

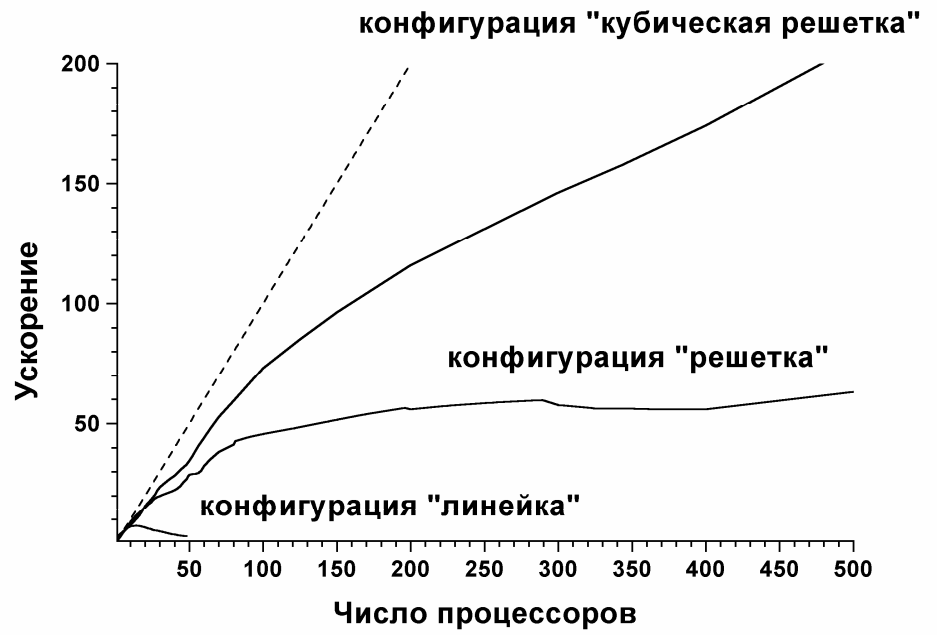
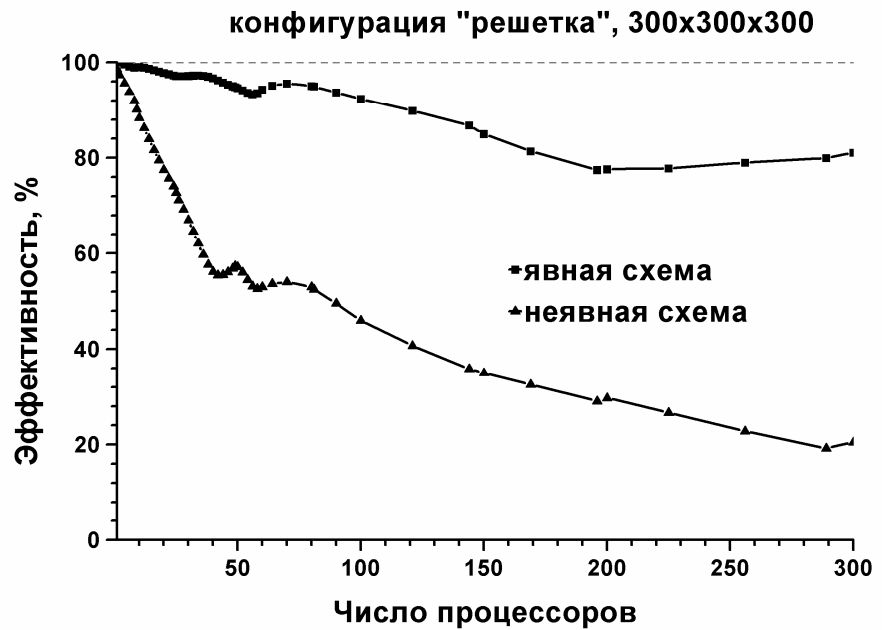


Рисунок 2.7. Эффективность (а) и ускорение (а) на сетке 3 для различных топологий обменов в расчетах по неявной ЛОС.

(a)



(б)

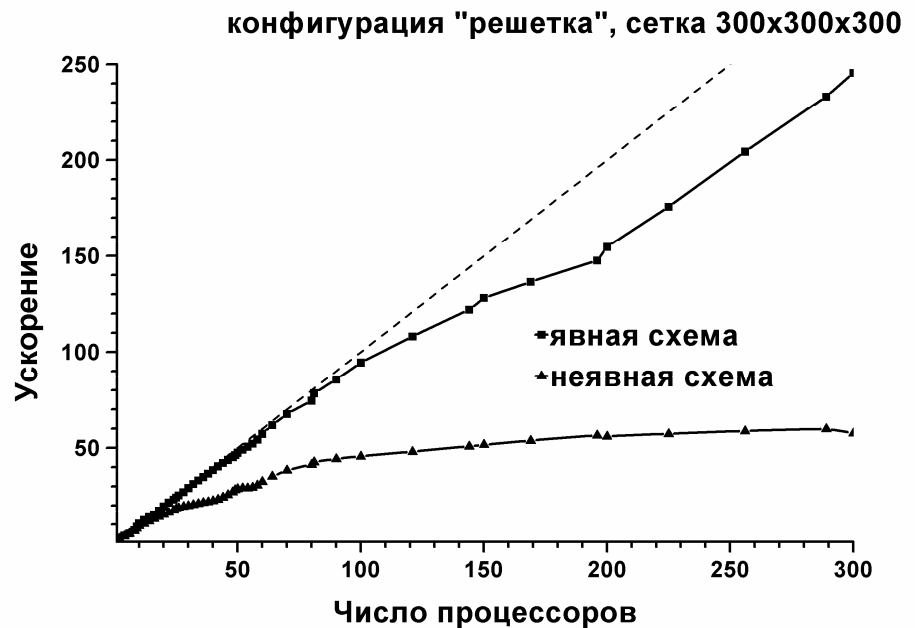


Рисунок 2.8. Кривые эффективности (а) и ускорения (б) для явной и неявной схем.

Суммируя выводы данных тестирования можно заключить следующее.

1) При расчетах на МВС стационарных и медленно меняющихся со временем нестационарных решений краевых задач для параболических уравнений на грубых сетках следует использовать явные схемы. В этом случае условие устойчивости схемы не является обременительным, а эффективность ее параллельной реализации максимальна.

2) При расчетах на МВС стационарных и слабо нестационарных решений на подробной сетке достаточно использовать неявные ЛОС первого порядка точности по времени. При этом необходимо следить, чтобы выполнялось лишь условие их асимптотической устойчивости.

3) При расчетах на МВС существенно нестационарных решений следует использовать неявные схемы двуциклического расщепления или аналогичные им, имеющие второй порядок точности по времени. При этом шаг по времени должен определяться необходимой точностью решения и удовлетворять условию асимптотической устойчивости.

4) Во всех случаях выбор конкретного разбиения области, топологии и способа межпроцессорных обменов определяется соотношением размеров расчетной и «процессорной» сеток. При этом следует иметь в виду, что для фиксированной расчетной сетки всегда существуют оптимальные топология обменов и количество процессоров, при которых достигается скорейшее решение задачи в целом.

В заключение пункта сделаем несколько замечаний.

Во-первых, при решении начально-краевых задач вида (2.27) для квазилинейных уравнений параболического типа по экспоненциальным схемам (1.37), (1.41) и (1.43) в диссертации предложены два подхода. Первый из них состоит в использовании полуявных схем, когда нелинейность операторов берется с предыдущего слоя по времени. Такой подход приемлем для расчёта медленных процессов и/или при выходе искомой функции на стационар. В этом случае при параллельной реализации используются алгоритмы, рассмотренные выше. Второй подход связан с использованием полностью неявных алгоритмов. В этом случае на каждом шаге по времени приходится организовывать итерационный процесс по нелинейности, аналогичный (1.38). Выбор простых итераций или итераций по Ньютону зависит от характера нелинейности и трудоёмкости вычисления оператора перехода с учётом производных. Распараллеливание такого процесса также возможно в рамках алгоритмов, предложенных выше.

Во-вторых, при численном анализе выбранных в диссертации прикладных задач приходится иметь дело с системой уравнений вида (2.27) как стационарных, так и нестационарных. В этом случае, как правило, удаётся привести систему к такому виду, в котором каждое уравнение рассчитывается во всей расчётной области, так что процедуру её декомпозиции на домены, обрабатываемые каждый одним вычислителем, достаточно выполнить один раз в начале расчёта. При этом производится расщепление по физическим процессам, в котором на каждом шаге по времени стационарные уравнения типа Пуассона рассчитываются отдельно, а полученные решения используются в процедуре расчёта решений нестационарных уравнений на новом слое. Иногда для этого требуется организовать внешний итерационный процесс по нелинейности. Нестационарные уравнения, наоборот, чаще всего решаются совместно (то есть в векторном виде), чтобы избежать схемного запаздывания и нарушения консервативности численного алгоритма в целом.

2.4.2 Технология решения задач на нерегулярных сетках

В данном пункте кратко рассмотрим параллельную технологию численного решения нестационарных задач в областях сложной формы на нерегулярных треугольных и тетраэдральных сетках большого объёма. В общих чертах она была выработана участниками семинара ИММ РАН по параллельным вычислениям и была отражена в целой серии работ. Наиболее полно она сформулирована в [391].

Как и выше, будем предполагать, что в расчётной области нерегулярной формы необходимо решить систему, состоящую из нескольких параболических и эллиптических уравнений общего вида с соответствующими начальными и граничными условиями. При этом каждое из уравнений необязательно задано во всей расчётной области. Алгоритм решения задачи базируется на экспоненциальных и/или обычных схемах на нерегулярных треугольных (тетраэдральных) сетках и расщепляется по

физическим процессам, проходящим в отдельных подобластях расчётной области. Рассмотрим основные этапы решения задачи.

Первый этап решения задачи предполагает создание геометрической модели расчётной области. Для этих целей в диссертации используются граничные геометрические модели, в которых каждая область (подобласть) определяется с помощью граничной кривой (поверхности) в пространстве двух (трёх) переменных. Граница области (подобласти) задаётся с помощью множества смежных частей некоторой кривой (поверхности), заданных в общем случае двумерными (трёхмерными) сплайнами. В простейшем случае двумерная область задаётся замкнутой ломаной, трёхмерная область – набором плоских многогранников. Каждой области (подобласти) приписывается набор атрибутов задачи, который указывает на количество и тип уравнений, решаемых в данной области (подобласти), свойства коэффициентов уравнений, начальные и граничные условия. Данный этап решения не подвергается, как правило, распараллеливанию, за исключением тех случаев, когда геометрическая модель возникает в результате импорта из параллельных САД-систем и является очень объёмной. На этом же этапе строится граф смежности всех областей (подобластей) задачи с тем, чтобы использовать его для генерации сетки и расщеплении по физическим процессам.

Второй этап решения задачи предполагает построение базовой сетки и нанесение на сетку всех атрибутов задачи. На этом же этапе строится множество графов, отвечающее методу расщепления по физическим процессам упомянутому в п. 2.3. Фактически на этом этапе строится первичная треугольная (тетраэдральная) сетка в каждой подобласти расчётной области, согласованная по границам подобластей. Затем на неё наносятся атрибуты задачи и далее она дробится до некоторого базового размера. Завершается этап разбиением построенной базовой сетки на домены, которые сразу можно распределять между небольшим числом вычислителей. Граф этого разбиения на домены назовём **базовым графом**.

Предложенная последовательность иногда может быть нарушена, если используется параллельный генератор сетки (см. рис. 2.9).

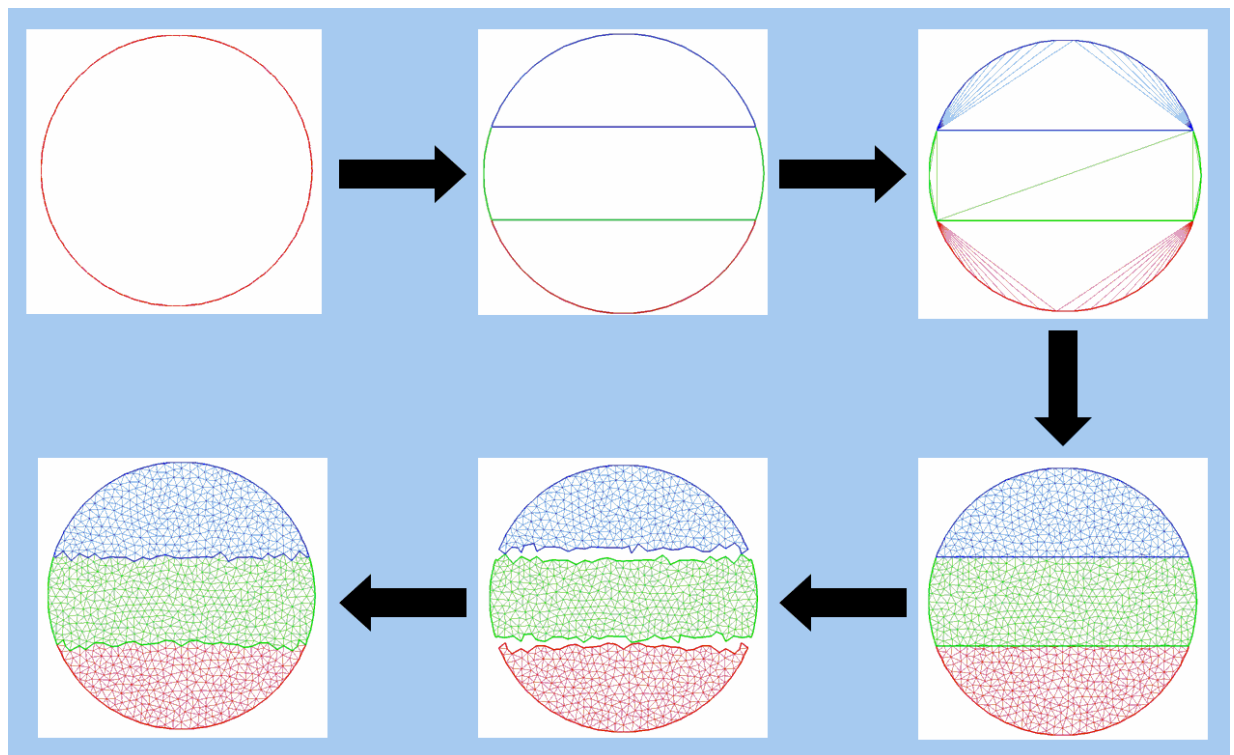


Рисунок 2.9. Параллельная технология подготовки треугольной сетки.

Третий этап решения задачи предполагает развёртывание задачи на конкретном кластере и проведение расчётов. При этом может быть произведено дальнейшее разбиение сетки и распределение её по ещё большему количеству вычислителей. Собственно алгоритм решения нестационарной задачи совпадает с алгоритмом, приведённым для случая ортогональной сетки (см. п. 4.2.1). Однако теперь неявный вариант алгоритма не может использовать локально-одномерные реализации разработанных численных схем. Фактически здесь приходится использовать либо явные схемы, либо привлекать итерационные методы на базе стабилизированных сопряжённых и бисопряженных градиентов, обсуждавшиеся в п. 2.3. Стабилизация в данном случае необходима для преодоления проблемы плохой обусловленности экспоненциальных схем. Однако большой помощью в этом случае является наличие дополнительных

параметров задачи (шаг по времени, измельчение сетки в областях большого перепада электрического поля), а также возможность использования в вычислениях числа большой разрядности.

Относительно использования чисел с увеличенной разрядностью заметим, что в современных процессорах Intel реализована аппаратно четверная точность вычислений. При этом замедление расчётов не превышает 2-х раз (ранее эта цифра на процессорах Intel составляла порядка 10, а на процессорах Power PC пятой серии – более 20). К тому же в общем доступе имеется библиотека GNU MP [392] для вычислений с длиной вещественного числа 256 бит и более (написана на языке C и может использоваться в языках C++ и Fortran). Скорость вычислений при использовании функций из этой библиотеки зависит от длины вещественного числа и падает в 5-10 раз, если выбранная длина не совпадает с аппаратно реализуемыми вариантами. Имеется также более эффективное промежуточное решение – использование чисел вида Double Double и Quad Double (имеющих соответственно 106 и 212 значащих бит) из открытой библиотеки QD [393]. Причём здесь имеются непосредственные реализации для C++/C/Fortran. В диссертации использовался первый вариант – аппаратно-программное решение от Intel.

Ещё одно обстоятельство, которое учитывалось в разработке программ для расчётов на нерегулярных треугольных и тетраэдральных сетках, состоит в том, что при использовании сеток большого размера иногда не хватает разрядности обычного целого числа (`int32` – `long int` в C и `INTEGER*4` в Fortran), а при геометрических вычислениях – разрядности вещественного числа (`float64` – `double` в C и `REAL*8` в Fortran). При этом сама сетка может храниться блоками не очень большого размера (не превосходящими размерность `int32`), а координаты точек могут быть заданы числами типа `float64`. Для разрешения этой проблемы использовались типы данных `int64` и `float128` (соответственно `long long int` и `long double` в C, `INTEGER*8` и `REAL*16` в Fortran).

Сохранение результатов расчётов и контрольных точек производится с помощью библиотеки ввода-вывода, которая организована по следующему принципу. Если количество используемых узлов МВС невелико (порядка или меньше числа вершин в базовом графе), то ввод-вывод данных и контрольных точек осуществляется с каждого узла МВС в рабочий каталог расчёта, расположенный, как правило, на серверном узле МВС. Если количество используемых узлов МВС существенно больше, чем количество вершин в базовом графе, то все узлы МВС группируются также, как ячейки расчётной сетки в базовый граф. В каждой группе узлов выбирается **мастер-узел**, который отвечает за ввод-вывод данных. При этом сохранение данных может производиться как в рабочий каталог расчёта на серверном узле МВС, так и во временные каталоги мастер-узлов. В последнем случае после очередного этапа сохранения результатов мастер-узлы готовят совместно компактную копию и записывают её в рабочий каталог расчёта на серверном узле МВС. Для очень больших сеток компактная копия воспроизводит лишь прореженный вариант расчёта, укладываемый в базовый граф сетки.

Визуализация результатов расчётов может проводиться как после окончания основного задания, так и во время его выполнения. В первом случае система визуализации может быть не параллельной и находиться либо на клиенте пользователя, либо на серверном узле МВС. Визуальный анализ при этом ведётся по компактной копии результатов расчётов. Во втором случае система визуализации может быть параллельной и распределенной. В любом случае у неё должен быть доступ к временным каталогам мастер-узлов. В диссертации для анализа компактной копии результатов использовался известный пакет **TecPlot** [394], расположенный на Windows-машине пользователя. Для анализа полной копии результатов использовалась распределённая среда визуализации **RemoteView** [395], разработанная в ИММ РАН.

2.5 Распараллеливание по группам и балансировка загрузки

В данном пункте рассмотрим кратко метод распараллеливания по неоднородным группам и алгоритм динамической балансировки загрузки узлов МВС с распределённой архитектурой.

В задачах нелинейного туннельного транспорта с непрерывным спектром иногда можно применить метод продолжения по параметру (в данном случае по энергии). Он состоит в том, что задача решается по полному алгоритму лишь для некоторого небольшого числа значений параметра, составляющих крупную реперную сетку. В остальных узлах более подробной параметрической сетки используется методика продолжения. При этом может оказаться, что алгоритм продолжения для каждого конкретного значения параметра использует различное число членов в разложении решения в ряд Тейлора, и, следовательно, имеет свою отличную от других арифметическую сложность. В целом методика продолжения по параметру существенно снижает вычислительные затраты на решение задачи по сравнению с прямым однородным методом, в котором все подзадачи решаются независимо для каждого узла параметрической сетки. При распараллеливании прямой алгоритм имеет 100% эффективность, однако он является существенно более затратным. Алгоритм, использующий методику продолжения, напротив является менее затратным, однако при распараллеливании очень быстро теряет свои преимущества. В связи с этим возникла необходимость разработки такого алгоритма, который был бы лишён этого недостатка.

Если решение задачи туннелирования производится многократно, например для расчёта вольт-амперной характеристики моделируемого прибора или структуры, то информацию о времени расчёта задачи для каждого значения параметра на данном шаге расчёта ВАХ можно учесть на следующем шаге в целях повышения эффективности распараллеливания и снижения времени вычислений. Это можно сделать путём перераспределения точек параметрической сетки по вычислителям, то есть путём балансировки

их загрузки (см., например, [396, 397]). Нелинейность задачи не позволяет использовать статическую балансировку загрузки. Поэтому выбор был сделан в пользу динамической балансировки. Предлагаемый ниже алгоритм относится к классу централизованных алгоритмов, оценивающих время выполнения операций.

Изложим суть алгоритма распараллеливания по группам с динамической балансировкой загрузки. Пусть у нас имеется равномерная параметрическая сетка $\Omega_\varepsilon = \{\varepsilon_j = h_\varepsilon j, j = 1, \dots, N_\varepsilon\}$, на которой необходимо решить множество абстрактных нелинейных задач вида

$$F(\psi, \varepsilon, V) = 0. \quad (2.32)$$

При этом значения второго параметра V принадлежат неравномерной сетке $\Omega_V = \{V = V_k, k = 0, 1, \dots, N_V\}$.

Процедура *последовательного прямого алгоритма* состоит в том, чтобы для каждого V_k решить независимо уравнения (2.32) для всех значений ε_j . *Параллельный прямой алгоритм* предполагает разбиение параметрической сетки на множества одинаковой мощности (смежные или несмежные), распределение их по p вычислителям и решение соответствующих уравнения (2.32) в параллельном режиме.

Последовательный алгоритм продолжения по параметру состоит в следующем. Сетка Ω_ε разбивается на смежные группы не очень большой длины m_ε . Количество групп будет равно $M_\varepsilon = \frac{N_\varepsilon}{m_\varepsilon}$. Для каждого значения параметра ε_j введём принадлежность его к той или иной группе (номер l) и номер внутри группы i : $\varepsilon_j \equiv \varepsilon_i^{(l)}$. Теперь каждое уравнение (2.32) решается точно или приближённо в соответствии со следующей стратегией:

$$\begin{aligned} \psi_1^{(l)} : F(\psi, \varepsilon_1^{(l)}, V_k) &= 0, \quad l = 1, \dots, M_\varepsilon; \\ \psi_i^{(l)} &= T_i^{(l)}(\psi_1^{(l)}, \varepsilon_i^{(l)} - \varepsilon_1^{(l)}, V_k), \quad i = 2, \dots, m_\varepsilon, \quad l = 1, \dots, M_\varepsilon; \end{aligned} \quad (2.33)$$

где $T_i^{(l)}$ – специальное тейлоровское разложение решения, зависящее от номера группы l и номера искомой функции в группе. В упрощённом варианте алгоритма вычисления в разных группах являются независимыми, а вычисления внутри каждой группы зависят от реперной функции $\psi_1^{(l)}$. В более сложном варианте алгоритма может применяться одношаговая схема, $\psi_i^{(l)} = T_i^{(l)}(\psi_{i-1}^{(l)}, \varepsilon_i^{(l)} - \varepsilon_{i-1}^{(l)}, V_k)$, или даже многошаговый метод. У всех вариантов есть свои преимущества и недостатки. В данной работе был выбран вариант (2.33), поскольку при его реализации тейлоровское разложение вычисляется путём накопления дополнительных членов и приводит к минимальным вычислительным затратам (Преимущество других вариантов состоит в том, что можно брать более длинные группы и экономить память.).

Параллельный алгоритм продолжения по параметру предполагает распределение групп по p вычислителям. При этом может оказаться, что $p \ll M_\varepsilon$. Тогда балансировка загрузки процессоров может и не понадобиться, но в этом случае при наличии свободных вычислителей следует перейти к большей конфигурации МВС.

Если $p \sim M_\varepsilon$, то можно так подобрать параметр m_ε , чтобы $M_\varepsilon = n \cdot p$, где $n = 1, 2, 3, \dots$ (то есть число групп должно быть кратно числу вычислителей). В этой ситуации неравномерность вычисления каждой функции $\psi_i^{(l)}$ в совокупности с конкретной производительностью вычислителя будет проявляться достаточно ощутимо, и скорее всего придётся применять динамическую балансировку загрузки вычислителей.

Алгоритм динамической балансировки загрузки состоит в следующем. На каждом шаге k глобального алгоритма измеряются времена $t_i^{(l)}$ расчёта функций $\psi_i^{(l)}$. Затем вычисляется время расчёта каждой группы $t^{(l)} = \sum_{i=1}^{m_\varepsilon} t_i^{(l)}$, а также время расчёта всех групп t_m на вычислителе с номером m . Затем вычисляются максимальное, минимальное и среднее времена

работы вычислителей на шаге k и дисперсия разброса этого времени по вычислителям, измеряемая в процентах:

$$t_{\max} \approx \max_{1 \leq m \leq p} t_m, \quad t_{\min} \approx \min_{1 \leq m \leq p} t_m, \quad t_s = \frac{1}{p} \sum_{m=1}^p t_m, \quad \sigma = \max_{1 \leq m \leq p} \left| \frac{t_m - t_s}{t_s} \right| \cdot 100\%. \quad (2.34)$$

Далее по заданному уровню балансировки ε_{load} (который обычно составляет 0.5-3%) принимается решение о необходимости перераспределения групп по процессорам. Если $\sigma \leq \varepsilon_{load}$, балансировка не нужна. Если наоборот, она производится точным или диффузионным способом.

При точном перераспределении групп их количество на вычислителе с номером m пропорционально величине $n \cdot \frac{t_m}{t_1 + \dots + t_p}$. При диффузионном перераспределении несколько групп с самых «медленных» вычислителей (у которых $t_m \approx t_{\max}$) перебрасываются на самые «быстрые» (у которых $t_m \approx t_{\min}$).

Ещё более эффективный алгоритм балансировки получается при «плавающей» длине группы m_ε (которая меняется в пределах от 1 до $m_{\varepsilon, \max}$) и использует в вычислениях баланса только времена $t_i^{(l)}$.

В заключение пункта отметим, что предложенная методика распараллеливания по неоднородным группам стала «де-факто» обобщением однородного распараллеливания по группам, применявшегося независимо при решении задач радиационной газовой динамики (см., например, [398, 399]). В диссертации она применяется в гл. 5 при параллельной реализации численного алгоритма решения задачи нелинейном электронном транспорте в квантовом канале гетероструктуры на основе AlGaAs.

2.6 Гибридная технология параллельного программирования

В данном пункте рассмотрим кратко гибридную технологию параллельного программирования, сочетающую параллельные вычисления на общей и распределённой памяти. В настоящее время она стала уже общепринятым стандартом ввиду того, что большинство суперкомпью-

терных систем представляет собой кластеры с большим числом узлов (от нескольких сотен, до десятков тысяч), объединённых высокоскоростной сетью (Ethernet G1 и G10, Myrinet 3, Infiniband QDR и т.д.). Внутренняя структура современного «стандартного» узла представляет собой мультипроцессорную систему с одинаковыми или различными по архитектуре многоядерными процессорами (к первому варианту, например, относятся узлы с процессорами Intel, ко второму – с процессорами AMD и IBM Cell), использующими общую память напрямую или в режиме гипертрейдинга. Ещё один вариант структуры узла возникает тогда, когда помимо центрального процессора имеется один или несколько спецвычислителей. Для устаревших архитектур таким спецвычислителем был транспьютер, затем ПЛИС и далее графический процессор (например, Tesla или Fermi компании NVIDIA). Подробнее об архитектурах современных суперкомпьютеров можно узнать из [291, 297, 400-404] и др.

С точки зрения технологии программирования, кластеры с симметричной архитектурой внутри узлов могут выполнять единый параллельный код, разработанный в одной системе подготовки программ на одном из языков высокого уровня. Кластеры с несимметричной (неоднородной) архитектурой внутри узлов пока принципиально не могут исполнять единый параллельный код на всех имеющихся в них вычислителях. В результате, для вычислителя каждого типа приходится иметь свой вариант параллельного кода. При этом каждый из вариантов кода подготавливается в собственной системе программирования.

Учитывая указанную выше ситуацию и то, что симметричные распределённые системы развиваются более динамично и имеют более широкое распространение, в диссертации велись разработки программ в рамках первой технологии программирования. Более того, для обеспечения максимальной портативности программы, использующие средства визуализации, были полностью отделены от основного расчётного ПО. В качестве систем программирования использовались две: Fortran 77/89 и ANSI

С. Для обеспечения коммуникаций между узлами МВС вначале использовались интерфейсы PARIX [405] и PVM [406], а затем MPI [407, 408]. Для реализации параллельных вычислений на общей памяти внутри узлов МВС использовался сначала MPI, а затем библиотека тредов Pthreads и интерфейс OpenMP [409]. При этом при использовании языка Fortran 77/89 распараллеливание внутри узла возможно либо в рамках автоматического распараллеливания, поддерживаемого современным компилятором, либо с помощью интерфейса OpenMP. При использовании языка ANSI C можно использовать все три возможности.

В результате, в диссертации для реализации параллельных программ на языке ANSI C были использованы интерфейс MPI и библиотека Pthreads. Для реализации программ на языке Fortran 77/89 использовался интерфейс MPI и стандарт OpenMP. Информация о методах реализации параллельных алгоритмов с помощью MPI, Pthreads и OpenMP была взята из источников [407-417]. Большая часть разработанных программ переносима на любую аппаратную платформу под управлением операционных систем Windows, UNIX и Linux. Программы, использующие расширенную арифметику четверной точности (long double – в ANSI C, quadruple – в Fortran 77/89), ориентированы на системы с процессорами Intel и AMD последних модификаций. Программы для визуализации расчётных данных разработаны на языке C++ и функционируют под управлением ОС Windows.

В заключение гл. 2 заметим, что результаты, изложенные выше, опубликованы в работах [A7, A17, A23, A25, A27, A30, A34, A39, A43].

ГЛАВА 3

Моделирование низкотемпературного примесного пробоя в полупроводниковых структурах

В данной главе приводятся результаты теоретического исследования низкотемпературного примесного пробоя в полупроводниках. Используемая математическая модель самосогласованным образом учитывает перезарядку возбуждённого состояния примесей и все процессы рассеяния электронов, влияющие на темп ударной ионизации. В рассмотрение включены процессы ударной ионизации как основного, так и возбуждённого состояний примесей, ударное возбуждение нейтральных примесей, межэлектронные столкновения и рассеяние электронов на фононах. Численные расчёты проведены применительно к *n*-GaAs. В них показано, что имеются три механизма, приводящие к отрицательному дифференциальному сопротивлению, которые в реальных условиях могут образовывать общий S-образный участок вольт-амперной характеристики (ВАХ). Первый обусловлен уменьшением коэффициента захвата электронов на мелкие примеси с ростом частоты межэлектронных столкновений, когда они начинают контролировать функцию распределения вблизи уровня протекания. Этот механизм инициирует неустойчивость при малых токах. Второй механизм обусловлен уменьшением энергетических потерь электронов с ростом тока вследствие ослабления неупругого рассеяния на примесях при их ионизации. Третий механизм представляет собой известную перегревную неустойчивость.

3.1 Введение в проблему

Низкотемпературный пробой мелких примесей в полупроводниках известен уже давно [418], однако основная связанная с ним проблема не решена до сих пор. Это вопрос о механизме S-образности вольтамперных характеристик. В последние годы интерес к нему возрос из-за того, что

расширился круг явлений, в которых низкотемпературный примесный пробой (НТПП) проявляется. Так, выяснилось, что НТПП является причиной нестабильностей, наблюдаемых в селективно легированных гетероструктурах GaAs/AlGaAs при больших напряжениях между истоком и стоком [419-421], и даже обсуждается использование примесного пробоя в таких условиях для приборных приложений [422]. НТПП широко используется в качестве модельной системы для исследования нелинейных волновых процессов в полупроводниках [423-425], динамического хаоса [426-428], явлений самоорганизации [429, 430]. Наш интерес к механизму НТПП связан ещё и с тем, что была обнаружена высокая чувствительность образцов *n*-GaAs к свету, инициирующему пробой, и оптоэлектронная бистабильность [431, 432].

За прошедшее время после обнаружения НТПП предлагалось много механизмов S-образности (обзор основных механизмов содержится в [433]), однако они не получили развития. Исключение составляет, по-видимому, только механизм, связанный с захватом свободных носителей на уровни возбуждённых состояний мелких примесей и их последующей ионизацией. Этот механизм был предложен Кастальским [433], а затем развит Шёллем [434] и широко использован им для исследования процессов самоорганизации в полупроводниках. Область существования S-образности за счёт этого механизма, как видно из [434], очень чувствительна к полевым зависимостям коэффициентов ударной ионизации основного и возбуждённого состояний примесей, т.е. к функции распределения электронов в области энергий выше соответствующих потенциалов ионизации. Однако в указанных работах функция распределения по сути дела не рассматривалась, а в [434] игнорировалось даже изменение подвижности носителей с током, что находится в противоречии с многочисленными экспериментами [435, 436], показывающими, что при пробое подвижность изменяется сильно.

В настоящей работе проведено детальное численное исследование НТПП в рамках модели на базе кинетического уравнения Фоккера-Планка, которая последовательно учитывает как перезарядку возбуждённого состояния примесей, так и все процессы, определяющие функцию распределения свободных электронов и таким образом влияющие на темп ударной ионизации и на рекомбинацию. Наиболее принципиальным является включение в рассмотрение неупругого рассеяния электронов на нейтральных примесях (процессы ударной ионизации как основного, так и возбуждённого состояний и ударного возбуждения примесей), и межэлектронных столкновений. Тот факт, что интеграл столкновений для неупругого примесного рассеяния зависит от заселённости основного и возбуждённого состояний примесей, а эта заселённость в свою очередь зависит от функции распределения свободных электронов, приводит к необходимости решать кинетическое уравнение совместно с уравнениями кинетики для примесных состояний. В результате такого решения самосогласованным образом получается как функция распределения электронов, так и кинетические коэффициенты (коэффициенты ударной ионизации, подвижность, коэффициент захвата на примеси).

Используемая ниже физико-математическая модель и её теоретический анализ проведены проф. В.А. Сабликовым. В диссертации разработана процедура численного решения задачи, применительно к исследованию НТПП в *n*-GaAs. Метод численного моделирования позволил выявить процессы, приводящие к S-образности.

В численных экспериментах установлено, что на ВАХ, имеются два участка S-образности, которые при определенных условиях могут перекрываться, образуя один. Первый участок возникает при небольшой концентрации электронов ($\sim 10^{10}$ - 10^{11} см⁻³), когда межэлектронные столкновения начинают изменять функцию распределения электронов вблизи уровня протекания. Он обусловлен уменьшением коэффициента захвата электронов на мелкие примеси с ростом частоты межэлектронных

столкновений. Второй S-образный участок возникает, когда концентрация свободных электронов по порядку величины начинает приближаться к концентрации примесей. Он связан с двумя факторами: с перегривной неустойчивостью [437], которая возникает после того, как межэлектронные столкновения начинают контролировать функцию распределения, и с происходящим при ионизации примесей уменьшением темпа потерь энергии электронов за счёт ослабления неупругого рассеяния на нейтральных примесях. Потери энергии электронов при ионизации возбуждённых состояний доноров проявляются также и в ходе зависимости подвижности электронов от тока.

3.2 Физико-математическая модель

Ударная ионизация примесей определяется свободными электронами с энергией, превышающей порог ионизации, т.е. функцией распределения электронов в области достаточно высоких энергий, где эта функция обычно мала. В этом и состоит существенная особенность задачи о примесном пробое в отличие, например, от расчёта подвижности, которая определяется функцией распределения в той области энергий, где больше всего электронов. Поэтому необходимо максимально полно учесть все факторы, влияющие на функцию распределения в области энергий над порогами ударной ионизации и возбуждения нейтральных примесей.

Прежде всего, это механизмы потерь энергии электронов. Для GaAs потери связаны с PA- и DA-фононами и с неупругим рассеянием электронов на нейтральных примесях. Фононные механизмы для GaAs хорошо известны [45]. Потери, связанные с примесями, обсуждались в литературе [438], но мы остановимся на них подробнее. Для простоты, следуя [433, 434], будем считать, что спектр электронов на донорах имеет два дискретных уровня с энергиями активации ε_1 и ε_2 (соответственно, основной и возбуждённый уровни). Выше возбуждённого уровня имеется квазинепрерывный спектр энергий, по которому осуществляется каскадный захват электронов из зоны

проводимости на уровень ε_2 . Потери энергии при неупругом рассеянии электронов на примесях будем моделировать с помощью этих двух уровней. Возможны следующие процессы: ударная ионизация донора в основном состоянии, ударное возбуждение донора (переход типа 1s-2p) и ударная ионизация донора в возбуждённом состоянии. Сечения этих процессов (соответственно, σ_1 , σ_{12} и σ_2) имеют приблизительно одинаковую зависимость от энергии рассеиваемого электрона ε , нормированной на соответствующую пороговую энергию (это известно для атомов водорода [439]). Будем её аппроксимировать так же, как в [440] (обсуждаются и другие аппроксимации [438], отличающиеся от этой при $\varepsilon \gg \varepsilon_i$, но это отличие не приводит к принципиальным результатам, так как при $\varepsilon \gg \varepsilon_i$ очень мало электронов):

$$\sigma_i = \sigma_i^0 \left(\frac{\varepsilon}{\varepsilon_i} - 1 \right) \left(\frac{\varepsilon_i}{\varepsilon} \right)^{5/4},$$

где $i=1, 12, 2$, $\varepsilon_{12} = \varepsilon_1 - \varepsilon_2$, $\sigma_1^0 \approx \pi a_B^2$, a_B – боровский радиус, $\sigma_2^0 \geq \sigma_{12}^0 \geq \sigma_1^0$. Времена релаксации энергии электронов за счёт неупругого рассеяния на примесях можно оценить следующим образом:

$$\tau_1^{-1} = \sigma_1(\varepsilon)V(\varepsilon)n_{D1}, \quad \tau_{12}^{-1} = \sigma_{12}(\varepsilon)V(\varepsilon)n_{D1}, \quad \tau_2^{-1} = \sigma_2(\varepsilon)V(\varepsilon)n_{D2},$$

где $V(\varepsilon) = \sqrt{\frac{2\varepsilon}{m}}$ – скорость электронов (m – эффективная масса электронов),

n_{D1} – концентрация доноров в основном состоянии, n_{D2} – концентрация возбуждённых доноров.

Относительный вклад разных механизмов потерь энергии электронов иллюстрирует рис. 3.1, на котором показаны частоты релаксации энергии для рассеяния на РА- и ДА-фононах и для неупругого рассеяния на примесях. Было положено $\sigma_1^0 = \sigma_{12}^0 = \sigma_2^0 = 3 \cdot 10^{-12} \text{ см}^2$ и $n_{D1} = n_{D2} = 10^{15} \text{ см}^{-3}$. Видно, что существенными оказываются все рассмотренные механизмы рассеяния. Здесь же необходимо заметить, что неупругое рассеяние на примесях

обладает рядом особенностей, которые нам понадобятся при интерпретации результатов:

- 1) возбуждение примесей (линия 12) затрудняет электронам приобретение энергии для ионизации основного состояния, а ионизация возбуждённого состояния (линия 2) затрудняет возбуждение примесей и ионизацию основного состояния;
- 2) интенсивность потерь (1, 12, 2) по-разному изменяется в процессе пробоя. Так, при слабом поле, когда ионизация примесей ещё не происходит, $n_{D2} = 0$ и поэтому канал потерь 2 отсутствует. С ростом тока, когда начинается возбуждение примесей, каналы 1 и 12 ослабляются, а канал 2, напротив, усиливается. Затем, при уже достаточно сильной ионизации, все три канала потерь исчезают.

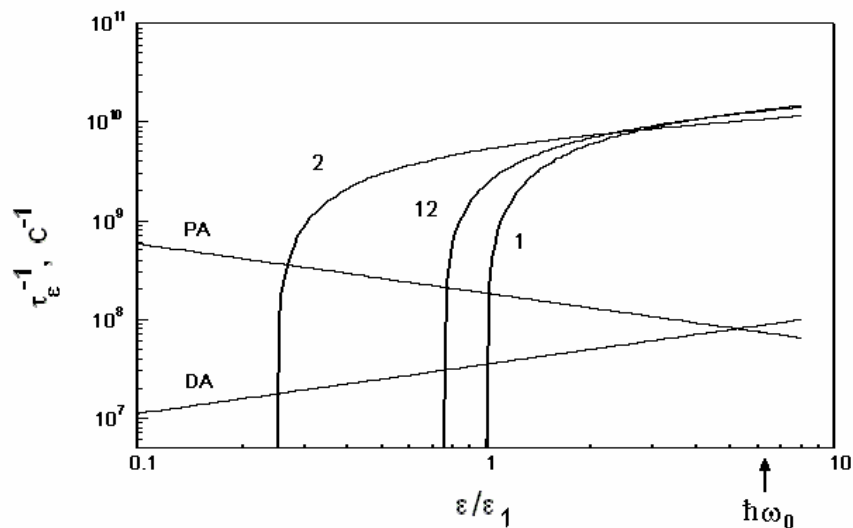


Рисунок 3.1. Времена релаксации энергии электронов τ_ϵ в зависимости от энергии для рассматриваемых механизмов рассеяния: РА-фононы, ДА-фононы, 1 – ударная ионизация основного состояния примесей, 12 - ударное возбуждение основного состояния, 2 – ударная ионизация возбуждённых состояний.

Имеется ещё один фактор, который сильно влияет на функцию распределения. Это межэлектронные столкновения. В ходе НТПП концентрация свободных носителей изменяется очень сильно: от

$10^8 \div 10^9 \text{ см}^{-3}$ при малых токах до $n \sim N_D - N_A \sim 10^{15} \text{ см}^{-3}$ (здесь N_D и N_A – концентрации доноров и акцепторов) при больших. Соответственно сильно изменяется частота межэлектронных столкновений τ_{ee}^{-1} . Влияние межэлектронных столкновений на функцию распределения определяется отношением τ_{ee}^{-1} к частоте релаксации энергии, которое зависит от энергии. В области тепловых энергий ($\sim 10K$) межэлектронные столкновения становятся существенными при $n \sim n_C \approx 10^{11} \text{ см}^{-3}$. В области ударной ионизации межэлектронные столкновения важны при $n \sim 10^{12} \div 10^{14} \text{ см}^{-3}$ (в зависимости от концентрации нейтральных доноров).

Таким образом, необходимо учесть все указанные механизмы рассеяния. Стационарное кинетическое уравнение Фоккера-Планка [33, 156-158] (см. также гл. 1) для симметричной части функции распределения $f(\varepsilon)$ электронов по энергиям в зоне проводимости представим в виде

$$\frac{\partial}{\partial \varepsilon} \left\{ B(\varepsilon) \left[\Theta(\varepsilon) \frac{\partial f}{\partial \varepsilon} + f \right] \right\} - R\{f\} + G\{f\} + S_{opt}\{f\} + S_{ee}\{f\} = 0. \quad (3.1)$$

Здесь 1-й член описывает приобретение электронами энергии от электрического поля и потери энергии при рассеянии на акустических фононах, $B(\varepsilon) = \frac{\varepsilon g(\varepsilon)}{\tau_\varepsilon(\varepsilon)}$, $\Theta(\varepsilon) = T \left[1 + \frac{e^2 E^2 \tau(\varepsilon) \tau_\varepsilon(\varepsilon)}{mT} \right]$, E – электрическое поле, e – единичный заряд, T – температура решетки, $g(\varepsilon)$ – плотность состояний в зоне свободных электронов. $\tau_\varepsilon(\varepsilon)$ – время релаксации энергии за счёт рассеяния на РА- и ДА- фононах, $\tau(\varepsilon)$ – время релаксации импульса при рассеянии на заряженных и нейтральных примесях и на фононах. Формулы для $\tau_\varepsilon(\varepsilon)$ и $\tau(\varepsilon)$ хорошо известны [441]. Заметим только, что фигурирующие в них концентрации заряженных и нейтральных примесей изменяются вместе с концентрацией электронов.

Для плотности состояний $g(\varepsilon)$ воспользуемся выражением

$$g(\varepsilon) = \frac{m(2m\varepsilon)^{1/2}}{\pi^2 \hbar^3},$$

(\hbar – постоянная Планка) но будем иметь в виду, что уравнение (3.1) относится к электронным состояниям с энергией выше уровня протекания, так что $\varepsilon \geq \varepsilon_p$, где ε_p – средняя кинетическая энергия на уровне протекания. Она порядка величины среднеквадратичного флуктуационного потенциала, который мы будем считать малым по сравнению с характерными энергиями в задаче. Относительно величины ε_p в литературе имеется противоречие. В книге Шкловского и Эфроса [442] приводится выражение

$$\varepsilon_p \approx 0.18\varepsilon_D K^{1/4}, \quad \varepsilon_D = \frac{e^2}{\kappa_0^2} \left(\frac{4}{3} \pi N_D \right)^{1/3}, \quad K = \frac{N_A}{N_D},$$

(κ_0 – диэлектрическая проницаемость, K – коэффициент компенсации доноров акцепторами), а согласно [443],

$$\varepsilon_p \approx 1.5\varepsilon_D K^{2/3}. \quad (3.2)$$

Для дальнейшего не принципиально, какой формулой пользоваться, однако выберем вторую, так как при $K \sim 0.1 \div 0.5$ она значительно ближе к результатам численного моделирования [444].

Второе слагаемое в уравнении (3.1) описывает исчезновение электронов из состояния ε при ударной ионизации и ударном возбуждении доноров:

$$R\{f\} = g(\varepsilon) V(\varepsilon) \left\{ [\sigma_1(\varepsilon) + \sigma_{12}(\varepsilon)] n_{D1} + \sigma_2(\varepsilon) n_{D2} \right\} f(\varepsilon). \quad (3.3)$$

Слагаемое $G\{f\}$ учитывает возникновение электронов в состоянии с энергией ε , которое происходит в результате ударного возбуждения доноров электронами с энергией $\varepsilon_{12} + \varepsilon$ и в результате ударной ионизации доноров в основном и в возбуждённом состояниях:

$$G\{f\} = n_{D1} g(\varepsilon_{12} + \varepsilon) V(\varepsilon_{12} + \varepsilon) \sigma_{12}(\varepsilon_{12} + \varepsilon) f(\varepsilon_{12} + \varepsilon) + \\ + 2n_{D1} \int_{\varepsilon_1 + \varepsilon}^{\infty} g(\varepsilon') V(\varepsilon') \frac{\sigma_1(\varepsilon')}{\varepsilon' - \varepsilon_1} f(\varepsilon') d\varepsilon' + 2n_{D2} \int_{\varepsilon_2 + \varepsilon}^{\infty} g(\varepsilon') V(\varepsilon') \frac{\sigma_2(\varepsilon')}{\varepsilon' - \varepsilon_2} f(\varepsilon') d\varepsilon'. \quad (3.4)$$

Слагаемое $S_{opt}\{f\}$ представляет собой интеграл столкновений с оптическими фононами, который добавлен для того, чтобы естественным образом ограничить область рассматриваемых энергий. При численном интегрировании уравнения (3.1) результат мало чувствителен к граничному условию при больших энергиях, если его задать выше энергии оптических фононов $\hbar\omega_0$:

$$S_{opt}\{f\} = \frac{f(\varepsilon + \hbar\omega_0)}{\tau_0} \ln \frac{\sqrt{\varepsilon + \hbar\omega_0} + \sqrt{\varepsilon}}{\sqrt{\varepsilon + \hbar\omega_0} - \sqrt{\varepsilon}} - \frac{f(\varepsilon)}{\tau_0} \Theta(\varepsilon - \hbar\omega_0) \ln \frac{\sqrt{\varepsilon} + \sqrt{\varepsilon - \hbar\omega_0}}{\sqrt{\varepsilon} - \sqrt{\varepsilon - \hbar\omega_0}}. \quad (3.5)$$

Слагаемое $S_{ee}\{f\}$ – интеграл межэлектронных столкновений, для записи которого используется форма Ландау,

$$S_{ee}\{f\} = \frac{\partial}{\partial \varepsilon} \left\{ \varepsilon g(\varepsilon) \int_{\varepsilon_p}^{\infty} g(\varepsilon') \left[f(\varepsilon') \frac{\partial f}{\partial \varepsilon} - f(\varepsilon) \frac{\partial f}{\partial \varepsilon'} \right] 2\varepsilon' \sigma_t \max(V, V') d\varepsilon' \right\}, \quad (3.6)$$

где $\sigma_t = \frac{\pi e^4 \Lambda}{\kappa_0^2 \max(\varepsilon^2, \varepsilon'^2)}$ (Λ – кулоновский логарифм). Поправка к этой формуле, учитывающая рассеяние на большие углы, которая была предложена в [445], как можно показать в нашем случае, несущественна из-за того, что отсутствует область энергий, в которой $f(\varepsilon)$ была бы постоянной.

Как было уже упомянуто, одно граничное условие к уравнению (3.1) можно задать при $\varepsilon > \hbar\omega_0$. Мы полагали

$$f(\varepsilon) = 0 \text{ при } \varepsilon = \hbar\omega_0 + \varepsilon_1. \quad (3.7)$$

Заметим, что решение очень мало чувствительно к выбору этой границы.

Другим граничным условием служит уравнение баланса электронных потоков по энергии через уровень протекания. Потоки по энергии вверх обусловлены ударной ионизацией уровней ε_1 и ε_2 и тепловой активацией уровня ε_2 . Тепловой активацией уровня ε_1 в зону проводимости можно пренебречь. Поток вниз связан с диффузией электронов по энергии в поле притягивающих центров. Для расчёта этого потока мы воспользуемся теорией Абакумова, Переля и Ясиевич [446], учитывая, что в GaAs

преобладающим механизмом релаксации энергии захватываемых электронов является рассеяние на РА-фононах. В результате имеем

$$\gamma f(\varepsilon_p) = (e_2 + \alpha_2 n) n_{D2} + \alpha_1 n n_{D1}, \quad (3.8)$$

где α_1 и α_2 – коэффициенты ударной ионизации основного и возбуждённого уровней,

$$\alpha_{1,2} = \frac{1}{n} \int_{\varepsilon_{1,2}}^{\infty} g(\varepsilon) V(\varepsilon) \sigma_{1,2}(\varepsilon) f(\varepsilon) d\varepsilon,$$

γ – коэффициент, описывающий захват свободных электронов. Конкретное выражение для γ зависит от того, происходит ли захват на изолированные кулоновские центры (0-комплексы), на диполи (2-комплексы) или на ямы флуктуаций потенциала:

$$\gamma \approx \begin{cases} \left(\frac{g}{\tau_\varepsilon} \right)_{\varepsilon_p} \cdot \frac{\varepsilon_D^3 K}{4T^2} \left(1 + \frac{1-K}{K} \frac{n}{N_D - N_A} \right), & \varepsilon_D < T, \quad \varepsilon_p < T; \\ \left(\frac{g}{\tau_\varepsilon} \right)_{\varepsilon_p} \frac{\varepsilon_D^2 K}{T} \left(1 + \frac{\varepsilon_D}{4T} \frac{1-K}{K} \frac{n}{N_D - N_A} \right), & \varepsilon_D > T, \quad \varepsilon_p < T; \\ \left(\frac{g}{\tau_\varepsilon} \right)_{\varepsilon_p} \varepsilon_p, & \varepsilon_D > T, \quad \varepsilon_p > T. \end{cases}$$

Поскольку эти варианты не определены строгими неравенствами, мы испробовали все три. Небольшое изменение вида ВАХ происходит только при переходе к третьему варианту. Оно связано с тем, что в нём не учтено влияние опустошения центров на частоту рекомбинации. Тем не менее в дальнейшем указанные варианты будут использованы в соответствии с приведёнными неравенствами, считая их строгими.

Коэффициент теплового заброса с уровня ε_2 в зону проводимости определим из условия равновесия при отсутствии ударной ионизации:

$$e_2 \approx \frac{\gamma(n = n_T)}{N_D} \exp \left\{ -\frac{\varepsilon_2}{T} \right\},$$

где n_T – тепловая концентрация электронов.

Для того, чтобы задача была полной, необходимо добавить ещё уравнение кинетики перезарядки уровня ε_1 и уравнение нейтральности.

Уравнение кинетики имеет вид

$$\gamma_{21}n_{D2} = [e_{12} + (\alpha_1 + \alpha_{12})n]n_{D1}, \quad (3.9)$$

где

$$\alpha_{12} = \frac{1}{n} \int_{\varepsilon_{12}}^{\infty} g(\varepsilon) V(\varepsilon) \sigma_{12}(\varepsilon) f(\varepsilon) d\varepsilon,$$

γ_{21} – частота электронных переходов с возбуждённого уровня на основной,

$$e_{12} \approx \gamma_{21} \exp\left\{-\frac{\varepsilon_{12}}{T}\right\}.$$

Уравнение нейтральности имеет вид

$$n_{D1} + n_{D2} + n + N_A = N_D. \quad (3.10)$$

С учётом того, что

$$n = \int_{\varepsilon_p}^{\infty} g(\varepsilon) f(\varepsilon) d\varepsilon, \quad (3.11)$$

система уравнений (3.1), (3.9), (3.10) с граничными условиями (3.7), (3.8) полностью определяет задачу.

Для расчета вальт-амперных характеристик и других параметров структуры *n*-GaAs электрический ток, подвижность и коэффициент захвата электронов определялись следующим образом:

$$j = \frac{e^2}{3} E \int_{\varepsilon_p}^{\infty} g(\varepsilon) V^2(\varepsilon) \tau(\varepsilon) \frac{\partial f}{\partial \varepsilon} d\varepsilon, \quad (3.12)$$

$$\mu = \frac{j}{enE}, \quad c_n = \frac{\gamma f(\varepsilon_p)}{n(N_A + n)}. \quad (3.13)$$

3.3 Численный алгоритм и программная реализация

Для численного анализа задачи (3.1)-(3.13) был разработан численный алгоритм на основе схем экспоненциальной подгонки (см. п. 1.3 гл. 1). Рассмотрим его подробнее применительно к конкретной постановке задачи.

Для этого заметим, что уравнение (3.1) – интегро-дифференциальное уравнение, содержащее нелинейные и нелокальные связи. Однако в его основе лежит обыкновенное дифференциальное уравнение 2-го порядка, с интегральными коэффициентами, зависящими от решения. Поэтому, применим к его решению метод конечных разностей на неравномерной сетке по энергетической координате ε .

Сначала преобразуем уравнение (3.1) с учетом (3.6):

$$\frac{\partial}{\partial \varepsilon} \left\{ \tilde{B}(\varepsilon) \frac{\partial f}{\partial \varepsilon} + \tilde{A}(\varepsilon) f \right\} - R\{f\} + G\{f\} + S_{opt}\{f\} = 0, \quad (3.14)$$

где

$$\tilde{B}(\varepsilon) = B(\varepsilon)\Theta(\varepsilon) + \varepsilon g(\varepsilon) \left[\int_{\varepsilon_p}^{\infty} g(\varepsilon') f(\varepsilon') 2\varepsilon' \sigma_t \max(V, V') d\varepsilon' \right],$$

$$\tilde{A}(\varepsilon) = B(\varepsilon) - \varepsilon g(\varepsilon) \left[\int_{\varepsilon_p}^{\infty} g(\varepsilon') \frac{\partial f}{\partial \varepsilon'} 2\varepsilon' \sigma_t \max(V, V') d\varepsilon' \right].$$

В такой форме уравнение (3.14) содержит производные по энергии в первом слагаемом, а остальные члены содержат только интегралы по ε . Из представления (3.14) видно, что при любой положительной функции распределения $f(\varepsilon)$ уравнение (3.14) не меняет свой тип, и можно ожидать, что исходная дифференциальная задача имеет решение необходимой степени гладкости. Вопрос единственности решения обсуждается ниже.

Для построения конечно-разностной схемы дифференциальная задача для уравнения (3.14) была обезразмерена. При этом для удобства численного

анализа была введена безразмерная координата $\xi = \frac{\varepsilon - \varepsilon_p}{\hbar\omega_0 + \varepsilon_1}$, изменяющаяся

от 0 до 1. Вследствие использования граничного условия (3.7) все интегралы с бесконечным верхним пределом были заменены на интегралы по ξ с верхним пределом равным 1. Сетка ω_ξ по координате ξ была выбрана так,

чтобы величины $\xi_m = \frac{\varepsilon_m - \varepsilon_p}{\hbar\omega_0 + \varepsilon_1}$ ($m=1,2,p$) были ее узлами. При этом она сгущалась вблизи 0 и была разреженной вблизи 1.

На сетке ω_ξ с помощью интегро-интерполяционного метода была построена следующая нелинейная схема экспоненциальной подгонки с интегральными коэффициентами, предложенная в гл. 1:

$$\begin{aligned} & \frac{1}{\hbar_i} \left\{ \left(\tilde{B}_{i+1} + \tilde{B}_i \right) \frac{e_{i+1}f_{i+1} - e_i f_i}{(e_{i+1} + e_i)\hbar_{i+1}} - \left(\tilde{B}_i + \tilde{B}_{i-1} \right) \frac{e_i f_i - e_{i-1}f_{i-1}}{(e_i + e_{i-1})\hbar_i} \right\} - \\ & -R_i + G_i + S_{opt,i} = 0, \quad 0 < i < N_\xi, \\ & f_0 = \gamma^{-1} \left[(e_2 + \alpha_2 n)n_{D2} + \alpha_1 n n_{D1} \right], \quad f_{N_\xi} = 0, \end{aligned} \quad (3.15)$$

где $f_i = f(\xi_i)$ – значения функции распределения на сетке, $\hbar_i, \tilde{\hbar}_i$ – соответствующие шаги сетки, $\tilde{B}_i = \tilde{B}(\xi_i)$, $e_i = \exp \left[\int_0^{\xi_i} \frac{\tilde{A}(\xi)d\xi}{\tilde{B}(\xi)} \right]$, а $R_i, G_i, S_{opt,i}$ – сеточные аналоги выражений (3.3)-(3.5). Интегралы, входящие в (3.15) вычисляются численно по формуле трапеций. Это же справедливо для величин n, j, α_k, \dots .

Для реализации нелинейной схемы (3.15) используется итерационный процесс Ньютона с параметром регуляризации $\theta \in (0,1)$. При этом матрица возникающей линейной системы уравнений оказывается полностью заполненной. Линейная система на каждой итерации решается методом Гаусса с выбором главного элемента по строке.

Анализ устойчивости и сходимости схемы (3.15) показал следующее. При условии существования единственного решения дифференциальной задачи можно показать, что при достаточно малых \hbar решение разностной задачи существует, единственно и сходится к решению дифференциальной задачи со скоростью $O(\hbar^2)$ в норме $L_2(\omega_\xi)$. При этом линейные системы, получаемые на каждой ньютоновской итерации удовлетворяют условию диагонального преобладания, то есть являются невырожденными и

позволяют найти решение. Параметр регуляризации θ выбирается равным $\theta_0 < 1$ и зависит от максимального шага сетки. При теоретическом анализе это значение определить трудно, поэтому оно подбиралось эмпирически.

Аналогично исходной дифференциальной задаче разностная задача (3.15) может быть некорректной из-за нелинейной и неявной связи тока j и величины поля E . А именно, как следует из теоретических оценок и приведенных ниже результатов моделирования, при определенных параметрах задачи реализуется S-N-образная вольт-амперная характеристика. Причем на ней есть участки, где ни задание величины поля, ни задание величины тока не позволяет определить решение из-за нарушения единственности. Данная проблема в общем случае была рассмотрена в гл. 1, п. 1.4. Разработанный подход позволяет разрешить проблему неединственности. Для этого необходимо добавить к исходной задаче два уравнения: уравнение для тока (3.12) и уравнение кривой нагрузки. В качестве последней выбрана Верзьера Аньези. Метод продолжения по параметру вдоль кривой нагрузки позволяет найти решение задачи в любом интересующем диапазоне токов и напряжений.

При численной реализации данного подхода используется сеточный аналог формулы (3.12) и уравнение Верзьеры. Оба добавленных уравнения дополняют сеточную систему (3.15), которая в каждой точке ВАХ также решается методом Ньютона. Фактически, вектор неизвестных разностной задачи расширяется до набора $y = (E, j, f_0, \dots, f_{N_\xi})^T$. В программной реализации использовался именно такой порядок неизвестных. Предложенная модификация численного алгоритма сходится, если шаг вдоль кривой нагрузки выбирается достаточно малым.

3.4 Результаты моделирования

Численное решение уравнений рассматриваемой модели позволяет проследить за ходом ВАХ, за изменением функции распределения,

концентрации и подвижности электронов, концентрации доноров в основном и в возбуждённом состояниях. Кроме того имеется возможность выяснить, как изменяются результаты при включении каких-либо механизмов рассеяния и при изменении параметров модели, и таким образом полностью изучить поведение системы. Ниже приведены наиболее интересные результаты, полученные применительно к *n*-GaAs для $T = 4.2K$ с использованием известных в литературе [45] данных по фоновому рассеянию. Кроме того в расчётах было положено $\varepsilon_1 = 5.9 \text{ мЭв}$, $\varepsilon_2 = 0.75\varepsilon_1$, $\sigma_1^0 = \sigma_{12}^0 = \sigma_2^0 = 3 \cdot 10^{-12} \text{ см}^2$. При этих фиксированных данных варьировались величины N_D , K и γ_{21} .

Поскольку нельзя считать, что величина γ_{21} известна хорошо (по данным работы [447] она оценивается как $2 \cdot 10^6 \text{ с}^{-1}$), рассмотрим сначала, как изменяются результаты при варьировании этой величины. Результаты представлены на рис. 3.2, 3.3 и 3.4. Оказалось, что при разумных для примесного пробоя концентрациях $N_D \sim 10^{14} \text{ см}^{-3}$ и коэффициенте компенсации $K \sim 0.1$ вид ВАХ сильнее чувствителен к γ_{21} , чем к N_D и K .

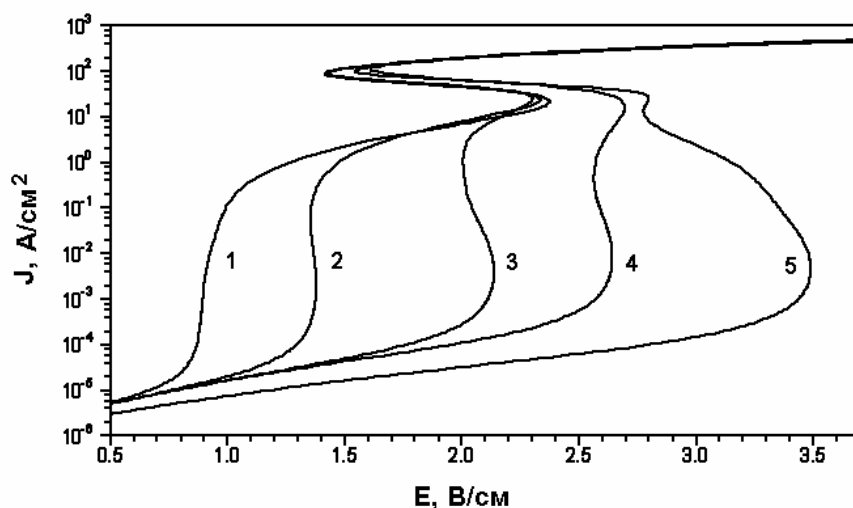


Рисунок 3.2. Кривые ВАХ при разных значениях $\gamma_{21} = 10^6, 10^7, 10^8, 10^9 \text{ с}^{-1}$ (линии 1,2,3,4) для $N_D = 2 \cdot 10^{14} \text{ см}^{-3}$, $K = 0.1$. Линия 5 соответствует $\gamma_{21} = 10^8 \text{ с}^{-1}$, $N_D = 4 \cdot 10^{14} \text{ см}^{-3}$, $K = 0.1$.

Как видно из рис. 3.2, S-образность имеется во всех случаях, причём правильнее говорить о двух участках S-образности: при больших токах, когда $n \sim N_D - N_A$, и при значительно меньших токах, когда $n \sim n_C \approx 10^{10} \div 10^{11} \text{ см}^{-3}$. При больших токах S-образность существует для любых γ_{21} , а при малых – только для $\gamma_{21} \geq 10^6 \text{ с}^{-1}$. На верхнем участке происходит сильное изменение подвижности, а на нижнем подвижность практически не изменяется, но сильно растёт концентрация свободных электронов.

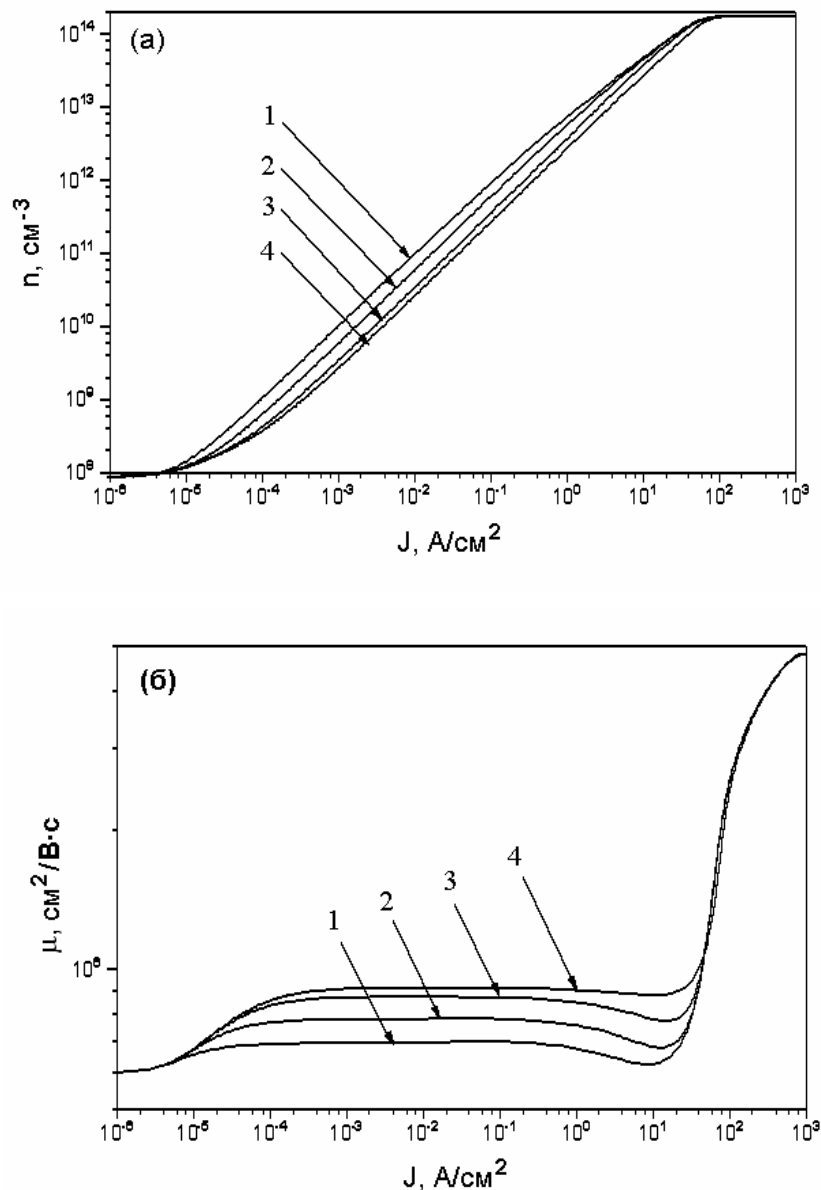


Рисунок 3.3. Концентрация электронов (а) и их подвижность (б) в зависимости от тока для ВАХ (1-4), приведённых на рис. 3.2.

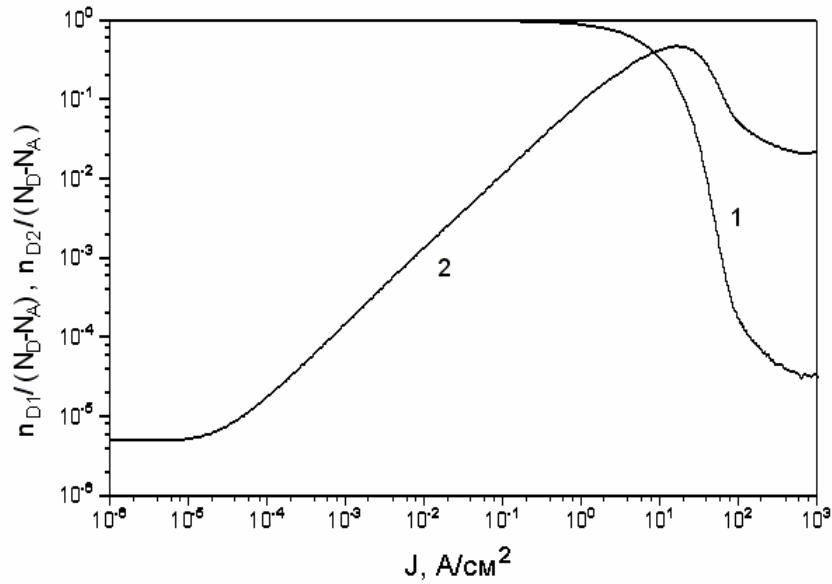


Рисунок 3.4. Концентрация доноров в основном (1) и в возбуждённом (2) состояниях в зависимости от тока для $\gamma_{21} = 10^7 \text{ c}^{-1}$, $N_D = 2 \cdot 10^{14} \text{ см}^{-3}$, $K = 0.1$.

Чтобы понять природу обоих участков S-образности, были проведены расчёты ВАХ при фиксированном значении γ_{21} для разных модификаций кинетического уравнения (3.1). Их результаты показаны на рис. 3.5 для $\gamma_{21} = 10^7 \text{ c}^{-1}$. Здесь жирная линия изображает ВАХ в случае, когда в уравнении (3.1) включены все рассмотренные механизмы рассеяния. Линия 1 соответствует случаю, когда из кинетического уравнения исключены межэлектронные столкновения и неупругое примесное рассеяние. Эта линия описывает S-образность, связанную только с перезарядкой возбуждённых состояний доноров. Такого типа S-образность исследовалась Кастальским и Шёллем. Линия 2 соответствует случаю, когда в уравнении (3.1) включено неупругое рассеяние электронов на примесях, но межэлектронное рассеяние отсутствует. Как видно, при учёте неупругого примесного рассеяния S-образность, связанная с возбуждёнными состояниями, исчезла, но появился другой участок S-образности при больших токах. Отличие этой линии (2) от основной (жирная линия) связано с межэлектронными столкновениями. Линия 3 соответствует искусственно созданной ситуации, когда все примеси

ионизованы, $n = N_D - N_A$, и, следовательно, нет потерь на ионизацию и возбуждение примесей, но межэлектронные столкновения присутствуют. В этом случае происходит только разогрев электронов и изменение их подвижности, а происхождение S-образности хорошо известно: она обусловлена перегривной неустойчивостью, возникающей в условиях, когда межэлектронные столкновения контролируют функцию распределения по энергии, импульс электронов рассеивается на заряженных примесях, а энергия – на РА-фононах [437].

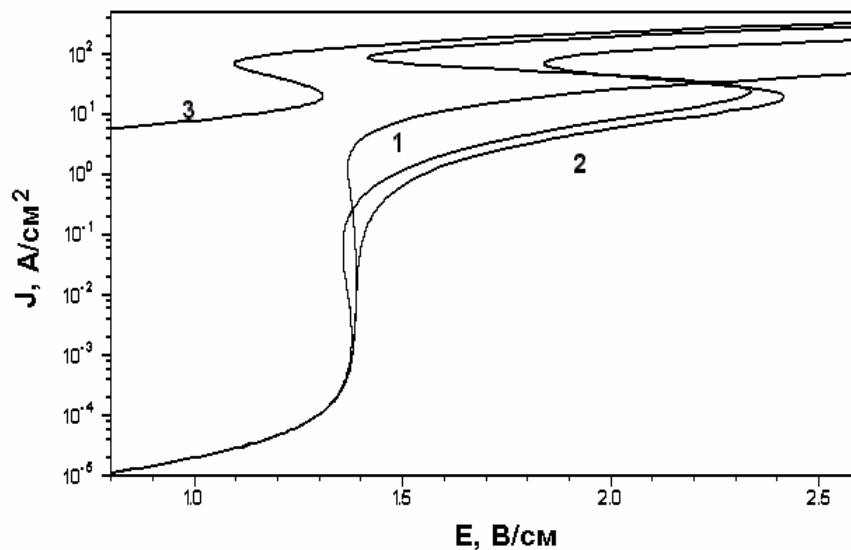


Рисунок 3.5. ВАХ для разных комбинаций механизмов рассеяния ($\gamma_{21} = 10^7 \text{ c}^{-1}$, $N_D = 2 \cdot 10^{14} \text{ см}^{-3}$, $K = 0.1$): жирная линия – включены все механизмы рассеяния, 1 – отсутствуют межэлектронные столкновения и неупругое примесное рассеяние, 2 – отсутствуют межэлектронные столкновения, 3 – ситуация полностью ионизованных примесей.

На рис. 3.6 приведены результаты расчётов коэффициентов ударной ионизации и коэффициента захвата в зависимости от тока для основной ВАХ, показанной на рис. 3.5 жирной линией.

Теперь можно понять происхождение S-образности при больших токах, когда $n \sim N_D - N_A$. Она сопровождается увеличением как концентрации свободных электронов, так и их подвижности. Как видно из рис. 3.6, на этом участке ВАХ происходит увеличение коэффициентов

ударной ионизации с током, несмотря на уменьшение электрического поля, и уменьшение коэффициента захвата электронов на ионизованные примеси. В этой же области токов резко уменьшаются концентрации нейтральных доноров n_{D1} и n_{D2} (рис. 3.4).

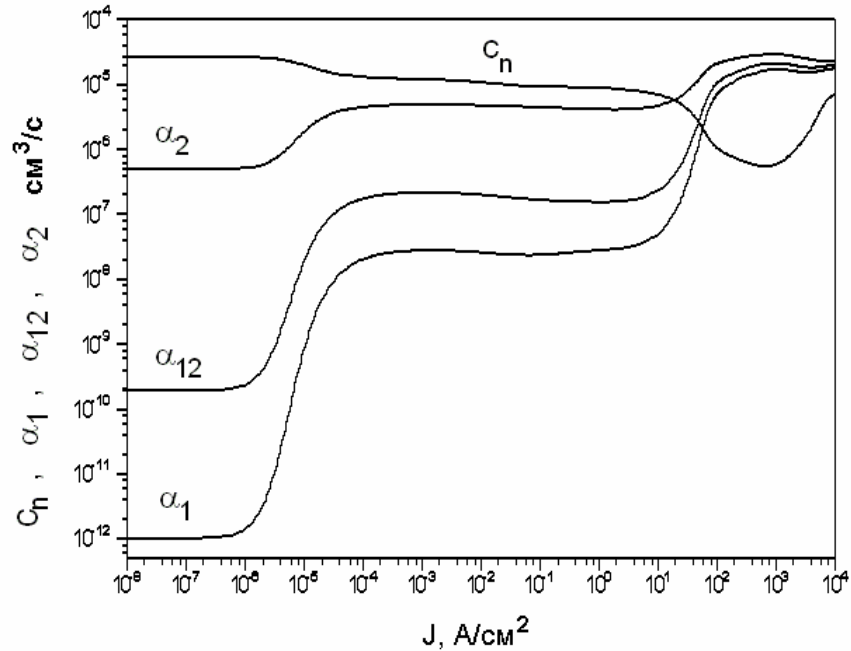


Рисунок 3.6. Коэффициенты ударной ионизации $\alpha_1, \alpha_{12}, \alpha_2$ и коэффициент захвата C_n в зависимости от тока, $\gamma_{21} = 10^7 \text{ c}^{-1}$, $N_D = 2 \cdot 10^{14} \text{ см}^{-3}$, $K = 0.1$.

Имеются два механизма S-образности на рассматриваемом участке ВАХ. Один из них связан с уже упомянутой перегревной неустойчивостью, которая становится возможной благодаря тому, что межэлектронные столкновения контролируют функцию распределения по энергии вплоть до энергии ионизации. Другой обусловлен тем фактом, что при ионизации примесей происходит увеличение времени релаксации энергии электронов с ростом тока, которое обусловлено уменьшением концентрации нейтральных примесей и, соответственно, ослаблением неупругого примесного рассеяния. Этот факт приводит к неустойчивости, которую можно объяснить следующим образом. Пусть произошла флуктуация увеличения энергии электронов. Она вызывает увеличение темпа ионизации и, следовательно,

уменьшение концентрации нейтральных доноров. В результате уменьшаются потери энергии на неупругое примесное рассеяние. Это означает, что при заданном поле увеличивается энергия электронов. Таким образом, первоначальная флуктуация усиливается. Этот механизм неустойчивости и реализуется в виде S-образного участка на ВАХ – 2 на рис. 3.5.

На основной ВАХ оба механизма (перегревная неустойчивость и механизм, связанный с уменьшением потерь энергии при ионизации примесей) вносят сопоставимый вклад в результирующую S-образность.

Обратимся к S-образности при малых токах. Как видно из рис. 3.5, она возникает благодаря межэлектронному рассеянию. Из рис. 3.3 следует, что в этой области токов подвижность остаётся практически постоянной, а концентрация электронов быстро увеличивается с током, причём величина её такова, что межэлектронное рассеяние начинает играть существенную роль в области энергий до порога неупругого примесного рассеяния ($\varepsilon < \varepsilon_2$). Следовательно, причину неустойчивости следует искать в том, что благодаря межэлектронным столкновениям увеличивается концентрация свободных электронов. Действительно, в этом случае флуктуация увеличения концентрации электронов будет вызывать увеличение частоты межэлектронных столкновений, что в свою очередь приведёт к дальнейшему увеличению концентрации электронов и т.д. (т.е. возникнет неустойчивость).

Механизм увеличения концентрации свободных электронов с ростом частоты межэлектронных столкновений связан с уменьшением коэффициента захвата электронов на доноры. Это следует из рис. 3.7, на котором изображены две функции распределения при одном поле: первая (1) получена с учётом межэлектронных столкновений, а вторая (2) – при их исключении. Обе функции нормированы на единицу. Коэффициент захвата определяется функцией распределения на уровне протекания. Первая функция вблизи уровня протекания ниже (см. рис. 3.7а), а следовательно, межэлектронные столкновения приводят к уменьшению коэффициента захвата. Уменьшение c_n с током демонстрирует рис. 3.6. Исчезновение

отрицательного дифференциального сопротивления с ростом тока на этом участке ВАХ обусловлено увеличением темпа потерь энергии, связанных с возбуждением и ионизацией примесей.

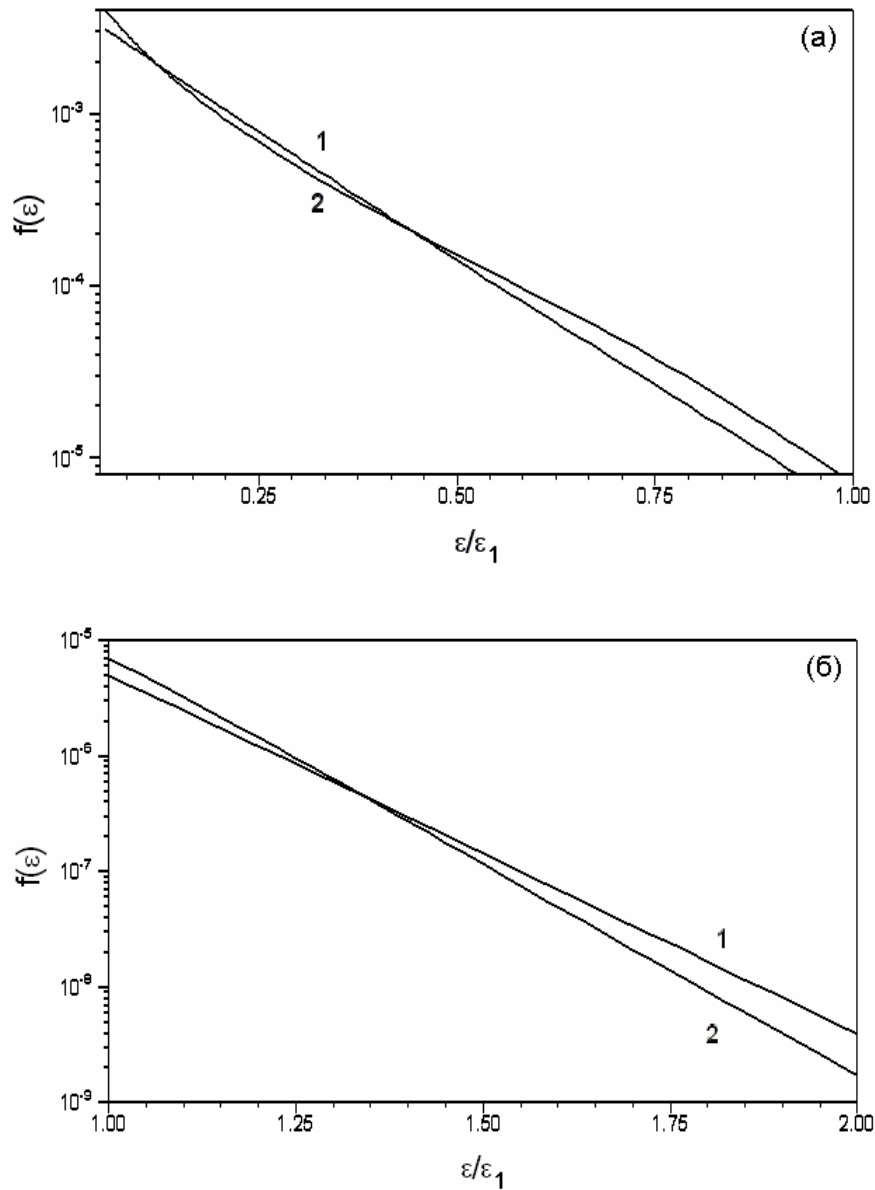


Рисунок 3.7. Функции распределения при наличии (1) и при отсутствии (2) межэлектронных столкновений для энергий до (а) и выше (б) порога ионизации основного состояния. $\gamma_{21} = 10^7 \text{ c}^{-1}$, $N_D = 2 \cdot 10^{14} \text{ см}^{-3}$, $K = 0.1$, $E = 1.48 \text{ В / см}$.

Особенно важную роль играют процессы ионизации возбужденного состояния, интенсивность которых быстро растёт с током вследствие увеличения концентрации возбуждённых доноров (см. рис. 3.4). Потери

энергии на ионизацию возбуждённых доноров затрудняют электронам приобретение энергии для возбуждения и ионизации основного состояния, и поэтому для поддержания пробоя требуется увеличение электрического поля.

С потерями энергии на ионизацию возбуждённых примесей связана сильная зависимость ВАХ от γ_{21} (см. рис. 3.2). При увеличении γ_{21} концентрация n_{D2} , уменьшается и соответственно уменьшаются потери на ионизацию возбуждённого состояния. В результате нижний S-образный участок расширяется и при достаточно большой концентрации N_D сливается с верхним (см. рис. 3.2, кривая 5). Благодаря потерям энергии при неупругом примесном рассеянии участок отрицательного дифференциального сопротивления, рассмотренного в [433, 434], сильно сокращается или исчезает вовсе (рис. 3.5). Так, если $\gamma_{21} = 10^7 \text{ c}^{-1}$, то S-образность за счёт этого механизма отсутствует; она возникает лишь при $\gamma_{21} > 3 \cdot 10^7 \text{ c}^{-1}$. В последнем случае перезарядка возбуждённого состояния доноров увеличивает отрицательное дифференциальное сопротивление и расширяет область S-образности при малых токах.

И ещё один эффект связан с неупругим рассеянием электронов на примесях – это уменьшение подвижности электронов в области пробоя (рис. 3.3б). Оно связано с ростом концентрации возбуждённых доноров и обусловлено потерями энергии на их ионизацию. Такое поведение подвижности наблюдалось в [435, 436].

Роль межэлектронных столкновений в формировании S-образности при НТПП впервые совершенно справедливо была отмечена Куросавой [448] применительно к Ge; межэлектронные столкновения привлекались позднее в [445] для объяснения бистабильности в CdTe.

Предложенная модель применима при достаточно малой концентрации примесей, когда флуктуационный потенциал мал по сравнению с характерными энергиями электронов, – строго говоря, при $\varepsilon_p < T$. При увеличении легирования ε_p увеличивается. Однако пока $\varepsilon_p < \varepsilon_2$, полученные

нами результаты качественно сохраняются. При $\varepsilon_p > \varepsilon_2$ требуется принципиально иной подход с учётом флуктуационных ям и их деформирования под действием внешнего электрического поля [449] и экранирования свободными электронами. Величины γ_{21} , ε_2 , σ_2 и ε_p можно рассматривать как подгоночные параметры представленной модели, которые должны определяться из сопоставления с экспериментом.

В заключение главы сформулируем некоторые выводы.

В данной части работы была рассмотрена проблема математического моделирования процессов низкотемпературного примесного пробоя в GaAs. Целью исследований было построение численного метода расчета и исследование стационарных вольт-амперных характеристик (ВАХ) кристаллов GaAs. В качестве базовой модели исследования выбрано кинетическое уравнение Фоккера-Планка для функции распределения электронов по энергии в зоне проводимости, дополняемое уравнениями связи для концентрации электронов и плотности тока. Особенность и трудность решения поставленной задачи состояла в нелокальной нелинейности системы интегро-дифференциальных уравнений, возникающей при расчетах ВАХ, а также в наличии механизмов отрицательной дифференциальной проводимости (ОДП), приводящих к би- и мультстабильным вольт-амперным характеристикам. В результате исследований был предложен оригинальный конечно-разностный метод решения кинетического уравнения, дополняемый методом продолжения по параметру и итерационным процессом Ньютона. С помощью разработанной на его основе программы проанализированы отдельные механизмы ОДП и рассчитаны ВАХ для условий, близких к эксперименту. На основе проведенных расчетов впервые получено единое описание процессов низкотемпературного примесного пробоя в GaAs при различных механизмах рассеяния. Основные результаты опубликованы в [A1, A2, A45, A46].

ГЛАВА 4

Моделирование процессов латерального переноса фотоиндуцированных носителей заряда в гетероструктурах с двумерным электронным газом

В данной главе рассматривается задача моделирования динамики фотоиндуцированных носителей заряда в слое двумерного электронного газа наноструктуры на основе AlGaAs. Данная прикладная задача возникла в связи с необходимостью создания методов неразрушающей диагностики наноструктур с двумерным электронным газом на этапе их роста. Для целей моделирования была выбрана диффузионно-дрейфовая модель, разработаны численные методы ее анализа в одномерном и двумерном случаях на регулярных декартовых сетках, созданы программные реализации. С помощью разработанных программ проведено моделирование процессов фотовозбуждения. В численных экспериментах подтверждена возможность оптической диагностики качества слоя с двумерным электронным газом (2DЭГ).

4.1 Введение в проблему

В настоящее время в связи с быстрым развитием элементной базы вычислительной техники и средств связи особенно актуальными стали исследования электронных процессов, происходящих в полупроводниковых структурах субмикронных размеров. Целью таких исследований является создание новых физических принципов хранения, обработки и передачи информации, а также методов диагностики элементов интегральных схем. Последнее чрезвычайно важно, поскольку хорошая диагностика в значительной мере определяет выход конечной продукции и, следовательно, ее себестоимость. Существенно, чтобы методы диагностики были неразрушающими и применимы *in situ*, то есть при их использовании не нарушался технологический процесс производства микросхем. Для создания таких методов обычно используются оптическое воздействие на иссле-

дуемую структуру и регистрация откликов фотолюминесценции и/или фотоотражения. Существующие методы позволяют определять энергетический спектр электронов, но не дают информацию о процессах переноса носителей заряда в активных слоях структур (подвижность носителей заряда, рекомбинационные характеристики), которые принципиально важны для функционирования устройств.

При изучении оптического воздействия на полупроводниковые структуры основное внимание долго уделялось однородному освещению. Однако затем возрос интерес к локальному оптическому воздействию на гетероструктуры, например сфокусированным лазерным лучом [450-455]. Он связан как с развитием бесконтактных методов диагностики с пространственным сканированием, так и с новыми физическими явлениями, которые возникают в условиях локального освещения. Одно из наиболее интересных явлений состоит в том, что эффект оптического воздействия обнаруживается на чрезвычайно больших расстояниях от места воздействия в плоскости гетероструктуры. Так, в работе [456] было установлено, что при освещении части поверхности селективно-легированной гетероструктуры эффект освещения, измеряемый по отражению зондирующего луча света, обнаруживался в тени на расстоянии до 3 мм. Как оказалось, этот эффект возникает при достаточно высокой подвижности электронов. Он до сих пор не получил точного объяснения, но с ним связываются перспективы приложений для бесконтактного определения подвижности или проводимости 2D электронного газа.

В работах [A3, A4] был предложен механизм латерального переноса фотовозбужденных носителей заряда вдоль слоя 2DЭГ гетероструктуры. Он состоит в том, что генерированные светом электроны и дырки разделяются встроенным электрическим полем гетероперехода к противоположным поверхностям буферного слоя и, будучи разделёнными, переносятся вдоль плоскости гетероструктуры. Расстояние, на которое переносятся неравновесные носители, достигает большой величины благодаря большому времени

жизни разделённых электронов и дырок и высокой проводимости 2DЭГ. Длина латерального переноса зависит от величины изгиба зон гетероперехода, температуры, концентрации поверхностных состояний и скорости поверхностной рекомбинации на поверхности буферного слоя, вблизи которой движутся дырки. По величине она может достигать сантиметров.

Исследование процессов латерального переноса в рамках данной работы было выполнено для гетероструктур типа AlGaAs/GaAs. Такие гетероструктуры рассматриваются в качестве основы элементной базы микроэлектроники нового поколения. К тому же параллельно с теоретическими и численными экспериментами проводился натурный эксперимент именно для этих структур. Методика эксперимента состоит в том, что исследуемая структура освещается локально лучом света, генерирующим свободные носители заряда, а регистрация откликов фотоотражения и/или фотолюминесценции производится также локально, но на некотором расстоянии от места возбуждения (рис. 4.1). В таком случае регистрируемые отклики определяются не только энергетическим спектром электронов, но и их переносом в плоскости гетероструктуры от точки возбуждения к точке регистрации.

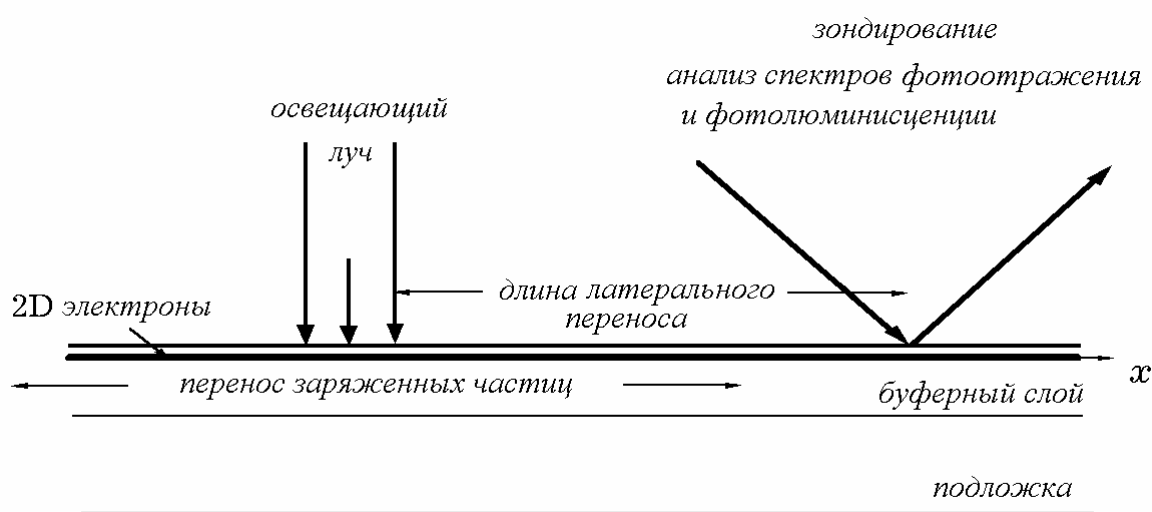


Рисунок 4.1. Схема натурального эксперимента.

Настоящая диссертационная работа включала создание численных методов и исследование с их помощью математической модели, предложенной В.А. Сабликовым в [А4] для описания неравновесных процессов переноса фотовозбужденных носителей заряда в селективно легированной гетероструктуре типа AlGaAs/GaAs с двумерным электронным газом. Используемая математическая модель базировалась на самосогласованном описании динамики электронов в потенциальных ямах, где движение электронов квантовано, и в тех слоях структуры, где электроны движутся как свободные частицы. Модель использует разделение всей электронной системы гетероструктуры на подсистему электронов в объеме активного слоя (GaAs) и подсистему двумерных электронов, локализованных в квантовой яме у гетерограницы. Перенос объемных и двумерных электронов вдоль квантового слоя описывается в рамках диффузионно-дрейфового приближения. Взаимодействие между этими подсистемами описывается кинетическими коэффициентами, которые вводятся в граничные условия для объемных электронов и в уравнения переноса двумерных электронов.

Численное исследование используемой математической модели проводилось сначала для случая однородного освещения, когда поставленная задача становится одномерной и описывает перенос электронов и дырок поперек активного слоя. Затем рассматривался перенос электронов и дырок вдоль активного слоя в квазиодномерной и полностью двумерной постановках.

4.2 Постановка задачи

Типичная селективно легированная гетероструктура представляет собой следующую систему слоев, выращенных на подложке из GaAs (см. рис. 4.2а): 1 – буферный слой со сверхрешёткой (20 пар слоев GaAs/AlGaAs толщиной ~ 1.5 нм каждый), 2 – активный слой GaAs толщиной $0.3 \div 1$ мкм (содержащий обычно небольшое количество акцепторов), 3 – спейсер – слой

нелегированного AlGaAs толщиной $\sim 5\text{ нм}$, 4 – слой сильно легированного AlGaAs толщиной $\sim 30\text{ нм}$, 5 – защитный слой нелегированного GaAs ($\sim 5\text{ нм}$). Энергетическая диаграмма показана на рис. 4.2б. В активном слое GaAs вблизи гетерограницы GaAs/AlGaAs ($z = 0$) имеется потенциальная яма (слой $(0, \delta)$), в которой движение электронов по оси z квантовано. При низких температурах электроны в потенциальной яме образуют вырожденный двумерный газ. Диапазон температур, в котором сохраняется квантование оценивается ниже (см. п. 4.3)

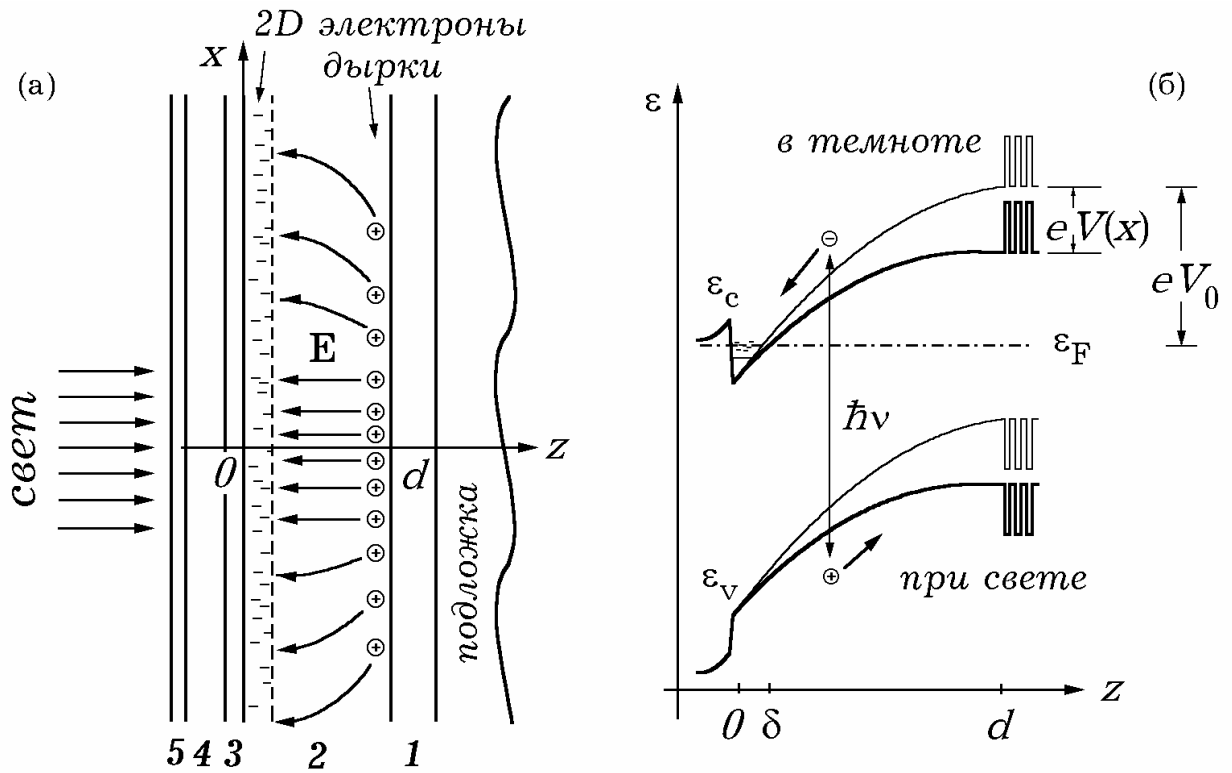


Рисунок 4.2. Геометрия (а) и энергетическая диаграмма (б) гетероструктуры. На рис. (а) цифрами 1-5 обозначены номера слоев структуры.

Рассмотрим процессы, происходящие в гетероструктуре при локальном оптическом воздействии, при котором происходит генерация электронов и дырок. Неравновесные носители заряда возникают в основном в активном слое GaAs (δ, d). Генерированные электроны и дырки разделяются

встроенным электрическим полем гетероперехода, как это показано на рис. 4.2б. При этом электроны попадают в слой двумерного электронного газа $(0, \delta)$, а дырки под действием встроенного электрического поля гетероперехода дрейфуют и диффундируют к противоположной поверхности $z = d$ активного слоя, где они накапливаются вблизи сверхрешеточного буфера. Таким образом, между краями активного слоя возникает неравновесная разность потенциалов $V(x, y)$, которая зависит от координат в плоскости гетероструктуры и стремится к нулю с увеличением расстояния r от центра светового луча. Поскольку потенциал $V(x, y)$ неоднороден вдоль поверхности, то имеется тангенциальное электрическое поле E_r в плоскости гетероструктуры. Это поле максимально вблизи тыловой поверхности $z = d$ активного слоя и минимально вблизи гетерограницы в силу высокой проводимости двумерного электронного газа. Поле E_r вызывает дрейф дырок вдоль поверхности $z = d$ в сторону от светового пятна. Этот процесс сопровождается изменением плотности заряда двумерного электронного газа, который локально компенсирует неравновесный дырочный заряд. Латеральный перенос электронов и дырок ограничивается только рекомбинацией, которая затруднена из-за наличия потенциального барьера, разделяющего электроны и дырки и увеличивающегося при удалении от освещаемой области. В результате неравновесные носители заряда могут распространиться на значительное расстояние.

Основные процессы переноса носителей заряда происходят в активном слое, а именно, в его объеме, где электроны и дырки движутся как свободные частицы, а также в квантовой яме, где электроны могут двигаться только вдоль плоскости структуры, а поведение дырок мало существенно. На перенос носителей заряда в активном слое оказывают влияние и прилегающие к нему слои. Расположенный справа сверхрешеточный буфер определяет темп рекомбинации неравновесных носителей на поверхности раздела $(z = d)$, которая может быть описана в терминах скорости поверхностной

рекомбинации [26, 457]. Слой AlGaAs, расположенный слева от активного слоя, играет важную роль, поскольку в нем сосредоточены положительно заряженные доноры, заряд которых экранируется свободными носителями заряда в активном слое. Однако при освещении заряд доноров изменяется слабо, поэтому будем считать, что слой AlGaAs имеет фиксированный заряд с поверхностной плотностью σ_1 , не изменяющейся при освещении.

Всю систему электронов активного слоя разделим на подсистему электронов в объеме активного слоя и подсистему двумерных электронов. Взаимодействие между этими подсистемами происходит путем электронных переходов. Для описания переноса носителей заряда в объеме используем следующий вариант диффузионно-дрейфовой модели

$$\frac{\partial n}{\partial t} = +\frac{1}{e} \operatorname{div} \mathbf{j}_n + G - R_n, \quad (4.1)$$

$$\frac{\partial p}{\partial t} = -\frac{1}{e} \operatorname{div} \mathbf{j}_p + G - R_p, \quad (4.2)$$

$$\frac{\partial n_A}{\partial t} = R_n - R_p, \quad (4.3)$$

$$\mathbf{j}_n = e\mu_n \mathbf{E} + eD_n \nabla n, \quad \mathbf{j}_p = e\mu_p \mathbf{E} - eD_p \nabla p, \quad G = \frac{\alpha I_0}{h\nu} \exp[-\alpha z],$$

$$R_n = C_n n (N_A - n_A) - C_n n_1 n_A + B(np - n_i^2),$$

$$R_p = C_p p n_A - C_p p_1 (N_A - n_A) + B(np - n_i^2).$$

Здесь n и p – концентрации электронов и дырок, n_A – концентрация электронов на акцепторах, $\mathbf{j}_n, \mathbf{j}_p$ – плотности электронного и дырочного токов, G – темп оптической генерации носителей заряда, R_n, R_p – темпы генерационно-рекомбинационных процессов (для электронов и дырок), связанных с межзонной рекомбинацией и захватом носителей заряда на акцепторы, \mathbf{E} – вектор напряженности электрического поля, e – элементарный заряд, μ_n, μ_p и D_n, D_p – подвижности и коэффициенты диффузии электронов и дырок, I_0 – интенсивность падающего оптического

излучения, α – коэффициент поглощения света, $h\nu$ – энергия световых квантов, B – коэффициент межзонной рекомбинации в объёме, n_i – собственная концентрация носителей заряда, C_n, C_p – коэффициенты захвата электронов и дырок на акцепторы, N_A – концентрация акцепторов, n_1 и p_1 – концентрации электронов в зоне проводимости и дырок в валентной зоне в случае, когда уровень Ферми ε_F совпадает с энергетическим уровнем ε_A акцепторов.

Концентрация двумерного электронного газа $n_s(x, y)$ описывается двумерным уравнением непрерывности

$$\frac{\partial n_s}{\partial t} = +\frac{1}{e} \operatorname{div}_{x,y} \mathbf{j}_s - R_{sn} - R_{sp}, \quad (4.4)$$

$$\mathbf{j}_s = e\mu_s \mathbf{E}_{x,y} + eD_s \nabla_{x,y} n_s, \quad R_{sn} = -C_s n(z = \delta) + \alpha_T n_s,$$

$$R_{sp} = B_s (n_s p(z = \delta) - n_{s0} p_0(z = \delta)).$$

Здесь \mathbf{j}_s – плотность тока двумерных электронов вдоль плоскости потенциальной ямы, R_{sn} и R_{sp} – темпы электронных переходов между потенциальной ямой и объёмом в зону проводимости и в валентную зону, μ_s и D_s – подвижность и коэффициент диффузии электронов в потенциальной яме, C_s – коэффициент захвата объёмных электронов в яму, α_T – коэффициент тепловой генерации двумерных электронов в объём, B_s – коэффициент межзонной рекомбинации двумерных электронов, n_{s0} и p_0 – равновесные концентрации двумерных электронов в яме и дырок в объёме.

Данная система уравнений должна быть дополнена уравнением кинетики для концентрации электронов n_t на поверхностных состояниях на границе $z = d$ активного слоя и слоя свёрхрешеточного буфера

$$\frac{\partial n_t}{\partial t} = -R_{tn} - R_{tp}, \quad (4.5)$$

$$R_{tn} = -C_{tn} n(z = d)(N_t - n_t) + C_{tn} n_{t1} n_t,$$

$$R_{tp} = C_{tp} p(z = d) n_t - C_{tp} p_{t1} (N_t - n_t).$$

Здесь R_m и R_p – темпы переходов электронов и дырок между уровнем поверхностных состояний и соответствующей зоной, C_m и C_p – коэффициенты захвата электронов и дырок на поверхностный уровень, N_t – концентрация поверхностных состояний, n_{t1} , p_{t1} – концентрации электронов в зоне проводимости и дырок в валентной зоне в случае, когда уровень Ферми ε_F совпадает с энергетическим уровнем ε_t поверхностных состояний.

Электрическое поле во всей структуре описывается уравнением

$$\operatorname{div}(\varepsilon \nabla \varphi) = -4\pi\rho, \quad (4.6)$$

$$\rho = \begin{cases} 0, & z < \delta, \\ e(p - n - n_A), & \delta < z < d, \\ 0, & z > d, \end{cases} \quad \varepsilon = \begin{cases} \varepsilon_1, & z < \delta, \\ \varepsilon_0, & \delta < z < d, \\ \varepsilon_2, & z > d. \end{cases}$$

Здесь φ – потенциал электрического поля, ρ – объёмная плотность зарядов, ε – диэлектрическая проницаемость, зависящая от состава слоев структуры.

Уравнения и условия связи (4.1)–(4.6) дополняются следующими начальными условиями

$$n|_{t=0} = n_0, \quad p|_{t=0} = p_0, \quad n_A|_{t=0} = n_{A0}, \quad n_s|_{t=0} = n_{s0}, \quad n_t|_{t=0} = n_{t0}, \quad (4.7)$$

где n_0 , n_{A0} и n_{t0} – равновесные концентрации свободных электронов, электронов на акцепторах и на поверхностных состояниях.

Для формулировки граничных условий к уравнениям (4.1), (4.2) и (4.6) введем поверхности Σ_1 , Σ_δ , Σ_d , Σ_2 , ограничивающие слои структуры $z < 0$, $0 < z < \delta$, $\delta < z < d$, $z > d$. Общие участки $z = 0$, $z = \delta$, $z = d$ этих поверхностей обозначим соответственно через $\Sigma_{1\delta}$, $\Sigma_{\delta d}$, Σ_{d2} . В данных обозначениях граничные условия для уравнений (4.1), (4.2) имеют вид

$$(\mathbf{j}_n, \mathbf{v})|_{\Sigma_d} = J_n, \quad (\mathbf{j}_p, \mathbf{v})|_{\Sigma_d} = J_p, \quad (4.8)$$

$$J_n = \begin{cases} 0, & P \in \Sigma_d^*, \\ -R_{sn}, & P \in \Sigma_{\delta d}, \\ +R_m, & P \in \Sigma_{d2}, \end{cases} \quad J_p = \begin{cases} 0, & P \in \Sigma_d^*, \\ -R_{sp}, & P \in \Sigma_{\delta d}, \\ +R_p, & P \in \Sigma_{d2}. \end{cases}$$

Здесь \mathbf{v} – внешняя нормаль к Σ_d , $\Sigma_d^* = \Sigma_d \setminus (\Sigma_{\delta d} \cup \Sigma_{d2})$, $P = P(x, y, z)$ – точка соответствующей поверхности.

Граничные условия для уравнения Пуассона (4.6) имеют вид

$$\begin{aligned} (\epsilon \nabla \varphi, \mathbf{v}) \Big|_{\Sigma} &= 0, \quad (\epsilon \nabla \varphi, \mathbf{v}) \Big|_{\Sigma_{1\delta}} = +4\pi e \sigma_1, \\ (\epsilon \nabla \varphi, \mathbf{v}) \Big|_{\Sigma_{\delta d}} &= -4\pi e n_s, \quad (\epsilon \nabla \varphi, \mathbf{v}) \Big|_{\Sigma_{d2}} = +4\pi e n_t^*, \end{aligned} \quad (4.9)$$

где Σ – поверхность структуры, n_t^* – концентрация электронов или дырок на поверхностных состояниях в зависимости от типа последних.

Поскольку поставленная задача нелинейна и, вообще говоря, может иметь несколько решений, то для выбора решения, адекватного физической ситуации, необходимы дополнительные условия. В качестве таковых мы потребовали, чтобы начальное состояние системы было состоянием термодинамического равновесия. Поэтому первый вопрос, который возникает при решении данной задачи, заключается в расчете равновесных концентраций n_0 , p_0 , N_{A0} , n_{s0} , n_{t0} и поля.

4.3 Равновесное состояние

Состояние термодинамического равновесия характеризуется тем, что все компоненты системы определяются одним общим химическим потенциалом (уровнем Ферми ϵ_F), не зависящим от координат. При этом газ свободных электронов и дырок в объеме можно считать невырожденным:

$$n_0 = N_c \exp \left[\frac{\epsilon_F + e\varphi_0 - \epsilon_c}{k_B T} \right], \quad p_0 = N_v \exp \left[\frac{\epsilon_v - \epsilon_F - e\varphi_0}{k_B T} \right]. \quad (4.10)$$

Здесь N_c и N_v – эффективные плотности состояний в зоне проводимости и в валентной зоне, $\varphi_0(z)$ – равновесный потенциал электрического поля, $\epsilon_c(z)$ и $\epsilon_v(z)$ – края зоны проводимости и валентной зоны, T – температура, k_B – постоянная Больцмана.

Равновесная концентрация электронов на акцепторах определяется выражением

$$n_{A0} = N_A \frac{C_n n_0 + C_p p_1}{C_n (n_0 + n_1) + C_p (p_0 + p_1)}. \quad (4.11)$$

Равновесная концентрация двумерных электронов и толщина слоя δ , в котором они сосредоточены, определяются приближенно [45] путем решения уравнения Шредингера в приближении треугольной ямы для потенциала, ограничивающего движение электронов по оси z (см. рис. 4.3). Решение этой задачи приводит к следующему результату:

$$n_{s0} = n_s^* \ln \left[1 + \exp \left[\frac{\varepsilon_F - \varepsilon_0}{k_B T} \right] \right], \quad (4.12)$$

$$\delta = -\frac{\Delta\varphi_0}{E_\delta}. \quad (4.13)$$

Здесь n_s^* – эффективная плотность двумерных состояний в квантовой яме, умноженная на $k_B T$, ε_0 – энергия основного состояния, E_δ – z -компонента электрического поля в яме, $\Delta\varphi_0$ – разность потенциалов на границах $z = \delta$ и $z = 0$ квантовой ямы.

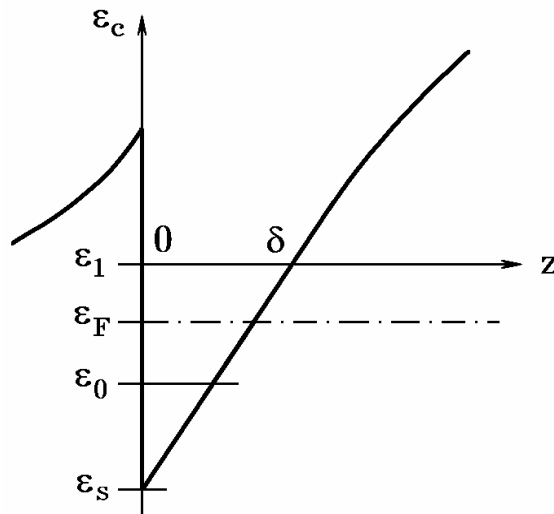


Рисунок 4.3. Край зоны проводимости вблизи потенциальной ямы.

Мы предполагаем, что уровень Ферми всей системы лежит между двумя уровнями энергии ε_0 и ε_1 (рис. 4.3), где ε_1 – следующее после основного состояние двумерных электронов в яме. Учитывая фермиевский вид функции распределения, количество двумерных электронов с энергией

ε_1 на порядки меньше, чем в основном состоянии. Поэтому движением двумерных электронов в состоянии ε_1 мы пренебрегаем. Кроме того, нами не учитываются переходы электронов из основного состояния в следующее и обратно. Также предполагается, что выше уровня ε_1 начинается квазинепрерывный спектр состояний объемных электронов.

Для того, чтобы указанные выше предположения имели место, необходимо, чтобы величина тепловых флуктуаций энергии двумерных электронов $k_B T$ была много меньше разницы энергий $\Delta\varepsilon = \varepsilon_1 - \varepsilon_0$, например, $k_B T \leq 0.1 \div 0.3 \Delta\varepsilon$. Из работ [458, 459] следует, что для рассматриваемой гетероструктуры $\varepsilon_0 \approx 55 \text{ нм}$, $\varepsilon_1 \approx 105 \text{ нм}$, и, таким образом, диапазон допустимых температур достигает 174 К. Поскольку эта граница несколько условна, ниже рассматривались и более высокие температуры: 200 К и выше.

Итак, в выбранном диапазоне температур (до 200 К) учитывается только динамика двумерных электронов, находящихся в основном состоянии. При решении электростатической задачи полный заряд двумерных электронов учитывается с помощью введения поверхностной плотности заряда $-en_s$ в плоскости $z = \delta$.

Более точно положение уровней ε_0 , ε_1 и минимума края зоны проводимости в яме ε_s можно определить через потенциал $\varphi_0(z = \delta)$ из соотношений

$$\begin{aligned} \varepsilon_0 &= -e\varphi_0(z = \delta) - \Delta\varepsilon_{10}, & \varepsilon_1 &= -e\varphi_0(z = \delta), & \varepsilon_s &= -e\varphi_0(z = \delta) - \Delta\varepsilon_{1s}, \\ \Delta\varepsilon_{10} &= \Delta\varepsilon_{1s} - \Delta\varepsilon_{0s}, & \Delta\varepsilon_{0s} &= A_0 (eE_\delta)^{2/3}, & \Delta\varepsilon_{1s} &= A_1 (eE_\delta)^{2/3}, \end{aligned} \quad (4.14)$$

где A_0, A_1 – положительные константы [45].

Величины E_δ и $\Delta\varphi_0$ находятся из условий непрерывности z -компоненты вектора электрической индукции и потенциала на поверхностях $z = 0$ и $z = \delta$:

$$\begin{aligned} \varepsilon_1 E_z(z = 0 - 0) &= \varepsilon_0 E_\delta - 4\pi e\sigma_1, & \varepsilon_0 E_\delta &= \varepsilon_0 E_z(z = \delta + 0) + 4\pi en_{s0}, \\ \varphi_0(z = 0) &= \varphi_0(z = \delta) + \frac{\Delta\varepsilon_{1s}}{e}. \end{aligned} \quad (4.15)$$

Коэффициент диффузии двумерных электронов и их подвижность связаны соотношением, следующим из требования $\mathbf{j}_s = 0$ в состоянии термодинамического равновесия. В рамках использованного приближения эта связь имеет вид

$$D_s = D_s(n_s) = \frac{\mu_s k_B T}{e} \frac{n_s}{n_s^*} \left(1 - \exp \left[\frac{n_s}{n_s^*} \right] \right)^{-1}. \quad (4.16)$$

Для равновесной концентрации электронов на поверхностных состояниях n_{t0} справедлива формула (см., например, [37])

$$n_{t0} = N_t \left(1 + \exp \left[\frac{\varepsilon_F + e\varphi_0(z=d) - \varepsilon_t}{k_B T} \right] \right)^{-1}. \quad (4.17)$$

Описание равновесного состояния системы замыкается уравнением (4.6) для потенциала φ_0 электрического поля.

При анализе уравнений, описывающих равновесное состояние структуры, нетрудно заметить параметрическую зависимость концентраций n_0 , p_0 , n_{A0} , n_{s0} , n_{t0} от функции $e\varphi_0 + \varepsilon_F$. Поэтому для расчета равновесного состояния достаточно решить нелинейное уравнение Пуассона (4.6).

4.4 Одномерная задача в условиях однородного освещения

Исследование поставленной задачи целесообразно начать со случая однородного освещения идеальной структуры, когда все процессы протекают одинаково в плоскости (x, y) . В этом случае все величины зависят только от координаты z .

4.4.1 Формулировка задачи

В условиях однородного освещения сформулированная выше задача может быть записана следующим образом. Для электронов и дырок в слое

(δ, d) справедливы одномерные уравнения (4.1) и (4.2), в которых токовые слагаемые принимают вид $+\frac{1}{e} \frac{\partial j_{nz}}{\partial z}$ и $-\frac{1}{e} \frac{\partial j_{pz}}{\partial z}$, где

$$j_{nz} = -e\mu_n n \frac{\partial \varphi}{\partial z} + eD_n \frac{\partial n}{\partial z}, \quad j_{pz} = -e\mu_p p \frac{\partial \varphi}{\partial z} - eD_p \frac{\partial p}{\partial z},$$

Уравнения (4.3) и (4.4) для концентраций электронов на акцепторах в объёме и на поверхностных состояниях не изменяются. В уравнении для концентрации электронов в яме (4.5) токовое слагаемое равно нулю.

В условиях однородности структуры и освещения в плоскости (x, y) электрическое поле имеет одну составляющую E_z , которая равна нулю вне активного слоя $(0, d)$. В приближении треугольной ямы поле в слое $(0, \delta)$ является константой, равной E_δ . Из условий (4.15) следует, что

$$E_\delta = \frac{4\pi e \sigma_1}{\epsilon_0}, \quad \delta = A_1 (eE_\delta)^{2/3}. \quad (4.18)$$

В слое (δ, d) потенциал электрического поля φ удовлетворяет одномерному уравнению

$$\frac{\partial^2 \varphi}{\partial z^2} = -4\pi e (p - n - n_A). \quad (4.19)$$

Начальные условия для n, p, n_A, n_s, n_t совпадают с (4.7). Граничные условия для n, p и φ имеют вид

$$j_{nz} = \begin{cases} -R_{sn}, & z = \delta, \\ +R_{in}, & z = d, \end{cases} \quad j_{pz} = \begin{cases} -R_{sp}, & z = \delta, \\ +R_{tp}, & z = d, \end{cases} \quad (4.20)$$

$$\frac{\partial \varphi}{\partial z} = \begin{cases} -\frac{4\pi e}{\epsilon_0} (\sigma_1 - n_s), & z = \delta, \\ +\frac{4\pi e}{\epsilon_0} n_t^*, & z = d. \end{cases}$$

4.4.2 Численный алгоритм

Для численного решения одномерной задачи был выбран метод конечных разностей на неравномерной пространственной сетке $\bar{\omega}_z$ и на

равномерной сетке по времени $\bar{\omega}_i$. С помощью интегро-интерполяционного метода для уравнений (4.1), (4.2) были построены две неявные схемы 2-го порядка аппроксимации по пространству и 1-го – по времени. Обе схемы используют экспоненциальную подгонку, подробно рассмотренную в гл. 1.

Первая полунеявная линейная схема получается в том случае, когда в неявной схеме нелинейные коэффициенты задаются с предыдущего слоя. Эта схема условно устойчива (шаг по пространству $h > 0$, а шаг по времени должен удовлетворять условию $\tau < \tau_0$), однако обладает простотой реализации, так как решается прямым методом (а именно немонотонной прогонкой).

Вторая полностью неявная нелинейная схема, абсолютно устойчива ($h > 0, \tau > 0$), но для ее решения требуется использовать итерационный процесс, например, метод простой итерации, который на каждой итерации также использует метод немонотонной прогонки.

Линейная схема использовалась для получения стационарного решения, нелинейная – для расчета динамики неравновесных процессов. Обе построенные схемы передают основные свойства дифференциальной задачи (неотрицательность концентраций, выполнение закона сохранения заряда) благодаря аппроксимации плотностей тока (в безразмерных переменных):

$$j_{nzh} = D_n \frac{(n_h e_h)_{\bar{z}}}{\bar{e}_h}, \quad j_{pzh} = -D_p \frac{(p_h e_h^{-1})_{\bar{z}}}{\bar{e}_h^{-1}}, \quad e_h = \exp[h_z E_{zh}]. \quad (4.21)$$

Здесь, как и в гл. 1, 2, индексом h обозначаются сеточные аналоги непрерывных функций, индексом \bar{z} – разностные производные назад по координате z , черта над e_h означает усреднение по двум соседним узлам пространственной сетки.

Замыкается разностная задача сеточным аналогом уравнения (4.19) и соответствующими начальными и граничными условиями. Сеточное уравнение (4.19) решается методом прогонки (см. п. 2.2 гл. 2).

Анализ устойчивости и сходимости предложенных схем, который несложно провести с помощью слабого принципа максимума и оценок в энергетических нормах, позволяет утверждать, что предложенные разностные схемы сходятся к решению дифференциальной задачи с точностью $O(\hbar_z^2 + \tau)$ в норме $L_2(\bar{\omega}_z) \times C(\bar{\omega}_t)$ (см. п. 1.2 гл. 1). При этом следует выбирать шаг по времени из условия асимптотической устойчивости:

$$\tau < C \min h_z, \quad h_z > 0, \quad C = \text{const} > 0. \quad (4.22)$$

Завершая обсуждение численного алгоритма, заметим, что использование аппроксимаций (4.21) позволило добиться выполнения слабого принципа максимума (неотрицательности n_h, p_h) при любых шагах пространственной сетки. Кроме того, данный подход позволил достаточно точно передать экспоненциальный характер изменений n, p по z , что труднее достигается при использовании линеаризованных схем.

На основе разработанного численного метода была создана последовательная программа **НЕТ_1D**. С ее помощью были получены результаты, излагающиеся в следующем пункте.

4.4.3 Результаты численного анализа

Приведем далее результаты моделирования, полученные в рамках одномерной модели. Численные расчеты процессов, происходящих в гетероструктуре под действием света, проводились для широкого диапазоне параметров: $T = 30 \div 300K$, $\sigma_1 = 10^{10} \div 10^{12} \text{ см}^{-2}$, $I_0 = 10^{-4} \div 10^2 \text{ Вт} / \text{ см}^2$, $d = 0.3 \div 2 \text{ мкм}$, $\alpha = 2 \cdot 10^4 \text{ см}^{-1}$.

Рассмотрим сначала стационарное состояние электронно-дырочной подсистемы в объеме, сформировавшееся при наличии света. На рис. 4.4 показаны стационарные распределения концентраций электронов и дырок, а также профиль потенциала. Для сравнения также приведены равновесные распределения n_0 , p_0 и φ_0 . Как видно из рисунка, при освещении происходит увеличение концентрации носителей заряда и уменьшается

электрическое поле. Если при отсутствии освещения встроенное электрическое поле существовало во всем слое, то при освещении оно концентрируется вблизи слоя двумерного электронного газа, а вблизи тыловой поверхности активного слоя возникает квазинейтральная электронно-дырочная плазма.

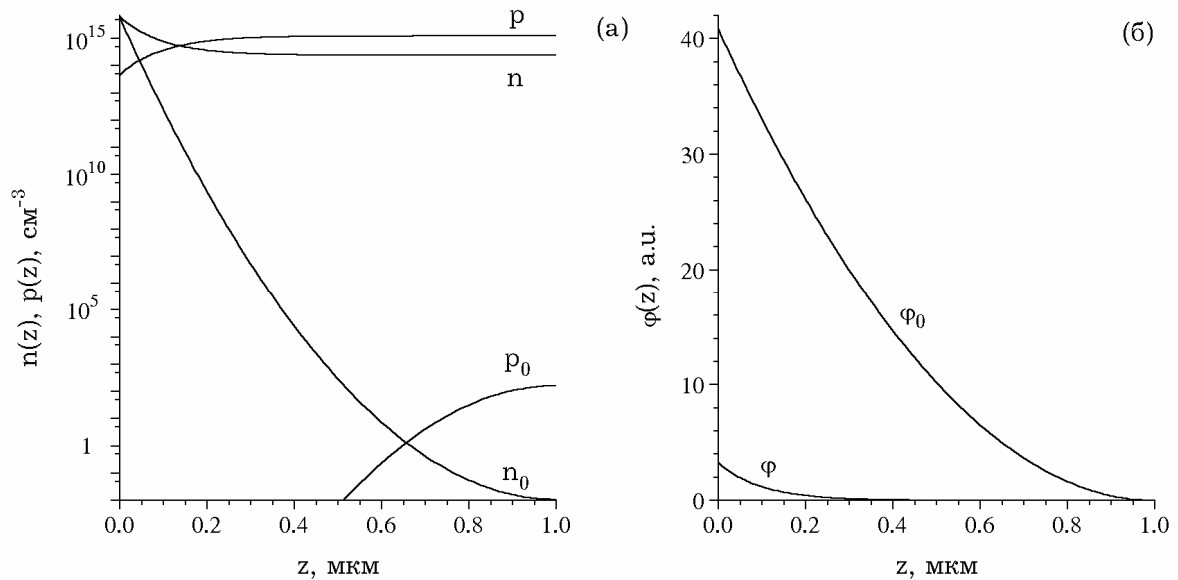


Рисунок 4.4. Равновесные и квазиравновесные распределения концентраций электронов и дырок в объеме (а) и соответствующие им профили потенциала (б), полученные при $T = 200\text{K}$, $\sigma_1 = 10^{12}\text{cm}^{-2}$, $d = 1\text{мкм}$, $I_0 = 10^{-2}\text{Вт} / \text{см}^2$.

Особенностью стационарных пространственных распределений n и p является то, что для установившихся со временем решений произведение np практически не зависит от z . Это означает, что несмотря на освещение, установившееся распределение концентраций свободных носителей заряда остается квазиравновесным:

$$n = N_c \exp\left(-\frac{\varepsilon_c - e\phi(z) - \varepsilon_{F_n}}{k_B T}\right), \quad p = N_v \exp\left(\frac{\varepsilon_v - e\phi(z) - \varepsilon_{F_p}}{k_B T}\right). \quad (4.23)$$

Здесь ε_{F_n} , ε_{F_p} – не зависящие от координаты квазиуровни Ферми электронов и дырок.

Полученный результат справедлив для широкого набора параметров и не изменяется при включении в рассмотрение процессов рекомбинации и захвата неравновесных носителей заряда на поверхностные состояния, хотя при этом изменяется распределение электрического потенциала в структуре. Это видно из рис. 4.5, где показаны три ситуации: при отсутствии поверхностных состояний и при наличии поверхностных состояний акцепторного и донорного типов. Во всех рассмотренных случаях произведение np не зависит от z .

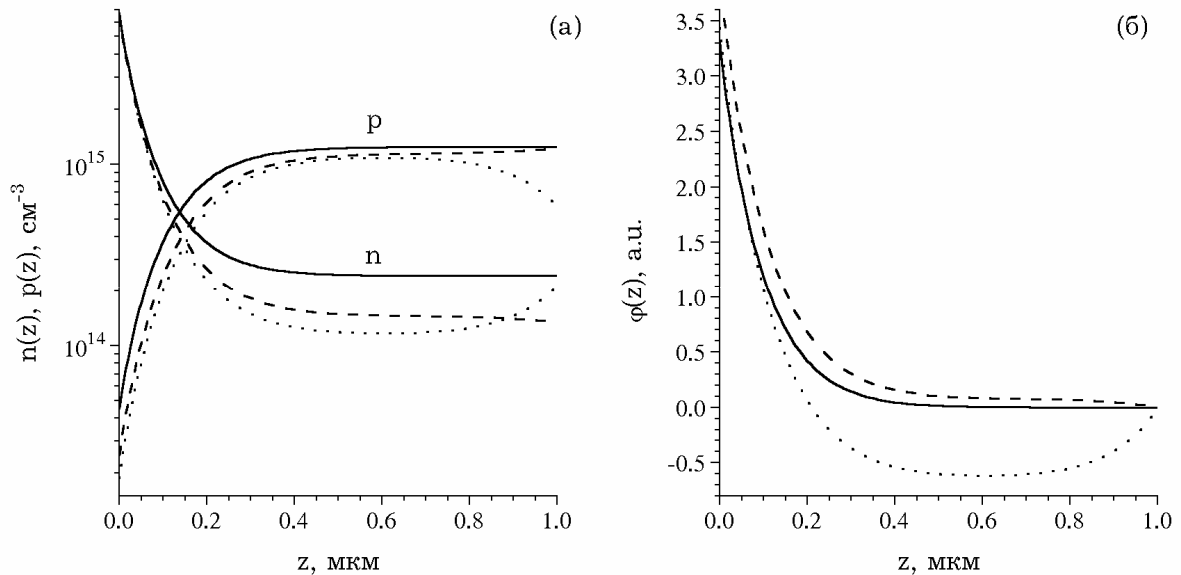


Рисунок 4.5. Квазиравновесные распределения концентраций электронов и дырок в объеме (а) и соответствующие им профили потенциала (б), полученные при отсутствии поверхностных состояний (сплошные кривые) и при наличии поверхностных состояний акцепторного (штриховые кривые) и донорного (пунктирные кривые) типов. Параметры: $T = 200\text{K}$, $\sigma_1 = 10^{12}\text{cm}^{-2}$, $d = 1\text{мкм}$, $I_0 = 10^{-2}\text{Вт} / \text{см}^2$.

Исследование нестационарных решений показывает, что квазиравновесные распределения n и p реализуются только при достаточном

приближении к стационарному состоянию. В нестационарных условиях произведение $n(z,t)p(z,t)$ существенно зависит от пространственной координаты. На рис. 4.6 показаны профили произведения np в различные моменты времени. Как видно из рисунка, квазиравновесие при данных параметрах устанавливается за $6 \div 7$ времен объемной межзонной рекомбинации. В общем случае время установления квазиравновесия сильно зависит от интенсивности света и толщины активного слоя.

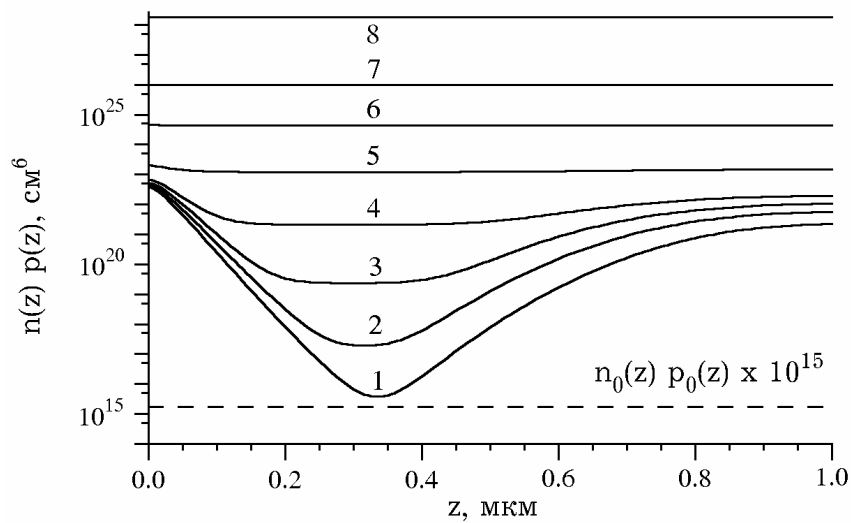


Рисунок 4.6. Распределения np в объеме в различные моменты времени $t = 1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, \infty$ (кривые 1-8) и равновесный профиль n_0p_0 (штриховая линия). Параметры: $T = 200\text{K}$, $\sigma_1 = 10^{12} \text{см}^{-2}$, $d = 1 \text{мкм}$, $I_0 = 10^{-3} \text{Вт} / \text{см}^2$.

Расчеты концентрации двумерных электронов показывают, что при воздействии света с интенсивностью $10^{-4} \div 10^{-1} \text{Вт} / \text{см}^2$, актуальной для диагностики структур, изменения концентрации n_s не превышают нескольких процентов от равновесного значения.

Таким образом, один из основных выводов одномерного численного анализа состоит в том, что установившееся пространственное распределение концентраций n и p (4.23) близко по форме к равновесному. Поскольку при освещении концентрация двумерных электронов изменяется слабо, это открывает возможность приближенного описания эффекта латерального

переноса в рамках одномерной модели по продольной координате. Последнее позволяет установить основные характеристики латерального переноса, а именно, его длину и характерное время (см. ниже).

4.5 Латеральный перенос в случае неоднородного освещения

В случае неоднородного освещения структуры рассматриваемая математическая модель становится как минимум двумерной. Рассмотрим ее для случая переменных (x, z) , где первая координата x изменяется вдоль слоя двумерного электронного газа на большое расстояние. Будем считать, что точка $x = 0$ соответствует середине светового луча, воздействующего на структуру (см. рис. 4.1). Размер области по координате x существенно превышает радиус луча: $L_x \gg a$. При этом интенсивность излучения I_0 имела следующее распределение по x :

$$I_0(x) = \begin{cases} I_0, & 0 \leq x \leq a, \\ I_0 \exp\left[-\left(\frac{x-a}{a}\right)^2\right], & a < x \leq L_x. \end{cases} \quad (4.24)$$

Будем считать, что в начальный момент времени структура находилась в темноте, и все распределения искомым функций совпадали с равновесными значениями и не зависели от координаты x .

4.5.1 Численный алгоритм в двумерном случае

Для численного решения двумерной задачи использовался тот же подход, который рассмотрен в п. 4.4. Однако теперь он рассматривался на произведении пространственных сеток $\bar{\omega}_x \times \bar{\omega}_z$, причем обе они были неравномерные: разбегающиеся в сторону увеличения координат x и z . Для уравнений (4.1), (4.2) теперь были построены локально-одномерные неявные по времени схемы экспоненциальной подгонки (линейная и нелинейная), имеющие порядок аппроксимации $O(\hbar^2 + \tau)$, где $\hbar^2 = \hbar_x^2 + \hbar_z^2$. Уравнение

Пуассона (4.6) было аппроксимировано с помощью обычной схемы «крест» также второго порядка аппроксимации по пространству.

Реализация линейной ЛОС на каждом шаге по времени проводилась с помощью комбинации немонотонных прогонок по координатам x и z (см. п. 2.2 гл. 2). Для увеличения устойчивости и повышения точности расчетов по времени, порядок прогонок чередовался. Реализация полностью неявной ЛОС проводилась с помощью метода простой итерации, а на каждой итерации также с помощью немонотонных прогонок. Решение сеточного уравнения Пуассона (4.6) проводилось с помощью итерационного метода переменных направлений [200, 283]. Шаг метода реализовался с помощью комбинации обычных прогонок по координатам x и z .

Анализ устойчивости и сходимости построенных ЛОС позволяет утверждать, что обе схемы сходятся к решению дифференциальной задачи с точностью $O(\hbar^2 + \tau)$ в норме $L_2(\omega_x \times \omega_z) \times C(\omega_t)$. При этом следует выбирать шаг по времени так же из условия асимптотической устойчивости:

$$\tau < C \min(h_x, h_z), \quad h_x > 0, \quad h_z > 0, \quad C = \text{const} > 0. \quad (4.25)$$

Программная реализация предложенного численного алгоритма **NET_2D** была выполнена на языке Fortran 77 и включала в себя как последовательный, так и параллельный алгоритмы. Для реализации обменов использовался интерфейс MPI. Алгоритм распараллеливания базировался на разбиении расчетной области по обеим координатам на одинаковые по мощности прямоугольные подобласти. Используемая топология обменов – процессорная решетка. Для параллельной реализации ЛОС и метода переменных направлений фактически использовалась комбинация параллельных прогонок, подробно рассмотренная в гл. 2.

4.5.2 Результаты моделирования

Моделирование процессов фотовозбуждения слоя с 2DЭГ в случае неоднородного освещения проводилось двумя способами. Первый из них

имел в своей основе полуаналитический подход, представленный в [A4]. Использование этого подхода было вызвано необходимостью понимания физики процесса и оценке возможностей оптической диагностики.

Второй подход состоял в прямом численном моделировании процессов фотовозбуждения на основе двумерной задачи. Его использование позволило рассчитывать характеристики фотоиндуцированного электронного транспорта в более широком диапазоне физических параметров с необходимой точностью.

4.5.2.1 Полуаналитический подход и его результаты

Если считать, что проводимость 2DЭГ велика, так что при освещении структуры слой 2D электронов остаётся эквипотенциальным, и учесть, что толщина d буферного слоя мала по сравнению с характерными длинами латерального переноса, то для анализа процессов фотовозбуждения достаточно проследить только за переносом дырок. Можно считать, что электроны переносятся вдоль слоя 2DЭГ и локально компенсируют неравновесный дырочный заряд. Возмущение плотности 2DЭГ Δn_s можно считать малым, даже если возмущение дырочной концентрации велико. Действительно, концентрация неравновесных дырок следует считать большой, если она сравнима с концентрацией примесей в буферном слое. Обычно это акцепторы с концентрацией $N_A \sim 10^{14} \div 10^{15} \text{ см}^{-3}$. Если $\Delta p \sim N_A$ вблизи тыловой поверхности буферного слоя, где концентрация дырок наибольшая, то полное количество неравновесных дырок на единицу площади буферного слоя $\Delta p_s \sim N_A l_D$, где l_D – длина, на которой сосредоточены дырки у тыловой границы слоя, то есть длина экранирования в двумерной системе, которую можно оценить следующим образом [460, 461]:

$$l_D = \frac{a^*}{2g_v}, \quad a^* = \frac{a_0}{m^*/m_0}, \quad a_0 = \frac{4\pi\epsilon_0\hbar^2}{m_0e^2},$$

где g_v – коэффициент долинного вырождения ($g_v = 1$), a^* – эффективный радиус Бора, ϵ_0 – диэлектрическая проницаемость, m^* – эффективная масса, m_0 – масса свободного электрона. Для структуры AlGaAs/GaAs $m^*/m_0 \approx 0.067$, и длина экранирования $l_D \approx 100 \text{ нм}$. Поэтому $\Delta p_s \sim 10^9 \div 10^{10} \text{ см}^{-2}$. В силу условия электронейтральности $\Delta n_s = \Delta p_s$, то есть Δn_s значительно меньше, чем типичная плотность 2DЭГ, которая имеет порядок 10^{12} см^{-2} .

Будем также считать, что интенсивность света не слишком велика, так что $\Delta p < N_A$ и возмущение плотности 2DЭГ пренебрежимо мало. При этом фотоиндуцированное напряжение может значительно превосходить $\frac{k_B T}{e}$.

Дальнейшее упрощение задачи связано с наличием в ней трех характерных масштабов. А именно, толщина d буферного слоя составляет $0.5 \div 1 \text{ мкм}$. Эта величина значительно больше толщины слоя 2DЭГ δ (которая составляет $\sim 30 \text{ нм}$), но значительно меньше интересующей нас длины латерального переноса l (они могут достигать нескольких сантиметров). Поскольку поглощение света и разделение неравновесных электронов и дырок встроенным полем гетероперехода происходит во всей толщине d , при рассмотрении переноса носителей поперёк буферного слоя мы пренебрежём толщиной слоя 2DЭГ и будем рассматривать его как эквипотенциальную поверхность, на которой происходит поверхностная рекомбинация: дырки рекомбинируют с 2D электронами непосредственно и через поверхностные состояния. Тот факт, что мы пренебрегаем толщиной слоя 2DЭГ, одновременно означает, что и длина туннелирования электронов и дырок под барьер гетероперехода мала по сравнению с d . Это позволяет при описании переноса носителей пользоваться локальными концентрациями, хотя при этом коэффициент межзонной рекомбинации может зависеть от электрического поля вследствие эффектов туннелирования. Однако при рассматриваемой в этой работе величине

модуляции электрического поля этот эффект несуществен. Тем не менее для общности мы будем различать коэффициент межзонной рекомбинации B в объёме буферного слоя, где поле невелико, и коэффициент межзонной рекомбинации B_s дырок с 2D электронами.

Тот факт, что толщина буферного слоя мала по сравнению с характерными длинами латерального переноса, позволяет разделить "быстрое" движение носителей заряда поперёк слоя и "медленное" движение вдоль слоя, причём при описании переноса носителей поперёк слоя можно воспользоваться стандартным приближением квазиравновесия (т.е. считать квазиуровни Ферми электронов и дырок не зависящими от поперечной координаты). Расчёты показывают, что это приближение выполняется хорошо (поскольку сквозной ток через слой отсутствует), но только при достаточно высоких температурах. При низких температурах условие квазиравновесия нарушается. Таким образом, наше рассмотрение будет ограничено температурами $100 \div 200K$, при которых еще справедливы условия квантования, и низкими интенсивностями света.

Теперь можно сформулировать полуаналитическую модель латерального переноса. В отличие от пункта 4.4 рассмотрим также одномерную геометрию переноса носителей в плоскости структуры, но по направлению x , что соответствует лучу света в виде полосы, перпендикулярной этому направлению.

В стационарном режиме перенос дырок в буферном слое описывается уравнением

$$\frac{1}{e} \left(\frac{\partial j_{px}}{\partial x} + \frac{\partial j_{pz}}{\partial z} \right) = G(x, z) - B(np - n_i^2), \quad (4.26)$$

где положено, что преобладающим механизмом рекомбинации являются межзонные переходы, Плотность дырочного тока \mathbf{j}_p представляет собой сумму дрейфового и диффузионного токов. На границах буферного слоя j_{pz} определяется поверхностной рекомбинацией. На границе с 2DЭГ имеем:

$$\frac{1}{e} j_{pz}(x, \delta) = -B_s n_s [p(x, \delta) - p_0(x, \delta)] - S_1 [p(x, \delta) - p_0(x, \delta)], \quad (4.27)$$

где S_1 – скорость рекомбинации через поверхностные состояния. На противоположной границе буферного слоя ($z = d$) дырочный ток определяется рекомбинацией через поверхностные состояния (для простоты моноэнергетические):

$$\frac{1}{e} j_{pz}(x, d) = C_{tp} [n_t p(x, d) - (N_t - n_t) p_{t1}], \quad (4.28)$$

где $p_{t1} \approx N_v \exp\left(-\frac{\varepsilon_t}{k_B T}\right)$ – шокли-ридовский фактор тепловой активации дырок в валентную зону. Полагая для простоты, что в неравновесных условиях поверхностные состояния почти полностью заселены дырками, уравнение (4.28) преобразуем к виду

$$\frac{1}{e} j_{pz}(x, d) = S_2 \frac{np - n_i^2}{p + p_T},$$

где $S_2 = C_{tm} N_t$ – скорость поверхностной рекомбинации, $p_T = p_{t1} + n_{t1} C_{tm} / C_{tp}$, n_{t1} – шокли-ридовский фактор для электронов.

Уравнение (4.26) можно упростить, если учесть, что искомые величины (концентрации носителей и поле) изменяются поперёк слоя значительно быстрее, чем вдоль него. В этом случае можно считать, что поперёк буферного слоя устанавливается квазиравновесное состояние, т.е. квазиуровни Ферми дырок и электронов не зависят от z . Тогда концентрация дырок выражается через потенциал $\varphi(x, z)$ в буферном слое, отсчитанный от плоскости $z = \delta$

$$p(x, z) = p(x, d) \exp\left[e(\varphi(x, d) - \varphi(x, z)) / (k_B T)\right]. \quad (4.29)$$

С учётом того, что практически во всём буферном слое электронный газ не вырожден, для электронной концентрации имеем аналогичное выражение

$$n(x, z) = n(x, \delta) \exp\left[e\varphi(x, z) / (k_B T)\right], \quad (4.30)$$

с тем отличием, что концентрация $n(x, \delta)$ велика и от x практически не зависит. Можно положить, что $n(x, \delta) \approx N_c$, где N_c – эффективная плотность состояний в зоне проводимости. При таком подходе к описанию $n(x, z)$ мы пренебрегаем фотоиндуцированной разностью потенциалов на слое 2DЭГ, что вполне оправдано, коль скоро наше рассмотрение ограничено невысокими интенсивностями света.

Одномерное уравнение переноса дырок вдоль слоя 2DЭГ можно получить, проинтегрировав уравнение (4.26) по z от $z = \delta$ до $z = d$ с учётом (4.29), (4.30). Таким образом, для усреднённых по толщине слоя величин имеем

$$\frac{d}{dx} \left(\mu_p \bar{E}_x \bar{p} - D_p \frac{d\bar{p}}{dx} \right) = \bar{G}(x) - \frac{B}{d - \delta} \int_{\delta}^d (np - n_i^2) dz - \frac{j_{pz}(x, d) - j_{pz}(x, \delta)}{e(d - \delta)}.$$

Ввиду малости δ по сравнению с другими размерами в дальнейшем будем считать $d - \delta \approx d$.

Усреднённая по слою концентрация $\bar{p}(x)$ выражается через концентрацию дырок у тыловой поверхности буферного слоя:

$$\bar{p}(x) = \beta p(x, d),$$

где β – величина, зависящая от распределения потенциала по координате z вблизи тыловой поверхности буферного слоя.

Для простоты будем считать, что пространственный заряд гетероперехода распространяется на весь буферный слой, толщина которого значительно превосходит дебаевскую длину $l_D = \sqrt{\epsilon_0 k_B T / (4\pi e^2 N_A)}$. Тогда вблизи тыловой границы плотность пространственного заряда приблизительно равна $-eN_A$, и решение уравнения Пуассона вместе с уравнением (4.29) дают $\beta \approx l_D / d$. Величину $\bar{E}_x \bar{p}$ можно заменить на $E_x \bar{p}$, понимая под E_x поле вблизи тыловой поверхности буферного слоя, где p наиболее велико. Поле E_x найдём как $-\frac{dV}{dx}$, воспользовавшись для

нахождения $V(x)$ формулой плоского конденсатора, одной обкладкой которого служит 2DЭГ, а другой – слой толщиной $\sim l_D$ у тыловой поверхности, в котором сосредоточен фотоиндуцированный положительный заряд. Учитывая заряд как свободных носителей, так и локализованных на поверхностных состояниях, получаем

$$V(x) \approx \frac{4\pi ed}{\epsilon_0} \left[\beta p(x, d) + N_t \frac{p(x, d)}{p(x, d) + p_T} \right]. \quad (4.31)$$

Потенциал $\varphi(x, d)$, входящий в уравнение (4.29) равен $V_0 - V(x)$, где V_0 – высота барьера без освещения (см. рис. 4.2б).

В результате проведенных рассуждений получаем следующее уравнение для $p(x, d)$ в безразмерной форме

$$\begin{aligned} \frac{d}{d\xi} \left(\left[1 + \tilde{p} \left(1 + \frac{Ng}{(\tilde{p} + g)^2} \right) \right] \frac{d\tilde{p}}{d\xi} \right) = -\tilde{G}(\xi) + \\ + \left(1 + \frac{\sigma}{\tilde{p} + g} \right) \tilde{p} \exp \left[\tilde{p} \left(1 + \frac{N}{\tilde{p} + g} \right) \right], \end{aligned} \quad (4.32)$$

где

$$\begin{aligned} \tilde{p} = \tilde{p}(\xi) = \frac{p(x, d)}{p^*}, \quad p^* = \frac{N_A l_D^2}{\beta d^2}, \quad N = \frac{N_t}{\beta d p^*}, \\ g = \frac{p_T}{p^*}, \quad \xi = \frac{x}{l}, \quad l = \sqrt{\beta D_p \tau}, \quad \sigma = \frac{S_2 N_c}{p^* (BN_c d + B_s n_s + S_1)}, \\ \tau = \frac{d \exp(eV_0 / k_B T)}{BN_c d + B_s n_s + S_1}, \quad \tilde{G} = \frac{I_0(\xi)}{h\nu p^*} (1 - e^{-\alpha d}). \end{aligned}$$

Уравнение (4.32) приведено в упрощённом виде для случая, когда концентрация $p(x, d)$ значительно превосходит равновесную концентрацию дырок p_{t0} на тыловой границе буферного слоя.

Уравнение (4.32) решалось численно с помощью нелинейной однородной консервативной конечно-разностной схемы на неравномерной сетке. Для ее реализации использовался метод простой итерации.

Распределение концентрации неравновесных дырок вдоль плоскости гетероструктуры, полученное в результате решения уравнения (4.32) применительно к GaAs для температуры 200 К, приведено на рис. 4.7. Здесь же для сравнения показано распределение интенсивности света, использованное в расчёте, и приведено распределение $p(x)$ в случае, если бы не был учтён дрейф дырок в фотоиндуцированном поле. Как видно, перенос носителей в плоскости двумерного слоя связан как с дрейфом, так и с диффузией дырок.

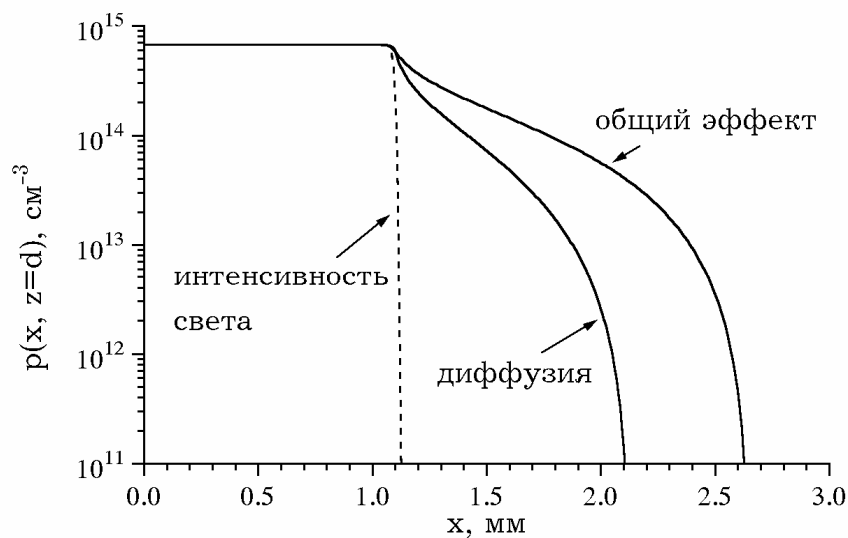


Рисунок 4.7. Распределение концентрации неравновесных носителей в плоскости гетероструктуры (полный эффект латерального переноса и перенос за счёт диффузии). Пунктир – распределение интенсивности света. Параметры: $I_0 = 10^{-1} \text{ Вт/см}^2$, $T = 200 \text{ К}$, $S_1 = S_2 = 10 \text{ см/с}$, $N_t = 10^9 \text{ см}^{-2}$, $V_0 = 0.225 \text{ В}$.

Вклад дрейфового механизма по сравнению с диффузионным определяется величиной $\tilde{p} \left[1 + Ng(\tilde{p} + g)^{-2} \right]$, которая зависит как от концентрации неравновесных носителей, так и от плотности поверхностных состояний и их энергетического положения. Как видно, при увеличении \tilde{p} эта величина может достигать больших значений.

В пределе малых концентраций p , то есть при малой интенсивности света или вдали от светового луча дрейфовый перенос становится несущественным и в пределе $x \rightarrow \infty$ имеет место асимптотика:

$$p \sim \exp\left[-\frac{x}{l}\sqrt{1+\sigma/g}\right].$$

Таким образом, характерная длина переноса

фотовозбужденных носителей заряда составляет $\sim l(1+\sigma/g)^{-1/2}$. Если \tilde{p} не мало (на рис. 4.6 при приближении к световому лучу), то зависимость p от x определяется как изменением высоты барьера $e[V_0 - V(x)]$, от которого зависит эффективное время жизни, так и возрастанием роли дрейфа.

При понижении температуры эффект переноса носителей в плоскости гетероструктуры сильно увеличивается вследствие уменьшения вероятности рекомбинации электронов и дырок, разделённых барьером. Распределение $p(x, d)$ и фотоиндуцированного напряжения при разных температурах показано на рис. 4.8 для случая, когда уровень поверхностных состояний на 0.5 эВ выше валентной зоны. Время жизни фотоиндуцированных носителей при этом составляет 4.8, 1.07 и 0.44 мсек для $T = 200, 250$ и 300 К, соответственно.

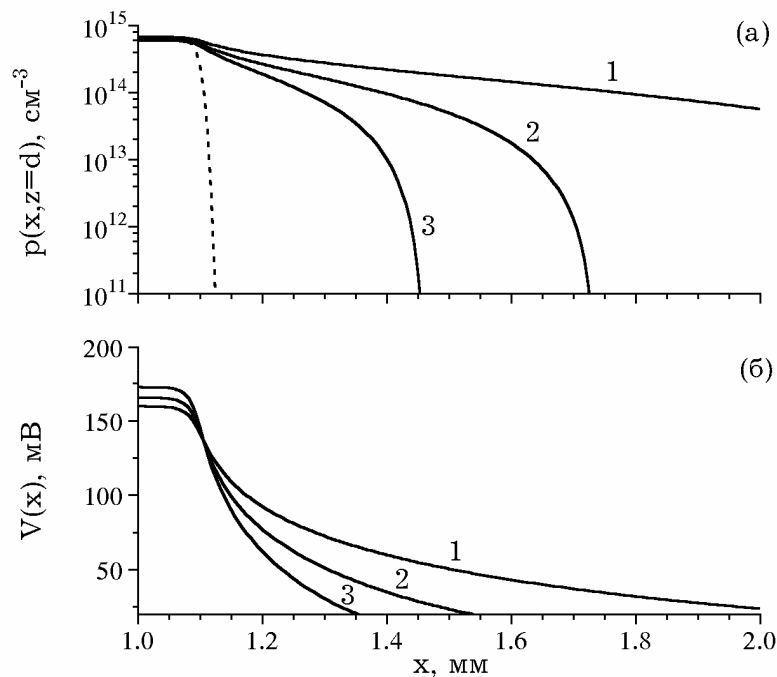


Рисунок 4.8. Распределение концентрации неравновесных дырок (а) и фотоиндуцированного напряжения (б) при температурах $T=200, 250, 300$ К, $I_0 = 10^{-1} \text{ Вт} / \text{см}^2$, $S_1 = S_2 = 10 \text{ см} / \text{с}$, $N_t = 10^9 \text{ см}^{-2}$. Пунктир – распределение интенсивности света.

Влияние концентрации поверхностных состояний и их энергетического положения на латеральный перенос носителей определяется как накапливающимся на них зарядом, который уменьшает высоту рекомбинационного барьера и увеличивает тангенциальное поле, так и непосредственно рекомбинацией через поверхностные состояния. В результате увеличение N_t , ε_t и скорости поверхностной рекомбинации S_2 приводит к уменьшению длины переноса (рис. 4.9, 4.10). Скорость поверхностной рекомбинации S_1 на гетерогранице с 2DЭГ значительно слабее влияет на эффект из-за того, что на этой границе достаточно сильна рекомбинация дырок с 2DЭГ.

Во всех численных расчётах $N_A = 5 \cdot 10^{14} \text{ см}^{-3}$, $d = 0.8 \text{ мкм}$, $\alpha = 10^4 \text{ см}^{-1}$, $B_s = B = 2 \cdot 10^{-10} (300 / T)^{3/2} \text{ см}^3 / \text{с}$, $n_s = 10^{12} \text{ см}^{-2}$, подвижность носителей и эффективная плотность состояний вычислялись согласно [45].

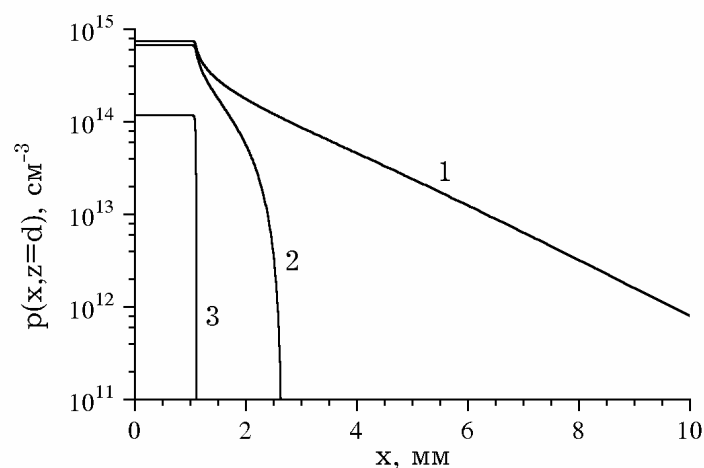


Рисунок 4.9. Распределение концентрации неравновесных дырок при разных концентрациях поверхностных состояний и скоростях поверхностной рекомбинации на тыловой поверхности буферного слоя. Кривая 1 получена при отсутствии поверхностных состояний; кривые 2 и 3 получены при

$N_i = 10^9 \text{ см}^{-2}$, $S_1 = S_2 = 10 \text{ см/с}$ и $N_i = 10^{10} \text{ см}^{-2}$, $S_1 = S_2 = 100 \text{ см/с}$,
соответственно. $T = 200 \text{ К}$, $\varepsilon_i = 0.5 \text{ Эв}$, $I_0 = 10^{-1} \text{ Вм/см}^2$.

Распределение интенсивности света на всех графиках показано пунктиром. Высота барьера eV_0 в равновесном состоянии вычислялась с учётом заряда как свободных электронов, так и ионизованных акцепторов (при $p \ll N_A$), считая, что область пространственного заряда занимает весь буферный слой ($d < l_D (2eV_c / k_B T)^{1/2}$, V_c – контактная разность потенциалов между сильно легированным широкозонным полупроводником и объёмом буферного полупроводника, если бы слой последнего был протяжённым):

$$\frac{eV_0}{k_B T} \approx \frac{1}{2} \left(d / l_D - \sqrt{2} \right)^2 + \ln(N_c / N_A).$$

Как видно, высота рекомбинационного барьера зависит от толщины и легирования буферного слоя. Увеличение V_0 , например, при увеличении d , приводит к сильному возрастанию длины латерального переноса.

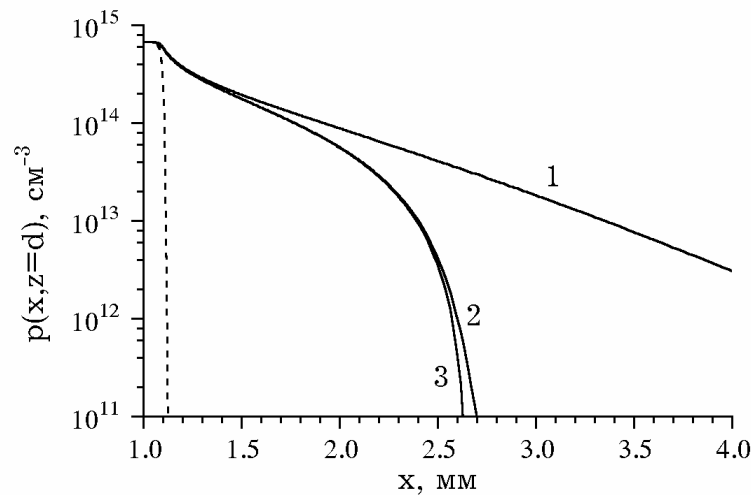


Рисунок 4.10. Распределение концентрации неравновесных дырок при разных энергиях ε_i поверхностных состояний над дном валентной зоны. Энергия в мэВ указана около соответствующих кривых. $N_i = 10^9 \text{ см}^{-2}$, $S_1 = S_2 = 10 \text{ см/с}$, $T = 200 \text{ К}$, $I_0 = 10^{-1} \text{ Вм/см}^2$.

В рамках полуаналитической модели длина латерального переноса экспоненциально зависит от величины $eV_0/k_B T$, характеризующей разделение фотоиндуцированных электронов и дырок. Однако более детальный анализ показывает, что этот вывод справедлив только в том случае, если $eV_0/k_B T$ не превышает некоторую величину, зависящую от интенсивности света. Дело в том, что увеличение $eV_0/k_B T$, например, вследствие уменьшения температуры, при фиксированной интенсивности света приводит к нарушению квазиравновесия в распределении концентрации носителей поперёк буферного слоя, которое позволило получить уравнение (4.32), не содержащее потенциал $\varphi(x, z)$. Для того чтобы показать это, достаточно рассмотреть распределения концентрации носителей поперёк буферного слоя при однородном освещении.

Как показано в [A4] на основе качественных оценок, при увеличении $eV_0/k_B T$ отклонение от квазиравновесия растёт экспоненциально, причём результатом нарушения квазиравновесия является значительно более медленное уменьшение концентрации n с ростом z . Количественно это показано на рис. 4.11, где представлены результаты численного расчёта $n(z)$ и $p(z)$, полученные без использования предположения о квазиравновесии для таких условий, когда квазиравновесие нарушается.

Таким образом, рассмотренная полуаналитическая модель латерального переноса справедлива при достаточно высоких температурах и низких интенсивностях света, когда $\frac{\Delta n}{n} \ll 1$. Причём, чем меньше интенсивность света, тем при более низких температурах нарушается квазиравновесие [A3]. Сделанный вывод обобщается с учётом поверхностной рекомбинации. При этом получаются более громоздкие формулы, но качественные результаты сохраняются.

Теперь рассмотрим кратко, как нарушение квазиравновесия влияет на латеральный перенос. Как видно из рис. 4.11, вследствие нарушения

квазиравновесия концентрация электронов сильно увеличивается вблизи тыловой поверхности буферного слоя по сравнению с квазиравновесным распределением. Аналогично концентрация дырок возрастает вблизи фронтальной поверхности буфера. В результате сильно увеличивается темп рекомбинации вблизи обеих границ буферного слоя, что приводит к ограничению латерального переноса.

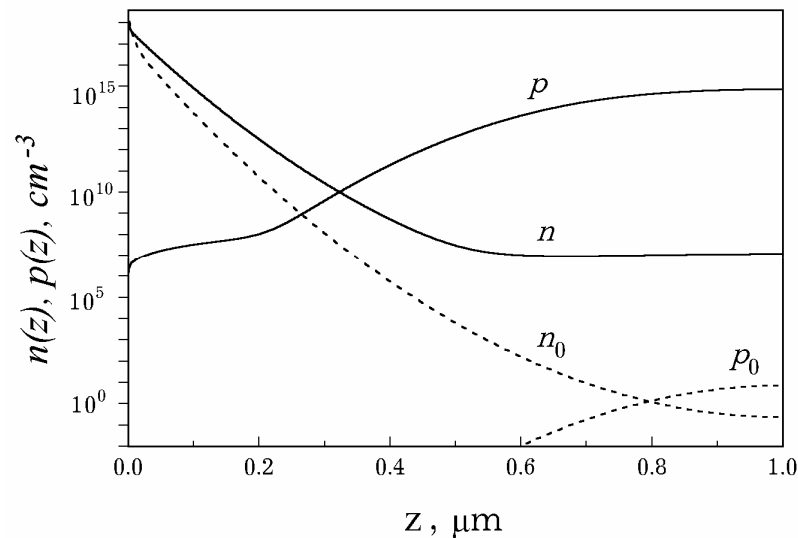


Рисунок 4.11. Распределение концентрации электронов n и дырок p поперёк буферного слоя при однородном освещении, полученное путём прямого численного решения одномерной задачи. $I_0 = 10^{-3} \text{ Вт} / \text{ см}^2$, $N_A = 10^{15} \text{ см}^{-3}$, $T = 200 \text{ К}$. Пунктир – распределение равновесных концентраций n_0 и p_0 .

Рассмотренный полуаналитический подход, опирающийся на результаты одномерного моделирования в случае однородного освещения, позволил описать механизм латерального переноса фотоиндуцированных носителей заряда в гетероструктурах с 2DЭГ. В результате была разработана модель этого эффекта, справедливая при достаточно высоких температурах и низких интенсивностях света, которые близки к условиям, при которых латеральный перенос наблюдается экспериментально. При более низких температурах эффект латерального переноса усиливается, но для того, чтобы

описать его количественно при приемлемых для эксперимента интенсивностях света, требуется расчёт на основе двумерной нелинейной модели.

По своей природе эффект латерального переноса близок к явлению замороженной фотопроводимости [459], особенно к экспериментам С.М. Рывкина и Д.В. Тархина [462]. Латеральный перенос неравновесных носителей заряда в приповерхностных слоях полупроводников известен с 70-х годов [463]. В частности, в работе [464] он исследовался в связи с выяснением предельно достижимого пространственного контраста фотоиндуцированного травления полупроводников. В [465] эффект латерального переноса привлекался для объяснения особенностей спектров фотопроводимости гетеропереходов Si/GaAs.

Экспериментально эффект латерального переноса в селективно легированных гетероструктурах может быть исследован путём измерений отклика фотоотражения (как в работах [456, 466]) с пространственным разделением возбуждающего и зондирующего лучей или по фотолюминесценции, также измеряемой локально со сдвигом относительно возбуждающего луча [466]. При этом отклик фотоотражения определяется в основном электрическим полем в буферном слое, то есть неравновесным зарядом как свободных носителей, так и локализованных на поверхностных состояниях, а фотолюминесценция позволяет проследить за неравновесной концентрацией свободных носителей заряда. На рис. 4.12 показаны результаты соответствующих измерений. Как видно из рисунка они подтверждают основные выводы теории и результаты моделирования.

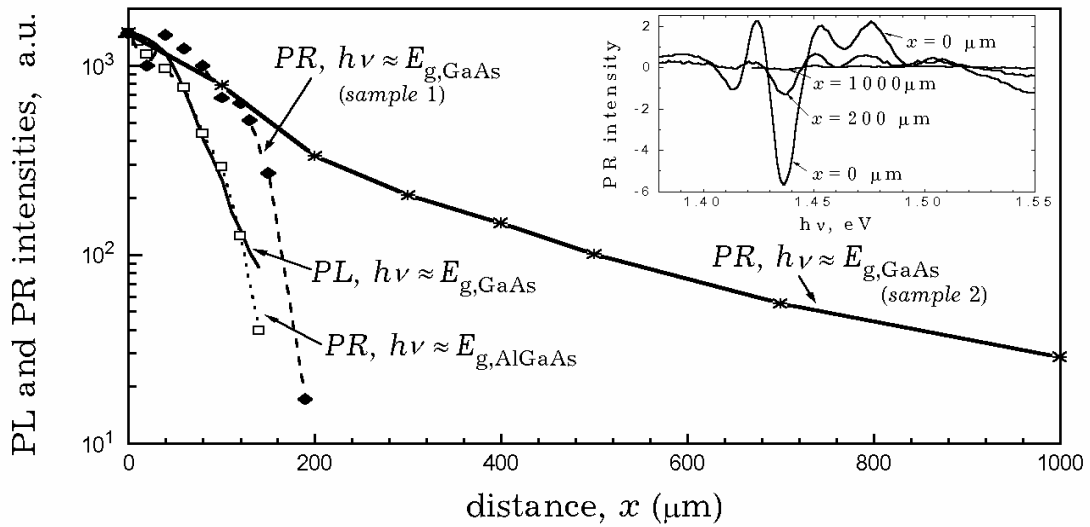


Рисунок 4.12. Распределения отклика фотолюминисценции и фотоотражения вдоль слоя 2DЭГ, полученные в экспериментах в работе [465] при $T = 300\text{K}$.

4.5.2.2 Результаты двумерного моделирования

К рассмотренным выше одномерным результатам добавим полученные при двумерном моделировании. Основное внимание при этом уделялось изучению зависимости длины латерального переноса от различных параметров.

В результате двумерных расчетов было подтверждено, что длина латерального переноса l зависит от двух факторов, которые определяют эффективное время жизни фотоиндуцированных носителей заряда. Во-первых, это концентрация двумерных электронов n_s . Во-вторых, это высота барьера eV_0 . С уменьшением концентрации n_s длина латерального переноса l также уменьшается. С ростом высоты барьера eV_0 длина l увеличивается. В совокупности действие обоих факторов не так однозначно.

Кроме того, падающий на структуру луч света индуцирует вихревой электрический ток, линии которого замкнуты в буферном слое. Его природу можно объяснить следующим образом. В освещенной области образца генерируются электроны и дырки, которые двигаются в противоположных

направлениях и дают начало электрическому току, направленному вдоль оси z . Из-за латерального переноса и диффузии фотоэлектроны вблизи слоя 2DЭГ и фото-дырки вблизи тыловой поверхности начинают двигаться вдоль структуры в сторону от светового луча. Это движение сохраняется далеко на периферии структуры. Однако там форма потенциала электрического поля близка к равновесному распределению, которое заставляет избыточные электроны и дырки рекомбинировать. Эта рекомбинация не успевает однако охватить все избыточные носители заряда, поэтому некоторая их часть разворачивается опять поперёк структуры и движется в сторону слоя 2DЭГ. В результате поток частиц замыкается. Величина тока может быть оценена как $j = eP / hv$, где P – мощность светового пучка.

Примеры двумерных расчетов представлены на рисунках 4.13 и 4.14. На первом из них изображено стационарное распределение концентрации дырок в случае достаточно широкого светового пучка и протяженного слоя 2DЭГ. Как видно из рисунка, распределение концентрации дырок имеет большую протяженность по продольной координате, то есть латеральный перенос налицо.

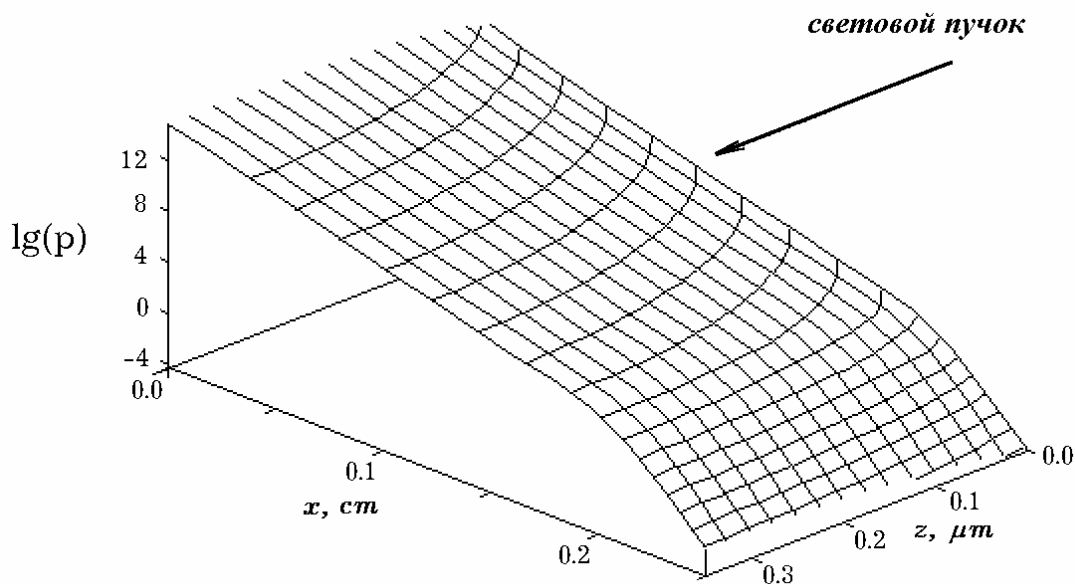


Рисунок 4.13. Стационарное двумерное распределение концентрации дырок. Поперечный размер структуры $d = 0.35 \text{ мкм}$, продольный размер

$L_x = 0.5 \text{ см}$, радиус светового пучка $a = 10 \text{ мкм}$, $n_s = 9 \cdot 10^{11} \text{ см}^{-2}$, $T = 300 \text{ K}$,
 $I_0 = 10^{-2} \text{ Вт / см}^2$. Поверхностная рекомбинация не учитывалась.

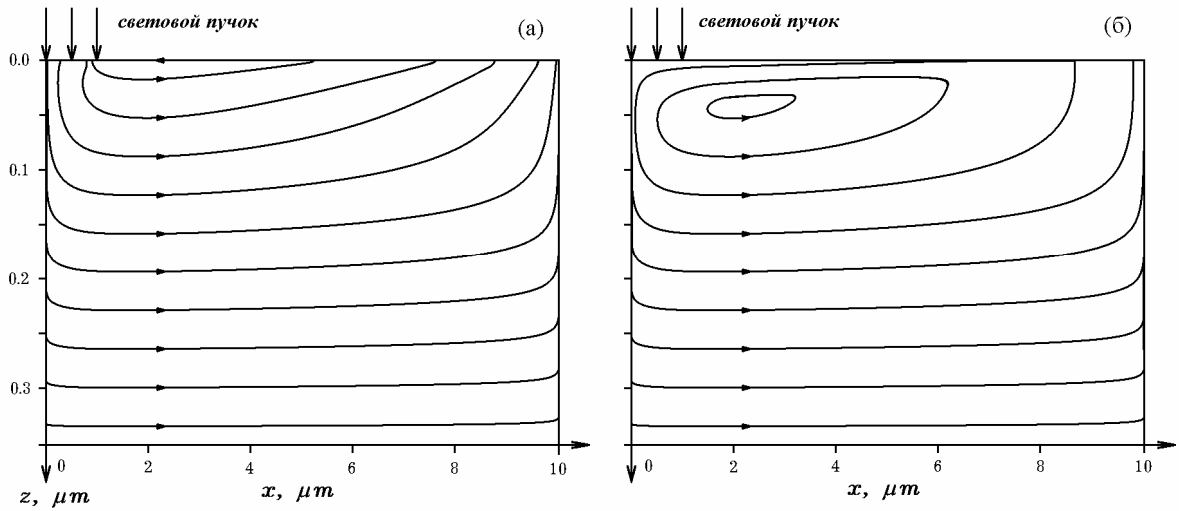


Рисунок 4.14. Линии фотоиндуцированного тока для $n_s = 9 \cdot 10^{11} \text{ см}^{-2}$ (а) и $n_s = 5 \cdot 10^{11} \text{ см}^{-2}$ (б). Поперечный размер структуры $d = 0.35 \text{ мкм}$, продольный размер $L_x = 10 \text{ мкм}$, радиус светового пучка $a = 1 \text{ мкм}$, $T = 300 \text{ K}$, $I_0 = 10^{-2} \text{ Вт / см}^2$.

На рис. 4.14 показаны линии суммарного тока электронов и дырок в двух случаях, когда концентрация двумерных электронов высока (а) и когда она умеренна (б). Из рисунка видно, что чем больше концентрация двумерных электронов, тем уже эффективный слой латерального транспорта и тем больше его длина. При малых концентрациях двумерных электронов кольцевой ток электронов и дырок распространяется глубже по z , но при этом блокирует боковой транспорт.

В заключение данной главы сделаем некоторые выводы. В данной части работы была рассмотрена проблема моделирования латерального переноса фотоиндуцированных носителей заряда в слое двумерного электронного газа селективно легированных наноструктур типа AlGaAs/GaAs. Возникающая здесь математическая задача была сформулирована в рамках диффузионно-дрейфового приближения и рассмотрена в трех различных пространственных постановках. Для каждой

постановки были разработаны эффективные численные алгоритмы и соответствующие программные реализации. С помощью разработанных численных методов и программ было проведено детальное исследование процесса латерального переноса.

В результате проведенных исследований показано, что неравновесные носители заряда, возникающие при локальном оптическом воздействии на гетероструктуру с двумерным электронным газом, переносятся в плоскости структуры на чрезвычайно большое расстояние от места возбуждения, которое значительно превосходит длину диффузии в объеме. Эффект обусловлен тем, что генерированные светом электроны и дырки разделяются встроенным электрическим полем гетероперехода к противоположным краям буферного слоя, где они переносятся по параллельным плоскостям. Расстояние, на которое распространяется неравновесная концентрация носителей, достигает больших значений благодаря (1) высокой проводимости 2D электронов, (2) барьеру для рекомбинации электронов и дырок и (3) дрейфу дырок в электрическом поле, создаваемом зарядом неравновесных носителей в плоскости структуры. Результаты теоретических исследований и численного моделирования согласуются с известными экспериментальными данными. Парактическое применение эффекта латерального переноса состоит в бесконтактной диагностике гетероструктур на этапе их роста.

Указанные выше результаты опубликованы в работах [А3-А7].

ГЛАВА 5

Моделирование электронного транспорта в квантовых каналах гетероструктур

В данной главе рассматриваются проблемы моделирования нелинейного электронного транспорта в квантовых каналах наноструктур на основе AlGaAs. В отличие от приложений, рассмотренных в предыдущих главах, здесь речь идет о субмикронных и нанометровых размерах всей структуры. Такие структуры принято называть мезоскопическими [141]. Математические модели электронных процессов в мезоскопических структурах формулируются обычно на основе комбинации классического и квантового описаний. Причиной тому служит существенное влияние квантовых эффектов на характеристики электронного транспорта, а также существенные трудности в реализации полного квантового подхода.

В настоящей работе развита и исследована новая математическая модель квазистационарного одномерного электронного транспорта в квантовом канале гетероструктуры AlGaAs/GaAs, образованном в слое двумерного электронного газа. Для упрощения анализа транспортной задачи предполагается, что канал имеет цилиндрически симметричную форму (то есть является квантовой проволокой) с радиусом порядка 5 нм и длиной от 5 до 250 нм. Математическое описание электронного транспорта формулируется в терминах одночастичных волновых функций для электронов в канале. Состояния электронов в канале описываются плоскими волнами, распространяющимися вдоль канала в прямом и обратном направлениях. Предполагается что они образуют непрерывный спектр и подчиняются статистике Ферми для вырожденного электронного газа. В этих предположениях применяется квазистационарная квантовая модель самосогласованного поля в приближении Хартри-Фока, которая приводит к существенным нелинейным эффектам.

Для выбранной математической модели в диссертации разработаны оригинальные численные методы и параллельная программа **NANO_2D**. С ее

помощью проведено детальное численное моделирование процессов электронного транспорта. В численных экспериментах обнаружен ряд новых физических эффектов, которые могут иметь также и прикладной интерес.

5.1 Введение в проблему

Моделирование нелинейного электронного транспорта в квантовых структурах является весьма актуальным направлением исследований в современной наноэлектронике [467-469]. В последнее время в его рамках проводятся исследования спонтанной спиновой поляризации электронных потоков в немагнитных квантоворазмерных структурах. Интерес к спиновой поляризации проявляется в связи с аномальной проводимостью квантовых структур, обнаруженной в экспериментах при низких температурах. Анализ механизма проводимости в таких условиях является очень важным этапом для создания сверхвысокочастотных приборов нового поколения, основанных на квантовых эффектах [470-475].

В настоящей работе рассматривается один из возможных подходов к численному моделированию электронных процессов в немагнитных квантовых структурах с двумерным электронным газом. В качестве примера выбрана задача об одномерном движении электронов в квантовом канале гетероструктуры AlGaAs/GaAs. Схематическое изображение цилиндрически симметричной геометрии модельной задачи показано на рис. 5.1.

Формулировка задачи основывается на математической модели нелинейного электронного транспорта в одномерном квантовом проводе с металлическими контактами. Данная модель предложена и исследована теоретически В.А. Сабликовым в [A18, A19]. Она базируется на модели самосогласованного поля в приближении Хартри-Фока и объединяет в единое целое электроны в квантовом слое и в контактах. Модель включает уравнения Шредингера для одночастичных волновых функций электронов в области непрерывного спектра, а также уравнение Пуассона для потенциала самосогласованного электрического поля внутри канала. В случае аксиальной симметрии и

прямоугольной формы потенциального барьера (см. рис. 5.2) решение уравнение Пуассона сводится к интегральным выражениям для потенциала и связанных с ним функций, использующим одномерную функцию Грина. В уравнениях Шредингера учитывается как направление движения электронов в канале, так и фактор спонтанной спиновой поляризации, позволяющий более точно исследовать проводимость канала и квазиравновесные состояния электронов с различным спином. Уравнения включают также нелинейные слагаемые, связанные с обменным взаимодействием электронов в канале.

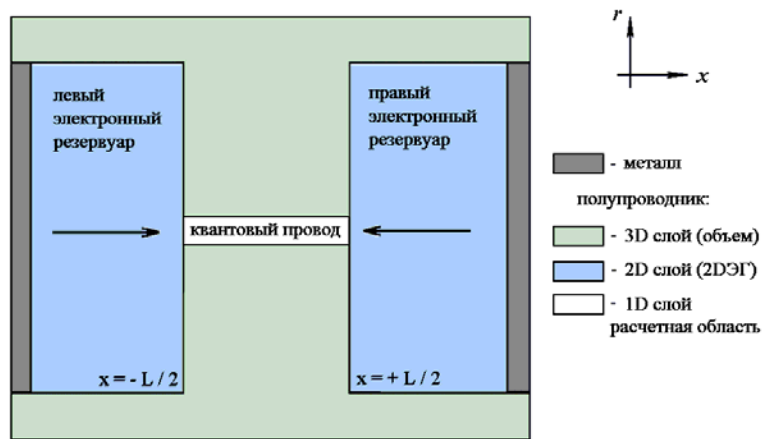


Рисунок 5.1. Геометрия наноструктуры с квантовым слоем (продольный разрез).

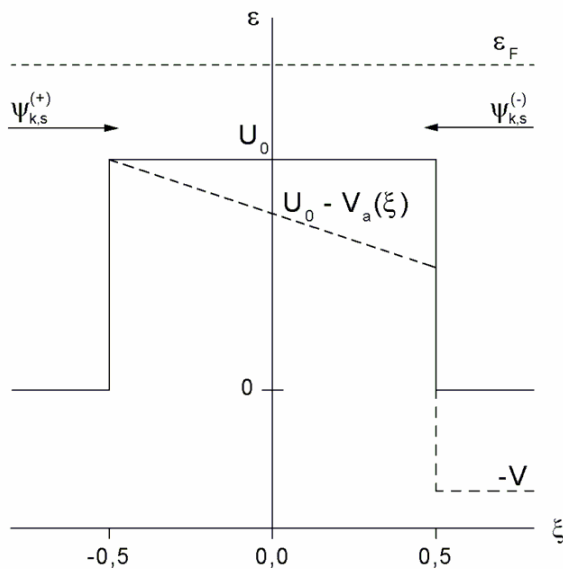


Рисунок 5.2. Энергетическая диаграмма квантового слоя и форма потенциального барьера в равновесии (сплошная кривая) и при приложенном напряжении (пунктирная кривая).

Используемая математическая модель является сильно нелинейной и имеет большую размерность, поскольку в ней к пространственной координате добавляется еще и спектральная. Вследствие этого детальное исследование модели можно провести лишь численно. Для этого в [A18, A22, A28] был разработан оригинальный численный алгоритм. Он использует конечно-разностную аппроксимацию как пространственных операторов, так и операторов в энергетическом пространстве. Для преодоления нелинейности задачи в нем используется итерационная процедура, записанная не в терминах искомого решения (каковым является пакет волновых функций электронов), а в терминах неизвестного гамильтониана, позволяющего найти данное решение. Такая постановка задачи существенно понижает ее размерность, однако не снимает эту проблему полностью. Поэтому эффективное решение задачи лежит на пути применения многопроцессорных вычислительных систем. С этой целью разработанный алгоритм был адаптирован к архитектуре МВС с распределенной памятью. Распараллеливание проведено по спектральной координате, поскольку решение зависит от нее параметрическим образом. В работе [A39] указанный численный алгоритм был модифицирован с учетом расщепления электронов по спине.

С помощью разработанного численного подхода, реализованного в виде программы **NANO_2D**, было проведено детальное численное моделирование процессов электронного транспорта. В результате моделирования получены некоторые общие закономерности квазистационарного транспорта электронов в одномерном квантовом канале. В частности, в численных экспериментах обнаружены и проанализированы четыре типа состояний электронов в канале, определяющие его проводимость. Еще один интересный результат связан с возможностью реализации мультистабильного режима проводимости при приложении к каналу внешнего напряжения. Такой режим предоставляет принципиальную возможность разработки элементов многозначной логики в новейших электронных схемах.

5.2 Постановка модельной задачи

Как уже было сказано выше, распространение и взаимодействие электронных волн в квантовом канале наноструктуры в стационарном состоянии может быть описано в модели самосогласованного поля в приближении Хартри-Фока в терминах одночастичных волновых функций электронов. В случае аксиальной симметрии канала конечной длины L и радиуса a , замыкающегося круговыми металлическими контактами, и при использовании однозонной аппроксимации зоны проводимости можно использовать квазиодномерную модель, предложенную в [A18]. Модель включает уравнения Шредингера для волновых функций $\psi_{ks}^{(\alpha)}(\xi)$ электронов, распространяющихся в прямом ($\alpha = "+"$) и обратном ($\alpha = "-"$) направлениях и имеющих спин $s = \pm 1/2$. Волновое число k принадлежит области непрерывного спектра $[0, k_F]$, где k_F – уровень Ферми.

Исследуемая задача имеет две координаты: пространственную, ξ , и спектральную, k . Система уравнений Шредингера замыкается уравнением Пуассона для потенциала самосогласованного электрического поля. Однако в данном случае его можно редуцировать с помощью техники функций Грина к интегральным выражениям для потенциалов, входящих в гамильтониан. В результате получается следующая система безразмерных уравнений

$$-\frac{d^2 \psi_{ks}^{(\alpha)}}{d\xi^2} + U_s(\alpha\xi, \psi_{ks}^{(\alpha)}) = \gamma^2 \varepsilon_k^{(\alpha)} \psi_{ks}^{(\alpha)}, \quad (5.1)$$

$$-0.5 < \xi < 0.5, \quad \alpha = +, -, \quad s = \pm 1/2.$$

Здесь координата ξ и обратная величина волнового числа k нормированы на длину канала L , $\varepsilon_k^{(+)} \equiv \varepsilon_k = k^2 / \gamma^2$ и $\varepsilon_k^{(-)} = \varepsilon_k - V$ – энергии электронных волн, параметр γ^2 равен среднему значению потенциальной энергии электронной системы в целом.

В уравнениях (5.1)

$$U_s(\xi, \psi_{ks}^{(\alpha)}) = \gamma^2 (U_0 + 2s\varepsilon_F \beta - V_a(\xi) + U_H(\xi)) \psi_{ks}^{(\alpha)} - \gamma^2 U_{ex,s}(\xi, \psi_{ks}^{(\alpha)}), \quad (5.2)$$

описывает полную потенциальную энергию электронной системы, которая помимо эффективного барьера, встроенного в активную область гетероструктуры, U_0 , включает следующие составляющие.

Второе слагаемое описывает спиновую коррекцию потенциальной энергии для различных электронных волн, коэффициент β – фактор спонтанной спиновой поляризации электронов.

Функция $V_a(\xi) = V(0.5 + \xi)$ описывает распределение приложенного к каналу внешнего потенциала и имеет максимум V на правом краю канала.

Слагаемое $U_H(\xi)$ описывает энергию самосогласованного поля,

$$U_H(\xi) = \int_{-1/2}^{1/2} G(\xi, \xi') (n_e(\xi') - n_b) d\xi', \quad (5.3)$$

где n_b – плотность положительного фонового заряда, создающего потенциальный барьер, $n_e(\xi)$ – плотность электронов в канале,

$$n_e(\xi) = n_{e,0} \int_0^{k_F} \sum_{\alpha=+,-} \sum_{s=+1/2,-1/2} \left| \psi_{ks}^{(\alpha)}(\xi) \right|^2 dk. \quad (5.4)$$

Для простоты в (5.3) предполагается, что радиальная компонента плотности фонового заряда изменяется под действием электрического поля так же, как и плотность электронов. Кроме того, в (5.4) и ниже используется, как уже отмечалось, ступенчатая функция распределения электронов по энергиям, то есть не учитывается ее зависимость от температуры.

Потенциал электрон-электронного взаимодействия $G(\xi, \xi')$ (функция Грина) в данном случае имеет простую форму

$$G(\xi, \xi') = \int_0^{\infty} \frac{e^{-y^2/2}}{sh(by)} G_y(\xi, \xi') dy, \quad (5.5)$$

$$G_y(\xi, \xi') = \begin{cases} sh\left(by\left(\frac{1}{2} + \xi\right)\right) sh\left(by\left(\frac{1}{2} - \xi'\right)\right), & \xi < \xi', \\ sh\left(by\left(\frac{1}{2} - \xi\right)\right) sh\left(by\left(\frac{1}{2} + \xi'\right)\right), & \xi > \xi'. \end{cases} \quad (5.6)$$

Последнее слагаемое в (5.2) $U_{ex,s}(\xi, \psi_{ks}^{(\alpha)})$ задает оператор обменного взаимодействия электронов,

$$U_{ex,s}(\xi, \psi_{ks}^{(\alpha)}) = \int_{-1/2}^{1/2} G(\xi, \xi') n_{ex,s}(\xi, \xi') \psi_{ks}^{(\alpha)}(\xi') d\xi', \quad (5.7)$$

$$n_{ex,s}(\xi, \xi') = n_{ex,0} \int_0^{k_F} \sum_{\alpha=+,-} \bar{\psi}_{ks}^{(\alpha)}(\xi') \psi_{ks}^{(\alpha)}(\xi) dk. \quad (5.8)$$

На границах канала ставятся следующие условия

$$\frac{d\psi_{ks}^{(\alpha)}}{d\xi} = \begin{cases} k_0^{(\alpha)}(2 - \psi_{ks}^{(\alpha)}), & \xi = -0.5, \quad k_0^{(\alpha)} = i\gamma\sqrt{\varepsilon_k}, \\ k_1^{(\alpha)}\psi_{ks}^{(\alpha)}, & \xi = +0.5, \quad k_1^{(\alpha)} = i\gamma\sqrt{\varepsilon_k - \alpha V}. \end{cases} \quad (5.9)$$

Для численного анализа задачи (5.1)-(5.9) удобно использовать энергетическую координату ε , выражающуюся через волновое число k . Для этого везде, где стоит интегрирование по спектру, используются следующие преобразования

$$\int_0^{k_F} F(k) dk = \frac{\gamma}{2} \int_0^{\varepsilon_F} \frac{F(\varepsilon) d\varepsilon}{\sqrt{\varepsilon}}, \quad (5.10)$$

где F – любая функция, зависящая от координаты k (и соответственно от ε). В уравнениях для обратных волн ($\alpha = "-"$) удобно сделать замену переменных $\xi' = -\xi$. Это позволяет проводить расчеты единым образом и сохранить симметрию решения относительно середины канала $\xi = 0$ в состоянии равновесия (то есть при $V = 0$).

В численных экспериментах рассчитываются и анализируются следующие физические характеристики электронной системы и канала в целом:

$$J = J_{+1/2} + J_{-1/2}, \quad J_s \equiv j_s(\xi = 0),$$

$$j_s(\xi) = j_0 \int_0^{\varepsilon_F} \sum_{\alpha=+,-} \left(\psi_{s\varepsilon}^{(\alpha)} \frac{d\bar{\psi}_{s\varepsilon}^{(\alpha)}}{d\xi} - \bar{\psi}_{s\varepsilon}^{(\alpha)} \frac{d\psi_{s\varepsilon}^{(\alpha)}}{d\xi} \right) \frac{d\varepsilon}{\sqrt{\varepsilon}}, \quad (5.11)$$

$$\sigma = \sigma_{-1/2} + \sigma_{+1/2}, \quad \sigma_s = \frac{dJ_s}{dV}, \quad (5.12)$$

$$\rho(\xi) = \rho_{+1/2}(\xi) + \rho_{-1/2}(\xi), \quad \Delta\rho(\xi) = \rho_{+1/2}(\xi) - \rho_{-1/2}(\xi),$$

$$\rho_s(\xi) = \rho_0 \int_0^{\varepsilon_F} \sum_{\alpha=+,-} |\psi_{s\varepsilon}^{(\alpha)}|^2 \frac{d\varepsilon}{\sqrt{\varepsilon}}, \quad (5.13)$$

$$Q_e = Q_{+1/2} + Q_{-1/2}, \quad \Delta Q_e = |Q_{+1/2} - Q_{-1/2}|, \quad Q = Q_b - Q_e,$$

$$Q_s = q_0 \int_{-1/2}^{+1/2} \rho_s(\xi) d\xi, \quad s = \pm 1/2. \quad (5.14)$$

Здесь J и J_s – полный и парциальные потоки электронов с различными спинами (токи в канале), σ и σ_s – суммарная и парциальные дифференциальные проводимости канала, Q_e и Q_s – средние суммарное и парциальные количества электронов с различными спинами в канале, Q – суммарный заряд канала, Q_b – положительный фоновый заряд канала, j_0 , ρ_0 и q_0 – нормирующие множители.

Более детальное описание математической модели и физических допущений, используемых при ее формулировке дано в [A18].

5.3 Численный алгоритм

Рассмотрим итоговый численный алгоритм, предложенный в [A18, A19, A22, A28, A39] для решения задачи (5.1)-(5.9). Для этого введем в области $D = [-0.5, +0.5] \times [0, \varepsilon_F]$ равномерную сетку $\Omega = \bar{\omega}_\xi \times \bar{\omega}_\varepsilon$ с компонентами

$$\bar{\omega}_\xi = \left\{ \xi = \xi_j = -0.5 + j \cdot h_\xi, j = 0, \dots, N_\xi, h_\xi = N_\xi^{-1} \right\},$$

$$\bar{\omega}_\varepsilon = \left\{ \varepsilon = \varepsilon_m, m = 0, \dots, N_\varepsilon \right\}.$$

Определим на Ω сеточные аналоги волновых функций $\psi_{h,\varepsilon s}^{(\alpha)}(\xi)$. Для дискретизации уравнений (5.1) с учетом граничных условий (5.9) с помощью интегро-интерполяционного метода были построены нелинейные монотонные консервативные разностные схемы. Их можно записать в следующем виде

$$L_{h,\varepsilon}^{(\alpha)} \psi_{h,\varepsilon s}^{(\alpha)}(\xi) + U_{h,s}(\alpha\xi, \psi_{h,\varepsilon s}^{(\alpha)}) - \gamma^2 \varepsilon^{(\alpha)} \psi_{h,\varepsilon s}^{(\alpha)} = \varphi_{h,\varepsilon}^{(\alpha)}, \quad (\xi, \varepsilon) \in \Omega, \quad (5.15)$$

где

$$L_{h,\varepsilon}^{(\alpha)} y_h = \begin{cases} -\frac{2}{h_\xi} (y_{h,\xi} + k_{0,\varepsilon}^{(\alpha)} y_h), & \xi = -0.5, \\ -y_{h,\xi\bar{\xi}}, & \xi \in \omega_\xi, \\ -\frac{2}{h_\xi} (k_{1,\varepsilon}^{(\alpha)} y_h - y_{h,\xi\bar{\xi}}), & \xi = +0.5, \end{cases} \quad \varphi_{h,\varepsilon}^{(\alpha)} = \begin{cases} -\frac{4}{h_\xi} k_{0,\varepsilon}^{(\alpha)}, & \xi = -0.5, \\ 0, & \xi > -0.5. \end{cases}$$

В (5.15) слагаемое $U_{h,s}$ имеет структуру аналогичную (5.2):

$$U_{h,s}(\xi, \psi_{h,\varepsilon s}^{(\alpha)}) = \gamma^2 (U_0 + 2s\varepsilon_F \beta - V_a(\xi) + U_{H,h}(\xi)) \psi_{h,\varepsilon s}^{(\alpha)} - \gamma^2 U_{ex,h,s}(\xi, \psi_{h,\varepsilon s}^{(\alpha)}),$$

где соответствующие интегральные члены аппроксимируются на сетке с помощью квадратурных формул трапеций.

Система разностных уравнений (5.15) сильно нелинейна. Нелинейность содержится в слагаемых гамильтониана, описывающих энергию Хартри (U_H) и энергию обменного взаимодействия электронов ($U_{ex,s}$). Эта нелинейность имеет нелокальный характер из-за интегрирования по пространственной и энергетической координатам. В результате решение любого из уравнений (5.15) зависит от всего набора волновых функций. Для преодоления данной трудности предлагается решать задачу (5.15) с помощью специальной итерационной процедуры.

Для этого рассмотрим комбинации $U_{H,h}(\xi)(\cdot) - U_{ex,h,s}(\xi, \cdot)$ как единые нелинейные операторы $H_{h,s}(\xi, \cdot)$, действующие на каждую сеточную функцию $\psi_{h,\varepsilon s}^{(+)}$. Аналогично, операторы $H_{h,s}(-\xi, \cdot)$ действуют на каждую функцию $\psi_{h,\varepsilon s}^{(-)}$. В обоих случаях операторы $H_{h,s}$ зависят от полного набора искоемых сеточных функций $\Psi_h = \{\psi_{h,\varepsilon s}^{(\alpha)}, \varepsilon \in \bar{\omega}_\varepsilon, \alpha = +, -, s = \pm 1/2\}$. В тоже время, вектор Ψ_h зависит от операторов $H_{h,s}$, причем неявным образом. Этот факт можно выразить с помощью системы нелинейных операторных уравнений

$$H_{h,s} = F_{h,s} \left[\Psi_h \left(H_{h,-1/2}, H_{h,+1/2} \right) \right] \equiv \Phi_{h,s} \left(H_{h,-1/2}, H_{h,+1/2} \right). \quad (5.16)$$

Систему операторных уравнений (5.16) можно использовать для решения общей задачи (5.15) при фиксированном значении параметра V . Для этого предлагается организовать следующий итерационный процесс

$$H_{h,s}^{(l+1)} = H_{h,s}^{(l)} + \tau_{l+1} \left[F_{h,s} \left(\Psi_h^{(l)} \right) - H_{h,s}^{(l)} \right], \quad l = 0, 1, \dots \quad (5.17)$$

В (5.17) операторы $H_{h,s}^{(0)}$ выбираются равными нулевому оператору, а итерационные параметры $0 < \tau_l < \tau_{\max}$ определяются спектром операторных функций $F_{h,s} \left(\Psi_h^{(l)} \right)$.

В случае единственности решения задачи (5.15) сходимость итераций (5.17) имеет место при малых значениях шагов сетки h_ξ , h_ε и параметров τ_l . Найти точные оценки области сходимости процесса (5.17) достаточно трудно. Однако, численные расчеты показали, что удовлетворительные результаты по точности разностного решения и скорости сходимости итераций реализуются при условиях

$$h_\xi < \gamma^{-2,5}, \quad h_\varepsilon < 0.001\varepsilon_F, \quad \tau_{\max} < 0.15. \quad (5.18)$$

В результате можно сформулировать следующее утверждение:

Утверждение 5.1. *При условии существования единственного решения дифференциальной задачи (5.1)-(5.9) и выполнении условий (5.18) на шаги сетки и параметры итерационного процесса (5.17) итерации сходятся к решению разностной задачи (5.15), которое в свою очередь сходится к решению дифференциальной задачи по норме пространства $L_2(\bar{\omega}_\xi \times \bar{\omega}_\varepsilon)$ со скоростью $O(h_\xi^2 + h_\varepsilon^2)$.*

Прямое доказательство утверждения 5.1 достаточно трудоемко и требует специального рассмотрения. В качестве косвенного обоснования утверждения 5.1 можно отметить, что при решении задачи предложенным численным методом (5.15)-(5.17) в случае $V = 0$ при достаточной длине канала ($a \ll L$) и близости высоты энергетического барьера к уровню Ферми

$(U_0 \sim \varepsilon_F)$ имеет место сходимость разностного решения к решению линейной задачи, в которой реализуются известные из теории и экспериментов фриделевские осцилляции плотности электронов [21, 476, A18].

Рассмотрим теперь подробнее весь алгоритм численного решения задачи. Как и для других задач подобного типа он состоит из двух этапов – расчете равновесного состояния при отсутствии внешних воздействий ($V=0$) и расчета ВАХ при ненулевом приложенном напряжении ($V>0$).

При расчете равновесного состояния электронов в канале алгоритм решения задачи состоит в следующем. Сначала задаются нулевые операторы $H_{h,s}^{(0)}$. По ним из уравнений (5.15) находится начальный вектор $\Psi_h^{(0)}$, для чего решается серия линейных задач с трехдиагональной матрицей. Затем из (5.17) по вектору $\Psi_h^{(0)}$ находятся операторы $H_{h,s}^{(1)}$. Далее из (5.15) определяется вектор $\Psi_h^{(1)}$, для чего приходится решать серию линейных задач с полностью заполненной матрицей. Это процесс повторяется до тех пор, пока не выполняется условие сходимости

$$\left\| H_{h,s}^{(l+1)} - H_{h,s}^{(l)} \right\|_C \leq \delta. \quad (5.19)$$

При решении задачи на компьютере и использовании чисел с двойной точностью величина $\delta \approx 10^{-13} \div 10^{-14}$, то есть близка к машинному нулю. Получаемая при этом абсолютная точность характеристик электронного транспорта составляет примерно $10^{-5} \div 10^{-6}$, что свидетельствует о сильной жесткости задачи. Тем не менее этой точности достаточно для количественного анализа процессов электронного транспорта в не очень длинных квантовых каналах (примерно до 200 нм).

Рассмотрим далее способ расчета вольт-амперной характеристики канала $J(V)$. Для этого, очевидно, необходимо провести серию расчетов по выше указанному алгоритму для целого набора значений приложенного напряжения. Учитывая сильную нелинейность задачи, следует начать расчеты с

определения равновесного состояния системы, а затем получить решение для интересующих значений напряжения V , начиная с малых его величин. Как показали численные эксперименты, лучше всего ввести на исследуемом интервале напряжений $[0, V_{\max}]$ сетку, например, равномерную, $\bar{\omega}_V = \{V = V_k = k \cdot h_V, k = 0, \dots, N_V, h_V = V_{\max} / N_V\}$ и согласовать ее шаг с шагом по энергии: $h_V \leq h_\varepsilon$. Для точек $V_k > 0$ в качестве начальных операторов $H_{h,s}^{(0)}$ в процессе (5.17) следует брать операторы, полученные в результате решения задачи для $V = V_{k-1}$.

Приведенный алгоритм устойчив, если ВАХ является однозначной функцией. В противном случае (то есть при наличии S-образных участков ВАХ, свидетельствующих о наличии би- или мультстабильности электронной системы в канале) по нему можно рассчитать лишь нижнюю ветвь $J(V)$ (см. рис. 5.3). Для расчета верхней ветви можно использовать обратный проход по характеристике (от V_{\max} к нулю), изменив при этом итерационную процедуру (5.17), в которой будут фигурировать уже обратные элементы операторов $H_{h,s}^{(l)}$. Для ускорения сходимости итераций в уравнения (5.17) можно также добавить слагаемые, связанные с регуляризацией по Тихонову [264].

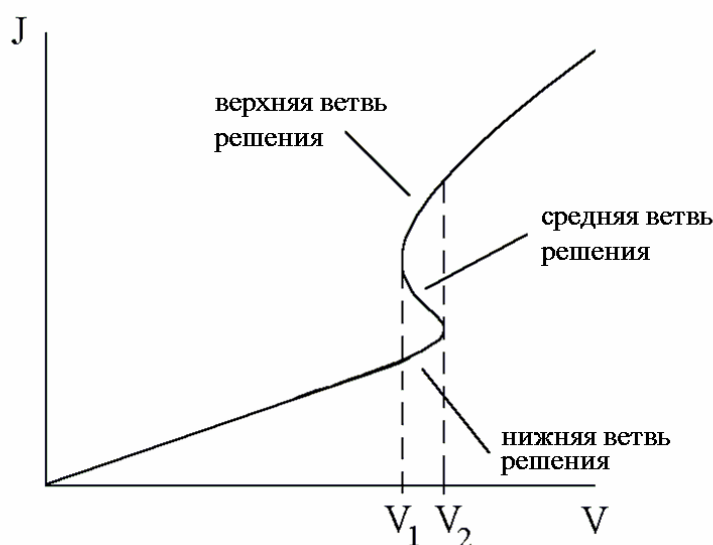


Рисунок 5.3. Возможная конфигурация кривой ВАХ.

Метод расчета отдельно верхней и нижней устойчивых ветвей ВАХ вполне приемлем, если учесть, что система уравнений (5.15) имеет очень большую размерность и решается с помощью МВС. Именно такой подход использовался в работах [A22, A28, A39, A40]. Полученные результаты обсуждаются ниже.

Альтернативой изложенному алгоритму является подход, разработанный в гл. 1 для разрешения проблемы неединственности решения в пространственно одномерных квантовых системах с постоянным квазистационарным током. При его использовании определение всех ветвей ВАХ (в том числе неустойчивых средних ветвей) получается автоматически, но требует значительно больших вычислительных затрат. Реализация такого алгоритма потребует включения в общую систему уравнений двух дополнительных уравнений для тока и напряжения. В данном случае это уравнение для тока (5.11) и уравнение Верзьеры. Такой подход использовался в [A18, A19]. При этом удалось также показать, что вместо уравнения для тока (5.11) можно использовать любую другую транспортную характеристику, например, среднюю кинетическую энергию электронов K (см. [A18]). Тогда уравнение Верзьеры записывается также в переменных (K, V) , а не в переменных (J, V) .

5.4 Параллельная реализация

Для проведения вычислительных экспериментов на основе предложенного выше численного алгоритма была разработана параллельная программа **NANO_2D**, ориентированная на применение МВС с распределенной памятью. При параллельной реализации использовались идеи, изложенные в п. 2.5 гл. 2. Область D разбивается на равные части по координате ε по числу процессоров (геометрический параллелизм в энергетическом пространстве). Дополнительное разбиение вводится по параметрам α и s . В итоге на каждой итерации численного алгоритма различные уравнения (5.15) решаются на различных процессорах, а сборка операторов $H_{h,s}^{(l+1)}$ производится по частям

на всех процессорах, а затем окончательно на управляющем процессоре. Последний рассылает итоговый результат на все другие процессоры.

Теоретическая эффективность такого параллельного алгоритма (обозначим его – **A1**) близка к 100%. В реальных вычислениях его эффективность зависит как от конкретной размерности задачи, так и от мощности процессоров и скорости межпроцессорных обменов. Например, при размерности задачи 201×5200 (произведение числа пространственных точек $N_\xi + 1$ на число точек по энергии N_ε , учетверенное ввиду разделения электронных волн по направлению движения и спину) на системе МВС-1000М с процессорами Alpha 21264A (667 MHz) и каналами обмена Myrinet 3 (2Gbit/s) эффективность составляла порядка 99-88% для числа процессоров от 10 до 100 и падала до 55% для максимального числа процессоров 630 (см. рис. 5.4). Причиной падения эффективности на большом числе процессоров была умеренная размерность задачи и накладные расходы, связанные с межпроцессорными обменами. Увеличение размерности задачи приводит к увеличению эффективности вычислений (см. рис. 5.5).

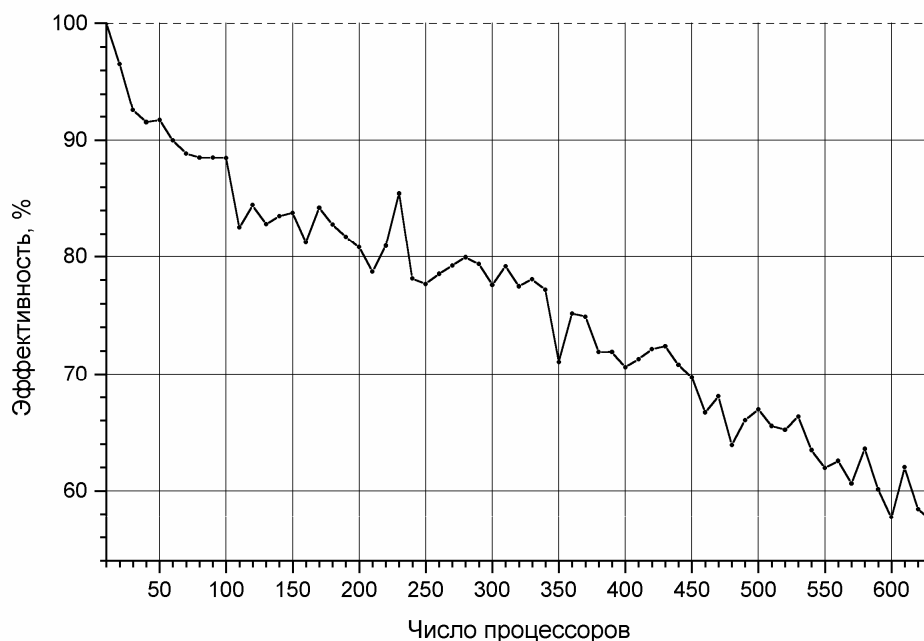


Рисунок 5.4. Эффективность распараллеливания алгоритма **A1** при расчетах модельной задачи на МВС-1000М (МЦЦ РАН) на сетке 201×5200 .

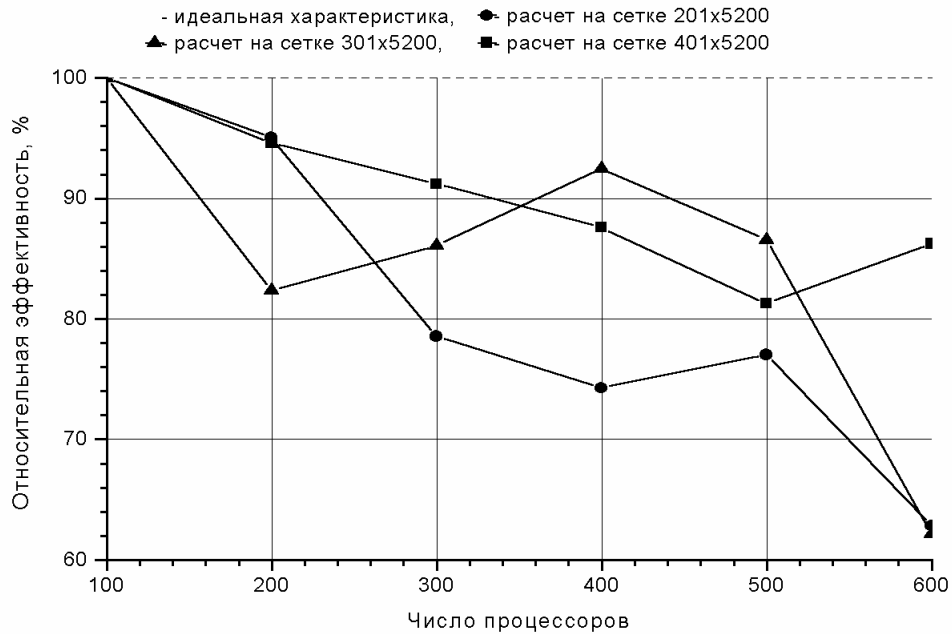


Рисунок 5.5. Сравнение эффективности распараллеливания алгоритма **A1** при расчетах модельной задачи на МВС-1000М (МСЦ РАН) на сетках различной размерности: 201x5200, 301x5200, 401x5200.

Оценивая в целом предложенный параллельный алгоритм **A1** можно отметить, что он дает желаемое линейное ускорение. Однако при моделировании электронного транспорта в случае развитого обменного взаимодействия вычислительная задача остается «тяжелой» даже для суперЭВМ. Причина этого заключается в использовании метода Гаусса при обращении большого количества полных матриц размерности N_ξ^2 при решении уравнений (5.15). Вычислительная сложность алгоритма в последовательной реализации может быть оценена величиной $Q_1 = O(4N_\xi^3 N_\varepsilon)$. Максимальная степень параллелизма при этом равна $d = 4N_\varepsilon$. Соответственно запас параллелизма, то есть максимально возможное число процессоров p , не может быть больше величины d . При этом объем передаваемых данных каждому процессору составляет $O(N_\xi^2)$ и не зависит от числа процессоров.

Для ускорения вычислений было предложено оптимизировать разработанный численный алгоритм с помощью метода продолжения решения по

малому параметру. Идея оптимизации состояла в том, что любую сеточную волновую функцию $\psi_{h,\varepsilon s}^{(\alpha)}$ можно представить в виде ряда Тэйлора по энергии ε . В частности, для двух функций с близкими значениями энергии можно записать

$$\psi_{h,\varepsilon_1 s}^{(\alpha)} = \psi_{h,\varepsilon_0 s}^{(\alpha)} + O(\Delta\varepsilon), \quad \Delta\varepsilon = \varepsilon_1 - \varepsilon_0. \quad (5.20)$$

Аналогичное разложение можно использовать и для линейных операторов $(L_{h,\varepsilon_1}^{(\alpha)} - \gamma^2 \varepsilon_1^{(\alpha)} I)$, а также для правых частей $\varphi_{h,\varepsilon_1}^{(\alpha)}$, входящих в сеточные уравнения (5.15). Нелинейные же операторы $U_{h,s}(\alpha\xi, \psi_{h,\varepsilon s}^{(\alpha)})$ в силу нелокальности по энергии и замороженности на итерации будут одинаковыми для всех волновых функций одинакового направления и спина. Поэтому, если функции $\psi_{h,\varepsilon_0 s}^{(\alpha)}$ уже известны и $\Delta\varepsilon$ мало, то $\psi_{h,\varepsilon_1 s}^{(\alpha)}$ можно вычислить как продолжение первых. Для этого необходимо найти LU -разложение матрицы уравнения (5.15) для функции $\psi_{h,\varepsilon_0 s}^{(\alpha)}$ и использовать его для определения $\psi_{h,\varepsilon_1 s}^{(\alpha)}$ по приближенным уравнениям (5.15), в которые подставлены разложения (5.20), модифицирующие в итоге лишь правую часть линейной задачи.

Данную методику можно использовать сразу для нескольких соседних по сетке значений энергии $\varepsilon_j > \varepsilon_0$. Однако для каждого из них придется вычислять разложения в ряд Тэйлора с различным числом членов, чтобы получить одинаковую точность решения. Фактически, если добавлять каждый раз один или несколько новых членов ряда, этого будет достаточно для получения нужной точности. Имеется и более рациональный способ выбора количества членов – анализ остаточного члена разложения.

Предложенная методика оптимизации позволила существенно понизить вычислительную сложность алгоритма (параллельный вариант этого алгоритма обозначим **A2**). Теперь величина $Q_1 = O\left(4N_\xi^3 m_\varepsilon + 4N_\xi^2 (N_\varepsilon - m_\varepsilon)\right)$, где m_ε – количество реперных точек сетки по энергии, в которых решение вы-

числяется с помощью полного LU -разложения, а $(N_\varepsilon - m_\varepsilon)$ – количество точек по энергии, для которых решение определяется с помощью обратного хода LU -разложения. В реальных расчетах применение предложенной оптимизации привело к снижению вычислительных затрат на порядок и более.

При распараллеливании предложенная оптимизация имеет несколько ограничений. Во-первых, число процессоров p должно быть согласовано с величиной $4m_\varepsilon$, то есть если $p < 4m_\varepsilon$, то $4m_\varepsilon / p$ должно быть натуральным числом (каждый процессор рассчитывает целое положительное число реперных точек по энергии). Если же мы хотим взять количество процессоров большее, чем $4m_\varepsilon$, то мы должны положить $m_\varepsilon = p / 4$ (каждый процессор рассчитывает одну реперную точку по энергии). В последнем случае количество вычислений по сравнению с последовательным алгоритмом возрастает, однако ускорение достаточно долго увеличивается, хотя и при падающей эффективности.

Во-вторых, возникает дисбаланс при параллельных вычислениях, который проявляется в большой разнице времен вычислений одной итерации на разных процессорах и может достигать нескольких раз. В результате эффективность даже на малом числе процессоров может быть низкой. Анализ ситуации показал, что это дисбаланс связан с тем, что каждый процессор должен рассчитать хотя бы одну реперную точку (что дешевле, чем пересылать от соседей матрицу LU -разложения), а затем вычислять остальные функции с различными вычислительными затратами, пропорциональными числу членов в разложении ряда Тэйлора. Поскольку точное число членов ряда зависит от положения точки в спектре, итоговое распределение вычислительной нагрузки по сетке в пространстве энергий может быть сильно неоднородным и, соответственно, приводить к большой разнице в загрузке процессоров.

Для устранения этой проблемы предложено было использовать динамическую балансировку загрузки процессоров (реализация алгоритма изложена в п. 2.5 гл. 2) путем перераспределения количества расчетных узлов по

энергии между процессорами на итерациях. Использование такой методики на практике привело к существенному увеличению эффективности. Однако максимальный выигрыш эта методика дала в случае использования кластеров с неоднородной архитектурой, например, при использовании узлов с различной частотой процессоров и/или различной производительностью. В последнем случае динамическая балансировка загрузки применялась для обоих алгоритмов **A1** и **A2**. В результате были реализованы их версии **A1M** и **A2M**, поддерживающие динамическую балансировку загрузки процессоров.

В качестве примера использования всех четырех версий параллельного алгоритма приведем расчеты, выполненные на неоднородном кластере ИММ РАН. Использованная конфигурация кластера приведена в таблице 5.1. Скорость обмена по сети между узлами – 2 Gbit/s. В тестировании было выбрано по одному потоку с каждого узла. Все потоки были упорядочены по убыванию относительной производительности, определенной экспериментально.

Таблица 5.1. Неоднородная конфигурация кластера ИММ РАН.

Тип узла	Количество процессоров в узле	Количество ядер в процессоре	Количество потоков в ядре	Частота, ГГц	Относительная производительность	Количество узлов
Intel Xeon X5550	2	4	2	2.67	3.17	10
Intel Xeon E5405	2	4	1	2.00	2.35	1
Intel Xeon E5504	2	4	1	2.00	2.13	1
Intel Xeon 5150	2	2	1	2.66	1.96	13
Intel Core 2 Quad	1	4	1	2.40	1.77	1
Intel Core 2 Duo	1	2	1	2.13	1.58	1
Intel Xeon	2	1	1	3.06	1.0	14

Результаты расчетов эффективности распараллеливания при решении модельной задачи представлены на рис. 5.6, 5.7. Для уравнивания шансов

всех вариантов алгоритма были выбраны 10 итераций процесса (5.17) при вычислениях равновесного состояния.

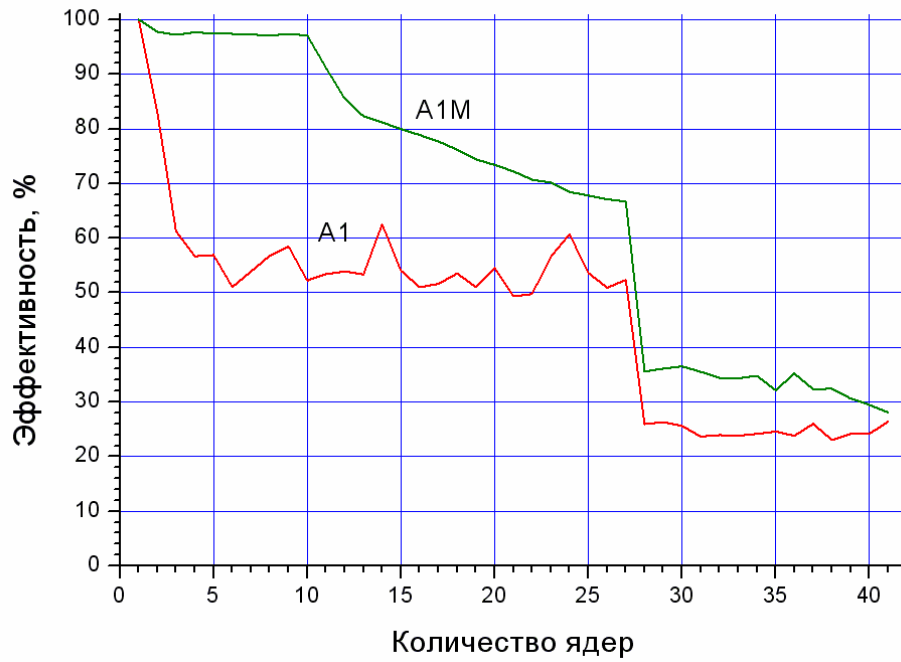


Рисунок 5.6. Сравнение эффективности распараллеливания при использовании алгоритмов A1 и A1M на сетке 201x6000.

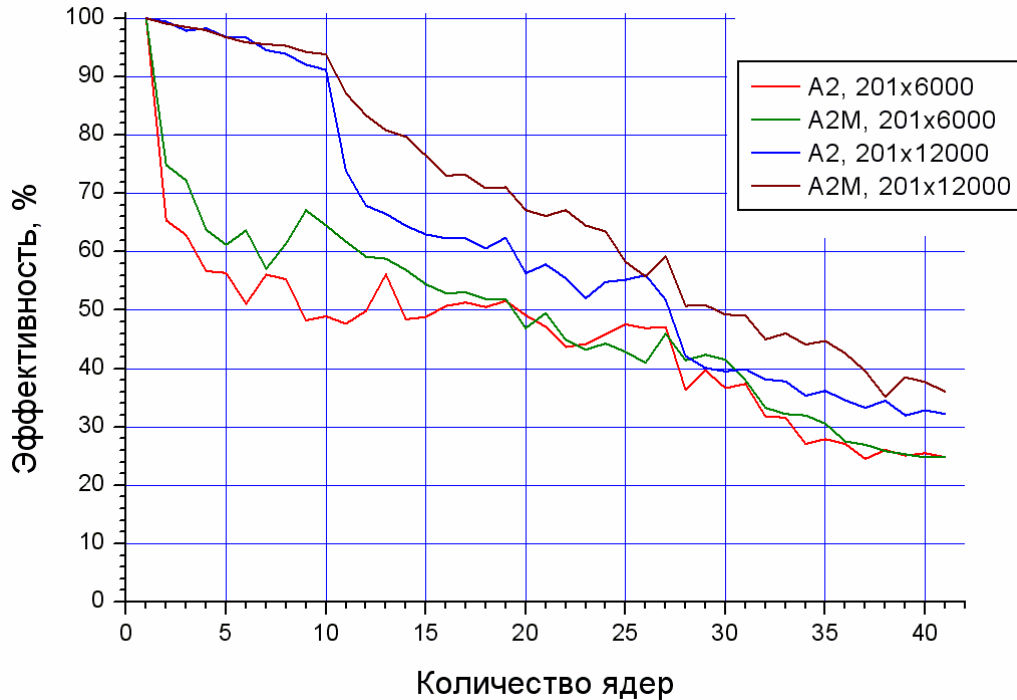


Рисунок 5.7. Сравнение эффективности распараллеливания при использовании алгоритмов A2 и A2M на сетках 201x6000 и 201x12000.

Как видно из рисунков, применение балансировки загрузки действительно приводит к увеличению эффективности (кривые **A1M** и **A2M** лежат выше кривых **A1** и **A2**). Оптимизированный алгоритм **A2** имеет существенно меньшие вычислительные затраты и потому его сложнее сбалансировать. Однако с ростом размерности задачи и его эффективность возрастает.

Следует также отметить, что эффективность распараллеливания задачи на кластере ИММ РАН существенно ниже, чем на системе МВС-1000М. Причиной этому служит большая производительность процессоров (самый медленный Intel Xeon быстрее Alpha 21264А примерно в 5 раз) и меньшая производительность сети (сдвоенный Gigabit Ethernet медленнее Myrinet 3 примерно в 3-4 раза за счет применения широковещательного протокола обмена сообщениями) у кластера ИММ РАН.

В заключение данного пункта отметим, что на базе рассмотренных алгоритмов была разработана параллельная программа **NANO_2D**, которая наряду с научным использованием вошла также в пакет стандартных тестов МВС в НИИ «Квант» и МСЦ РАН. С ее помощью на этапе опытной эксплуатации тестировались такие отечественные суперкомпьютеры, как МВС-1000М (НИИ «Квант»), МВС-15К, МВС-100К (оба МСЦ РАН), СКИФ-ГРИД «Чебышев» (НИВЦ МГУ), а также кластеры ИММ РАН.

5.5 Результаты моделирования

Рассмотрим основные результаты, полученные с помощью разработанной методики. В представленных ниже численных экспериментах характеристики электронного транспорта рассчитывались как вблизи положения равновесия (внешнее напряжение на контактах отсутствует: $V = 0$), так и вдали от него ($V \sim \varepsilon_F$). Основные характеристики (полная проводимость канала, суммарный заряд электронов и др.) анализировались как функции уровня Ферми ε_F , величины $\Delta\bar{\varepsilon}_F = 1 - U_0 / \varepsilon_F$ (где U_0 – высота потенциального барьера) и спинового фактора β . Вычисления проводились для канала с радиусом $a = 5\text{ нм}$ и длиной $L = 100\text{ нм}$.

Первая серия расчетов связана с анализом равновесного состояния электронной системы в канале. Для этого были выбраны следующие параметры: $\varepsilon_F = 7.5 \text{ мЭв}$, $\beta = 10^{-3}$. Результаты вычислений представлены на рис. 5.8, 5.9. На них все характеристики, соответствующие положительному (отрицательному) спину помечены знаком “+” (“-“).

Полученные результаты показывают, что в равновесном состоянии реализуются четыре различных типа распределения электронной плотности в канале. Первый тип распределения (рис. 5.8) имеет место при небольших значениях потенциального барьера U_0 (то есть при большом энергетическом зазоре $\Delta\bar{\varepsilon}_F$) и соответствует полному прохождению прямых и обратных электронных волн через канал. В этом случае спонтанная спиновая поляризация электронов не оказывает существенного влияния на их транспорт, и можно считать, что в любой момент времени среднее количество электронов с различными спинами, находящихся в канале, одинаково (следовательно, их суммарные заряды тоже равны: $Q_+ = Q_-$). Как следствие, проводимость канала в этом случае близка к максимальной: $\sigma = (0.7 \div 1) \sigma_{\max}$, $\sigma_{\max} = 2e^2 / \hbar$.

Заметим, что под заполнением канала n электронами здесь и далее понимается такой транспортный режим, который эквивалентен постоянному нахождению в канале n электронов. Фактически канал приобретает постоянный заряд Q равный $n \cdot e$ (см. рис. 5.9). Вследствие учета спина n принимает значения кратные 0.5 и может стать отрицательным (за положительный заряд принят заряд электрона), то есть равным фоновому заряду.

Второй и третий типы распределения электронной плотности реализуются для больших значений потенциального барьера (то есть для средних и малых значений $\Delta\bar{\varepsilon}_F$) и характеризуются расщеплением электронных потоков по спину. В этих случаях канал заполняет либо нечетное (рис. 5.10), либо четное (рис. 5.11) число электронов с различными спинами. Суммарная проводимость канала зависит от соотношения между спиновыми модами. Ее значение может стать очень малым (см. рис. 5.12а).

Четвертый тип распределения электронной плотности реализуется при очень больших барьерах (очень малый зазор $\Delta\bar{\varepsilon}_F$) и соответствует одномодовому спиновому транспорту через канал (рис. 5.10в, 5.11в). А именно, электроны со спином $-1/2$ заполняют канал полностью. В этом случае проводимость канала становится очень низкой и не может быть выше, чем e^2 / \hbar .

Электронный заряд канала и поляризация (рис. 5.9, 5.12б) помогают определить наличие и параметры спинового расщепления электронных потоков и могут использоваться для классификации режимов электронного транспорта. Например, поляризационная кривая дает информацию о количестве электронов с различными спинами, находящимися в канале.

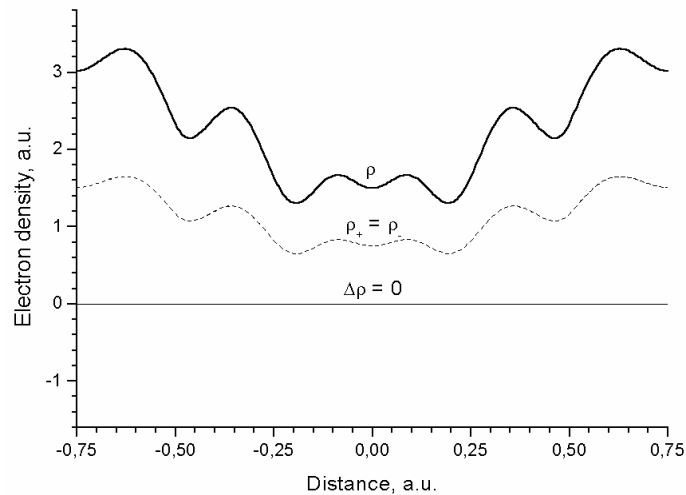


Рисунок 5.8. Распределение электронной плотности в канале для $\Delta\bar{\varepsilon}_F = 0.4$.

Суммарный заряд канала равен 0.5.

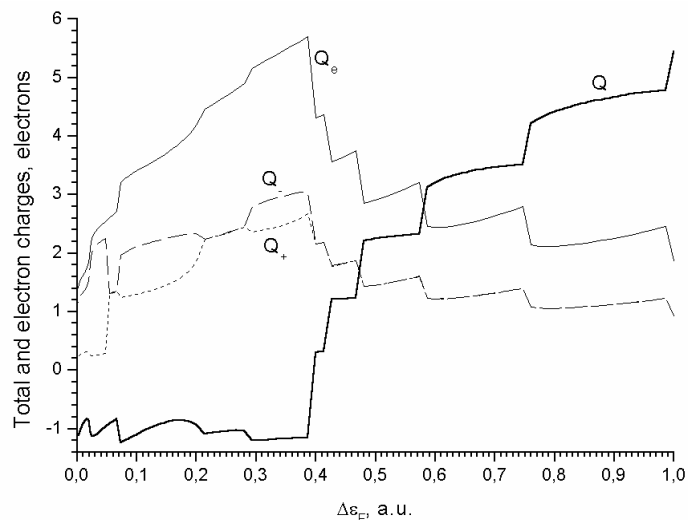


Рисунок 5.9. Зависимость суммарного заряда канала от величины $\Delta\bar{\varepsilon}_F$.

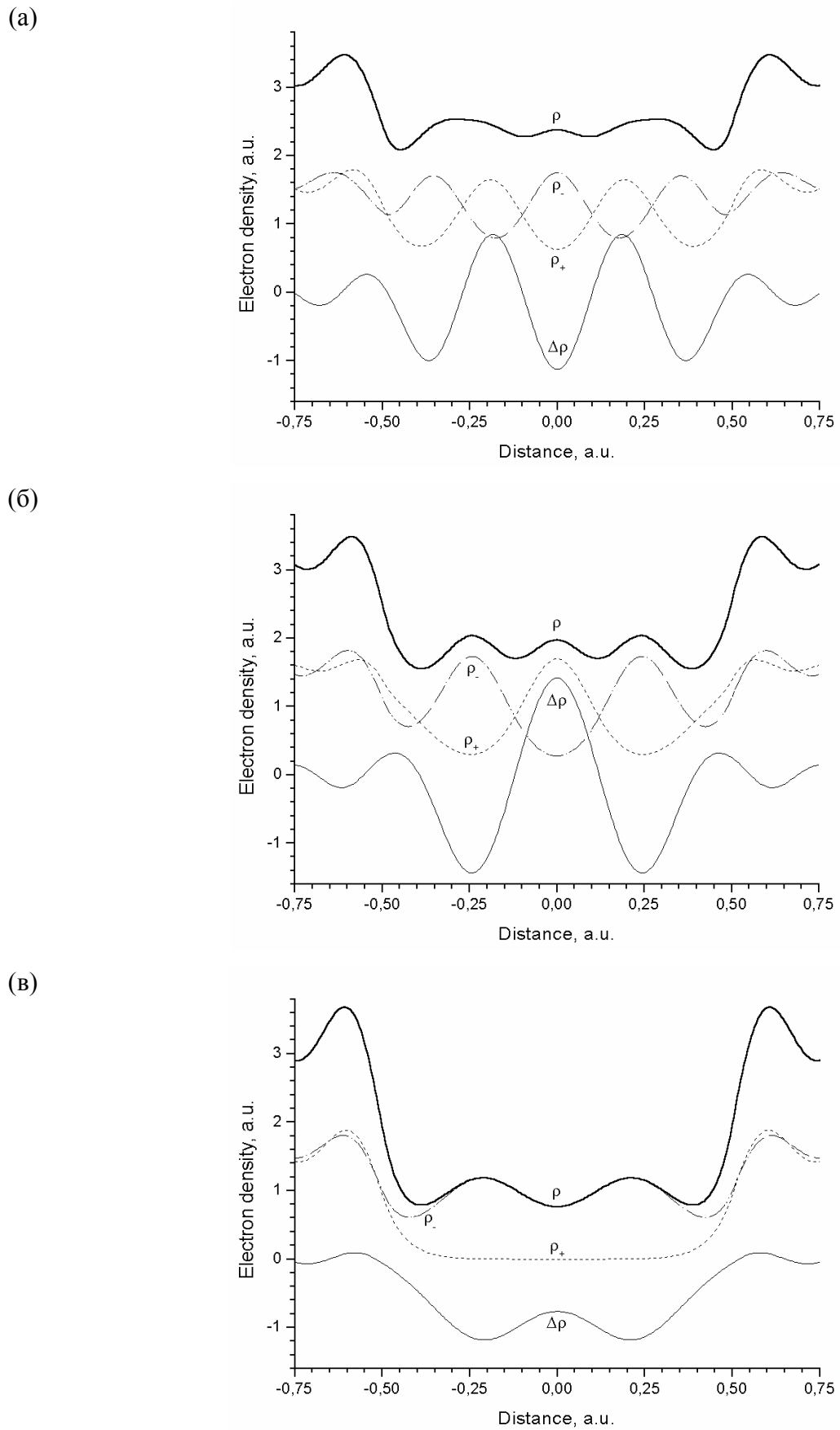


Рисунок 5.10. Распределение электронной плотности в канале для значений $\Delta\bar{\epsilon}_F = 0.33(3), 0.2, 0.026(6)$ (рис. (а)-(в)). Количество электронов в канале нечетное.

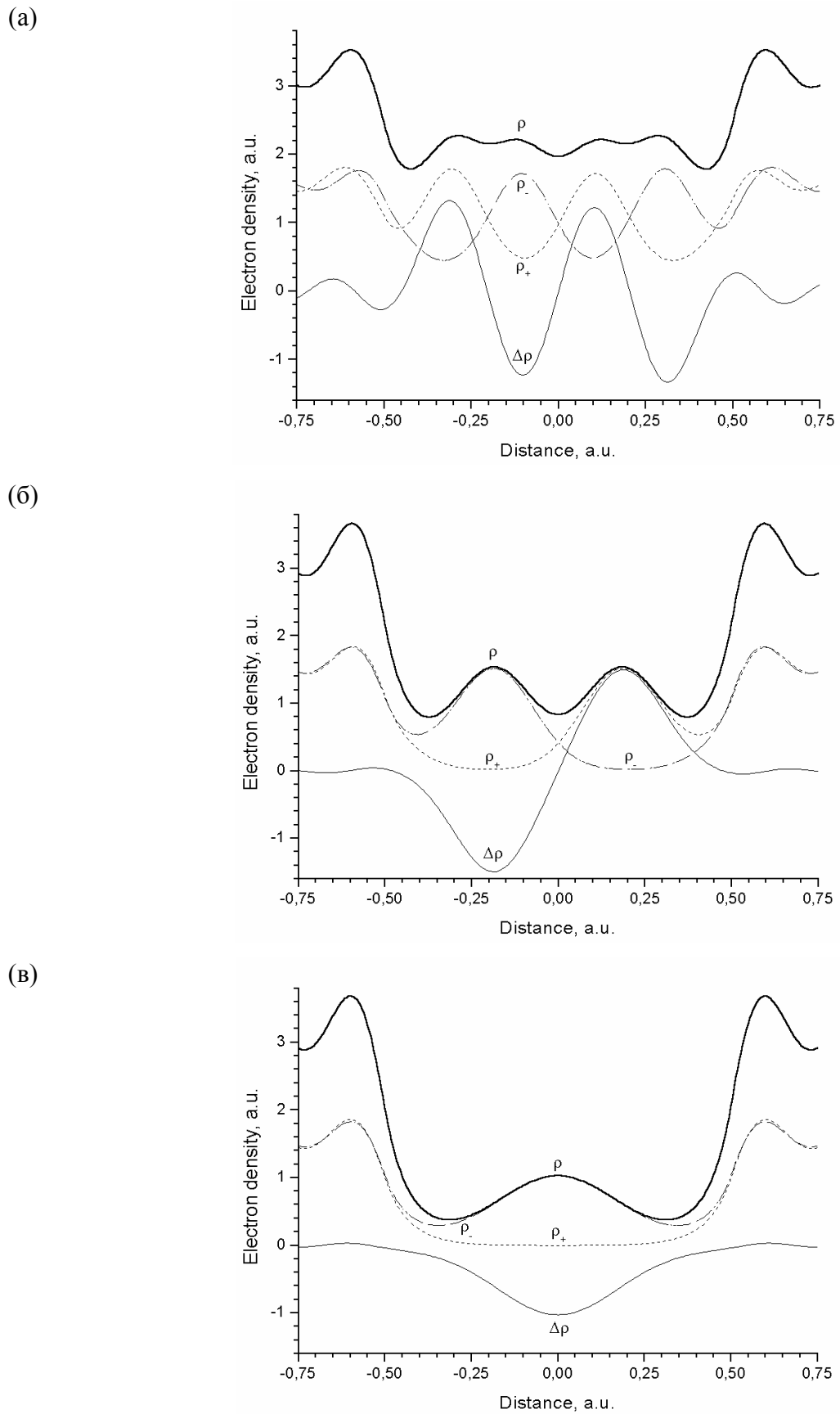


Рисунок 5.11. Распределение электронной плотности в канале для значений $\Delta\bar{\epsilon}_F = 0.26(6), 0.06(6), 0.013(3)$ (рис. (а)-(в)). Количество электронов в канале четное.

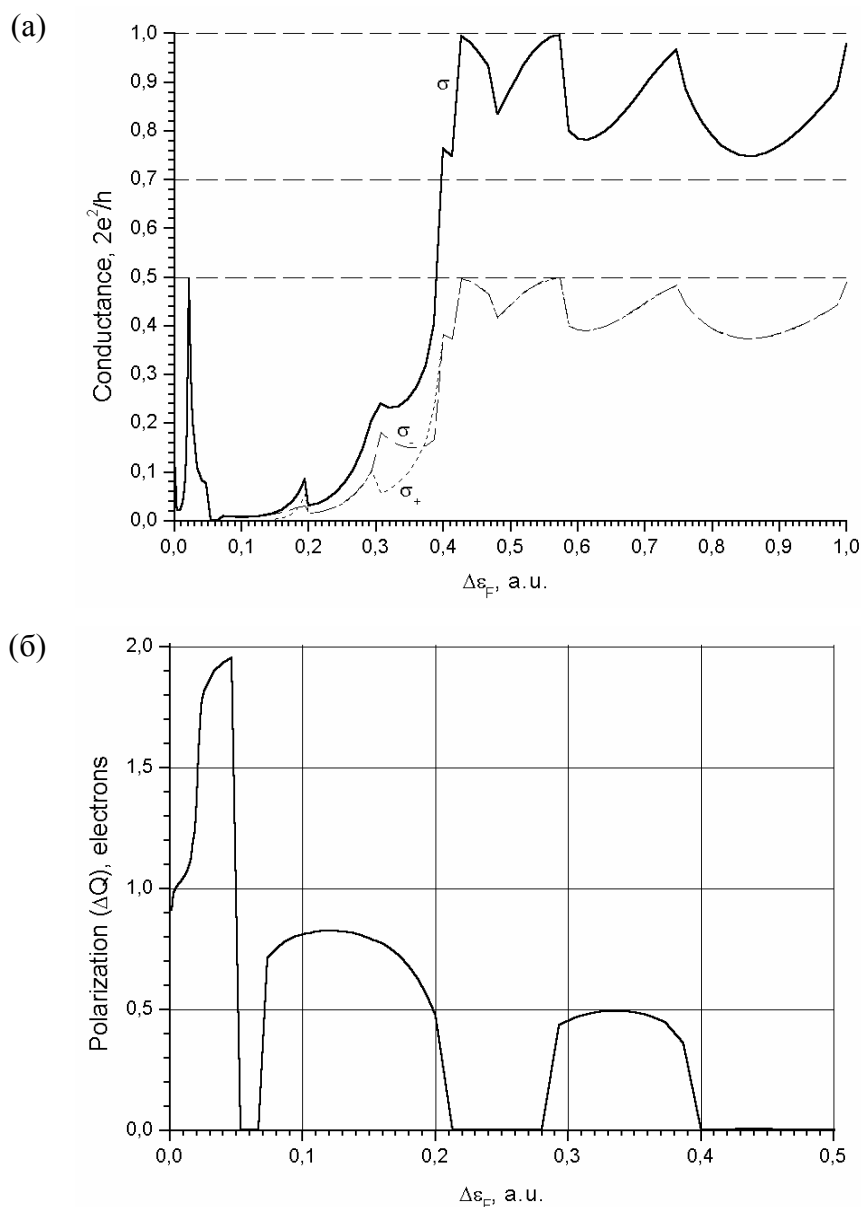


Рисунок 5.12. Проводимость (а) и поляризация (б) канала как функции $\Delta\bar{\varepsilon}_F$.

Вторая серия расчетов была выполнена для $\varepsilon_F = 15 \text{ мЭв}$ с целью сравнения модели без учета спиновой поляризации ($\beta = 0$), рассмотренной в [A18], и полной модели ($\beta > 0$). Результаты расчетов приведены на рис. 5.13 и 5.14. На рис. 5.13 представлены зависимости проводимости канала от величины $\Delta\bar{\varepsilon}_F$, полученные по обеим моделям. Как видно из рисунка полная проводимость канала одинакова для обоих случаев при $\Delta\bar{\varepsilon}_F \geq 0.24$. При меньших $\Delta\bar{\varepsilon}_F$ суммарная проводимость канала в полной модели резко падает и теряет гладкость в некоторых точках. Это происходит потому, что электроны со

спином $-1/2$ заполняют канал полностью. Модель, не учитывающая фактор спонтанной спиновой поляризации электронов, дает некорректный результат. В ее рамках нечетное заполнение канала электронами реализоваться не может, поскольку электронная плотность формируется двумя одинаковыми спиновыми модами (см. рис. 5.14).

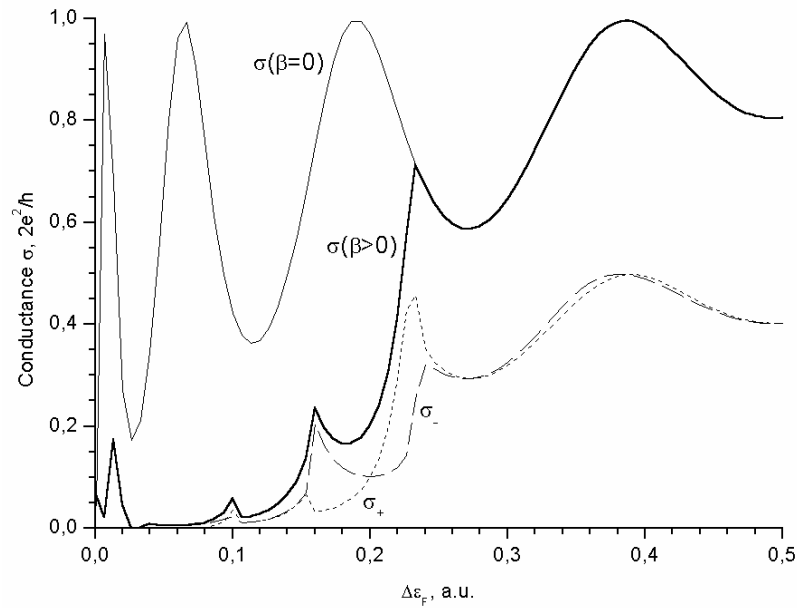


Рисунок 5.13. Полная проводимость канала при $\beta = 0$ и $\beta > 0$.

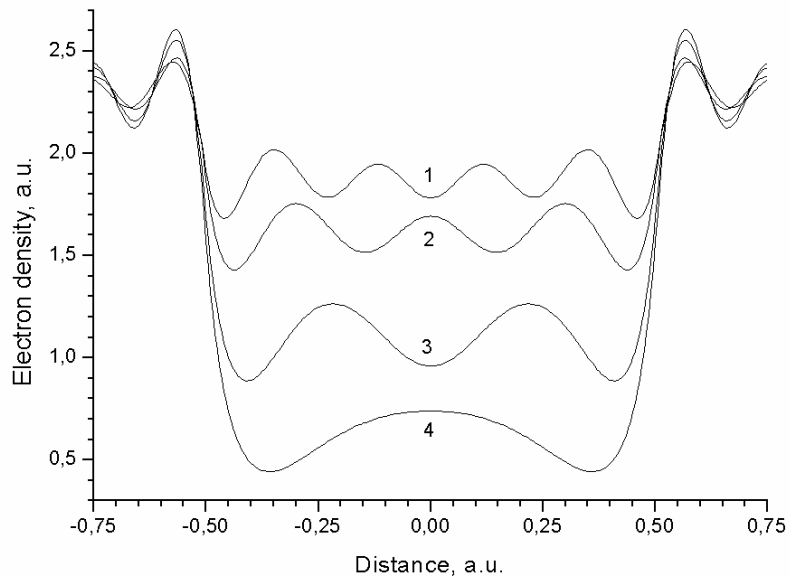


Рисунок 5.14. Электронная плотность в канале для $\beta = 0$, $\Delta \bar{\epsilon}_F = 0.46(6), 0.33(3), 0.13(3), 0.03(3)$ (кривые 1-4).

Зависимость равновесных характеристик электронного транспорта от различных параметров рассматривалась в [A18, A19, A22, A28]. В частности, было изучено равновесное состояние электронной системы в канале в зависимости от его длины L . В расчетах было показано, что при фиксированном радиусе канала ($a = 5\text{нм}$), нелинейная проводимость канала реализуется при достаточно больших значениях длины ($L \approx 12\text{нм}$ и более). Этот факт можно прокомментировать следующим образом. При малых длинах канала ($L \sim a$ и менее) суммарный заряд канала в равновесии $Q \leq 0$, то есть проходящие через канал электронные потоки могут лишь компенсировать фоновый заряд. Если же длина канала становится больше, то в нем помещается некоторое количество «виртуальных» электронов, заряд которых инвертирует суммарный заряд канала (заряд Q становится положительным). Этот эффект можно условно назвать перезарядкой или зарядовой поляризацией канала. Эта перезарядка препятствует электронному транспорту, и проводимость длинного канала сильно отличается от проводимости короткого. Изменить ситуацию может только приложенное к каналу внешнее напряжение $V > 0$.

Далее было исследовано влияние фактора спонтанной спиновой поляризации β на равновесное состояние электронов в канале. Величина β влияет в первую очередь на проводимость канала. Результаты расчетов проводимости канала представлены на рис. 5.15, 5.16. Как видно из рисунков, с увеличением β различия в поведении спиновых мод все более увеличиваются. Так, с некоторого значения β электроны со спином $+1/2$ перестают проходить через канал. В результате проводимость канала становится в 2 раза меньше. Однако, эта ситуация соответствует слишком большому значению β и трудно реализуема на практике, если не воздействовать на систему, например, магнитным полем.

Попутно было показано, что линейная проводимость канала (кривая 1 на рис. 5.15) сильно отличается как от случая учета в модели энергии Хартри (кривая 2 на рис. 5.15), так и от случая добавления в модель обменного взаи-

модействия электронов (кривые 3 на рис. 5.15). Это означает, что оба эти фактора необходимо принимать во внимание.

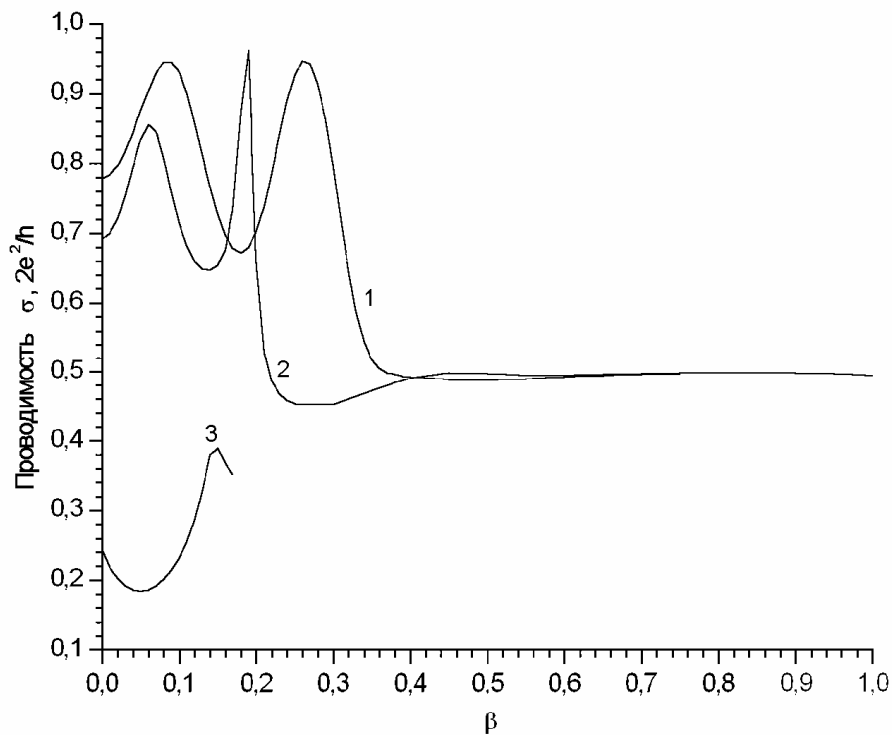


Рисунок 5.15. Зависимость проводимости канала от фактора спонтанной спиновой поляризации β в линейном случае (кривые 1), без учета обменного взаимодействия электронов (кривые 2) и в его присутствии (кривые 3).

Эффект пространственного разделения электронных волн по спину, нашедший свое отражение в кривых проводимости канала, условно назовем спиновым расщеплением или спиновой поляризацией канала. Вместе с эффектом зарядовой поляризации его можно условно изобразить на фотографии экспериментальной структуры, приведенной в работе [469] (см. рис. 5.17, 5.18). В случае зарядовой поляризации в канале появляются виртуальные электроны с различными спинами. Их количество зависит от величины $\Delta\bar{\epsilon}_F$ и отношения длины канала к его радиусу: L/a . В случае спиновой поляризации канал заполняют виртуальные электроны со спином $-1/2$. Реализация эффекта дополнительно связана с фактором спонтанной спиновой поляризации β .

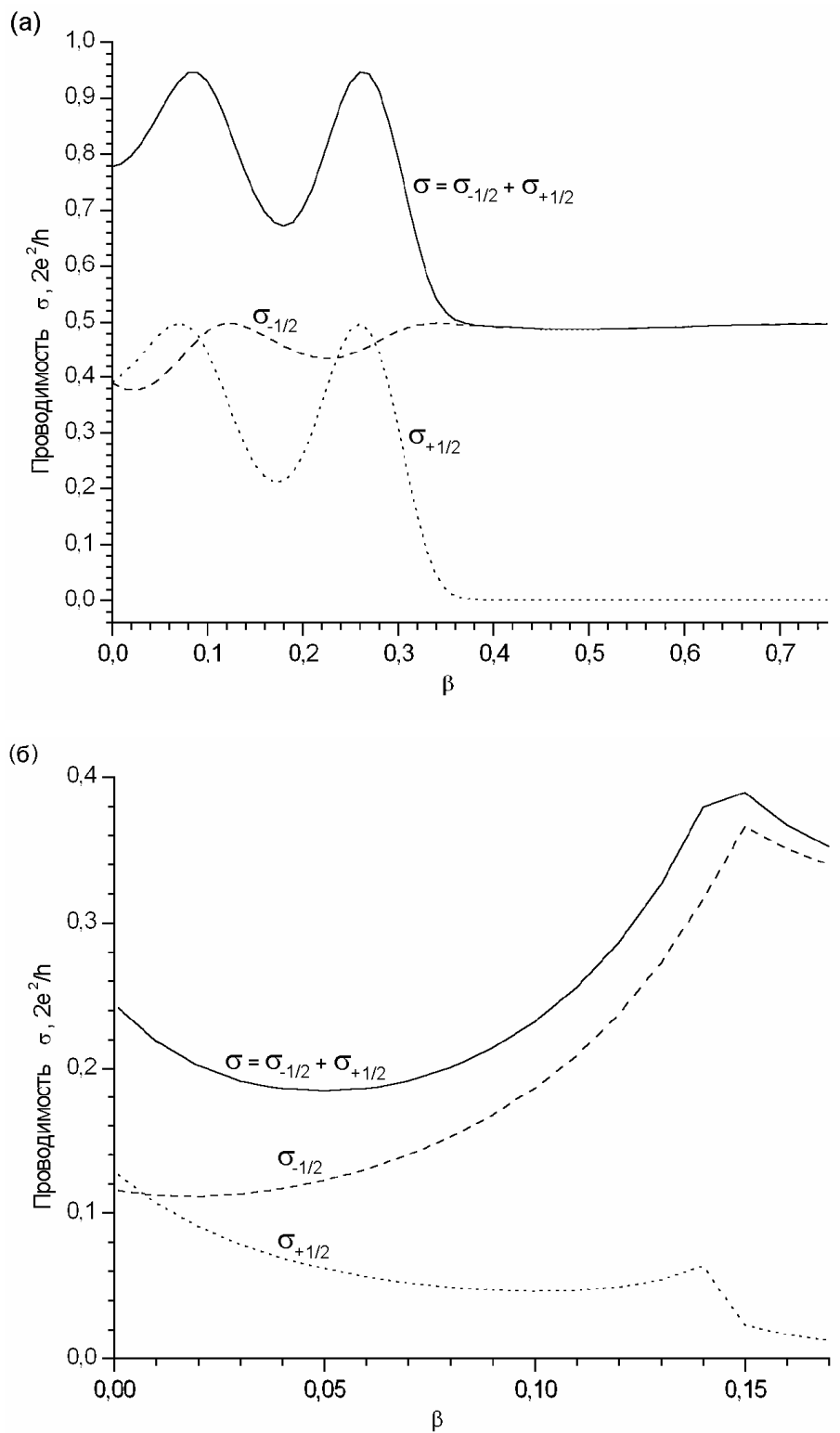


Рисунок 5.16. Суммарная и парциальные проводимости канала в зависимости от фактора спонтанной спиновой поляризации в отсутствие (а) и в присутствии (б) обменного взаимодействия электронов.

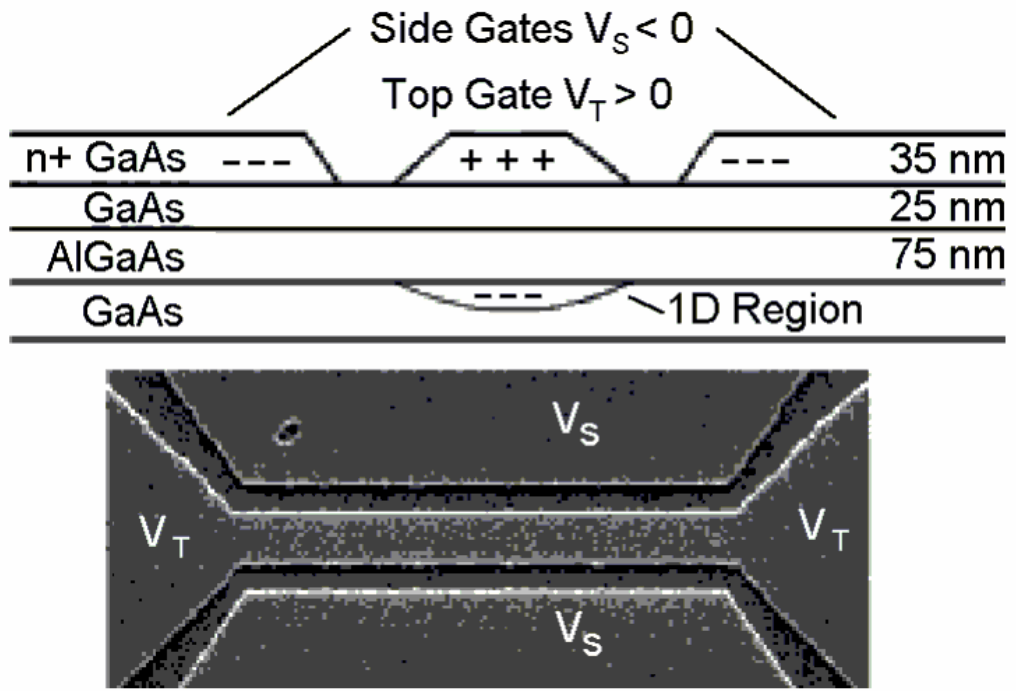


Рисунок 5.17. Экспериментальная наноструктура с квантовым каналом.

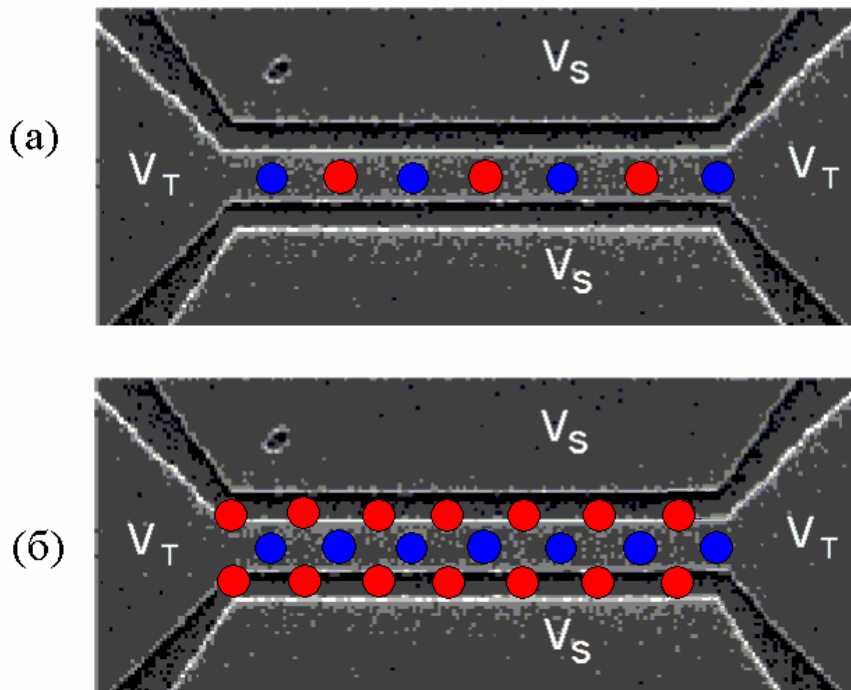


Рисунок 5.18. Эффекты зарядовой (а) и спиновой (б) поляризации канала. Красными кружками изображены электроны со спином $+1/2$, синими – со спином $-1/2$.

Рассмотрим далее расчеты вольт-амперных характеристик. Первоначально они были рассчитаны в модели без учета спина. Основным результатом моделирования состоял в следующем. При приложении внешнего напряжения на правом конце канала итоговый профиль потенциального барьера деформируется. При малых значениях напряжения ($V \ll \varepsilon_F$) эта деформация приводит лишь к тому, что все большее количество положительных электронных волн (распространяющихся слева направо) легко туннелируют через канал. Однако при больших напряжениях результирующий потенциальный барьер может достигать в некоторых точках канала дна зоны проводимости ($\varepsilon = 0$) или даже расщепляться на две кривые, одна из которых проходит в области отрицательных энергий. Последнее соответствует существованию наряду с основным локализованного состояния, расположенного ниже зоны проводимости. При еще больших напряжениях локализованное состояние становится основным.

На рис. 5.19-5.20 приведены результаты расчетов для параметров $a = 5 \text{ нм}$, $L = 100 \text{ нм}$, $U_0 = 10 \text{ мВ}$, $\varepsilon_F = 13 \text{ мЭв}$, $\beta = 0$. Они иллюстрируют рассмотренную выше ситуацию. Так, кривые 4 на обоих рисунках соответствуют наличию двух состояний канала при одном и том же напряжении, кривые 5 – случаю, когда основным является локализованное состояние.

Для сравнения расчетных и экспериментальных данных были проведены вычисления проводимости длинного канала. На рис. 5.21 и 5.22 приведены соответственно данные экспериментов из работы [469] и данные расчетов. Из сравнения рисунков видно, что экспериментальные и расчетные кривые проводимости имеют похожую сильно немонотонную структуру. Это означает, что качественно результаты расчетов и измерений близки. Однако количественное сравнение результатов требует уточнения как условий натурального эксперимента, так и учета в модели реальной трехмерной геометрии наноструктуры и измерительной системы. Оба этих фактора выводят сравнительный анализ за рамки настоящей работы.

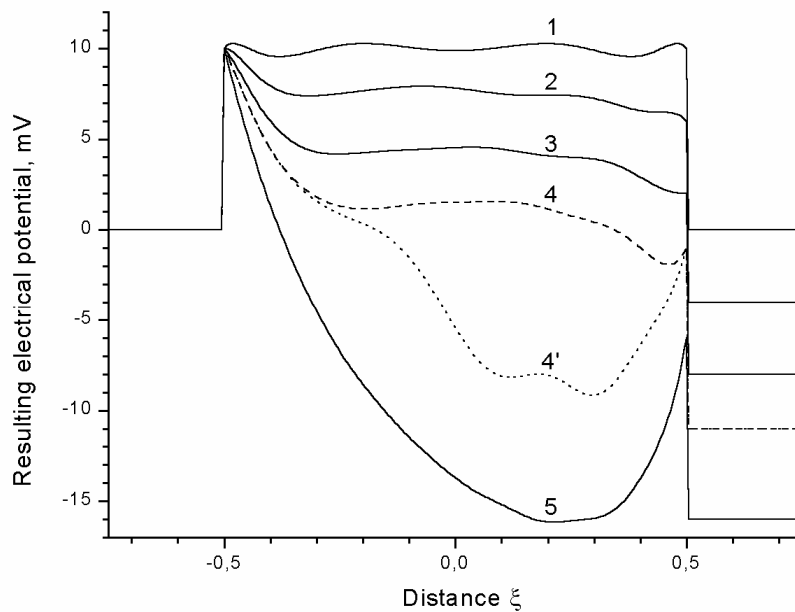


Рисунок 5.19. Результирующие профили потенциального барьера для следующих значений приложенного напряжения: $V = 0, 4, 8, 11, 16$ мВ (кривые 1-5). Кривые 4 соответствуют двум состояниям системы – основному и локализованному.

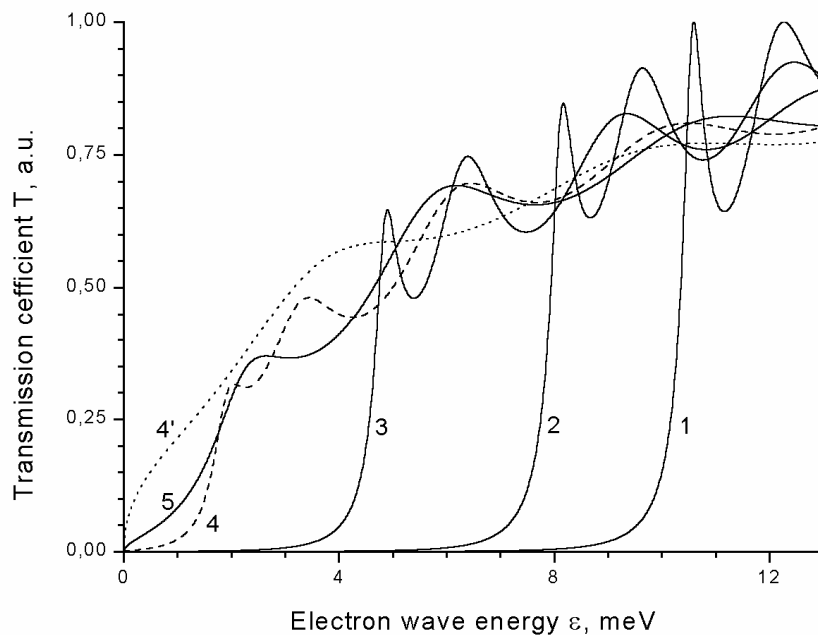


Рисунок 5.20. Коэффициент туннелирования для следующих значений приложенного напряжения: $V = 0, 4, 8, 11, 16$ мВ (кривые 1-5). Кривые 4 соответствуют двум состояниям системы – основному и локализованному.

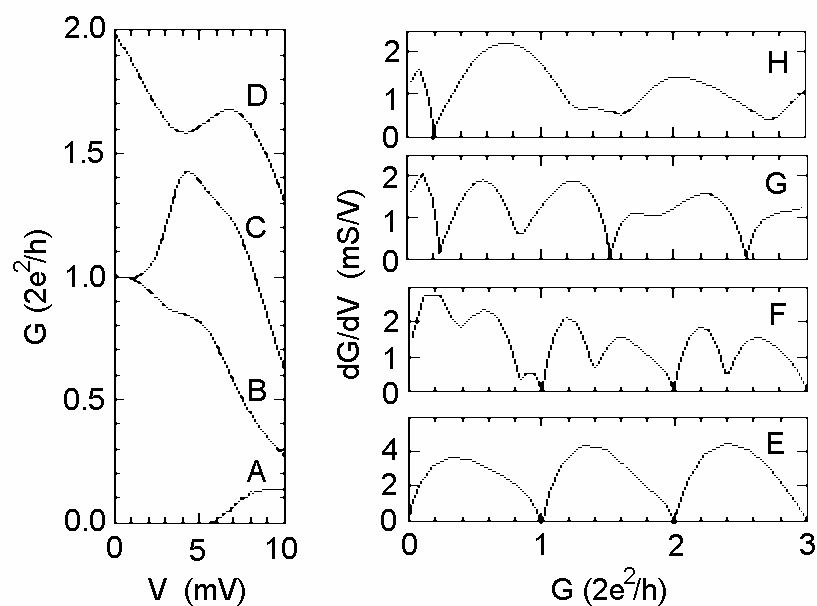


Рисунок 5.21. Результаты измерений проводимости канала в зависимости от приложенного напряжения V , полученные в работе [469] для нескольких значений запирающего напряжения V_T (кривые A, B, C, D).

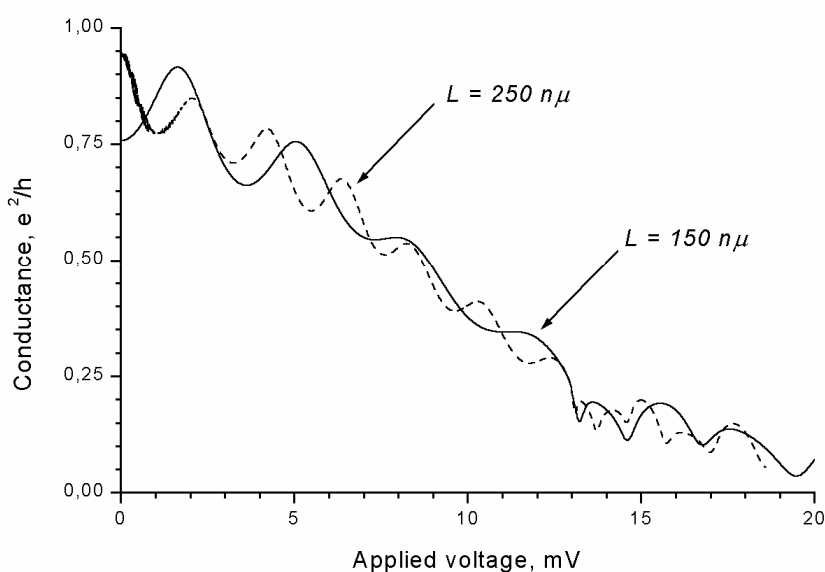


Рисунок 5.22. Результаты расчетов проводимости канала для двух значений длины, полученные без учета спинового расщепления.

В заключение анализа разработанной численной модели рассмотрим кратко поведение ВАХ при учете спинового расщепления электронных потоков и влияние на них фактора спонтанной спиновой поляризации β . На рис.

5.23 приведены ВАХ для нескольких значений β . Анализ этих данных позволяет сделать вывод, что спонтанная спиновая поляризация существенно влияет на устойчивость электронной системы в канале, а результирующая ВАХ в зависимости от фактора β может иметь несколько участков усиления или неоднозначности. Это означает, что спонтанная спиновая поляризация может индуцировать мультстабильные свойства электронного транспорта в канале. Последнее очень важно для приложений в области спинтроники, поскольку при управлении процессом поляризации квантовая система может выступать в роли транзистора или элемента многозначной логики. Соответствующее управление можно реализовать с помощью воздействия на квантовую систему переменным магнитным полем.

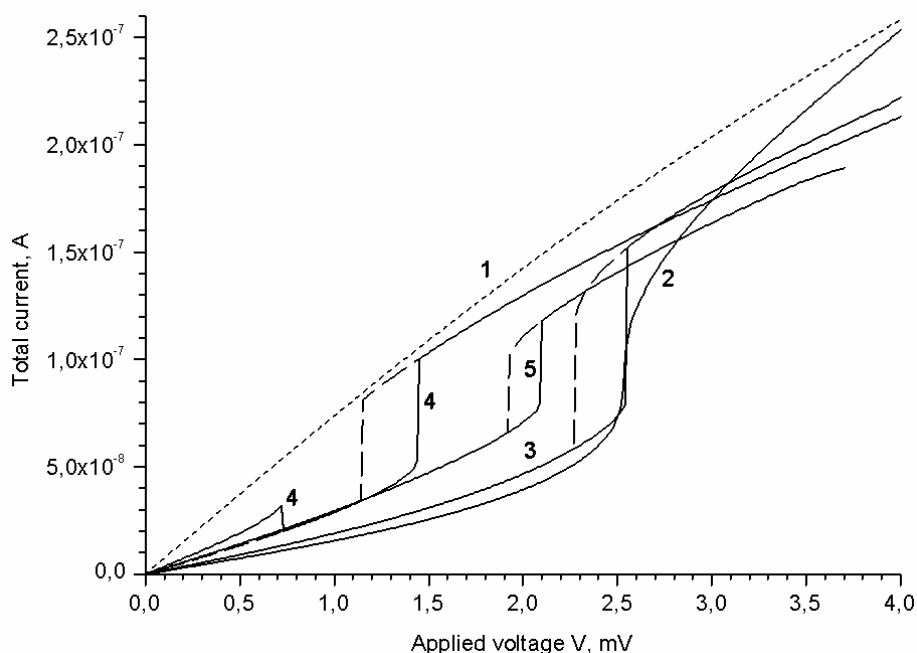


Рисунок 5.23. Вольтамперные характеристики $J(V)$ для значений $\beta = 0, 0.066, 0.099, 0.132, 0.165$ (кривые 1-5). Сплошной линией обозначены нижние ветви ВАХ, пунктирной – верхние.

В заключение главы отметим, что в данной части диссертации была рассмотрена проблема моделирования процессов квазистационарного одномерного нелинейного электронного транспорта в квантовых каналах наноструктур на базе AlGaAs. Математическая модель этих процессов записана в

предположении цилиндрической симметрии канала, оперирует одночастичными волновыми функциями электронов из непрерывного спектра энергий и учитывает: направление электронных потоков, расщепление их по спину, самосогласованное изменение потенциального барьера канала за счет энергии Хартри и межэлектронного обменного взаимодействия. В результате получается система стационарных одномерных нелинейных уравнений Шрёдингера, записанных в приближении Хартри-Фока. Для каждого уравнения системы рассматривается задача туннелирования.

Для данного множества параметрически связанных задач нелинейного туннелирования разработан параллельный численный алгоритм решения. Его основу составляют: метод конечных разностей для аппроксимации интегро-дифференциальных уравнений, итерационный процесс по нелинейности, решение линейных систем на основе LU-разложения, оптимизация вычислений на основе метода продолжения по параметру, методика регуляризации в случае неединственности решения. Параллелизация алгоритма выполнена на основе геометрического параллелизма в пространстве энергий и использует динамическую балансировку загрузки вычислителей. На основе разработанной методики создана параллельная программа **NANO_2D**, использовавшаяся как для численного анализа поставленной модельной задачи, так и для тестирования нескольких отечественных суперкомпьютерных систем.

С помощью разработанного численного подхода и программы **NANO_2D** детально исследованы равновесные характеристики электронного транспорта: распределение электронной плотности в канале, суммарный заряд и проводимость канала. На основе анализа этих данных обнаружены эффекты зарядовой и спиновой поляризации электронов в канале. Найдены их зависимости от длины канала, величины энергетической щели, фактора спонтанной спиновой поляризации.

Рассмотрено влияние приложенной контактной разности потенциалов на проводимость канала и рассчитаны его вольт-амперные характеристики. В численных экспериментах обнаружено, что в некоторых ситуациях реализу-

ется неустойчивость квазистационарных состояний канала, а именно, би- или мультистабильность. Она вызвана перераспределением эффективного потенциального барьера канала и образованием локализованных состояний ниже дна зоны проводимости. Наличие дополнительных локализованных состояний зависит от величины приложенного напряжения, длины канала, величины энергетической щели, фактора спонтанной спиновой поляризации.

На основе полученных расчетных данных можно предложить несколько способов реализации электронных приборов, основанных на квантовых эффектах.

Результаты работы по данной теме опубликованы в [A9, A10, A15, A16, A18-A20, A22, A28, A33, A37-A40].

Глава 6

Моделирование неравновесных процессов в ячейках автокатодных дисплеев и других автоэмиссионных микро- и наноструктур

В данной главе рассматривается проблема решения задач электродинамики в современных вакуумных полупроводниковых приборах со сложной субмикронной геометрией. Для описания процессов в полупроводнике используется квазигидродинамическая модель. Для анализа модели предлагаются оригинальные численные методы как на ортогональных, так и на нерегулярных сетках, разработанные в гл. 1. Для параллельной реализации предложенных численных алгоритмов используются подходы, разработанные в гл. 2. На их основе разработан комплекс программ **MICRO_2D/3D** для МВС с гибридной архитектурой. С его помощью был проведён цикл исследований эмиссионных процессов в ячейке автокатодного дисплея. В настоящее время комплекс адаптирован к расчётам и других автоэмиссионных микро- и наноструктур. С его помощью можно определить распределения электрического поля, плотности зарядов и тепла в различных частях прибора (структуры) и оценить их влияние на его (её) эмиссионные характеристики.

6.1 Введение в проблему

Современный уровень микроэлектронной технологии позволяет реализовать в устройствах вакуумной микроэлектроники (ВМ) ряд существенных преимуществ вакуумных приборов (см., например, [477-482]). Базовым элементом вакуумной микроэлектроники служит массив полевых микроэмиттеров (автокатодов), функционирующих в условиях физического вакуума, что позволяет реализовать бесстолкновительный перенос электронов. Возможность достижения в условиях баллистического переноса высоких скоростей электронов позволяет реализовать в вакуумных микроэлектронных

устройствах более высокие скорости модуляции, а также получить потоки электронов с существенно более высокой энергией при меньших энергозатратах, чем это возможно в традиционных устройствах твердотельной электроники. Кроме того, устройства ВМ сохраняют работоспособность в широком температурном диапазоне и в условиях повышенной радиации.

Значительные потенциальные преимущества предоставляет использование в устройствах ВМ автоэмиссионных катодов, что связано с рядом их уникальных свойств:

- максимальная плотность тока эмиссии может достигать более 10^6 А/см²,
- ток эмиссии относительно слабо зависит от температуры в широком температурном диапазоне (порядка 0 - 1000 К) и при радиационном облучении нейтронами (до 10^{17} нейтрон/см²),
- предельная частота модуляции принципиально может принадлежать терагерцовому диапазону (время акта эмиссии составляет около 10 фемтосекунд),
- минимальный размер эмитирующей области может быть меньше нанометра.

Это позволяет создавать широкий спектр различных классов приборов, технологического и аналитического оборудования с более высокими параметрами, чем у твердотельных приборов. Устройства ВМ могут использоваться в плоских экранах, СВЧ устройствах, в качестве элементов цифровых ИС, электронных и ионных пушках, сенсорах, ускорителях высоких энергий, в устройствах литографии, лазерах на свободных электронах, в электронных микроскопах и электронных микронзондовых приборах [480-482].

В устройствах ВМ субмикронных и нанометровых размеров автоэлектронная эмиссия может быть реализована при малых напряжениях (меньших потенциала ионизации остаточных газов), что предоставляет

принципиальную возможность получить достаточно стабильную эмиссию в условиях технического вакуума.

Значительные преимущества предоставляет использование полупроводниковых автоэммиттеров. Одним из наиболее перспективных материалов для создания автокатодных узлов устройств ВМ является кремний в связи со сравнительной дешевизной этого материала и его распространенностью в сочетании с уникальными свойствами, возможностью использовать высокоразвитую групповую технологию кремниевых интегральных схем, а также принципиальную возможность интеграции элементов ВМ с элементами традиционной микроэлектроники [477-484].

Несмотря на то, что концентрация электронов в зоне проводимости кремния на несколько порядков меньше, чем в металлах, их эмиссионные характеристики оказываются сопоставимыми. Обычно наблюдаемые значения тока эмиссии из кремниевых микроавтокатодов составляют в среднем от единиц до десятков наноампер на один катод при рабочих напряжениях [485, 486]. В ряде работ сообщается о наблюдении токов эмиссии до сотен и даже нескольких тысяч наноампер на катод [487, 488].

Базовым элементом ВМ служит миниатюрный катодный узел, который является источником микроскопического электронного пучка. В устройствах ВМ используются как массивы таких ячеек, так и одиночные узлы, например, для микродисплеев высокого разрешения. Катодный узел с автоэммиттером представляет собой весьма сложную многоэлектродную систему и теоретическое исследование его характеристик возможно лишь с привлечением численных методов. В настоящей работе представляется программный комплекс **MICRO_2D/3D**, предназначенный изначально для математического моделирования вакуумного катодного микроузла реальной геометрии с кремниевым лезвийным автоэммиттером. Однако его возможности уже переросли эту конкретную прикладную проблему.

6.2. Физико-математическая модель

Физико-математическая модель полевой эмиссии из полупроводникового автокатода разрабатывалась и исследовалась совместно с проф. В.А. Федирко в течение более чем 10 лет (см. [A8, A11-A14, A17, A21, A23-A26, A34, A36, A42-A44, A46, A48, A49]). Отправной точкой были работы В.А. Федирко, Н.А. Дюжева и В.А. Николаевой [489, 490], касающиеся полевой эмиссии из кремния в сильно упрощённом пространственно-одномерном приближении. Основные этапы разработки более полной многомерной модели были отражены в [A21, A23-A25, A43]. Для этого была показана существенная роль разогрева электронного газа вблизи эмитирующей поверхности, что приводит к неравновесному и нелинейному характеру процесса пререноса заряда. Значительный разогрев электронного газа вблизи эмитирующего наноострия может вызывать значительное повышение температуры кристаллической решетки в этой области катода, которое также оказывает заметное влияние на электронный транспорт (а также может служить и одной из причин деградации острия).

Построенная в итоге физико-математическая модель позволяет адекватно учитывать особенности электронного переноса в полупроводнике при полевой эмиссии из микроэмиттера с нанометровым острием произвольной двух- и трёхмерной формы. Модель использует соответственно двух- или трёхмерный квазигидродинамический подход, основанный на самосогласованном решении уравнения непрерывности, уравнения энергетического баланса в электронно-дырочной плазме, уравнения Пуассона и уравнения теплопроводности для кристалла или всей структуры прибора. Энергетический баланс описывается в терминах времени энергетической релаксации, учитываются, кроме того, процессы ударной ионизации, возможные в сильно разогретом электронном газе. Модель может быть без труда адаптирована и к расчёту аксиально-симметричного микроузла с острийным автокатодом.

В дальнейшем мы сосредоточимся на случае двумерной геометрии, поскольку во многих проведённых исследованиях достаточно было рассмотреть плоский или аксиально-симметричный случай. Схема эмиссионной ячейки соответствующая реальной конструкции катодного микроузла изображена на рисунке 6.1. По соображениям симметрии на рисунке 6.1 изображена половина реальной ячейки.

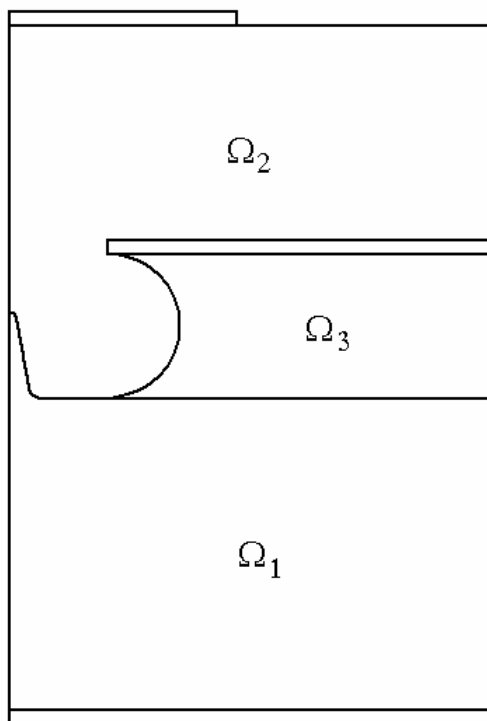


Рисунок 6.1. Конфигурация микрокатодного узла. Области Ω_k ($k=1,2,3$) соответствуют кремниевой части катода, диэлектрику (оксиду кремния) и вакууму. Черным цветом обозначены металлические контакты.

Процессы эмиссии электронов в рамках развитой модели описываются следующей системой уравнений, записанной в безразмерных переменных:

$$\frac{\partial n}{\partial t} = \mu_1 \operatorname{div} \mathbf{j}_n + G_0 G_n, \quad \mathbf{j}_n = +n\mu_n \mathbf{E} + D_1 \nabla (D_n n), \quad (6.1)$$

$$\frac{\partial p}{\partial t} = \mu_2 \operatorname{div} \mathbf{j}_p + G_0 G_n, \quad \mathbf{j}_p = -p\mu_p \mathbf{E} + D_2 \nabla (D_p p), \quad (6.2)$$

$$\frac{\partial w_n}{\partial t} = \mu_3 \operatorname{div} \mathbf{Q}_n + G_2 \mathbf{j}_n \cdot \mathbf{E} - G_1 G_n - R_n, \quad \mathbf{Q}_n = w_n \mu_n \alpha \mathbf{E} + D_3 \nabla (D_n \alpha w_n), \quad (6.3)$$

$$\frac{\partial T_l}{\partial t} = \mu_4 \operatorname{div} \mathbf{Q}_l + \delta R_n, \quad \mathbf{Q}_l = \nabla T_l, \quad (6.4)$$

$$\operatorname{div}(\varepsilon \mathbf{E}) = \gamma \cdot \rho, \quad \mathbf{E} = -\nabla \varphi. \quad (6.5)$$

Уравнения (6.1)-(6.4) справедливы в слое катода (область Ω_1), уравнение (6.5) – во всей области $\Omega = \Omega_1 \cup \Omega_2 \cup \Omega_3$. В уравнениях (6.1)-(6.5) n, p – концентрации электронов и дырок, нормированные на равновесную концентрацию доноров N_D , $w_n = nT_n$ – безразмерная энергия электронов, T_n, T_l – электронная и решеточная температуры, нормированные на температуру T_0 окружающей среды, $\mathbf{j}_n, \mathbf{j}_p$ – плотности электронного и дырочного токов, $\mathbf{Q}_n, \mathbf{Q}_l$ – вектора плотностей потоков энергии электронов и ионов решетки, \mathbf{E} – вектор напряженности электрического поля, φ – потенциал, нормированный на величину φ_0 (равную 50 В), $\operatorname{div}, \nabla$ – операторы дивергенции и градиента в координатах $\mathbf{r} = (x, y)$, нормированных на характерный размер h (равный 1 мкм), t – время, измеряемое в единицах времени релаксации энергии электронов τ_ε , $\mu_n, \mu_p, D_n, D_p, G_n, R_n, \alpha, \rho, \varepsilon$ – суть следующие функции

$$\begin{aligned} \mu_n &= [1 + \beta(T_n - T_l)]^{-1}, \quad \mu_p = 1, \quad D_n = T_n \mu_n, \quad D_p = T_n, \\ G_n &= nT_n^{3/2} \exp(-\delta_0 / T_n), \quad R_n = w_n - w_l, \quad w_l = nT_l, \\ \alpha &= \left(1 - \frac{2}{5} \beta T_n [1 + \beta(T_n - T_l)]^{-1} \right), \\ \rho &= \begin{cases} 1 - n + p, & (x, y) \in \Omega_1, \\ 0, & \mathbf{r} \in \Omega_2 \cup \Omega_3, \end{cases} \quad \varepsilon = \begin{cases} 1, & \mathbf{r} \in \Omega_1, \\ \varepsilon_2 / \varepsilon_1, & \mathbf{r} \in \Omega_2, \\ \varepsilon_3 / \varepsilon_1, & \mathbf{r} \in \Omega_3, \end{cases} \end{aligned}$$

ε_k – диэлектрические проницаемости полупроводника, вакуума и изолятора, $\mu_k, D_k, G_k, \delta_0, \delta, \gamma, \beta$ – безразмерные коэффициенты, которые выражаются через размерные величины следующим образом:

$$\begin{aligned}\mu_1 &= \frac{\tau_\varepsilon \mu_{n0} \varphi_0}{h^2}, \quad \mu_2 = \frac{\tau_\varepsilon \mu_{p0} \varphi_0}{h^2}, \quad \mu_3 = \frac{5}{3} \mu_1, \quad \mu_4 = \frac{\tau_\varepsilon \lambda_1}{c_{v1} h^2}, \quad D_{1,2,3} = \frac{k_{BJ} T_0}{e \varphi_0}, \\ G_0 &= \frac{\tau_\varepsilon A}{3\sqrt{2}} \left(\frac{k_{BJ} T_0}{e E_g} \right)^{3/2} \left(\frac{R_h}{\varepsilon_1} \right)^2, \quad G_1 = \frac{7}{6} \frac{e E_g}{k_{BJ} T_0} G_0, \quad \frac{2\tau_\varepsilon e \varphi_0^2}{3k_{BJ} T_0 h^2}, \quad \delta_0 = \frac{3}{2} \frac{e E_g}{k_{BJ} T_0}, \\ \delta &= \frac{3k_{BJ} N_D}{2c_{v1}}, \quad \gamma = \frac{4\pi e N_D C_{pois} h^2}{\varepsilon_1 \varphi_0}, \quad \beta = \frac{3\mu_{n0} k_{BJ} T_0}{2\tau_\varepsilon e v_{es}^2},\end{aligned}$$

где μ_{n0}, μ_{p0} – равновесные подвижности электронов и дырок, λ_1 и c_{v1} – коэффициент теплопроводности и теплоемкость проводника, k_{BJ} – константа Больцмана, A – темп ударной ионизации, E_g – ширина запрещенной зоны полупроводника, R_h – ионизационный фактор, e – заряд электрона, C_{pois} – коэффициент Пуассона, v_{es} – максимальная дрейфовая скорость электронов.

Система уравнений (6.1)-(6.5) дополняется следующими начальными условиями

$$\begin{aligned}n &= 1, \quad p = 0, \quad w_n = 1, \quad T_n = T_l = 1, \quad \mathbf{r} \in \Omega_1; \\ \varphi &= 0, \quad \mathbf{r} \in \Omega,\end{aligned}\tag{6.6}$$

и условиями на границах

$$\begin{aligned}(\mathbf{j}_n, \mathbf{v}) &= 0, \quad (\mathbf{j}_p, \mathbf{v}) = 0, \quad (\mathbf{Q}_n, \mathbf{v}) = 0, \quad (\mathbf{Q}_l, \mathbf{v}) = 0, \quad (\nabla \varphi, \mathbf{v}) = 0, \quad x = 0, L_x; \\ (\mathbf{j}_n, \mathbf{v}) &= j_{ns}, \quad (\mathbf{j}_p, \mathbf{v}) = j_{ps}, \quad (\mathbf{Q}_n, \mathbf{v}) = Q_{ns}, \quad (\mathbf{Q}_l, \mathbf{v}) = Q_{ls}, \quad \varphi = 0, \quad y = 0; \\ (\mathbf{j}_n, \mathbf{v}) &= j_{ns}, \quad (\mathbf{j}_p, \mathbf{v}) = j_{ps}, \quad (\mathbf{Q}_n, \mathbf{v}) = Q_{ns}, \quad (\mathbf{Q}_l, \mathbf{v}) = Q_{ls}, \\ \varepsilon_1 E_v^{(1)} &= \varepsilon_2 E_v^{(2)}, \quad E_\tau^{(1)} = E_\tau^{(2)}, \quad \mathbf{r} \in \partial\Omega_1 \cap \partial\Omega_2; \\ \varepsilon_1 E_v^{(1)} &= \varepsilon_3 E_v^{(3)}, \quad E_\tau^{(1)} = E_\tau^{(3)}, \quad \mathbf{r} \in \partial\Omega_1 \cap \partial\Omega_3; \\ \varepsilon_2 E_v^{(2)} &= \varepsilon_3 E_v^{(3)}, \quad E_\tau^{(2)} = E_\tau^{(3)}, \quad \mathbf{r} \in \partial\Omega_2 \cap \partial\Omega_3; \\ \varphi &= V_a, \quad y = L_y.\end{aligned}\tag{6.7}$$

Здесь L_x, L_y – размеры области Ω , \mathbf{v} – вектор внешней нормали к границам областей, $\partial\Omega_k$ – границы подобластей, $E_v^{(k)}, E_\tau^{(k)}$ – нормальные и

тангенциальные компоненты поля на границе k -ой области, V_a – потенциал на аноде, $j_{ns}, j_{ps}, Q_{ns}, Q_{ls}$ – значения поверхностных токов и потоков энергии:

$$\begin{aligned}
 j_{ns} &= \begin{cases} E_y, & y=0, \\ -J_{n0} n T_n^{1/2} \int_0^\infty D_0(-E_v^{(2)} / \alpha_0, \beta_0 T_n \xi) \exp[-\xi] d\xi, & \mathbf{r} \in \partial\Omega_1 \cap \partial\Omega_2, \end{cases} \\
 j_{ps} &= \begin{cases} J_{p0} p, & y=0, \\ 0, & (x, y) \in \partial\Omega_1 \cap \partial\Omega_2, \end{cases} \\
 Q_{ns} &= \begin{cases} E_y, & y=0, \\ -\frac{2}{5} J_{n0} n T_n^{3/2} \int_0^\infty D_0(-E_v^{(2)} / \alpha_0, \beta_0 T_n \xi) (\xi + 1) \exp[-\xi] d\xi, & \mathbf{r} \in \partial\Omega_1 \cap \partial\Omega_2, \end{cases} \\
 Q_{ls} &= \begin{cases} \eta_l (T_l - 1), & y=0, \\ 0, & (x, y) \in \partial\Omega_1 \cap \partial\Omega_2, \end{cases}
 \end{aligned} \tag{6.8}$$

Коэффициент туннелирования через эмиттирующую поверхность D_0 либо приближается с помощью формулы Фоулера-Нордгейма [491]:

$$D_0(x, y) = \begin{cases} 0, & x \leq 0, \\ \exp[-(1-y)^{3/2} \theta(\eta) / x], & x > 0, \quad y < 1, \\ 1, & x > 0, \quad y \geq 1, \end{cases} \tag{6.9}$$

$$\theta(\eta) \approx \max\left(0, 1 - 0.07\eta - 0.739\eta^2 - 0.191\eta^{15}\right), \quad \eta = \frac{\gamma_0 \sqrt{\alpha_0 x}}{(1-y)},$$

либо рассчитывается при решении линейной задачи туннелирования вида (1.14)-(1.16) (см. гл. 1). В (6.8), (6.9) используются следующие константы:

$$\begin{aligned}
 J_{n0} &= \sqrt{\frac{10^7 k_{BJ} T_0}{2\pi m_e}} \frac{h}{\mu_{n0} \varphi_0}, \quad J_{p0} = \frac{v_{hs} h}{\mu_{p0} \varphi_0}, \quad \alpha_0 = \sqrt{\frac{2m_e e \chi_0}{10^7 \hbar_{PJ}^2}} \frac{4\chi_0 h}{3\varphi_0}, \\
 \beta_0 &= \frac{k_{BJ} T_0}{e \chi_0}, \quad \gamma_0 = \sqrt{\frac{C_{pois} e \varphi_0}{\chi_0^2 h} \left(\frac{\varepsilon_1 - 1}{\varepsilon_1 + 1} \right)},
 \end{aligned}$$

где m_e – эффективная масса электрона в полупроводнике, v_{hs} – скорость поверхностной рекомбинации дырок, \hbar_{PJ} – постоянная Планка, χ_0 –

потенциальный барьер, препятствующий эмиссии электронов из полупроводника, η_l – безразмерный темп выхода тепла в подложку.

6.3 Численный алгоритм

Система уравнений (6.1)-(6.5) с начальными и граничными условиями (6.6), (6.7) решалась численно на двух типах сеток: ортогональных (декартовых или цилиндрических) и нерегулярных треугольных (тетраэдральных). Суть вычислительного эксперимента состояла в расчёте эволюции системы в стационарный режим автоэмиссии из заданного начального состояния (6.6). В качестве последнего выбирается равновесное состояние системы в отсутствие приложенного напряжения.

Для решения задачи (6.1)-(6.9) на ортогональных сетках в случае прямоугольной геометрии расчётной области были созданы численные алгоритмы, представленные в ранних работах [A8, A11-A14, A17, A21, A23-A26]. В этом случае расчёты ведутся исключительно в слое кремния. Неоднородность поля на эмиссионной поверхности задаётся с помощью подгоночной формулы. Основу численного подхода составляют нестационарные неявные и полунеявные локально-одномерные схемы экспоненциальной подгонки (см. п. 1.2 гл. 1). Уравнение Пуассона для электрического поля решается прямым методом, сочетающим преобразование Фурье по поперечной координате (вдоль эмитирующей поверхности) и прогонку по продольной координате (идушей вглубь полупроводниковой структуры). Параллельный алгоритм решения задачи базировался на методах ОПФ и параллельной прогонки (см. п. 2.1 и 2.2 гл. 2). Программная реализация на данном этапе исследований использовала лишь Fortran 77 и распараллеливание с помощью интерфейсов PARIX и MPI.

Для решения задачи (6.1)-(6.9) в области реальной геометрии на треугольных сетках была разработана другая численная модель [A34, A36, A42].

Она предполагала использование произвольных нерегулярных треугольных сетки и конечно-объёмных аппроксимаций на этих сетках уравнений квазигидродинамики и уравнения Пуассона. Для решения динамических уравнений (6.1)-(6.4) были предложены конечно-объёмные экспоненциальные схемы, подробно рассмотренные в п. 1.2 гл. 1 и обобщённые на случай тетраэдральных сеток в [A49]. Для дискретизации уравнения Пуассона использовались известные аппроксимации операторов дивергенции и градиента на треугольных сетках. В обоих случаях в качестве контрольных объёмов использовались барицентрические объёмы.

Для численной реализации построенных конечно-объёмных схем использовалась технология, изложенная в п. 2.3 и 2.4 гл. 2 и основанная на итерационных методах стабилизированных сопряженных и бисопряженных градиентов со структурой предобусловливателя в виде неполного разложения Холецкого. Построение предобусловливателя использовало переход в пространства Крылова. Параллельная реализация предложенных численных алгоритмов базировалась на методе разделения областей Шварца. При проведении расчетов на МВС предполагалось использование как полностью распределенной вычислительной системы, так и гибридной, в которой отдельные вычислительные узлы могут быть SMP-системами с общей памятью.

6.4 Программный комплекс MICRO_2D/3D

Разработанные численные методы и параллельные алгоритмы были скомпонованы в виде комплекса параллельных программ **MICRO_2D/3D**. Структура и принципы работы комплекса частично освещены в [A34]. В представляемой версии в него добавлена поддержка многоядерных процессоров. Для этого совместно используются интерфейсы и библиотеки MPI, Pthreads, OpenMP. В результате, если вычисления проводятся на кластерной системе гибридной архитектуры, то обмен между удалёнными узлами МВС

осуществляется с помощью функций MPI. Внутри узлов при наличии многих ядер и/или процессоров используются параллельные алгоритмы, ориентированные на использование общей памяти и нитей и реализованные в рамках стандартов Pthreads или OpenMP (см. п. 2.6 гл. 2).

Функциональная структура комплекса **MICRO_2D/3D** состоит из следующих компонентов:

- Среда управления (**Graphical Shell**)
- Редактор геометрии расчетных областей (**Area Editor**)
- Генераторы сеток (**Mesh Gen Tool**)
- Библиотека ввода/вывода сеток и сеточных функций (**IO Library**)
- Библиотека методов декомпозиции (**Decomposition Library**)
- Модули решения задачи в различных постановках (**Microcell Solvers**)
- Библиотека методов решения СЛАУ (**Linear Solver Library**)
- Среда визуализации результатов (**Visualization Tool**)

Рассмотрим кратко назначение каждого из выше перечисленных компонентов.

Среда управления комплекса **Graphical Shell** разработана Э.М. Кононовым и О.А. Косолаповым [492] и представляет собой графический интерфейс пользователя, с помощью которого осуществляется выполнение всего цикла моделирования от самого начала до конца. В её функции входит создание и сопровождение нового или уже созданного проекта вычислений. Под проектом понимается именованный единым образом набор конфигурационных файлов, файлов начальных, промежуточных и результирующих данных, а также выполняющееся в настоящее время множество процессов, инициированных пользователем на конкретных вычислителях и системах. В настоящий момент среда реализована с помощью системы визуального программирования Qt [493] и может быть собрана как на компьютере с ОС Windows, так и на компьютере с ОС Linux.

Редактор геометрии **Area Editor** разрабатывается О.А. Косолаповым [492] и является независимо реализованной последовательной программой со своей графической оболочкой, позволяющей задать расчетную область, нанести атрибуты задачи на отдельные ее части и инициировать генерацию сетки в этой области. Поясним необходимость такого компонента вычислительной среды.

Любая программная среда, предназначенная для моделирования задач методом сеток, предполагает возможность задания простых объектов внутри среды, а также возможность импорта графических объектов из доступных CAD-систем. Поэтому в рамках данного комплекса вместе с генераторами сеток создавались средства для задания двумерных и трехмерных объектов и/или импорта таких объектов из известных систем подготовки геометрических данных и чертежей. В качестве последних предполагается использовать AutoCAD, SolidWorks и другие.

К настоящему моменту разработана структура и отдельные компоненты встроенного редактора объектов AreaEditor. Функциональные возможности редактора были разделены на четыре группы.

Первая группа функций связана с заданием областей с помощью графических примитивов. В качестве таковых как обычно выступают точки, отрезки прямых и кривых, многоугольники и многогранники, фигуры и тела вращения. Отличие этих объектов от других состоит в том, что пользователь имеет возможность задать их лишь с помощью курсора мыши.

Вторая группа функций связана со средствами привязки объектов к конкретной геометрии. Среди них отметим средства задания размерности пространства, типа системы координат, цифрового ввода и коррекции объектов, топологических вычислений.

Третья группа функций отвечает за нанесение атрибутов задачи на геометрию объектов, а также за первичную декомпозицию объектов на элементарные составляющие. В этой группе уже частично реализованы

различные методы раскраски объектов, кодирующей свойства материалов, набор уравнений, граничные и начальные условия, а также методы декомпозиции объектов на элементарные блоки, что необходимо для организации распределенного хранения объектов и их параллельной обработки при построении сеток.

Четвертая группа включает в себя визуализацию объектов и расчетных областей, а также визуализацию сеток и атрибутов задачи на сетках.

К настоящему моменту реализована версия редактора (рис 6.2, 6.3), поддерживающая задание двух- и трехмерных объектов, и несколько усеченный набор функций из всех трех групп. Реализация выполнена на основе функций библиотеки Qt Designer [493]. Проведено тестирование первой полной версии редактора в системах Windows и Linux. Тесты подтвердили полную переносимость кода с одной платформы на другую. Существенных недостатков работы **AreaEditor** пока не выявлено. В последующих версиях предполагается реализация всего набора функций в двух- и трёхмерном случаях. Примеры построения расчетных областей в двумерном и трехмерном случае показаны на рис. 6.4 и 6.5.

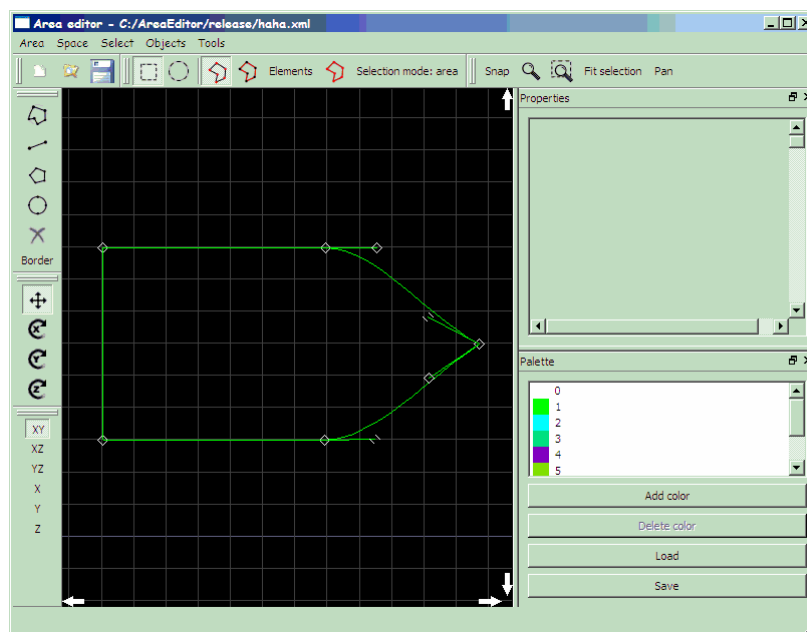


Рисунок 6.2. Общий вид среды AreaEditor.

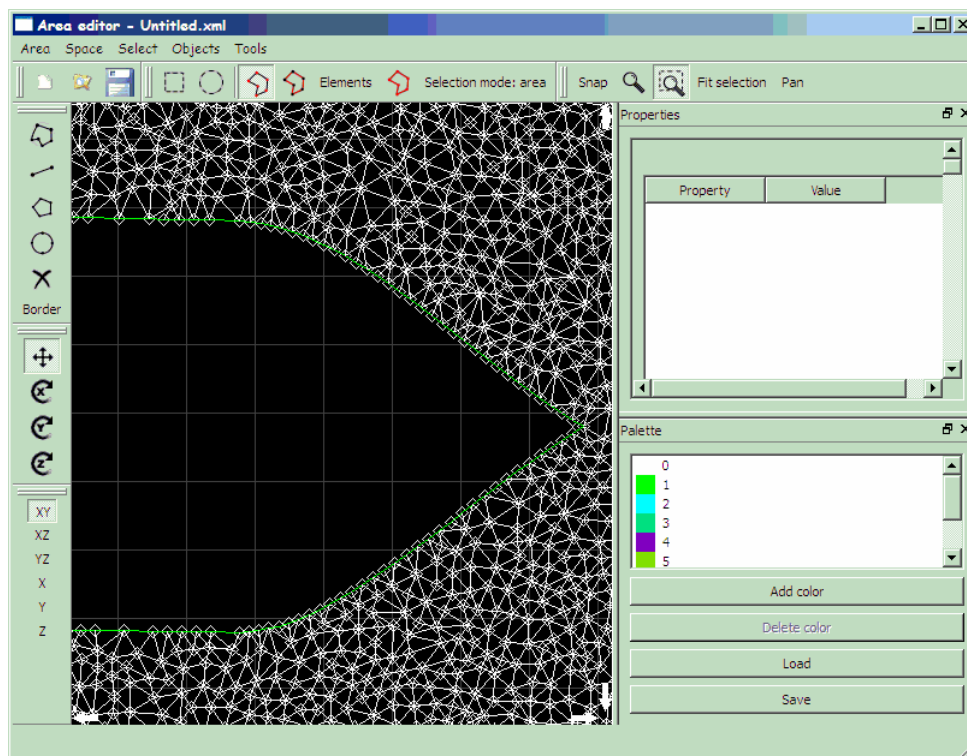


Рисунок 6.3. Нанесение атрибутов задачи на сетку.

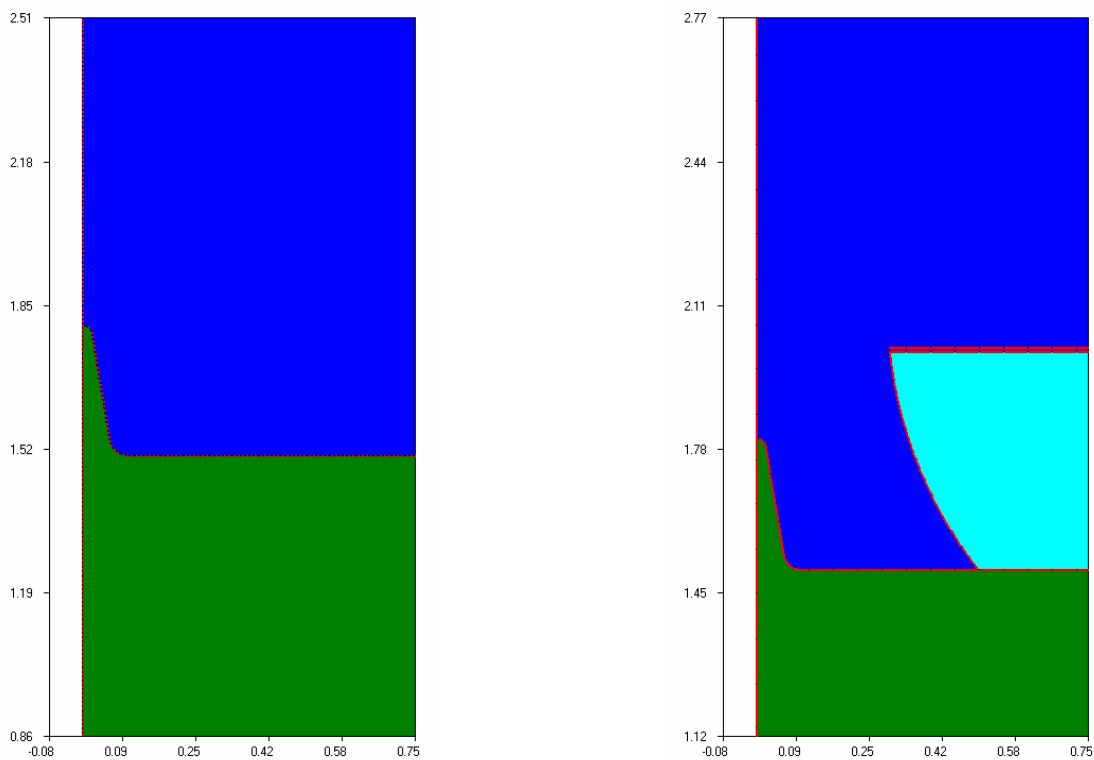


Рисунок 6.4. Пример задания с помощью AreaEditor диодной (слева) и триодной (справа) катодной ячейки аксиально-симметричной геометрии.

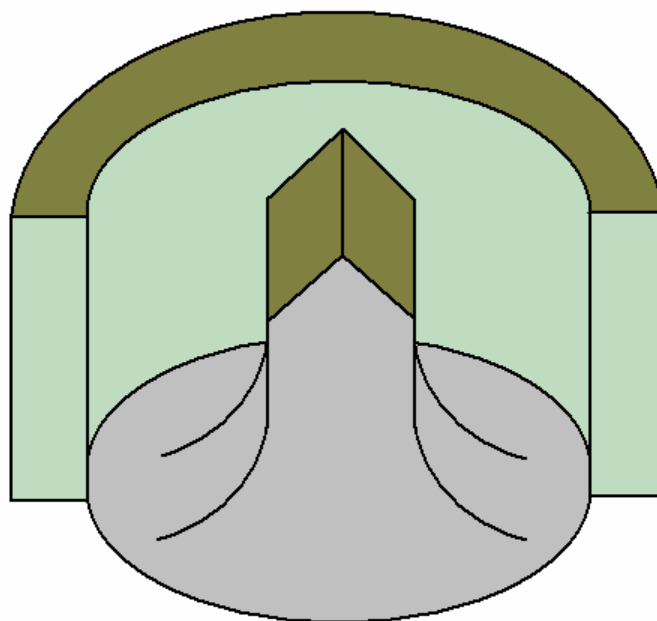


Рисунок 6.5. Пример задания трехмерной катодной ячейки.

Генераторы сеток из **Mesh Gen Tool** разработаны и продолжают развиваться автором совместно с И.В. Поповым [261, 494, 495, A29, A31] и представляют собой некоторое множество последовательных и параллельных программ, позволяющих по информации о геометрии расчетной области и набору параметров создать файлы, содержащие расчетные сетки нужного объема и качества. При этом генерация сетки может производиться как в последовательном, так и в параллельном режимах. Итоговый файл сетки может располагаться на компьютере пользователя, на сервере МВС или на узлах МВС, то есть быть распределенным.

Скажем несколько слов об алгоритмах генерации сеток. Начнём с *нерегулярных треугольных сеток*. Общая стратегия генерации треугольной сетки в произвольной двумерной области состоит в следующем. На первом этапе в последовательном либо параллельном режиме работы производится разбиение исходной области на первичные треугольники. Для этого область представляется в виде набора контуров, ограничивающих ее снаружи (внешний

контур) и изнутри (внутренние контура, возникающие при наличии в области дырок). Каждый контур задается с помощью замкнутой ломаной, соединяющей некоторые опорные точки. В качестве опорных точек выбираются все точки экстремума и перегиба криволинейной границы области. В качестве сегментов ломаных можно взять как отрезки прямой, так и криволинейные участки границы или их аппроксимации, соединяющие две соседние опорные точки (на работу описываемых ниже алгоритмов это не влияет). По этой информации строится первичная триангуляция области. Она включает в себя только опорные точки границы. После того, как проведена первичная декомпозиция области, в параллельном режиме производится измельчение первичных треугольников до заданного размера. Для этого первичные треугольники распределяются компактными группами по процессорам и измельчаются.

Построение *нерегулярных тетраэдральных сеток* по сути проводится по такой же схеме. Однако задача генерации тетраэдральной сетки является более трудоёмкой и требует использования параллельных вычислений на всех этапах её решения. В рамках комплекса решено было ограничиться сначала случаем односвязных невыпуклых областей. Входными данными для генератора сетки должно быть описание поверхности замкнутого тела, заданной с помощью множества поверхностных треугольников (плоских или криволинейных). Поверхностную триангуляцию предполагалось строить по граничной геометрической модели тела, например, по набору сечений или множеству фрагментов поверхности, каждый из которых задан либо аналитически, либо с помощью сплайн-аппроксимаций. Таким образом, составной частью генератора объемных сеток должен быть построитель поверхностной триангуляции тел (см. [495]). В итоге работы предполагалось получить многопроцессорную версию генератора, функционирующие как на многоядерном персональном компьютере пользователя, так и на МВС.

К настоящему моменту многие компоненты генераторов сетки готовы и включены в более общий программный комплекс **GIMM_QGD** [492]. Однако они доступны и в рамках **MICRO_2D/3D**, который предполагается со временем включить в среду **GIMM** [391] моделирования с помощью МВС задач механики сплошной среды. Одновременно с этой возможностью имеется также возможность использования внешних генераторов тетраэдральной сетки, например, пакета *TetGen* [496].

На рис. 6.6 в качестве иллюстрации работы генератора, созданного автором, показана одна из возможных конфигураций кремниевой ячейки и фрагмент треугольной сетки. Визуализация выполнена с помощью программы *TrgView*, также разработанной автором диссертации.

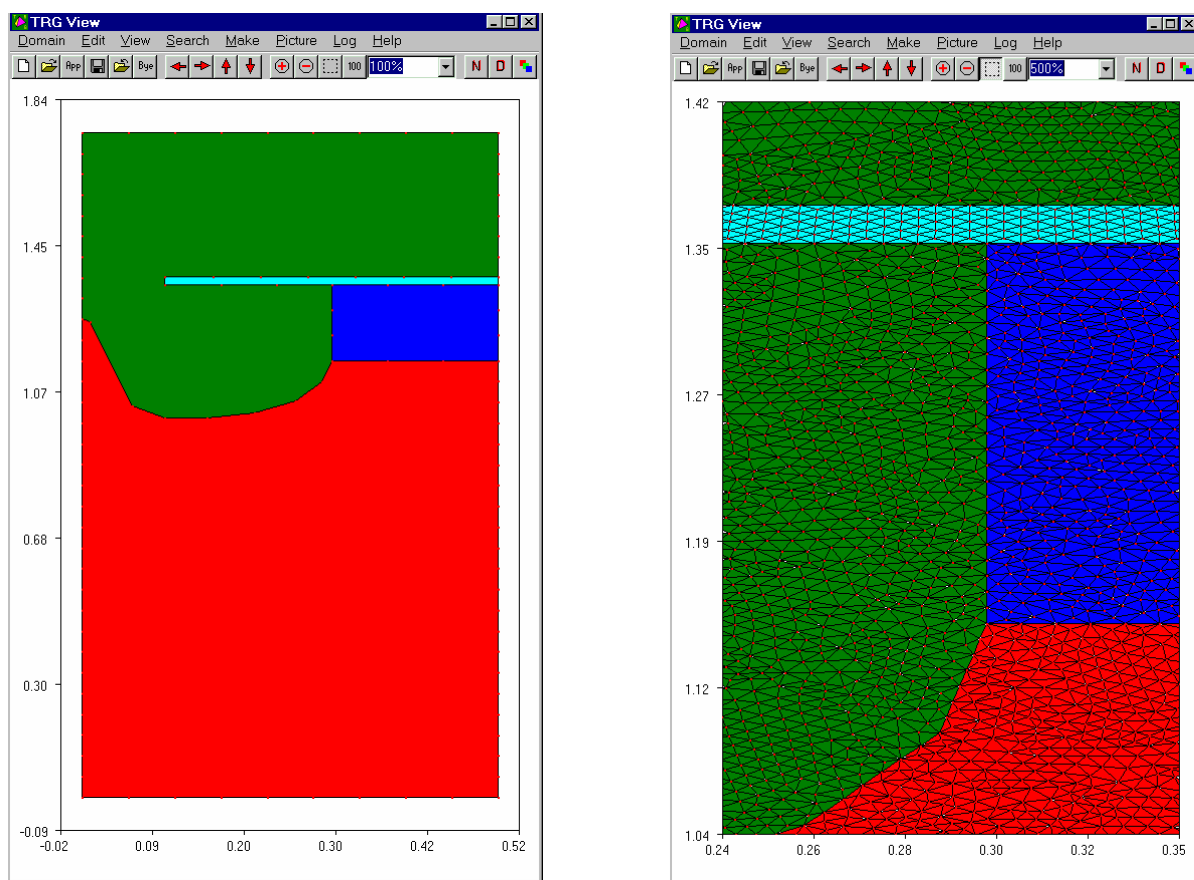


Рисунок 6.6. Конфигурация катодной ячейки (слева) и фрагмент сетки (справа) с нанесенными атрибутами материалов.

Библиотека ввода-вывода данных **IO Library** разработана автором на основе идей и алгоритмов М.В. Якобовского [395] и С.А. Сукова [497] и объединяет функции чтения и записи файлов различной структуры, в том числе распределенных по компьютерам сети. Она используется при реализации других программных компонент комплекса.

Библиотека методов декомпозиции расчетных областей и сеток **Decomposition Library** разработана автором совместно с О.А. Косолаповым с учётом результатов работ М.В. Якобовского и Е.Н. Головченко [386-388], используется совместно с библиотекой ввода-вывода и позволяет строить разбиения расчетной области и/или сетки, ее описывающей на фрагменты по заданным критериям. К настоящему моменту в библиотеке реализованы алгоритмы многослойного разбиения области и нерегулярной треугольной сетки, предложенные в п. 2.3 гл. 2. Для примера на рис. 6.7 показано двухслойное разбиение расчётной области и сетки (в качестве которой использовалась моделируемая ниже диодная структура) на базовое количество доменов (в данном случае 11, отмеченные различными цветами).

Модули решения задачи в различных постановках из множества **Microcell Solvers** разработаны автором и представляют собой параллельные программы, реализующие основной цикл решения динамической задачи. Их функция – прочитать исходные данные о модели и методах решения, расчетную сетку, произвести декомпозицию области на требуемое число фрагментов, запустить параллельные вычисления и обеспечить запись промежуточных и финальных результатов в требуемом формате. Между собой эти солверы отличаются размерностью задачи (1D, 2D, 3D для ортогональных сеток, 2D и 3D для нерегулярных треугольных и тетраэдральных сеток), а также разрядностью вещественных чисел (**float64** и **float128**).

Библиотека методов решения СЛАУ **Linear Solver Library** разработана автором с использованием идей О.Ю. Милюковой [374-378] и предназначена

для решения в последовательном и параллельном режимах возникающих в процессе моделирования линейных систем. Она ориентирована на использование как прямых методов: дискретного преобразования Фурье и прогонки и их комбинаций, так и итерационных: методов переменных направлений и схем сопряженных и бисопряженных градиентов с различными типами предобусловливателя. В комплексе не используются стандартные библиотеки линейной алгебры (например, PETSC [498]) по двум причинам: 1) в них не реализованы методы повышенной разрядности; 2) результат применения методов из стандартной библиотеки к конкретной матрице не предсказуем.

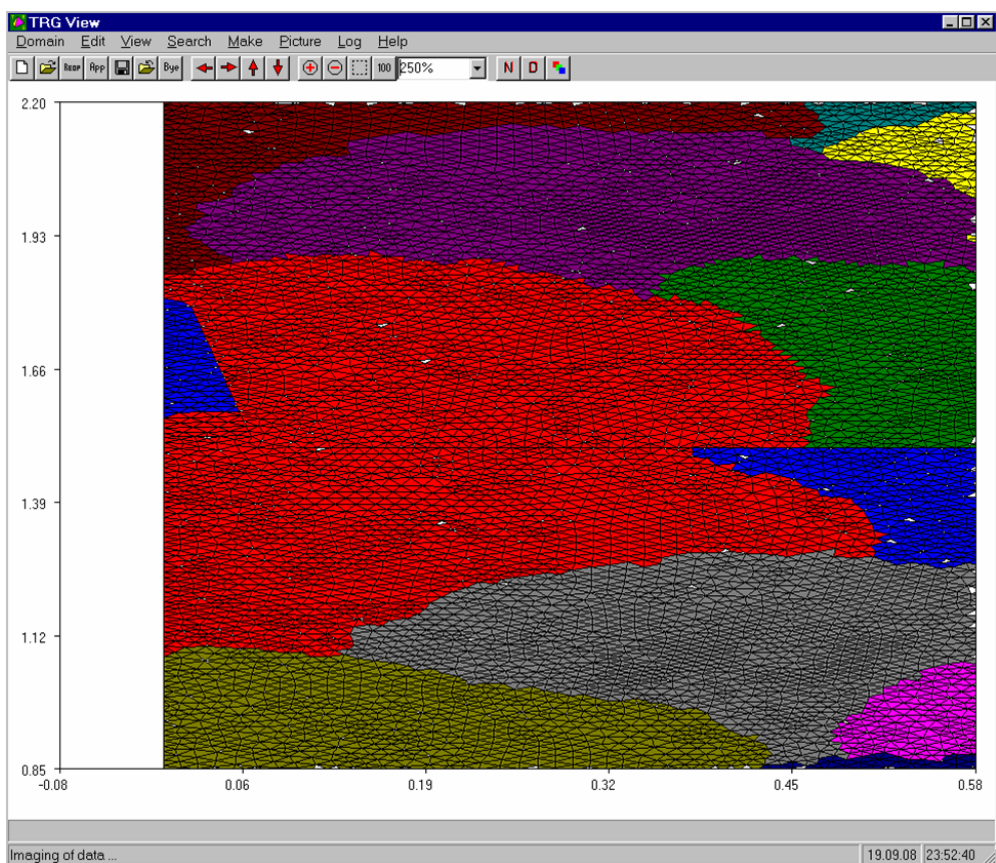


Рисунок 6.7. Двухслойное разбиение расчётной области и нерегулярной треугольной сетки на базовые домены.

Среда визуализации результатов **Visualization Tool** состоит из некоторого набора программ, определяющегося локализацией комплекса и сложностью

задачи. Если управление комплексом производится в среде Windows и файлы результатов помещаются на компьютер пользователя, то в качестве средств визуализации используются известный пакет *TecPlot* и разработанной ранее автором программой *TrgView*. Если пакет развернут на системе под управлением ОС Linux, то в качестве визуализаторов можно использовать встроенный визуализатор из **Graphical Shell, Area Editor**, а также известный пакет *ParaView*. Если при этом отображающиеся данные очень велики и распределены, то используется среда визуализации *RemoteView* [395, 499], разработанная в ИММ РАН.

6.5 Результаты моделирования

В данном разделе приведены некоторые примеры расчетов, выполненные с помощью как отдельных последовательных и параллельных программ, так и комплекса **MICRO_2D/3D**. Рассмотрим сначала результаты, полученные на ранней стадии исследований с помощью программ на ортогональных сетках.

6.5.1 Результаты моделирования в случае заданного распределения электрического поля на эмиссионной поверхности

В данном пункте рассмотрим упрощённый вариант задачи, когда вместо реальной геометрии микроузла (автокатодной ячейки) рассматривается лишь прямоугольный слой, находящийся под остриём катода (см. область ABCD на рис. 6.8). Для корректности расчёта необходимо задать приближённый профиль продольной компоненты поля E_y как функцию поперечной координаты x на верхней границе слоя AB . Рассмотрим сначала вариант, когда учитывались только движения и разогрев электронной системы. В проведённых численных экспериментах использовалась ЛОС экспоненциальной подгонки на прямоугольной сетке (см. рис. 6.8), которая была неравномерной по продольной координате y .

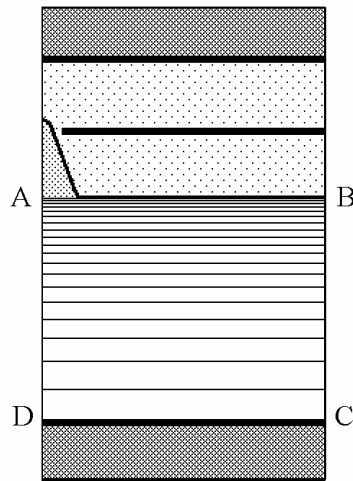


Рисунок 6.8. Схема расчетной области (ABCD) и разностной сетки; эмитирующей является поверхность AB ($y = 1$); размер области: $0,5 \text{ мкм} \times 1 \text{ мкм}$; размеры сетки: $h_x = 0,004 \text{ мкм}$; $h_y = (0,0004-0,02 \text{ мкм})$, $h_{y \text{ max}}/h_{y \text{ min}} = 200$.

Типичное распределение тянущего электрического поля E_s на эмитирующей поверхности, которое задавалось в качестве граничного условия показано на рис. 6.9а. В расчётах мы брали максимум этой зависимости в диапазоне $10^5 \div 10^7 \text{ В/см}$. Безусловно вблизи верхней границы этого диапазона получаются мало реальные значения разогрева ($\sim 1 \text{ Эв}$ и выше). Однако это свойство не численной методики, а физической модели.

На рис. 6.10 представлены двумерные распределения потенциала φ , электронной температуры T и концентрации электронов n . Как можно видеть, эти распределения сильно неоднородны вблизи эмитирующей поверхности. Сильное поле сосредоточено в субмикронной области вблизи лицевой поверхности катода. Там электронные температура и концентрация существенно превышают их равновесные значения ($T_0 = 300 \text{ К}$ и $N_D = 10^{18} \text{ см}^{-3}$). Это приводит к существенному росту плотности тока эмиссии (рис. 6.9б), который в отсутствие разогрева при таких полях пренебрежимо мал. Распределение плотности эмиссионного тока неоднородно как на эмитирующей поверхности (см. рис. 6.9б), так и в объёме полупроводника вблизи неё (рис. 6.10г).

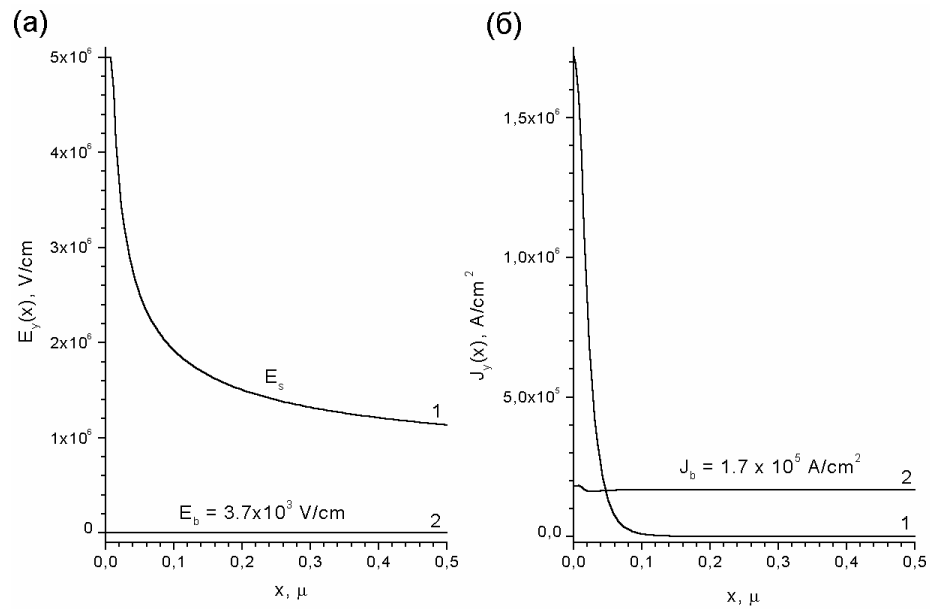


Рисунок 6.9. Распределения электрического поля (а) и нормальной компоненты плотности тока (б) на лицевой АВ (кривые 1) и тыльной CD (кривые 2) поверхностях для $E_{s,\max} = 5 \cdot 10^6 \text{ В/см}$.

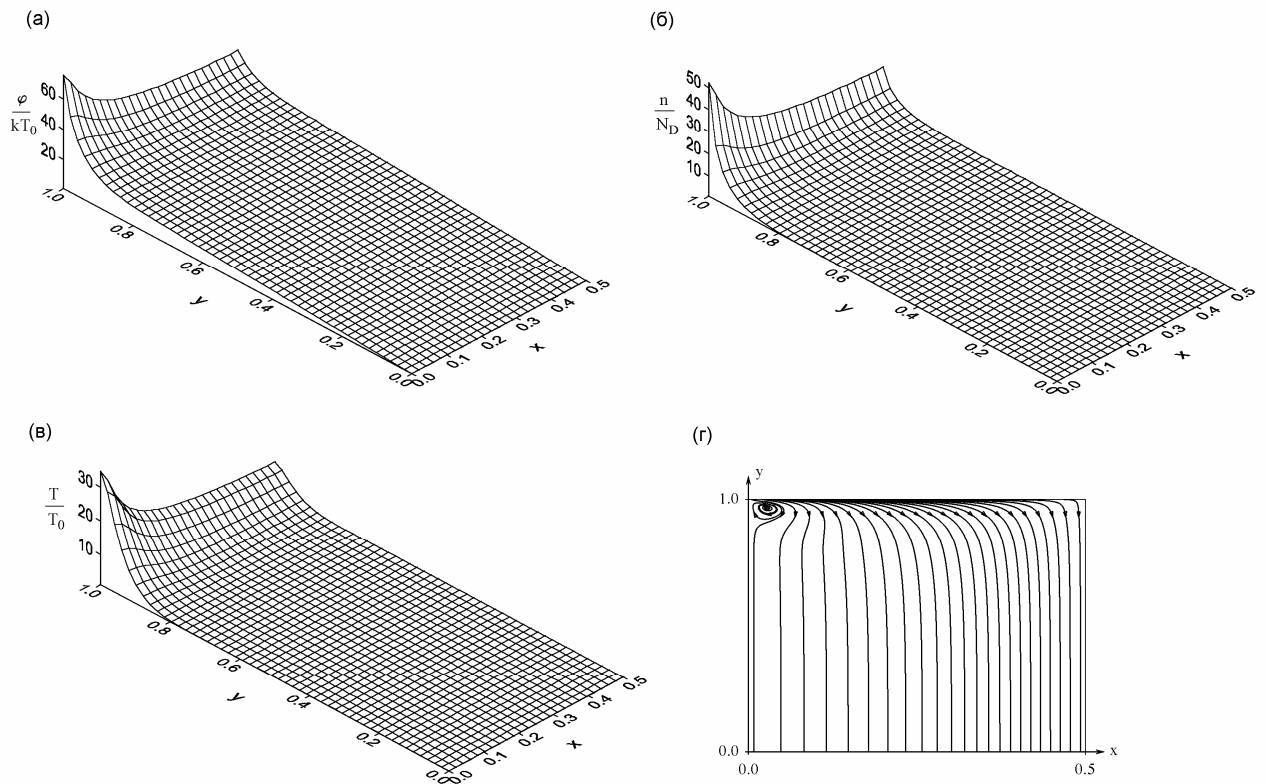


Рисунок 6.10. Пространственные распределения электрического потенциала (а), электронной концентрации, электронной температуры (в) и плотности тока (г) для $E_{s,\max} = 5 \cdot 10^6 \text{ В/см}$.

Электронная температура у поверхности монотонно возрастает с ростом тянущего поля в рассматриваемом диапазоне полей (рис. 6.11а). Электронная концентрация вблизи поверхности с ростом поля, как видно на рис. 6.11б, меняется немонотонно, что объясняется делокализацией электронов из приповерхностной потенциальной ямы (см. рис. 6.9а) с ростом их средней энергии $k_B T$. Мы ограничиваемся здесь указанным выше диапазоном полей, так как при более сильных полях разогрев электронного газа становится столь значительным, что становятся существенными процессы ударной ионизации, учет которых обсуждается ниже (а также другие факторы, например, зависимость времени релаксации энергии на фонах от величины разогрева). Электрическое поле и плотность электронного тока на тыльной поверхности практически однородны и их связь вполне описывается законом Ома с соответствующим значением подвижности электронов.

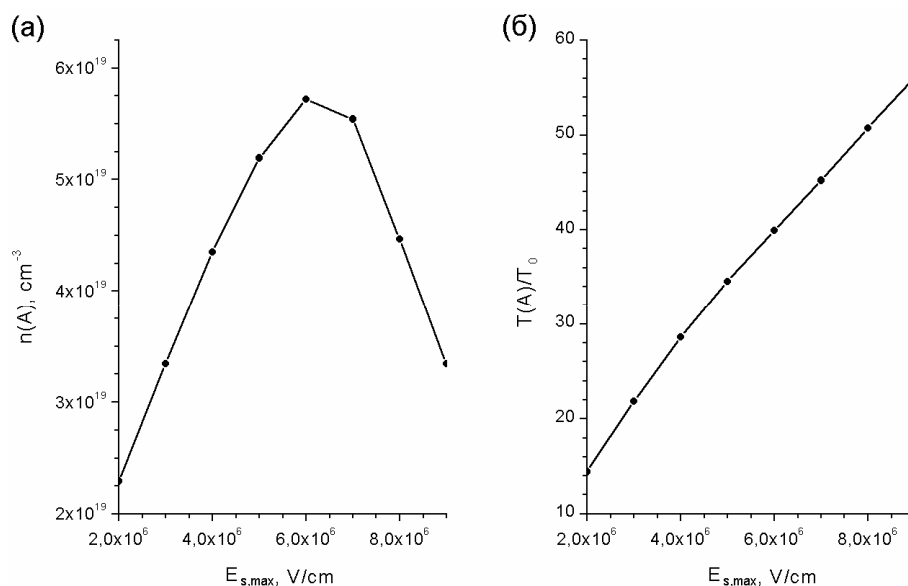


Рисунок 6.11. Полевые зависимости максимума электронной концентрации (а) и электронной температуры (б) у эмитирующей поверхности (в точке А).

Вычислительным экспериментом была также подтверждена существенная роль процессов двумерной термодиффузии в электронном транспорте горячих электронов при полевой эмиссии из полупроводникового автокатода.

На рис. 6.12а приведены распределения плотности тока на лицевой поверхности катода, рассчитанные в диффузионно-дрейфовой модели (без учета уравнения энергетического баланса) для нескольких значений электронной температуры $T = const$ (кривые 2-4). Видно, что они заметно отличаются от кривой 1, рассчитанной в квазигидродинамическом приближении. Существенно различаются также пространственные распределения потенциала, электронной концентрации и плотности тока в объеме полупроводника. Для примера на рис. 6.12б показано пространственное распределение тока, полученное в диффузионно-дрейфовой модели (ср. с рис. 6.10г).

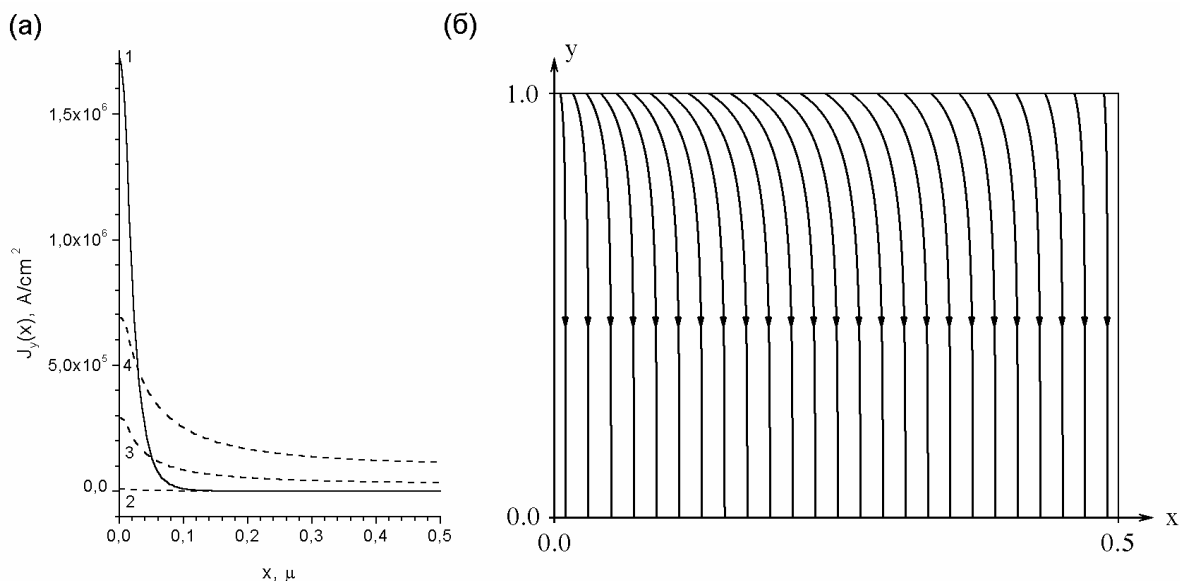


Рисунок 6.12. Распределения нормальной компоненты плотности тока (а) на лицевой поверхности АВ и пространственное распределение плотности тока в катоде (б), рассчитанные в диффузионно-дрейфовом приближении. $E_{s,max} = 5 \times 10^6$ В/см; 1 – $T_{max} = 35T_0$; 2 – $T = 15T_0$, 3 – $T = 25T_0$, 4 – $T = 35T_0$.

Зависимость плотности тока эмиссии от тянущего электрического поля представлена на рисунке 6.13а. При достаточно больших полях наблюдается заметное отклонение вольт-амперной характеристики от линейной зависимости в координатах Фоулера-Нордгейма (рис. 6.13б), связанное с рассмотренными

выше эффектами. При этом загиб ВАХ вблизи правой границы диапазона свидетельствует о нарушении условий применимости используемой модели.

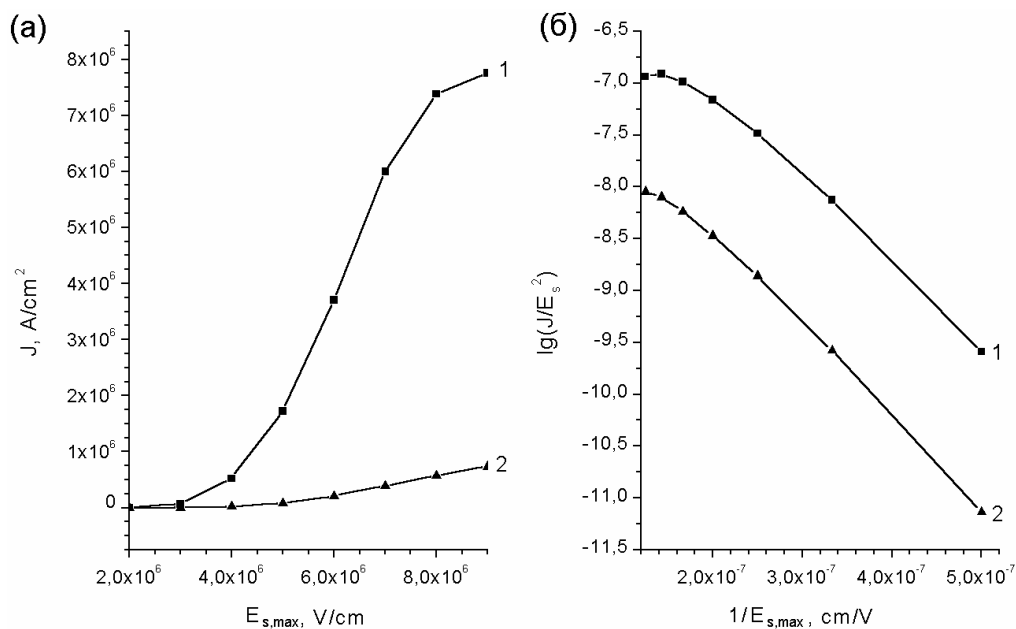


Рисунок 6.13. Полевые зависимости плотности тока эмиссии: максимальной (в точке А) - (1) и средней по эмитирующей поверхности ячейки АВ - (2).

На рис. 6.14 показаны характерные спектральные кривые плотности эмиссионного тока. В расчётах установлено, что пик энергетического распределения эмитируемых электронов смещается с ростом тянущего поля в сторону высоких энергий на величину, сравнимую с энергией электронного сродства в кремнии (≈ 4 эВ). Смещение происходит в узком диапазоне полей вблизи 10^6 В/см, что соответствует теоретическим оценкам. Полученные результаты согласуются с экспериментальными данными по измерению энергетического спектра полевой эмиссии электронов из кремниевых микрокатодов [484].

Таким образом, разработанная модель и численный алгоритм уже на предварительной стадии показали высокую эффективность при исследовании полевой эмиссии из кремниевого микрокатода. Было показано, что в области рабочих полей ток эмиссии определяется горячими электронами. При этом

существенную роль играет термодиффузия. Численные результаты находятся в качественном согласии с выводами, полученными ранее в одномерной модели [490], но демонстрируют существенную роль двумерного подхода при моделировании реальных микрокатодов. Недостатком модели является завышенный разогрев при больших тянущих полях.

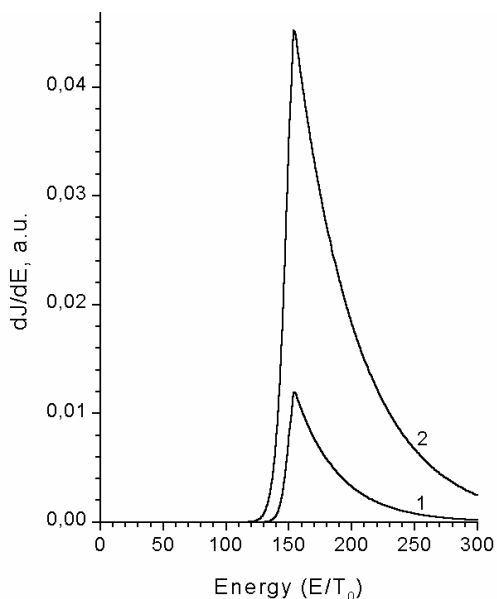


Рисунок 6.14. Энергетическое распределение плотности эмиссионного тока:
 1 – $E_{s,\max} = 5 \times 10^6$ В/см, 2 – $E_{s,\max} = 8 \times 10^6$ В/см.

Следующий этап исследований был связан с учётом *процессов ударной ионизации*. Для этого в модели были учтены изменения концентрации дырок и члены ударной ионизации в уравнениях неразрывности и плотности электронной энергии. В проведенных численных экспериментах были рассчитаны установившиеся двумерные распределения электрического потенциала, концентраций электронов и дырок и электронной температуры в полупроводниковом эмиттере для различных значений тянущего поля E_s на эмитирующей поверхности. Распределение поля $E_s(x)$, которое использовалось в расчетах, показано на рис. 6.15. Максимум этой зависимости достигается в точке **A**, соответствующей острию клиновидного катода. Полученные распределения

сравнивались с распределениями, рассчитанными без учета ударной ионизации при тех же параметрах задачи, что и выше.

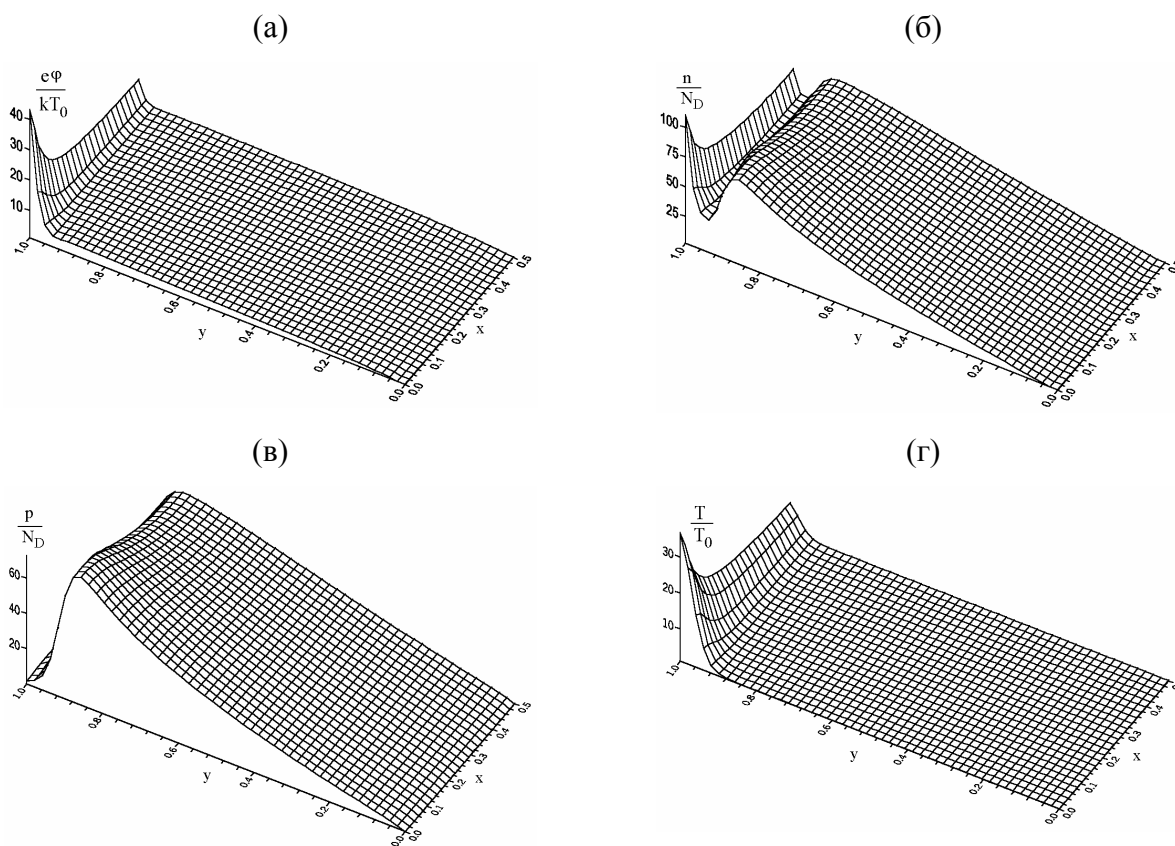


Рисунок 6.15. Установившиеся двумерные распределения электрического потенциала (а), концентраций электронов (б) и дырок (в) и электронной температуры (г) для $E_{s,\max} = 5 \cdot 10^6 \text{ В / см}$.

Типичные рассчитанные распределения представлены на рис. 6.15 (распределения электронных концентрации и температуры, полученные при том же тянущем поле без учета ударной ионизации см. на рис. 6.10). Из рис. 6.15 видно, что ударная ионизация существенно образом меняет процесс переноса в автокатоде при актуальных значениях тянущего поля. Концентрация дырок внутри катода достигает заметной величины, так что токоперенос внутри полупроводникового полевого эмиттера носит скорее биполярный, чем

униполярный характер. Концентрация электронов вблизи эмитирующей поверхности вследствие ударной ионизации еще более возрастает. С другой стороны, ударная ионизация приводит к некоторому охлаждению электронного газа вследствие наличия слагаемого $-\gamma G$ в правой части уравнения энергетического баланса, и служит механизмом, ограничивающим беспредельный разогрев электронов проводимости. Как видно по результатам вычислений, электронный разогрев здесь остался почти на том же уровне, но оказался сильнее локализован у эмитирующей поверхности вблизи максимума поля.

Таким образом, дополнение модели новыми факторами послужило адекватному описанию ею процессов ударной ионизации в неоднородно разогретом электронном газе полупроводника. Численные эксперименты на базе расширенной модели показали, что ударная ионизация оказывает существенное влияние на токоперенос в катодной области и, следовательно, на его характеристики. Поэтому учет ударной ионизации необходим при моделировании переноса в разогретой электронно-дырочной плазме полупроводника и, в частности, при моделировании реальных полупроводниковых катодов и приборов на их основе.

6.5.2 Результаты моделирования реальной двумерной структуры

Моделирование задачи (6.9) в условиях реальной двумерной геометрии катодной ячейки проводилось с помощью программ комплекса **MICRO_2D/3D**. Для начала приведём результаты тестирования соответствующей программы. Для этого отметим, что большинство расчётов проводилось при следующих физических параметрах:

$$T_0 = 300K, N_D = 10^{18} \text{ см}^{-3}, \lambda_1 = 1.48 \frac{\text{Дж}}{\text{К} \cdot \text{см} \cdot \text{с}}, c_{v1} = 1.664 \frac{\text{Дж}}{\text{К} \cdot \text{см}^3},$$

$$\chi_0 = 4B, E_g = 1.12 \text{ Эв}, \tau_e = 6 \cdot 10^{-13} \text{ с}, \mu_{n0} = 280 \frac{\text{см}^2}{\text{В} \cdot \text{с}}, \mu_{p0} = 50 \frac{\text{см}^2}{\text{В} \cdot \text{с}},$$

$$v_{es} = 10^7 \frac{CM}{c}, v_{hs} = 10^8 \frac{CM}{c}, m_e = 9.828 \cdot 10^{-28} \text{ z}, \varepsilon_1 = 11.7, \varepsilon_2 = 1, \varepsilon_3 = 3.9,$$

$$A = 1.32 \cdot 10^{17} \text{ c}^{-1}, R_h = 0.1, \eta_l = 10^5.$$

Один из тестовых расчётов эмиссии с поверхности кремниевого катода в случае реальной аксиально-симметричной геометрии проводился на подробной треугольной сетке с параметрами $(N_P, N_T) = (37862871, 76445696)$ (где N_P – число узлов, N_T – число треугольников), полученной путём измельчения стартовой сетки с размерами $(37563, 74654)$ путем равномерного измельчения в 1024 раза. Расчёты проводились на кластерах ИММ РАН и МВС «Чебышёв» НИВЦ МГУ на конфигурациях от 1 до 1000 ядер и подтвердили работоспособность разработанного кода.

Рассмотрим сначала результаты, полученные в расчётах на кластере ИММ РАН. В качестве иллюстрации приведем данные для области, изображенной на рис. 6.16 слева с размерами 1.5×3 мкм. Полуширина анода была равна 1.5 мкм, высота катода – 1.5 мкм, высота острия – 0.3 мкм, радиус скругления острия – 20 нм, полуширина основания острия – 60 нм. Потенциал на аноде был равен 1000 В. Расчет проводился на стартовой треугольной сетке. Целью расчетов был поиск области катода, подвергающейся наибольшему воздействию электрического поля.

Моделирование проводилось на конфигурациях от 1 до 40 ядер. Эффективность распараллеливания для стартовой сетки была достаточно высокой (~80% на максимальной конфигурации 40 ядер). Для тестирования на большем числе ядер сетка измельчалась в 64 раза (количество узлов сетки составило при этом порядка 2,1 млн. узлов, количество треугольников – 4,5 млн.). При этом эффективность распараллеливания на максимальной однородной конфигурации кластера (160 одинаковых ядер) составила 96%.

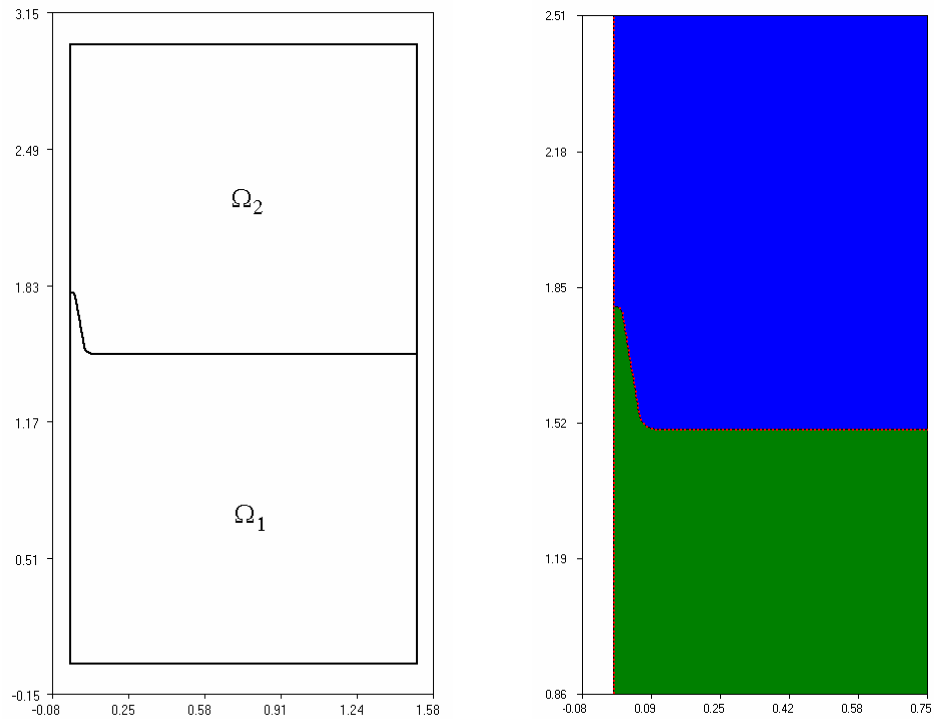


Рисунок 6.16. Аксиально-симметричная диодная структура ячейки (слева) и её фрагмент с нанесёнными атрибутами задачи (справа). В данном случае показано разделение области на вакуумный (голубой цвет) и кремниевый (зелёный цвет) слои. Размеры указаны в микронах.

На рис. 6.17 показаны распределения модуля электрического поля, электронной температуры и энергии электронов в области острия во время переходного процесса. Видно, что электрическое поле глубоко проникает в объём острия, разогрев электронов достигает значительной величины в верхней его части. Именно это приводит к наблюдаемым в натурных экспериментах весьма высоким плотностям тока автоэмиссии у вершины острия, а так же, как можно полагать, служит причиной деградации вершины острия в процессе эмиссии. Таким образом, расчеты позволяют найти участки катода, наиболее подверженные деградации. На сетках малого размера получается качественная картина моделируемого процесса. На подробных сетках можно получить и количественное совпадение результатов моделирования с экспериментальными измерениями.

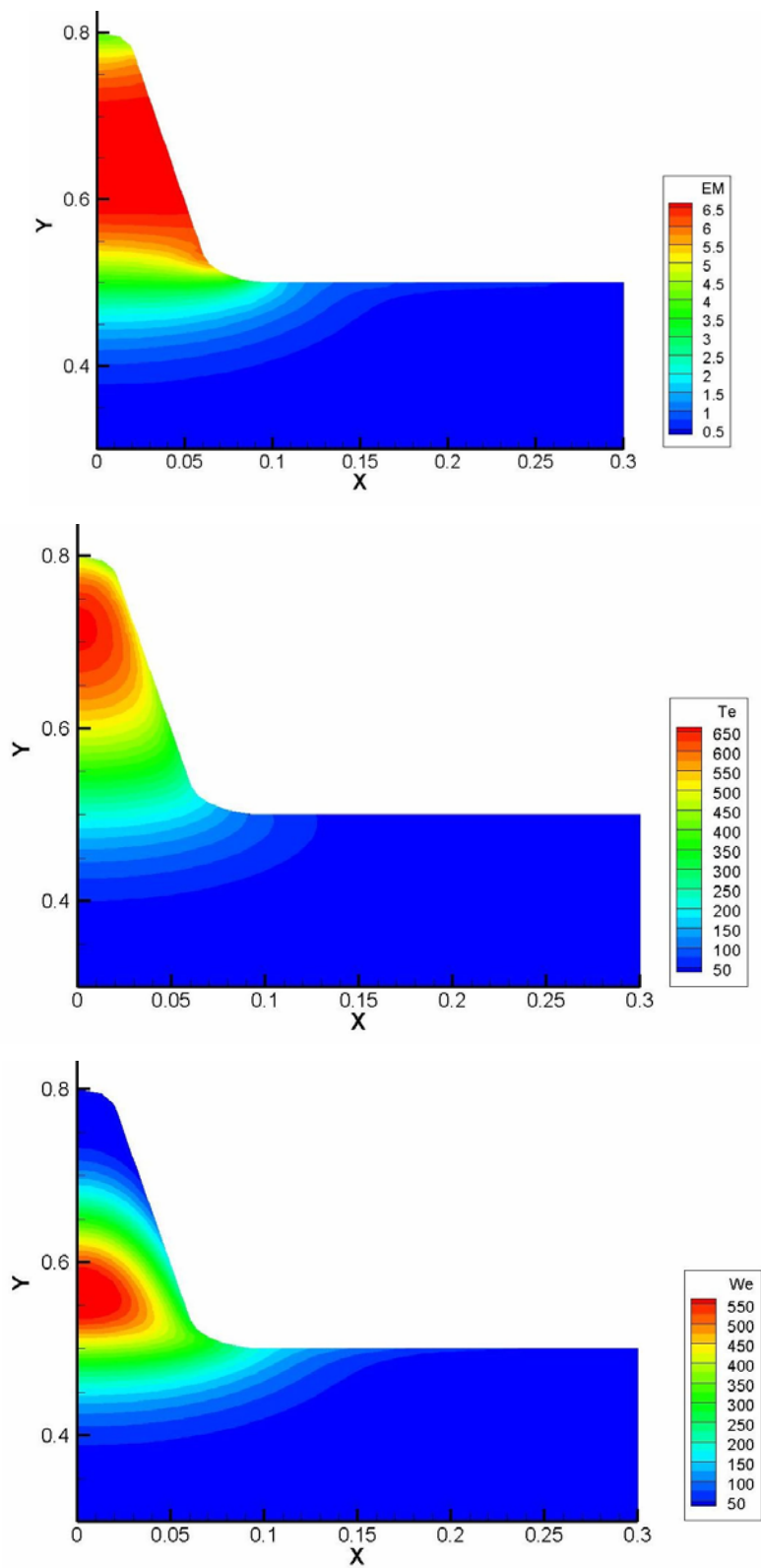


Рисунок 6.17. Нормированные распределения модуля электрического поля (сверху), электронной температуры (в середине) и плотности энергии электронов (снизу) в области острия катода.

Тестирование двумерной программы на треугольной сетке на МВС «Чебышёв» НИВЦ МГУ, проведенное для сравнения для той же стартовой сетки показало, что разработанная программа может выполняться на большом количестве ядер (расчёты проводились в конфигурациях от 10 до 1000 ядер). На выполнение одного шага численного алгоритма по времени на максимальной сетке (37862871, 76445696) на 10 ядрах было затрачено 5556 сек, на 100 ядрах – 653 сек, а на 1000 ядрах – 85 сек. Полученные эффективности распараллеливания составили во втором и третьем случаях 85,1% и 65,4%. Для нерегулярных сеток это вполне разумный результат. Таким образом, уменьшение времени расчёта в параллельном режиме происходило вплоть до максимальной рассмотренной конфигурации. К сожалению, ввиду загруженности данного суперкомпьютера, провести детальное тестирование задачи на промежуточных конфигурациях не удалось.

Рассмотрим теперь более подробно другие результаты моделирования.

Первая серия расчетов была связана с анализом плоской структуры (отсутствует острие, изолятор и управляющая сетка) для случая узкого анода (существенно меньшего чем ширина катода). Размеры области Ω были равны $1\text{ мкм} \times 1\text{ мкм}$, полуширина анода равна 0.25 мкм . Потенциал на аноде V_a варьировался в пределах от 100 до 2000 В. Изменения концентрации дырок и температуры решетки не учитывались. В проведенных вычислениях была получена зависимость тока эмиссии J_{es} от приложенного напряжения V_a . Анализ показывает, что данная зависимость имеет «пороговый» характер. В частности, вплоть до напряжения 1130 В эмиссия электронов через рабочую поверхность катода практически отсутствует. При напряжении 1140 В эмиссия электронов уже слишком велика (за пределами применимости модели). Порог эмиссии располагается вблизи напряжения 1133 В. Безусловно, в реальной ситуации порог эмиссии сильно размыт (хотя бы потому, что имеет место

термоэмиссия) и находится вблизи 1 кВ. Здесь же можно говорить о пороге (старте) разрушения острия катода. Именно это мы и будем иметь ввиду.

Характерные распределения модуля напряженности электрического поля, концентрации электронов и их температуры до и после порога изображены на рис. 6.18-6.20. До порога они соответствуют значению $V_a = 1000V$ (рис. а), после порога – $V_a = 1200V$. Они показывают, что до порога эмиссии электроны собираются в узком слое вблизи эмитирующей поверхности напротив анода, их концентрация тем больше, чем больше потенциал на аноде (рис. 6.19а), а их температура близка к равновесной (рис. 6.20а). При этом электрическое поле слабо проникает в катод (рис. 6.18а). Практически оно сосредоточено там же, где скопились неравновесные электроны.

После порога концентрация электронов вблизи эмитирующей поверхности напротив анода оказывается немного выше равновесной, поскольку неравновесные электроны здесь туннелируют в вакуум. Однако с продвижением вправо по координате x вдоль эмитирующей поверхности условия туннелирования ухудшаются, и неравновесные электроны начинают там скапливаться. В итоге в квазиравновесии профиль концентрации вдоль эмитирующей поверхности возрастает по x до больших значений (см. рис. 6.19б). Температура электронов напротив анода наоборот высока и сильно падает к периферии (рис. 6.20б). Электрическое поле теперь сильно проникает в катод (рис. 6.18б), поскольку в нем имеется достаточно большая область, занимаемая квазиравновесным объёмным зарядом.

Оценивая приведённые результаты расчетов, отметим, что все качественные особенности поведения решения внутри катода и поля во всей структуре передаются адекватно известным физическим представлениям. Количественные характеристики численного решения оценить сложно, так как данные физических экспериментов для конкретных структур, как правило, не публикуются. Тем не менее, можно сказать, что величины порогов разрушения

по порядку величины соответствуют известным экспериментальным данным. По сравнению с результатами из п. 6.5.1 здесь получаются более реалистичные данные, поскольку электрическое поле на эмитирующей поверхности рассчитывается, а не задаётся в виде модельной зависимости.

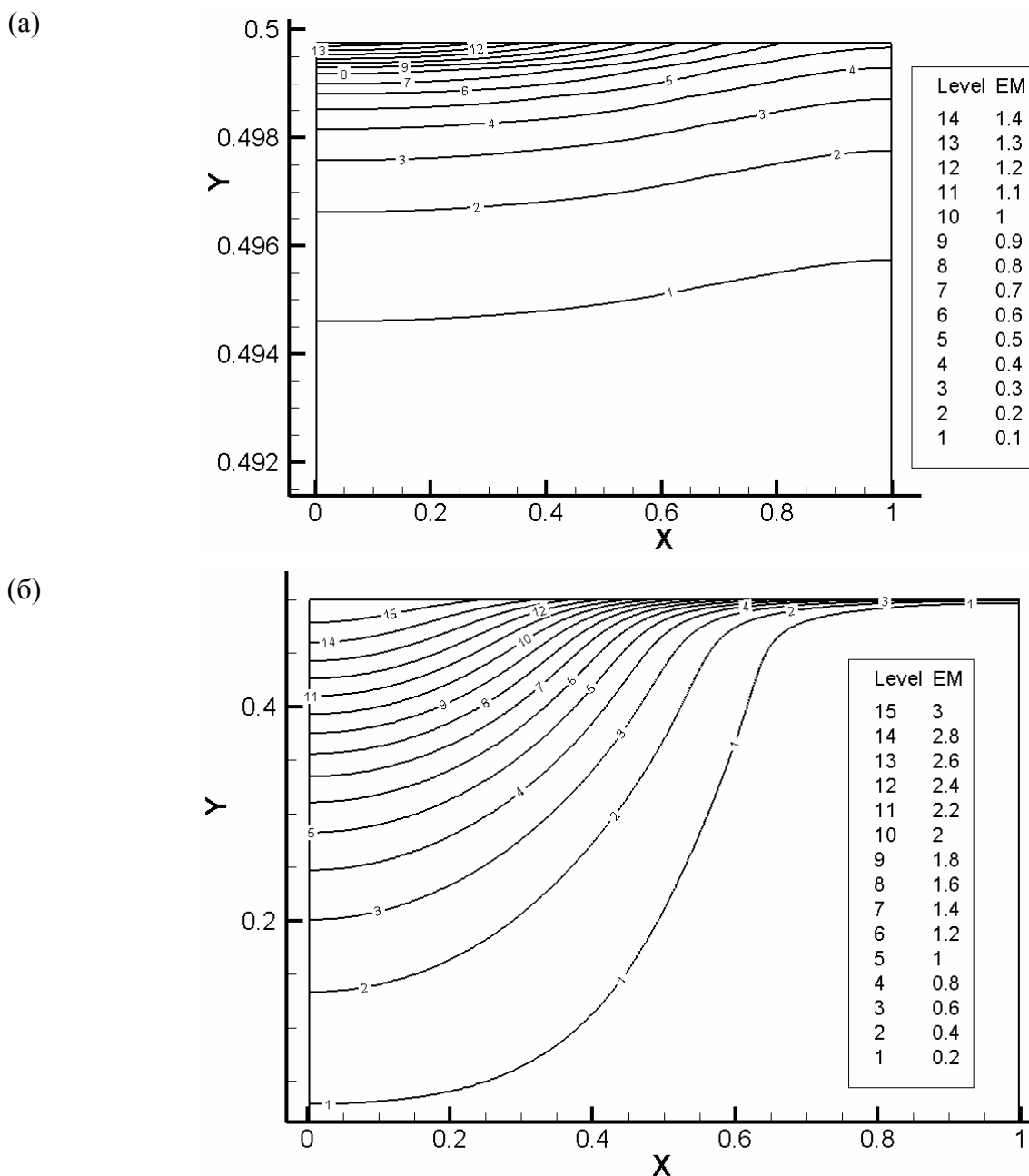


Рисунок 6.18. Изолинии нормированного модуля напряженности электрического поля в структуре с узким анодом и плоским катодом до достижения порога (а) и за порогом (б) разрушения.

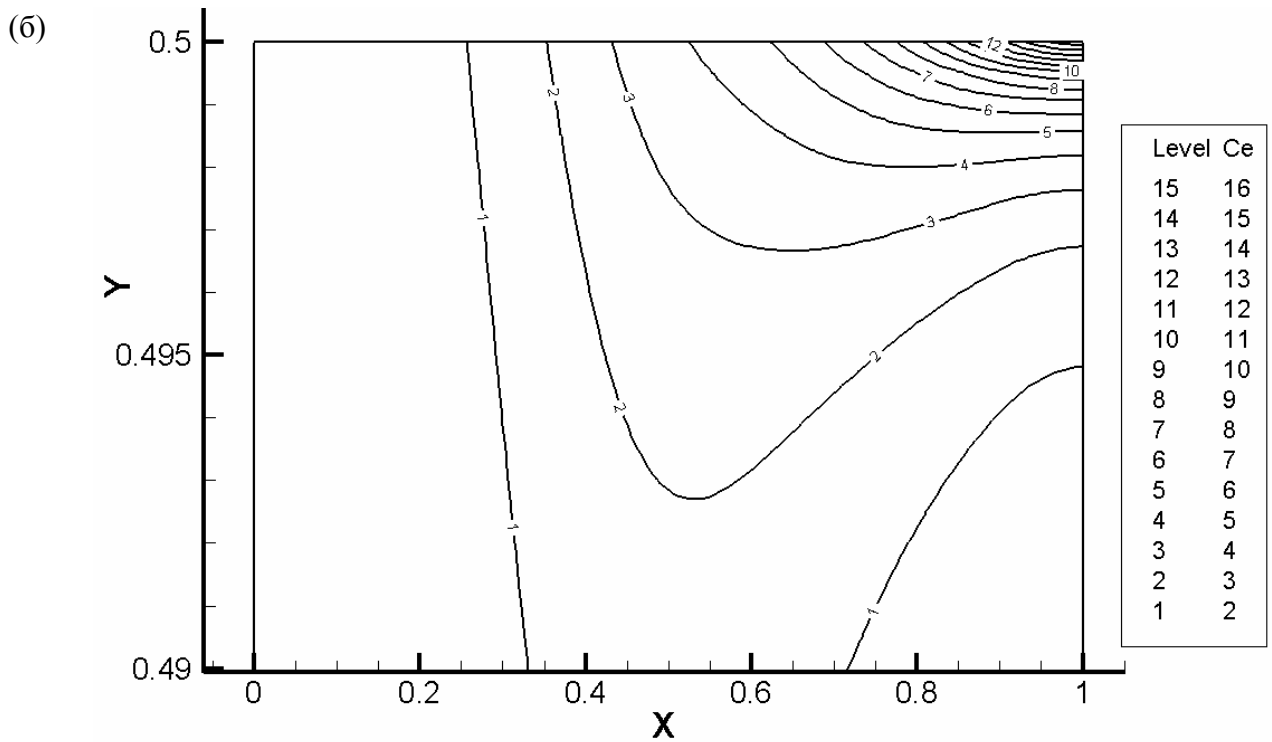
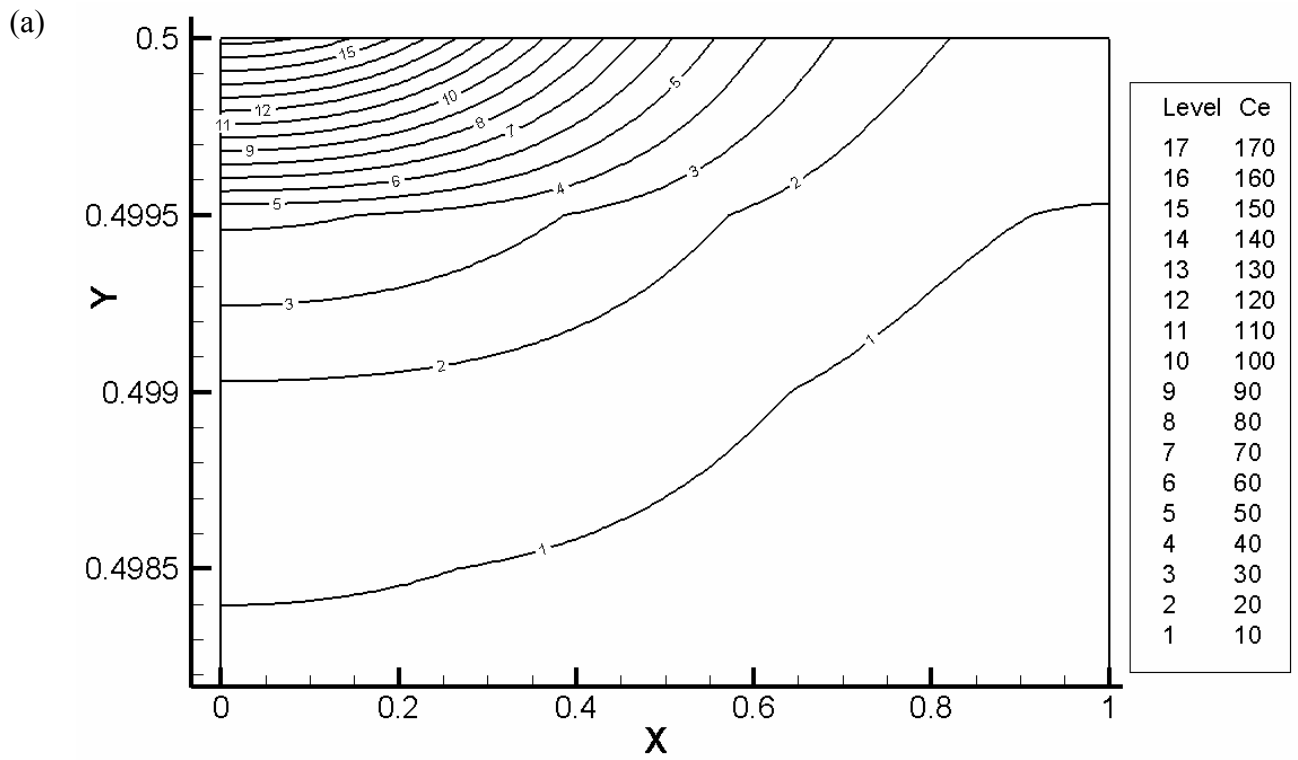
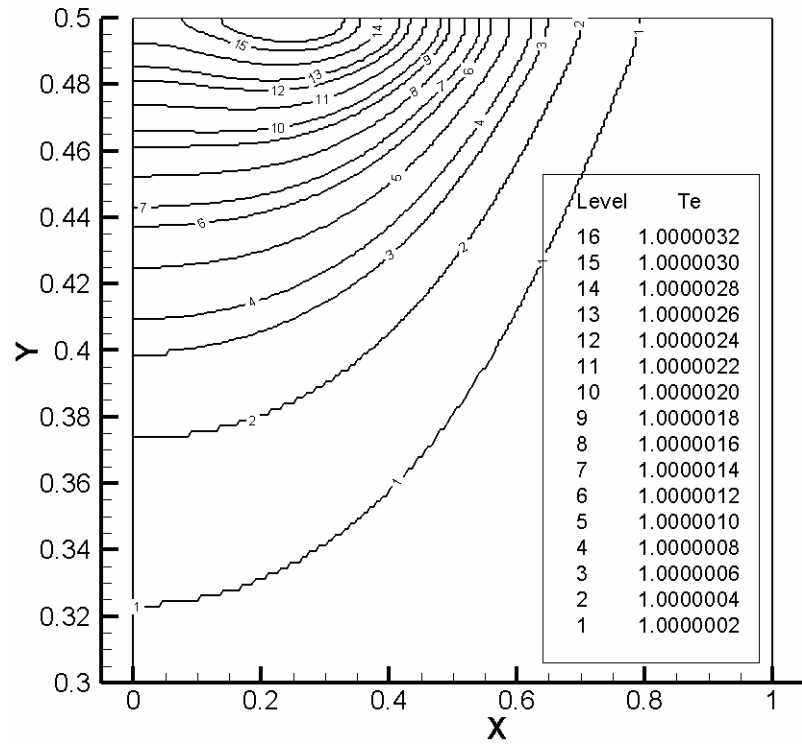


Рисунок 6.19. Изолинии нормированной концентрации электронов в структуре с узким анодом и плоским катодом до достижения порога (а) и за порогом (б) разрушения.

(a)



(б)

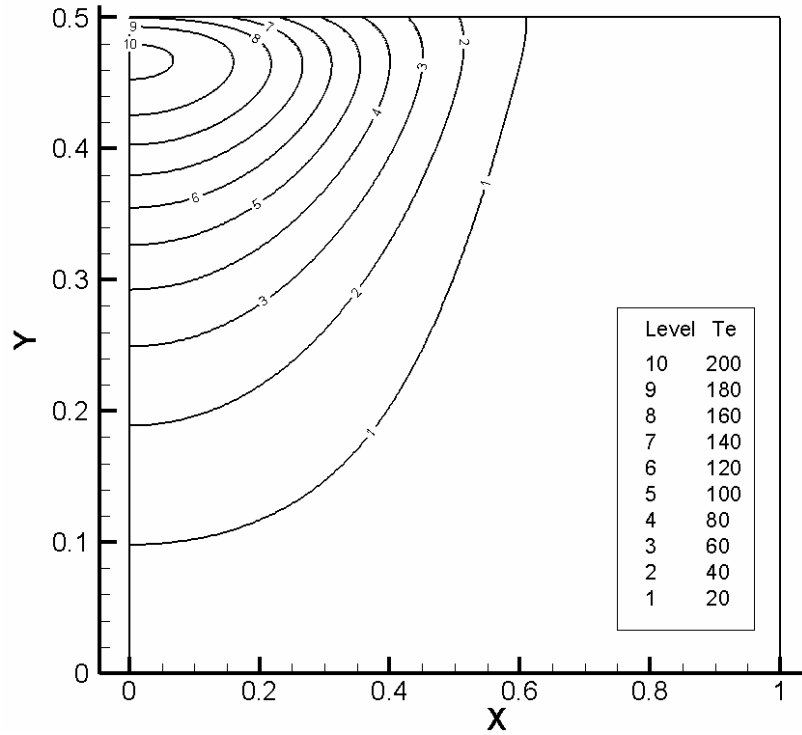


Рисунок 6.20. Изолинии нормированной электронной температуры в структуре с узким анодом и плоским катодом до достижения порога (а) и за порогом (б) разрушения.

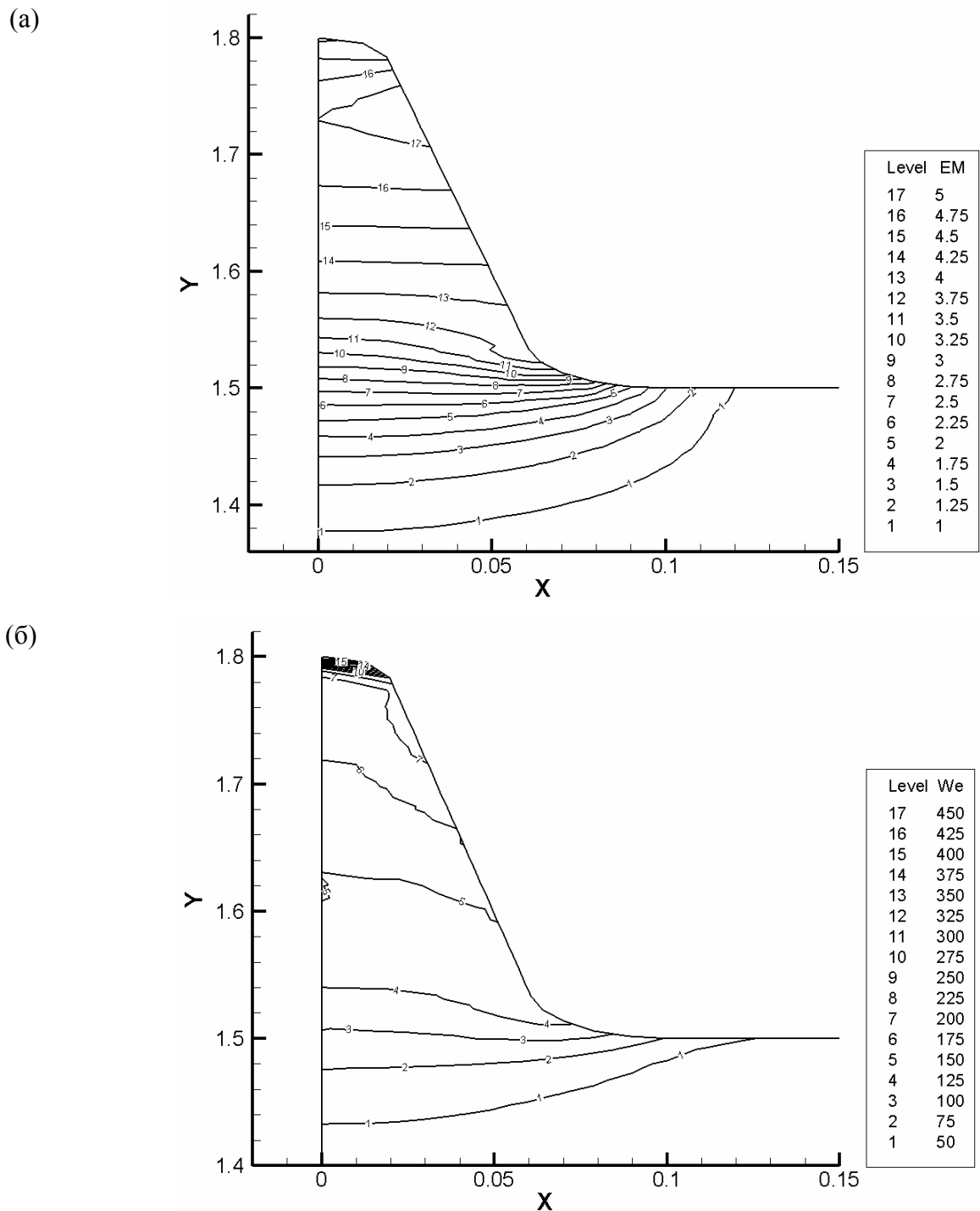


Рисунок 6.21. Изолинии нормированных модуля напряженности электрического поля (а) и плотности энергии электронов (б) в области острья катода.

Вторая серия расчетов была проведена для диодной структуры с лезвийным катодом, которая использовалась в тесте, рассмотренном выше. На рис.

6.21 в дополнение к уже приведённым данным (рис. 6.17) показаны изолинии модуля электрического поля и энергии электронов в области острия во время переходного процесса. Из рис. 6.21а видно, что максимум поля достигается в средней части острия (изолиния 17) и глубоко проникает в его объем. Разогрев электронов максимален в верхней части острия (рис. 6.21б). Таким образом, верхняя и средняя подобласти острия подвержены максимальному воздействию электрического поля и тепла. Как показывают натурные эксперименты, именно эти подобласти разрушаются в первую очередь в процессе эксплуатации катодов. Следовательно, используемая нами модель при умеренных значениях приложенных напряжений на качественном и количественном уровне вполне удовлетворяет требованиям, предъявляемым к численным экспериментам. Дальнейшее её развитие и калибровка позволит только улучшить количественное соответствие результатов расчётов данным экспериментов.

6.5.3 Результаты моделирования реальной трёхмерной структуры

Разработанный программный комплекс **MICRO 2D/3D** использовался также для моделирования процессов электронной эмиссии с поверхности кремниевого катода реальной трехмерной геометрии. Основной целью моделирования на данном этапе разработки было подтверждение его работоспособности и качественное соответствие численных результатов имеющимся представлениям о существовании изучаемых физических процессов.

Схема численного эксперимента состояла в следующем. Сначала выбиралась аксиально-симметричная ячейка с кремниевым острым катодом и проводилось двумерное моделирование задачи. На этом этапе анализировались распределения электрического поля во всей структуре, а также распределения концентрации, электронной температуры и электронной энергии в кремнии.

На втором этапе с помощью преобразований вращения строилась

трехмерная реконструкция ячейки и проводился цикл трехмерного моделирования. Полученные результаты использовались для тестирования численной схемы и сравнения трехмерного решения с двумерным аксиально-симметричным.

На третьем этапе на поверхности трехмерной геометрической структуры накладывался некоторый шум и снова проводилось трехмерное моделирование. Полученные результаты сравнивались с расчетами в случае идеальной трехмерной геометрии.

Такой подход позволил провести предварительную калибровку численных алгоритмов и программ. Полностью этот процесс пока далёк от завершения, однако некоторые предварительные результаты уже получены.

Рассмотрим здесь один существенно трёхмерный расчёт, проведенный для ячейки реальной геометрии, реконструированной по матрице автокатодного дисплея (см. рис. 6.22.). Реконструкция заключалась в построении 3D геометрической модели ячейки (рис. 6.23) с последующим нанесением на неё свойств конкретных материалов. Далее ячейка помещалась в слой вакуума с прилегающими снизу и сверху плоскими металлическими электродами.

Итоговая расчётная область была покрыта стартовой тетраэдральной сеткой, изображенной на рис. 6.24. Параметры стартовой тетраэдральной сетки $(N_P, N_T) = (4770, 17673)$ (здесь N_P – число узлов, N_T – число тетраэдров). Стартовая сетка измельчалась почти равномерно в 32768 раз до размеров $(156303360, 579108864)$. Расчёты проводились на МВС «Чебышёв» и «Ломоносов» (НИВЦ МГУ) на конфигурациях от 100 до 7000 ядер и подтвердили работоспособность разработанного модуля.

Результаты расчётов на сетке максимального размера на МВС «Ломоносов» показали, что на выполнение одного шага численной схемы по времени на 100 ядрах требуется 4140 сек, а на 7000 ядрах – 83 сек. Уменьшение времени расчёта в параллельном режиме происходит вплоть до максимальной

рассмотренной конфигурации МВС. На рис. 6.25 показана эффективность распараллеливания в проведённых численных экспериментах. Кривая эффективности подтверждает высокий коэффициент распараллеливания разработанной численной реализации. При этом результаты трёхмерного численного расчёта качественно похожи на результаты двумерного моделирования.

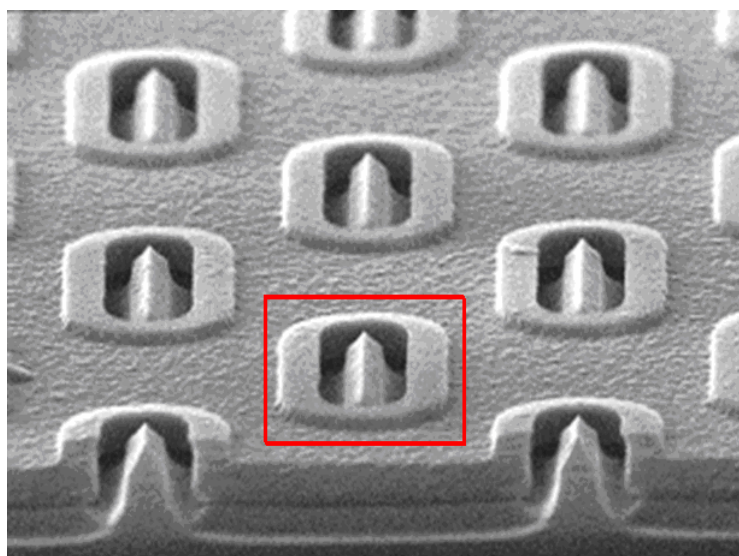


Рисунок 6.22. Реальная матричная структура с кремниевыми катодами лезвийного типа. Красным цветом выделена ячейка, выбранная для моделирования.



Рисунок 6.23. Реконструкция катодной ячейки в AreaEditor.

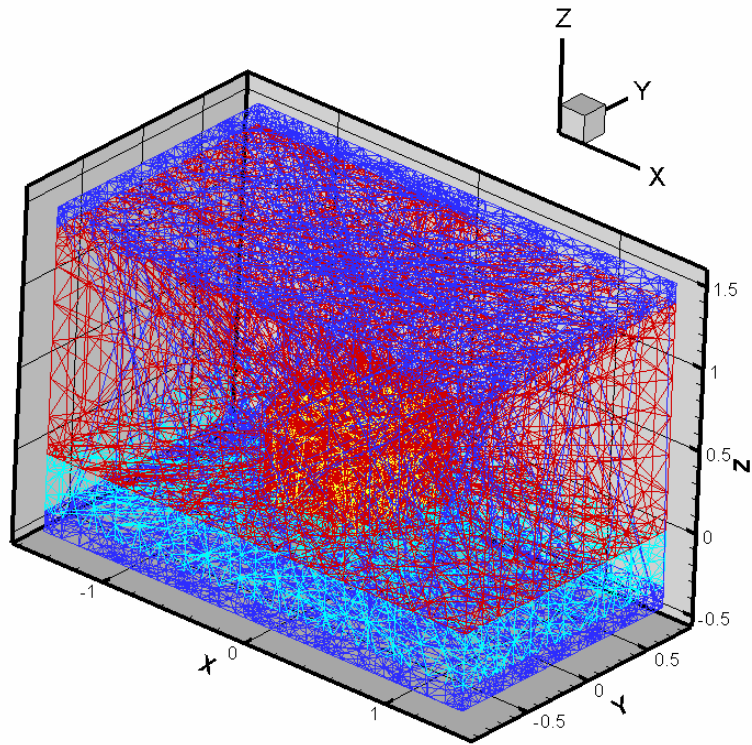


Рисунок 6.24. Стартовая тетраэдральная сетка.

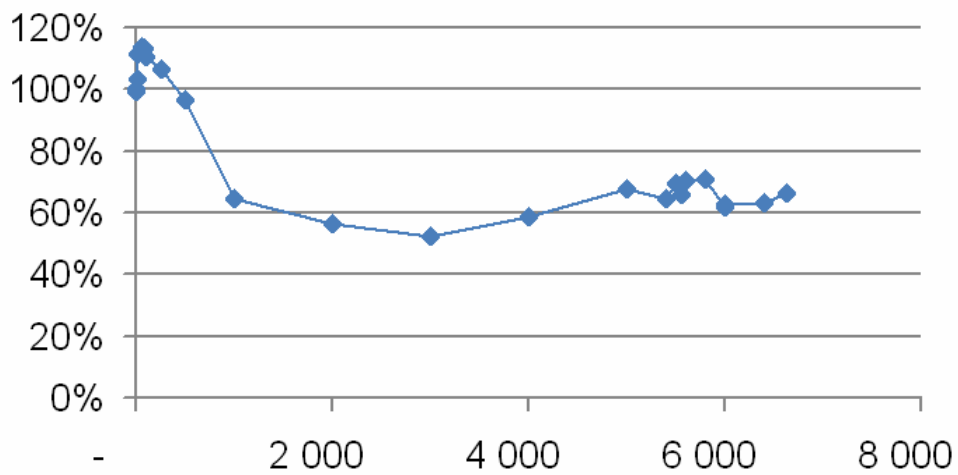


Рисунок 6.25. Эффективность распараллеливания трёхмерного алгоритма при расчётах на сетке максимального размера на МВС «Ломоносов».

В заключение данной главы отметим, что в результате исследований разработана физико-математическая модель процессов электронной авто-

эмиссии в полупроводниковых микро- и наноструктурах реальной геометрии и состава. Основу модели составляет квазигидродинамическое описание неравновесных процессов в полупроводниковых частях структуры. На эмитирующей поверхности используется квантовое описание процессов туннелирования электронов.

Для численного анализа разработанной модели используются оригинальные численные методы как на ортогональных, так и на нерегулярных сетках, а также параллельные алгоритмы, реализованные в виде программ для МВС. На основе последних разработан программный комплекс **MICRO_2D/3D** для решения задач электродинамики в современных вакуумных полупроводниковых приборах со сложной субмикронной геометрией, ориентированный на расчёты эмиссионных процессов в условиях больших перепадов электрического поля. Комплекс позволяет качественно и количественно определять распределения электрического поля, плотности зарядов и разогрев в различных подобластях прибора и анализировать их влияние на его рабочие характеристики. Эффективность работы комплекса продемонстрирована на примере задачи вакуумной микроэлектроники о расчете эмиссионных характеристик кремниевого автокатодного микроузла реальной геометрии.

В проведённых с помощью комплекса численных экспериментах показано, что учёт разогрева неравновесных электронов, а также процессов ударной ионизации и реальной геометрии микро- или наноструктуры являются необходимыми условиями для адекватного численного анализа конкретных конфигураций ячеек автокатодов, а также их матриц. Созданный программный комплекс **MICRO_2D/3D** позволяет рассчитывать эмиссионные приборы на основе кремния любой реальной конфигурации и может быть включен в цикл промышленной разработки подобных устройств.

Результаты гл. 6 опубликованы в работах [А8, А11-А14, А17, А21, А23-А26, А34, А36, А42-А44, А46, А48, А49].

Глава 7

Моделирование процессов образования и миграции пор в межсоединениях электрических схем

В данной главе рассматриваются проблемы моделирования образования и миграции пор в межсоединениях электрических схем. Предложена математическая модель процессов, основанная на дрейфо-диффузионном приближении. Для анализа модели в случае плоской прямоугольной геометрии межсоединения построены монотонные консервативные конечно-разностные схемы, разработаны алгоритмы их численной реализации для персонального компьютера и многопроцессорных вычислительных систем. Тестирование разработанного подхода проведено на модельной задаче. В численных экспериментах показано, что модель качественно и количественно описывает основные физические процессы и может быть использована на этапе разработки новых микросхем.

7.1 Введение в проблему

Проблемы образования пор в металлах при различных физических воздействиях известны достаточно давно. Однако наибольшую актуальность они приобрели в прошлом веке в связи с началом массового использования электричества и резким подъемом в металлургии и машиностроении. С появлением и развитием электронных приборов процессы порообразования в металлических соединениях электрических схем стали одним из основных препятствий на пути разработки отказоустойчивых систем [500]. В современной микроэлектронике проблемы порообразования остаются актуальными в связи с переходом к производству приборов нанометрового диапазона, в котором даже незначительные дефекты материалов очень быстро приводят к разрушению, как отдельных схем, так и целых чипов. Поэтому в настоящее время ведущие производители микросхем вынуждены разрабатывать новые подходы к решению данной проблемы. Последнее

невозможно без проведения детальных исследований процессов образования пор и их миграции по проводящим линиям микросхем [500-508].

Систематическое исследование процессов порообразования в приложении к микроэлектронике началось в конце 50-х годов, то есть с начала массового производства и использования ЭВМ. Практически сразу было выяснено, что порообразование является следствием наличия в кристаллах твердых тел различных дефектов: вакансий атомов, объединений вакансий, дислокаций, межзеренных пустот, а также примесей других материалов (см. например, [31, 509-512]). С другой стороны, даже в идеальном кристалле могут проходить процессы разупорядочения межатомной структуры, если на него воздействует внешнее электромагнитное поле, тепло, механические напряжения, радиация. Соответственно, для предотвращения процессов порообразования следует использовать особо чистые материалы правильной структуры и минимизировать влияние внешних воздействий. К этому в итоге и пришла технология. Однако, исключить полностью все факторы невозможно, поскольку электрическая линия должна проводить ток определенного номинала, а значит, она будет нагреваться и деформироваться. Таким образом, электрическое, тепловое и механическое воздействия в любом случае будут способствовать разрушению кристаллической решетки материала линии. В этих условиях решение проблемы сводится к максимальному увеличению срока службы линии. Для примера отметим, что в современных электронных приборах срок службы отдельных электронных компонентов составляет не менее 10 лет. В приборах нового поколения, использующих наноструктуры и другие низкоразмерные объекты, такой уровень надежности пока не достигнут. Это связано с тем, что размеры компонент приближаются к межатомным расстояниям, а частоты (десятки гигагерц и выше) и удельная мощность сигналов очень высоки.

В настоящей работе был предложен один из возможных подходов к моделированию процессов образования и миграции пор в межсоединениях

электрических схем. Для этого разработана нелинейная математическая модель процессов, включающая стационарные уравнения для электрического поля, переноса тепла и упругих напряжений внутри слоистой среды, содержащей межсоединение, а также нестационарное уравнение диффузии для концентрации атомов металла в линии и межсоединении. Для примера выбрана плоская геометрия задачи. В качестве материала линии и межсоединения выступает медь с танталовой прокладкой по внешнему контуру (см. рис. 7.1).

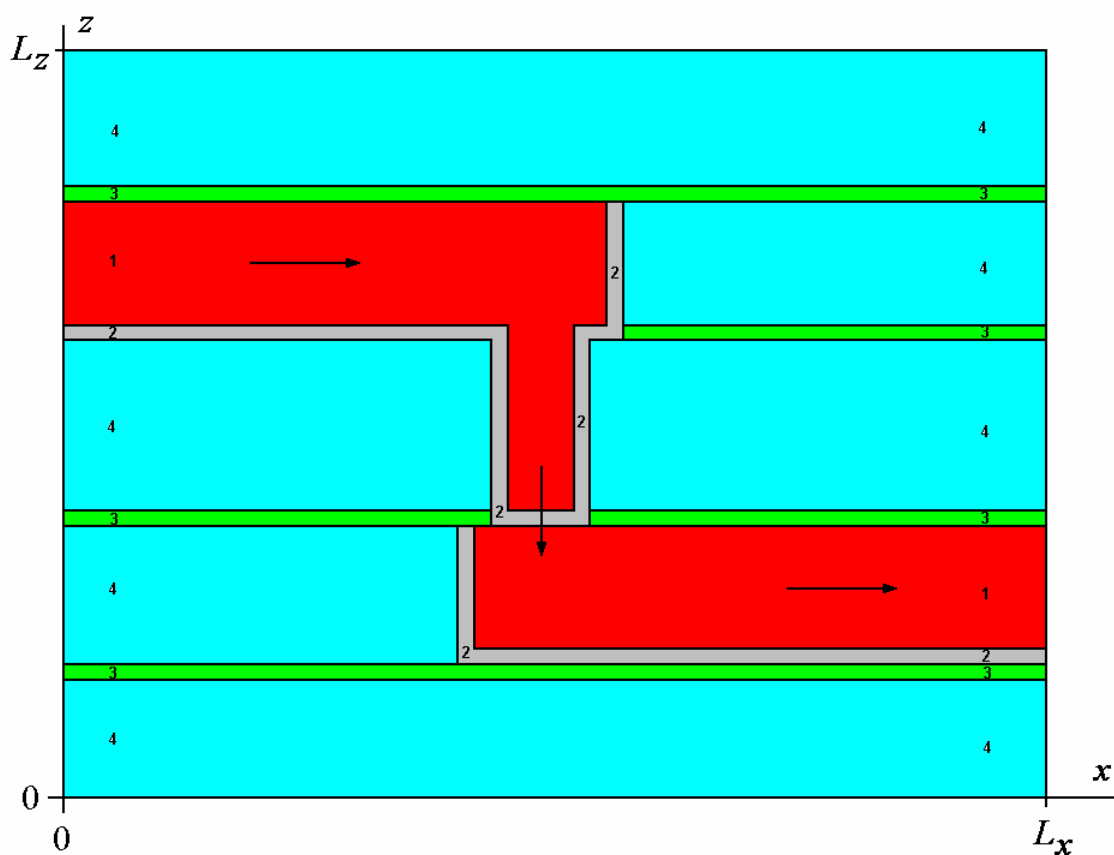


Рисунок 7.1. Пример соединения двух электрических линий внутри чипа. Цифрами 1, 2, 3, 4 и цветом обозначены включения меди, тантала, карбида кремния и композитного теплоизолятора. Стрелками обозначено направление протекания электрического тока.

Для выбранной постановки задачи построены монотонные консервативные конечно-разностные схемы, построенные с помощью интегроинтерполяционного подхода [188, 200]. Уравнения для потенциала электрического поля, температуры и компонент вектора смещений являются

эллиптическими и реализуются с помощью итераций по схеме сопряженных градиентов. Нестационарное уравнение диффузии аппроксимируется явной схемой. Для ее реализации используется чебышевское ускорение [513].

В случае решения задачи на многопроцессорной системе предлагается разбиение расчетной области на компактные прямоугольные фрагменты одинаковой мощности и применение параллельных вариантов итерационных методов (см. п. 2.3 гл. 2 и [374, 375]).

Тестирование разработанного подхода проведено на модельной задаче. В численных экспериментах показано, что модель качественно и количественно описывает основные физические процессы и может быть использована на этапе разработки новых микросхем.

7.2 Постановка модельной задачи

Анализ процессов образования и миграции пор проводился во множестве работ (см., например, [500-508]). Их можно условно разделить на несколько групп, связанных с типом и методами исследования математических моделей. К первому направлению отнесем экспериментально-теоретические исследования, в которых накапливалась информация об особенностях процесса и механизмах, которые необходимо учитывать в модели. К таким работам можно отнести ранние работы Канна и Хилларда [502] и др. В результате было показано, что процесс порообразования является не обычным диффузионным процессом. Его движущей силой является свободная энергия разупорядочения, порождаемая как минимум четырьмя факторами: электромагнитным полем, теплом, механическими напряжениями и химическими взаимодействиями на границе среды. К этому следует также добавить капиллярные явления.

Описание такого рода механизмов невозможно только в рамках диффузионно-дрейфового приближения. В связи с этим появились работы, которые предлагают в качестве модели брать задачу минимизации функционала полной энергии кристалла [503, 504] и решать ее методом

конечных элементов. Таким образом, сформировался подход, основанный на вариационных принципах. При этом для описания нелинейных капиллярных явлений было предложено использовать технику параметра порядка. Наиболее детально она проработана Дж. Сетьяном в [505]. Эту же методику удалось применить В.Я. Сухареву и в случае диффузионно-дрейфового приближения [506-508]. В том и другом случае имеется альтернатива – считать ли свободную поверхность поры бесконечно тонкой (острый интерфейс) или имеющей малую конечную толщину (диффузионный интерфейс). В качестве параметра порядка обычно выбирается некоторая функция, модуль которой совпадает с массовой долей вещества, в котором образуются поры.

В настоящей работе сделана попытка объединить несколько подходов. Следуя [506-508], модель основывается на диффузионно-дрейфовом приближении. Однако вместо феноменологических поправок в уравнение диффузии вводится вариация полной энергии кристалла (пространственные производные от полного термодинамического потенциала кристалла, включающего электрохимический потенциал, а также члены, описывающие термодиффузию и механические напряжения на поверхности поры). В результате уравнение диффузии включает пространственные производные вплоть до четвертого порядка. В качестве параметра порядка выбрана массовая доля меди, а не её модуль. Это позволяет наглядно и математически точно описать механизм быстрой диффузии на поверхности поры, а также изменения электрических, тепловых и механических свойств меди вблизи её поверхности. Процессы вблизи поверхности поры описываются с помощью модели диффузионного интерфейса [502].

В целом можно отметить, что в отличие от других подходов настоящая модель описывает все три стадии процесса порообразования: 1) докритическую, когда поры нет, но создаются условия для ее возникновения; 2) критическую, когда идет образование поры за конечное время; 3) посткритическую, на которой происходит эволюция поры (рост и

перемещение по кристаллу). При других подходах модель описывает либо только первую стадию, либо только третью, либо, первую и третью, минуя вторую (предполагается, что вторая стадия протекает мгновенно). Во всех случаях может потеряться часть информации, существенно влияющая на результат моделирования.

Выпишем систему основных уравнений в безразмерных переменных в квазистационарном плоском случае:

$$\operatorname{div} \mathbf{j} = 0, \quad \mathbf{j} = \sigma \mathbf{E}, \quad \mathbf{E} = -\nabla \varphi, \quad (x, z) \in \Omega, \quad (7.1)$$

$$\operatorname{div} \mathbf{q} = \gamma_0 (\mathbf{E}, \mathbf{j}), \quad \mathbf{q} = -k_T \nabla T, \quad (x, z) \in \Omega, \quad (7.2)$$

$$\operatorname{div} \boldsymbol{\sigma}_1 = 0, \quad v = 0, \quad \operatorname{div} \boldsymbol{\sigma}_3 = 0, \quad (x, z) \in \Omega,$$

$$\boldsymbol{\sigma}_k = (\sigma_{k1}, \sigma_{k2}, \sigma_{k3})^T \quad (k=1, 2, 3), \quad \mathbf{u} = (u, v, w)^T,$$

$$\sigma_{11} = (2\mu + \lambda) \frac{\partial u}{\partial x} + \lambda \frac{\partial w}{\partial z} - K\alpha, \quad \sigma_{12} = 0, \quad \sigma_{13} = \mu \left(\frac{\partial u}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial x} \right), \quad (7.3)$$

$$\sigma_{21} = 0, \quad \sigma_{22} = \lambda \left(\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial w}{\partial z} \right) - K\alpha, \quad \sigma_{23} = 0,$$

$$\sigma_{31} = \mu \left(\frac{\partial w}{\partial x} + \frac{\partial u}{\partial z} \right), \quad \sigma_{32} = 0, \quad \sigma_{33} = (2\mu + \lambda) \frac{\partial w}{\partial z} + \lambda \frac{\partial u}{\partial x} - K\alpha,$$

$$\frac{\partial C}{\partial t} = -\operatorname{div} \mathbf{W}, \quad \mathbf{W} = -D\nabla C + \bar{D}\nabla \Phi, \quad (x, z) \in \Omega_1, \quad t > 0. \quad (7.4)$$

Здесь \mathbf{j} , σ , \mathbf{E} и φ соответственно плотность электрического тока, нелинейная проводимость среды, напряженность и потенциал электрического поля, div и ∇ операторы дивергенции и градиента в декартовых координатах (x, z) , $\Omega = [0, L_x] \times [0, L_z]$ – расчетная область с линейными размерами L_x , L_z ; \mathbf{q} , k_T , T – тепловой поток, коэффициент температуропроводности, температура, γ_0 – безразмерный параметр, (\cdot, \cdot) – скалярное произведение в пространстве переменных (x, z) ; $\boldsymbol{\sigma}_k$ – вектор-столбцы, составляющие тензор термоупругих напряжений, \mathbf{u} – вектор смещений, μ , λ и K – безразмерные коэффициенты Ламэ и модуль всестороннего сжатия тела, α – функция нагрузки, возникающей при тепловом расширении тела и изменении его массового состава; C – массовая

доля (нормированная концентрация) меди, t – время, \mathbf{W} – полный диффузионный поток, D и \bar{D} – нелинейные коэффициенты диффузии, зависящие от C и T , $\Phi = \Phi(\varphi, C, T, H)$ – обобщенный термо-динамический потенциал (H – след тензора термоупругих напряжений), Ω_1 – подобласть Ω , занятая медью и порами.

Граничные и начальные условия имеют следующий вид:

$$j_x(0, z) = j_0, \quad j_x(L_x, z) = j_1, \quad \int_0^{L_z} j_0 dz = \int_0^{L_z} j_1 dz = I_0, \quad (7.5)$$

$$j_z(x, 0) = 0, \quad j_z(x, L_z) = 0, \\ T = T_1, \quad (x, z) \in \partial\Omega, \quad (7.6)$$

$$u = 0, \quad (\boldsymbol{\sigma}_3 \cdot \mathbf{n}) \equiv -\sigma_{31} = 0, \quad x = 0, \\ u = 0, \quad (\boldsymbol{\sigma}_3 \cdot \mathbf{n}) \equiv +\sigma_{31} = 0, \quad x = L_x, \quad (7.7) \\ (\boldsymbol{\sigma}_1 \cdot \mathbf{n}) \equiv -\sigma_{13} = 0, \quad w = 0, \quad z = 0, \\ (\boldsymbol{\sigma}_1 \cdot \mathbf{n}) \equiv +\sigma_{13} = 0, \quad (\boldsymbol{\sigma}_3 \cdot \mathbf{n}) \equiv +\sigma_{33} = 0, \quad z = L_z,$$

$$C|_{t=0} = C_{i1}, \quad (x, z) \in \Omega_1, \\ C = C_{i1}, \quad (x, z) \in \partial\Omega_1 \cap \partial\Omega, \quad (7.8) \\ (\mathbf{W}, \mathbf{n}) = 0, \quad (x, z) \in \partial\Omega_1, \quad (x, z) \notin \partial\Omega.$$

Здесь j_k – плотности тока на металлических поверхностях, выходящих на боковые границы расчетной области, I_0 – суммарный ток, протекающий через систему, T_1 – температура чипа, C_{i1} – равновесная массовая доля (концентрация) меди.

Сделаем несколько замечаний относительно постановки задачи.

Во-первых, коэффициенты уравнений (7.1)-(7.4) разрывны и нелинейным образом зависят от температуры и массовой доли меди. Конкретный вид используемых зависимостей весьма разнообразен и определяется условиями моделируемого физического эксперимента и параметрами электрической схемы.

Во-вторых, обобщенный термодинамический потенциал Φ зависит не только от самой массовой доли меди, но и от её пространственных

производных до второго порядка включительно. В общем случае его можно записать следующим образом:

$$\Phi(\varphi, C, T, H) = \sum_{j=0}^m a_j C^j + b_1 \varphi + b_2 \Delta C - b_3 \ln T - b_4 \frac{\partial H}{\partial C}, \quad (7.9)$$

где m, a_j, b_j – числовые константы, Δ – оператор Лапласа. Ввиду сказанного к граничным условиям (7.8) необходимо добавить также дополнительные условия. На наш взгляд наиболее естественными будут условия отсутствия изменения свободной энергии на внутренних и внешних границах медных проводников, т. е.

$$\sum_{j=0}^m a_j C^j + b_2 \Delta C = 0, \quad (x, z) \in \partial\Omega_1. \quad (7.10)$$

Условия (7.10) отвечают физике процесса, поскольку степень сродства меди и тантала очень мала. Поэтому на границе медь-тантал медь в тантал не проникает и не деформирует его поверхность. На границе же медь-карбид кремния напротив подобная ситуация возможна. Однако ее учет сильно усложняет модель. В общем случае необходимо добавить уравнение для массовой доли карбида кремния и решать задачу со свободной границей.

В данной работе эта ситуация не рассматривается по двум причинам. Во-первых, существуют различные технические приемы устранения так называемой экструзии (выдавливания) меди в карбид кремния (например, покрытие свободной границы меди сначала специальным лаком, а затем напыление на нее карбида кремния), которые обязательно применяются при создании современных чипов. Во-вторых, рассмотрение данного эффекта существенно повышает вычислительные затраты, однако не влияет на основной процесс порообразования. В-третьих, задача для электрического потенциала поставлена в режиме генерации постоянного тока (см. дополнительное условие в (7.5)). Для обеспечения её корректности необходимо согласованным образом задавать значения плотности тока $j_0(z), j_1(z)$ (которые в общем случае неизвестны) на границах медных

участков. В приведенной постановке данная проблема обходится следующим образом.

На краю линии, куда идут электроны и атомы меди (сечение $x = 0$ на рис. 7.1), ситуация близка к равновесной, и проводимость среды как в меди, так и в других материалах не изменяется со временем. Поэтому плотность тока можно задать кусочно постоянной функцией вида:

$$j_0(z) = \begin{cases} \frac{I_0 \sigma_{Cu}}{h_{Cu}(\sigma_{Cu} + \sigma_{Ta})}, & \text{на границе меди,} \\ \frac{I_0 \sigma_{Ta}}{h_{Ta}(\sigma_{Cu} + \sigma_{Ta})}, & \text{на границе тантала,} \\ 0, & \text{на границе других материалов.} \end{cases} \quad (7.11)$$

Здесь h_{Cu} , h_{Ta} , σ_{Cu} , σ_{Ta} – суммарные толщины и равновесные проводимости слоев меди и тантала на границе области. Формула (7.11) выражает линейный закон Ома. Интеграл от такой плотности тока равен величине I_0 .

На правом краю линии (сечение $x = L_x$ на рис. 7.1, 7.2) в зависимости от геометрии задачи могут реализоваться две ситуации. Первая из них соответствует случаю, когда правый край линии полностью изолирован танталом (рис. 7.2).

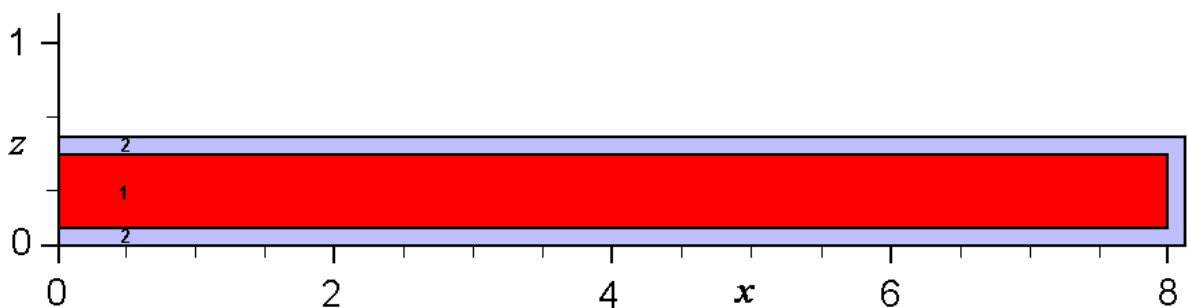


Рисунок 7.2. Симметричный фрагмент электрической линии. Красным и серым цветами обозначены включения меди и тантала. Размеры здесь и далее указаны в микронах.

Тогда плотность тока $j_1(z)$ постоянна, и ее можно задать по формуле, аналогичной (7.11), а именно:

$$j_1(z) = \begin{cases} \frac{I_0}{h_{Ta}}, & \text{на границе тантала,} \\ 0, & \text{на границе других материалов.} \end{cases} \quad (7.12)$$

Во втором случае, когда медь выходит на правый край (рис. 7.1), можно использовать нелинейный интегральный вариант формулы (7.11), в котором проводимость меди σ_{Cu} зависит от ее массовой доли в данной точке z . В результате мы получим:

$$j_1(z) = \begin{cases} \frac{I_0 \sigma_{Cu}(z)}{h_{Cu} \left(\frac{1}{h_{Cu}} \int \sigma_{Cu}(z') dz' + \sigma_{Ta} \right)}, & \text{на границе меди,} \\ \frac{I_0 \sigma_{Ta}}{h_{Ta} \left(\frac{1}{h_{Cu}} \int \sigma_{Cu}(z') dz' + \sigma_{Ta} \right)}, & \text{на границе тантала,} \\ 0, & \text{на границе других материалов.} \end{cases} \quad (7.13)$$

Формулу (7.13) можно использовать в случае применения расщепления по физическим процессам (именно оно является основой приводимой ниже численной схемы). В другой ситуации для реализации граничного условия необходим внешний итерационный процесс.

Отметим далее, что для организации сквозного счета в случае сложной геометрии задачи и моделирования возможной утечки тока через приповерхностные слои карбида кремния и композитного теплоизолятора предполагается, что слабый электрический ток может течь в любой точке расчетной области. Это означает, что проводимость всех материалов может быть очень малой, однако она отлична от нуля, в том числе в порах. Последнее предположение часто используется при моделировании подобных задач и не вносит обычно большой ошибки в результаты расчетов. Основная цель данного приема – избежать введения свободных границ. Приводимые ниже результаты моделирования показывают, что в данной задаче это вполне оправдано и не мешает образованию и эволюции пор.

7.3 Численный алгоритм и параллельная реализация

Численное решение задачи (7.1)-(7.13) осуществлялось методом конечных разностей на прямоугольных адаптивных пространственных сетках. Для этого с помощью интегро-интерполяционного подхода были построены нелинейные однородные консервативные разностные схемы для основных уравнений системы (7.1)-(7.4). Перед этим предварительно уравнения (7.1) были сведены к одному уравнению Пуассона для потенциала электрического поля, уравнения (7.2) – к уравнению теплопроводности для температуры, уравнения (7.3) к двум уравнениям для компонент вектора смещения u, w , уравнения (7.4) к нестационарному уравнению диффузии для массовой доли меди.

Поскольку задача в целом является нелинейной и нестационарной, то уравнение диффузии реализовывалось с помощью явной схемы по времени. При этом осуществлялось естественное расщепление по физическим процессам. А именно, поскольку возмущение моделируемого объекта происходит путем включения электрического тока, который запускает механизм электронного и атомного дрейфа в меди, инициирует нагрев проводников (медь и тантал), порождающий упругие деформации всей среды, то на каждом шаге по времени сначала решается уравнение для потенциала электрического поля, затем решается уравнение теплопроводности, далее уравнения термоупругости, и, наконец, уравнение диффузии атомов меди. Таким образом, удается разрешить проблему сильной нелинейности системы основных уравнений. Поскольку процесс порообразования является более медленным (в десятки тысяч раз), чем изменение потенциала электрического поля, распространение тепла в среде и установление механических напряжений, то данная схема расщепления является сходящейся и наиболее экономичной по сравнению с другими, в том числе полностью неявными алгоритмами.

Выпишем теперь построенные разностные уравнения в безиндексной форме.

$$\Lambda_x[\sigma_h]\varphi_h + \Lambda_z[\sigma_h]\varphi_h = 0, \quad (7.14)$$

$$\Lambda_x[k_{T,h}]T_h + \Lambda_z[k_{T,h}]T_h = -\gamma_0\sigma_h|\nabla_h\varphi_h|^2, \quad (7.15)$$

$$\Lambda_x[2\mu_h + \lambda_h]u_h + \Lambda_{xz}[\lambda_h]w_h = 0, \quad \Lambda_{xz}[\mu_h]u_h + \Lambda_z[2\mu_h + \lambda_h]w_h = 0, \quad (7.16)$$

$$\frac{\hat{C}_h - C_h}{\tau} = \Lambda_x[D_h]C_h + \Lambda_z[D_h]C_h - \Lambda_x[\bar{D}_h]\Phi_h - \Lambda_z[\bar{D}_h]\Phi_h, \quad (7.17)$$

$$C_h|_{t=0} = C_{i1},$$

$$\Phi_h = \sum_{j=0}^m a_j C_h^j + b_1 \varphi_h + b_2 (\Lambda_x[1]C_h + \Lambda_z[1]C_h) - b_3 \ln T_h - b_4 \frac{\partial H_h}{\partial C_h}. \quad (7.18)$$

Здесь $\Lambda_\alpha[\cdot]$ ($\alpha = x, z$) – обычные аппроксимации одномерных операторов диффузии с переменными разрывными коэффициентами на неравномерной пространственной сетке; $\Lambda_{xz}[\cdot]$ – аппроксимации смешанных производных на семиточечном шаблоне, предложенные в [188, 198, 200]. Входящие в (7.14)-(7.18) обозначения с индексом h суть сеточные аналоги соответствующих непрерывных функций.

Отметим далее, что проблема разрывности коэффициентов уравнений поставленной задачи решается путем выбора соответствующих интегральных аппроксимаций $\sigma, k_T, \mu, \lambda$. Подробно эта методика описана в [188, 200]. Погрешность аппроксимации и точность построенных разностных схем в сеточной норме $L_2(\omega_x \times \omega_z) \times C(\omega_t)$ имеет порядок $O(\hbar_x^2 + \hbar_z^2 + \tau)$, что легко доказывается.

Разностное уравнение диффузии (7.17) с учетом формулы (7.18) решается прямым методом. Остальные уравнения решаются с помощью итерационных методов сопряженных и бисопряженных градиентов с переобуславливанием (см. п. 2.3 гл 2 и [374, 375]). В частности, уравнения (7.14) и (7.15) с учетом краевых и дополнительных условий приводят к системам линейных уравнений с симметричной положительно определенной матрицей. Для их решения на прямоугольной сетке лучше всего использовать либо метод переменных направлений, либо сопряженные градиенты с переобуславливателем в виде неполного разложения Холецкого. В данной

работе был выбран второй вариант.

Разностные уравнения (7.16) рассматривались в совокупности (в векторном виде). Получаемая при этом матрица системы линейных уравнений получается блочной (с размером блока 2×2) положительно определенной и кососимметричной. Последнее обстоятельство сильно затрудняет выбор метода для решения такой системы уравнений. В данной работе использовалась схема бисопряженных градиентов с предобуславливателями двух типов – диагональным и в виде блочного разностного оператора Лапласа. В первом случае скорость сходимости оказывается в несколько раз ниже, чем во втором. Однако область параметров задачи, при которых метод сходится, оказывается несколько шире.

Приведенная численная схема относительно проста для компьютерной реализации. Ее недостатком является лишь сильное ограничение на шаг по времени. В данном случае условие Куранта имеет вид:

$$\tau \leq \tau_0 = c_1 \hbar^2 + c_2 \hbar^4. \quad (7.19)$$

Параметры c_k в (7.19) зависят от решения, вследствие чего, шаг действительно может изменяться от одной асимптоты к другой.

Последнее обстоятельство побудило искать другие алгоритмы решения задачи. Один из них – применение нелинейной неявной схемы. Однако этот подход не решает проблему. При его реализации возникает более широкий шаблон в разностных уравнениях (7.16)-(7.18), существенно возрастают вычислительные затраты и размер необходимой оперативной памяти, и, главное, условие (7.19) становится необходимым условием сходимости итераций по нелинейности. Таким образом, полностью неявный алгоритм не дает существенного выигрыша при решении задачи.

Другая возможность (которая и была впоследствии выбрана) – применение к построенной явной схеме процедуры ускорения по Чебышову-Лебедеву [513]. В этом случае для перехода на новый слой по времени

проводится серия шагов $\left\{ t_j = t_0 + \sum_{m=1}^j \tau_m, j = 1, \dots, 2^p \right\}$ длины 2^p

($p = 1, 2, \dots, p_{\max}$), в которой используются чебышовские параметры $\tau_m = \tau_0 \cdot \rho_m$. В итоге, условие Куранта существенно ослабляется (в 2^p раз). В реальных расчетах достигалось ускорение от 2 до 1024 раз. Ограничением данного подхода является предел p_{\max} , который связан с условием асимптотической устойчивости схемы и с особенностями решения нелинейной задачи. В частности, когда реализуется очень контрастная структура, каковой и является пора, большое ускорение может уже и не достигаться из-за нарушения условия монотонности разностного решения (массовая доля меди должна всегда находиться в пределах между 0 и 1). Однако в большинстве расчетов момент начала образования поры является условием окончания вычислений, поскольку исследователей интересует время, за которое накопится достаточное для образования поры количество вакансий.

При параллельной реализации численного алгоритма следует отметить, что данная задача обладает рядом особенностей, которые накладывают ограничения на возможность эффективного распараллеливания. Во-первых, это умеренный объем сеточных данных, поскольку задача двумерная, а условие Куранта достаточно жесткое. Во-вторых, это сильная связанность уравнений вследствие нелинейности. В итоге, на практике оказалось, что наиболее эффективное решение данной задачи можно осуществить при использовании МВС с общей памятью. Наиболее жестко это требование к архитектуре проявляется при реализации схемы Чебышовского ускорения и контроля точности вычислений.

Опишем кратко схему распараллеливания. В ее основе лежит метод разделения области на компактные фрагменты с одинаковой вычислительной мощностью. Поскольку разностная схема оказалась однородной благодаря введению единых механизмов нелинейности, то учитывать вычислительную нагрузку на узел расчетной сетки не обязательно. Достаточно разделить исходную сетку на связные блоки с примерно одинаковым числом узлов.

Однако большой проблемой является использование одновременно

двух разбиений сетки. Одно используется для всей расчетной области при решении уравнений для электрического поля, температуры и вектора смещений. Второе разбиение касается только медной части среды, где решается уравнение диффузии. При этом в зависимости от конкретной геометрии расчетной области отдельные ее части, содержащие медь, могут быть несвязными (см., например, рис. 7.1).

В этой ситуации необходимо построить сначала разбиение медных участков на фрагменты, а затем присоединить к ним другие участки среды. Простой способ для реализации данной идеи состоит в следующем. Необходимо представить пространственную сетку в виде множества Ω элементарных прямоугольных ячеек вида

$$\Omega_{ij} = [x_{i-1}, x_i] \times [z_{k-1}, z_k] \quad (i = 1, N_x, k = 1, N_z),$$

и назначить каждой ячейке атрибут материала m_{ij} , содержащегося в ней.

Далее необходимо составить граф связности множества ячеек $\Omega_{Cu} = \{(i, j) : m_{ij} = m_{Cu}\}$, содержащих медь, и разбить его на p частей $\Omega_{Cu}^{(k)}$ (где p – число процессоров). Оставшиеся ячейки $\Omega / \Omega_{Cu} = \{(i, j) : m_{ij} \neq m_{Cu}\}$ нужно добавлять к уже имеющемуся разбиению, руководствуясь принципом геометрической близости добавляемой ячейки к тому или иному множеству $\Omega_{Cu}^{(k)}$ и равной мощности всех частей разбиения. При реализации разбиения медных участков на фрагменты можно использовать пакет PARMETIS [382].

После построения соответствующих разбиений расчетной области следует выбрать методику распараллеливания алгоритма на отдельных этапах решения задачи. В данном случае речь идет о параллельной реализации итерационных алгоритмов решения эллиптических уравнений и уравнения диффузии по явной схеме. Ввиду сложности задачи в целом для первого этапа было предложено использовать внешний итерационный процесс (то есть метод итераций Шварца). Тогда процедура решения любого из уравнений (7.14)-(7.16) состоит в том, что в каждой подобласти, обрабатываемой одним процессором, задается начальное приближение к

решению и проводится цикл итераций внутри данной подобласти. При этом используется тот же итерационный метод, что и в однопроцессорном варианте. Как только каждый процессор получает решение с нужной точностью, производится коллективный обмен граничными значениями и вычисление глобальной невязки. Если невязка мала, то вычисления заканчиваются. Если нет – они продолжаются в том же порядке до получения решения с нужной точностью. Заметим, что реализация данной итерационной схемы приводит к большим накладным расходам на системах с отдельной оперативной памятью. Поэтому ее лучше использовать в кластерах с общей памятью и многоядерными процессорами.

Распараллеливание явных формул на этапе решения уравнения диффузии не представляет больших проблем, но имеет свои особенности. Дело в том, что после каждого шага по времени в процедуре Чебышевского ускорения необходимо проверять выполнение принципа максимума, а именно, принадлежность области изменения функции \hat{C}_h интервалу $(0,1)$, а также пересчету условия Куранта (7.19). В итоге это также ведет к интенсивным коллективным обменам данными. Поэтому и вторая часть алгоритма наиболее эффективно реализуется на SMP-системах с общей памятью.

Тестирование разработанного алгоритма проводилось на SMP-системе IBM P670, установленной в МСЦ РАН, с максимальным количеством процессоров на общей памяти – 16. В расчетах на максимальной конфигурации эффективность распараллеливания достигала 87-89 % при числе узлов сетки около 1.5 млн. узлов. Проведение тех же расчетов на кластере Intel Xeon IV с двухядерными процессорами (по 2 процессора на модуль) показало, что эффективность расчетов на той же сетке выходит на уровень 65 % для конфигурации 16 ядер.

7.4. Результаты моделирования

Тестирование разработанных численных алгоритмов и программ

проводилась в нескольких направлениях. Во-первых, необходимо было выяснить реальную точность расчетов. Во-вторых, определить потенциальные возможности анализа сложных конфигураций.

Для достижения первой цели использовался простейший тест, описывающий процессы в геометрически симметричном элементе проводящей линии (см. рис. 7.2). Выбранный фрагмент линии имел длину 8 мкм, толщину 0.6 мкм, на краях линии имеется слой тантала толщиной 0.1 мкм с каждой стороны. Слева слой меди оголен, справа он закрыт танталом. Предполагалось, что в начальный момент фрагмент линии не имеет каких-либо дефектов, то есть количество вакансий и атомов меди равны своим равновесным значениям во всем объёме линии. Для примера в тесте равновесная массовая доля меди равна 0.98. Электрический ток включался мгновенно. Величина тока равна $3 \cdot 10^9$ пкА, что соответствует условиям тестирования чипов. Температура линии при тестировании составляет 628 К, температура плавления меди лежит вблизи 673 К. Длина диффузии в численном эксперименте полагалась равной 10 нм, что соответствует экспериментальным данным. Соответственно, она же является шириной пограничного слоя между танталом и медью, где и зарождаются поры.

Расчеты процессов рождения и эволюции пор в указанной выше структуре проводились на последовательности прямоугольных сеток с числом узлов $(250n_r + 1) \cdot (60n_r + 1)$, где $n_r = 1, 2, 3, 4, 5$ – параметр измельчения, численно равный количеству точек сетки внутри пограничного слоя. Сетка по координате x была адаптивной и сгущалась к правому концу линии. Сетка по координате z была равномерной.

Результаты расчетов эволюции массовой доли меди вблизи правого края линии представлены на рис. 7.3. Они показывают, что под действием электрического тока неравновесные вакансии атомов меди скапливаются, прежде всего, в углах правой части линии и образуют две поры (рис. 7.3а). Далее эти поры начинают расти навстречу друг другу вдоль вертикального танталового слоя (рис. 7.3б-7.3д) и наконец объединяются в одну большую

пору (рис. 7.3е), которая перекрывает путь электрическому току в меди.

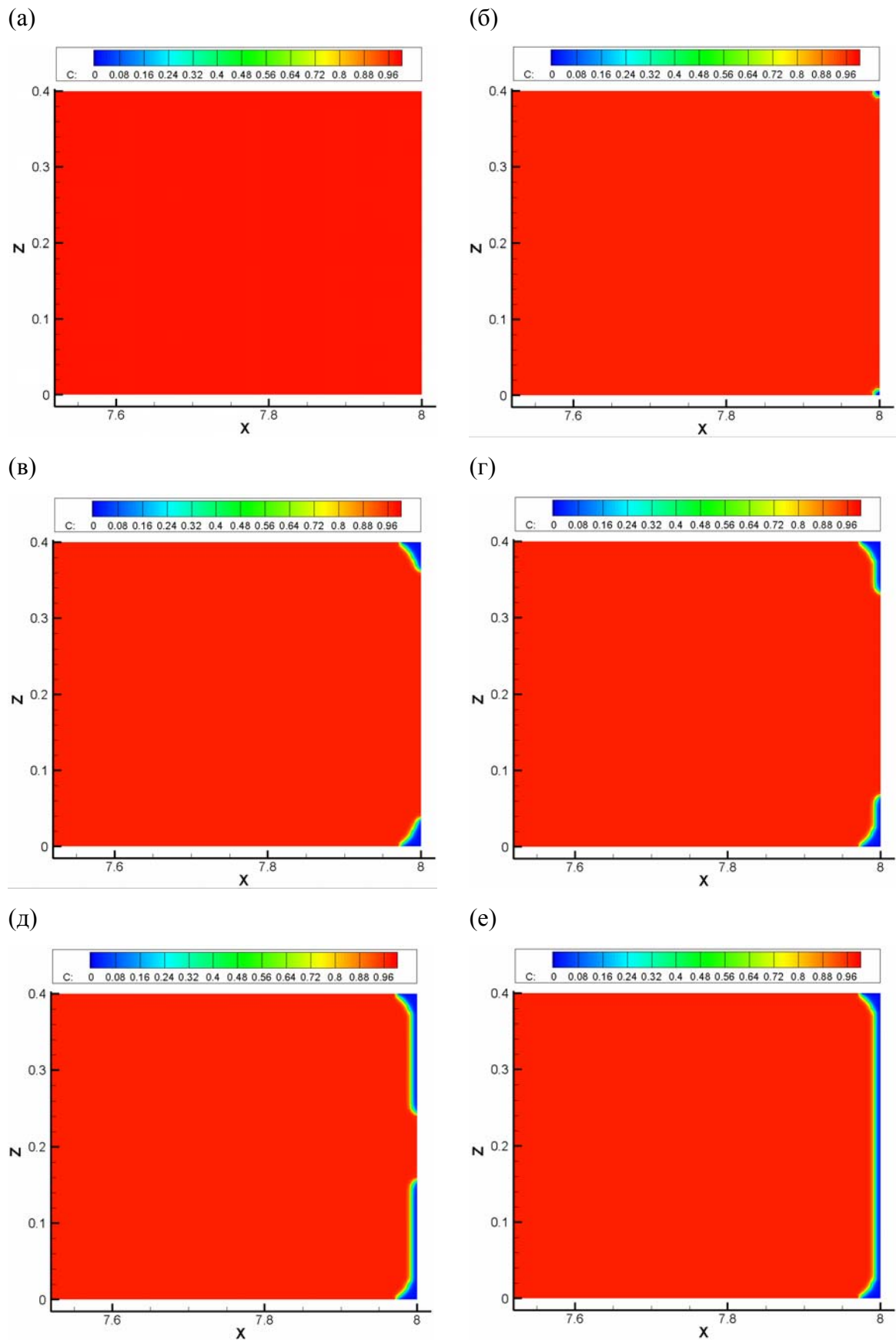


Рисунок 7.3. Распределение массовой доли меди вблизи правого конца линии в моменты времени $t = 0, 27.08, 29.84, 33.68, 47.15, 49.17$ сек. (а-е).

На рис. 7.4, 7.5 показаны изолинии модуля тока и температуры в начале процесса рождения поры и после завершения ее формирования. В начале процесса порообразования ток вблизи правого края линии течет как по танталу (малая часть), так и по приповерхностному слою меди (основная часть). После образования поры путь электрическому току по меди постепенно перекрывается. В итоге, ток вблизи правого края линии течет по танталу (см. рис. 7.4б), сопротивление которого на полтора порядка выше, чем у меди. В результате интегральное сопротивление линии существенно увеличивается, что и приводит к негативным последствиям (неправильная работа чипа или полный выход его из строя). Увеличивается также и разогрев линии вблизи поры (рис. 7.5). В данном случае он невелик, однако в другой ситуации (например, при комнатной температуре) влияние термодиффузии [512] может быть ускоряющим фактором роста поры.

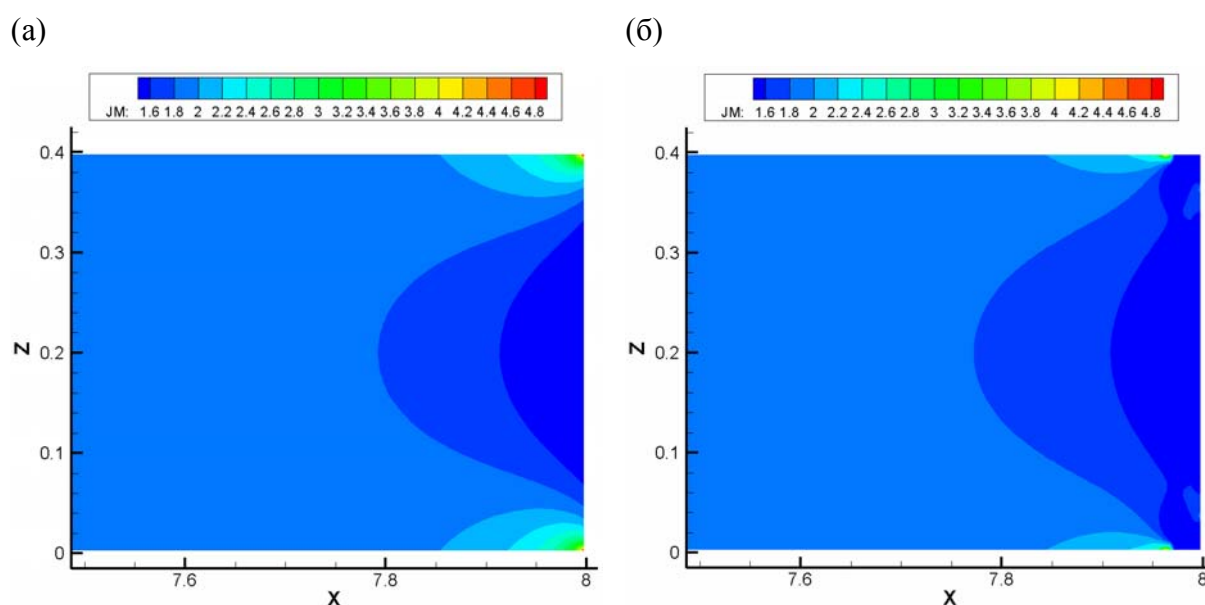


Рисунок 7.4. Распределение модуля тока вблизи правого конца линии до рождения поры (а) и в финале ее эволюции (б).

Относительно точности вычислений по результатам данного теста можно сказать следующее. Параметры метода выбирались таким образом, чтобы получаемые распределения электрического поля, температуры,

гидростатических напряжений и массовой доли меди были симметричны относительно оси $z = 0.2$. Этого можно достичь при определенном условии на шаг по времени и количестве точек в пограничном слое n_r , не менее 2. На приведенных рисунках видно, что распределения основных характеристик процесса симметричны относительно указанной оси.

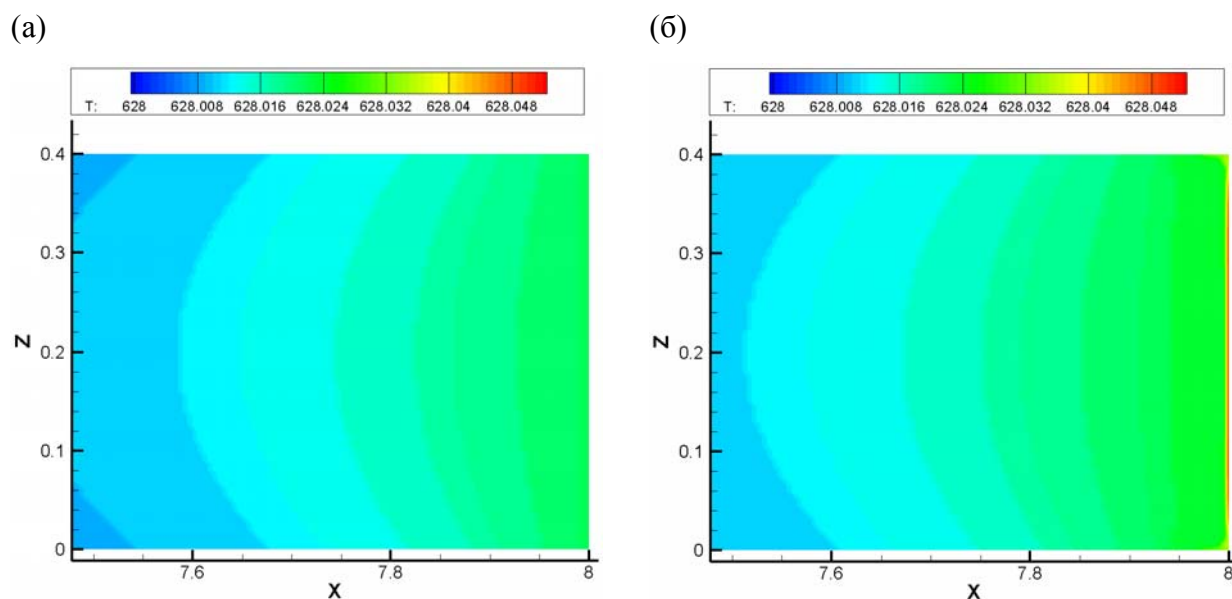


Рисунок 7.5. Распределение температуры вблизи правого конца до рождения поры (а) и в финале ее эволюции (б).

Еще одна характеристика, по которой контролировалась точность – время появления пор t_{void} . По мере измельчения сетки это время должно стремиться к фиксированной величине. В приведенных расчетах для $n_r = 1, 2, 3, 4, 5$ $t_{void} = 25.83, 26.58, 27.14, 27.42, 27.52$ сек. Таким образом, расчеты демонстрируют сходимость по сетке.

Отметим далее, что конкретные времена образования пор связаны со многими параметрами, в том числе, с равновесной долей вакансий в линии. Обычно она составляет 0.0001-0.000001. Поэтому в натуральных экспериментах процесс порообразования может протекать в течение несколько часов или даже суток. В представленных расчетах равновесная доля вакансий была выбрана равной 0.02 для уменьшения вычислительных затрат. Однако на практике и такая ситуация может возникнуть, если моделируется

завершающая фаза процесса порообразования (то есть начало расчета совпадает с началом зарождения поры).

Другой тест был проделан для того, чтобы продемонстрировать возможность расчета сложных конфигураций. Геометрия структуры была подобна приведенной на рис. 7.1. В реальной ситуации наиболее уязвимым местом электрической цепи является так называемое межсоединение двух линий (на рис. 7.1 оно расположено вертикально в центре структуры). Межсоединение имеет малую толщину по сравнению с толщиной линии, и по нему течет максимальный ток. На рис. 7.6 показана конфигурация межсоединения до образования поры (рис. 7.6а) и в финале ее эволюции (рис. 7.6б). Как видно из рисунка, пора перекрыла полностью медную часть межсоединения. На рис. 7.7 приведены изолинии модуля электрического тока до образования поры и после завершения ее эволюции. Они также показывают, что пора перекрывает основной канал прохождения тока (рис. 7б). Слева и справа от медной части межсоединения в тантале образовались два шнура тока, которые существенно меняют интегральное сопротивление линии и потенциально могут привести к ее обрыву. Таким образом, расчет реальной конфигурации позволяет не только оценить время порообразования, но и указать потенциально узкие места электрических цепей. Эту информацию можно использовать при проектировании чипов.

Далее следует отметить, что на базе представленной математической модели и численного алгоритма её анализа по заказу компании LSI Logic Incorporation (США) совместно с Г.М. Кобельковым, С.Г. Кобельковым и И.В. Поповым был разработан комплекс параллельных программ **VOID_2D/3D**, предназначенный для промышленного моделирования. Помимо изложенного численного подхода в него была включена трёхмерная модель, базирующаяся на методе конечных элементов. Программная реализация расчётного ядра была выполнена на языке Fortan с использованием интерфейса MPI. Управляющая среда и система визуализации были реализованы на языке TCLTK и C++. Программный

комплекс функционирует под управлением ОС Windows, Linux, Solaris.

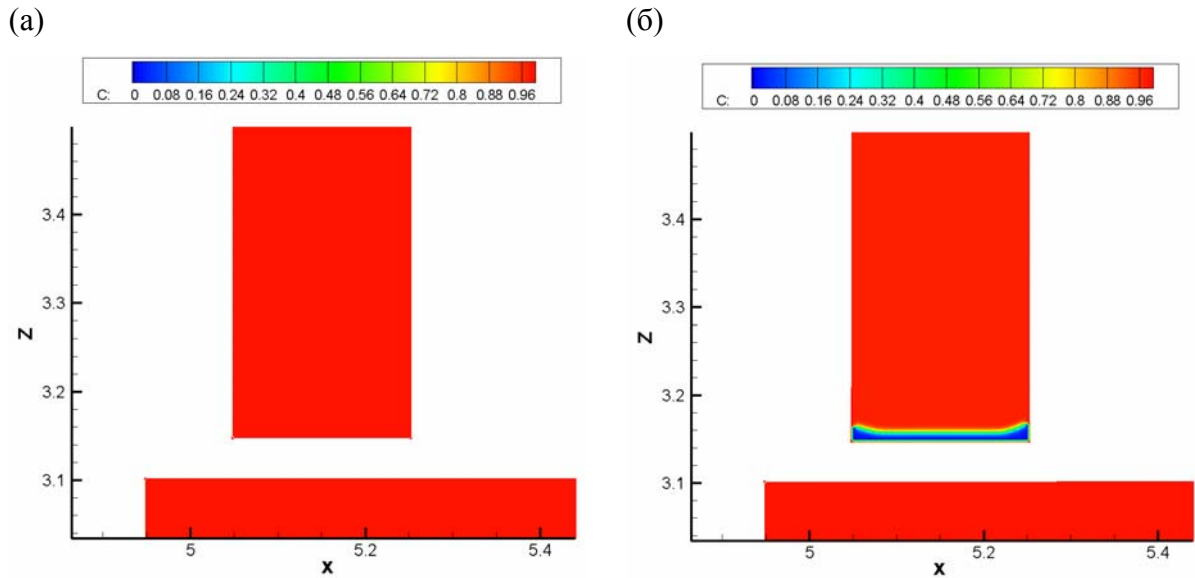


Рисунок 7.6. Распределение массовой доли меди в межсоединении до рождения поры (а) и в финале ее эволюции (б).

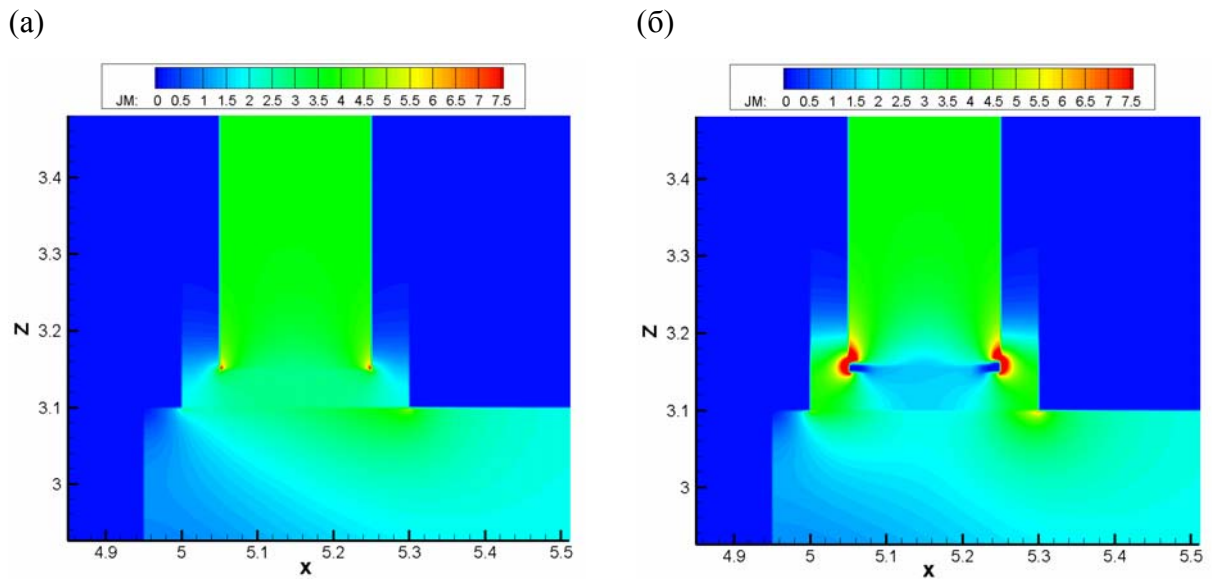


Рисунок 7.7. Распределение модуля тока в межсоединении до рождения поры (а) и в финале ее эволюции (б).

В заключение главы отметим, что в этой части совместно с В.Я. Сухаревым и Jun Cho Choy (оба из LSI Logic Incorporation) была разработана новая физико-математическая модель процессов образования и миграции пор в межсоединениях электрических схем. Модель базируется на диффузионно-дрейфовом приближении и включает в себя квазистационарные уравнения

электродинамики и термомеханики. Квантово-механическое описание процессов образования пор включается в модель с помощью метода параметра порядка и добавления вариации свободной энергии в химический потенциал системы.

Для анализа разработанной математической модели были построены нелинейные консервативные однородные разностные схемы на адаптивных прямоугольных сетках. Для их реализации предложены итерационные процессы на базе схем сопряженных и бисопряженных градиентов и явная схема по времени. Для ускорения вычислений по явной схеме применена процедура Чебышева-Лебедева. Для расчетов больших конфигураций разработан параллельный алгоритм решения задачи на основе метода Шварца разделения области. Предложен алгоритм двойного разбиения области на компактные фрагменты.

На основе разработанных численных алгоритмов и комплекса программ проведены модельные расчеты. В них подтверждена как робастность предложенных численных методов, так и адекватность результатов физическим процессам, происходящим в электрических линиях субмикронной толщины. В частности, удалось рассчитать все стадии процесса порообразования от начала скопления вакансий вблизи межсоединений до образования полного разрыва линии. В расчетах также подтвержден скачкообразный характер порообразования, продемонстрирована возможность количественной оценки отказа, как конкретной линии, так и чипа в целом.

Результаты гл. 7 опубликованы в работе [A41] и отчётах LSI Logic Incorporation.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В заключение сформулируем положения диссертации, которые выносятся на защиту:

1. На основе анализа состояния научных исследований в области твердотельной и вакуумной микро- и наноэлектроники разработаны вычислительные основы математического моделирования с помощью многопроцессорных вычислительных систем нескольких актуальных для приложений классов задач.
2. Развита математическая модель электронной эмиссии с поверхности кремниевых микро- и наноструктур и электро-, термо- и стресс-миграции пор в медных межсоединениях электронных схем.
3. Разработаны конечно-объемные схемы экспоненциальной подгонки для решения начально-краевых задач для эволюционных уравнений на ортогональных и нерегулярных треугольных и тетраэдральных сетках.
4. Предложены методика регуляризации и численные алгоритмы решения пространственно нуль-мерных и одномерных нелокально нелинейных некорректных математических задач, моделирующих электронные процессы в наноструктурах.
5. Разработаны параллельные алгоритмы решения задач электронного транспорта в полупроводниковых твердотельных и вакуумных микро- и наноструктурах, в том числе, алгоритмы распараллеливания явных и неявных конечно-объемных схем на нерегулярных сетках для решения системы квазигидродинамических уравнений, описывающих динамику электронно-дырочной плазмы, а также алгоритм решения, включающий динамическую балансировку загрузки вычислителей, нелокально нелинейной задачи одномерного электронного транспорта в канале наноструктуры.
6. Созданы комплексы параллельных программ **MICRO_2D/3D** и **VOID_2D/3D** для моделирования процессов электронной эмиссии с

поверхности кремниевых автокатодов и электро-, термо- и стресс-миграции пор в медных межсоединениях электронных схем.

7. С помощью разработанных вычислительных методик и комплексов программ методами математического моделирования и вычислительного эксперимента получены новые результаты в исследовании процессов низкотемпературного примесного пробоя в полупроводниках типа GaAs, одномерного электронного транспорта в наноструктурах на основе AlGaAs, автоэлектронной эмиссии из кремниевого микрокатода с учетом реальной геометрии структуры.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *А.А. Самарский, А.П. Михайлов.* Математическое моделирование. – М., Наука, Физматлит, 1997. – 320 с.
2. *Ю.Р. Носов, К.О. Петросянци, В.А. Шилин.* Математические модели элементов интегральной электроники. – М., Сов. радио, 1976. – 304 с.
3. *S. Selberherr.* Analysis and Simulation of Semiconductor Devices. – Wien, Springer-Verlag, 1984. – 293 p.
4. Simulation of semiconductor devices and processes: proc. of an int. conf. held at University College of Swansea, (Swansea, U.K. on July 9th-12th, 1984), Ed. by K. Board, D.R.J. Owen. – Pineridge Press, 1984. – 597 p.
5. *Е.Е. Чахмахсаян, Г.П. Мозговой, В.Д. Силин.* Математическое моделирование и макро моделирование биполярных элементов электронных схем. – М., Радио и связь, 1985. – 144 с.
6. *Б.С. Польский.* Численное моделирование полупроводниковых приборов. – Рига, Зинатне, 1986. – 168 с.
7. *W.L. Engl.* Process and device modeling. – North-Holland, 1986. – 461 p.
8. *C.M. Snowden, E. Snowden.* Introduction to Semiconductor Device Modelling. – World Scientific, Singapore, 1987. – 238 p.
9. *Н. Влах, К. Сингхал.* Машинные методы анализа и проектирования электронных схем. – М., Радио и связь, 1988. – 560 с.
10. МОП-СБИС. Моделирование элементов и технологических процессов. / Под ред. П. Антонетти, Д. Антониадиса, Р. Даттона, У. Оулдхема. – М., Радио и связь, 1988. – 496 с.
11. *Р. Маллер, Т. Кейминс.* Элементы интегральных схем. – М., Мир, 1989. – 630 с.
12. Моделирование полупроводниковых приборов и технологических процессов. / Под ред. Д. Миллера. – М., Радио и связь, 1989. – 279 с.
13. *С.Г. Мулярчик.* Численное моделирование микроэлектронных структур. – Минск., Университетское, 1989. – 368 с.
14. *Ю. Пожела.* Физика быстродействующих транзисторов. – Вильнюс, Мокслас, 1989. – 264 с.
15. *C.M. Snowden (Ed.).* Semiconductor device modeling. – Berlin, Springer, 1989.
16. *А.Н. Бубенников.* Моделирование интегральных микротехнологий, приборов и схем. – М., Высш. школа, 1989. – 320 с.
17. *А.И. Бурштейн.* Физические основы расчёта полупроводниковых термоэлектрических устройств. – М, Физматлит, 1962. – 135 с.
18. *М.С. Шур.* Эффект Ганна. – Л., Энергия, 1971. – 78 с.
19. *М. Ламперт, П. Марк.* Инжекционные токи в твёрдых телах. – М., Мир, 1973. – 416 с.
20. *Ж. Панков.* Оптические процессы в полупроводниках. – М., Мир, 1973. – 456 с.
21. *Дж. Займан.* Принципы теории твердого тела. – М., Мир, 1974, – 472 с.

22. *В.П. Грибковский.* Теория поглощения и испускания света в полупроводниках. – Минск, Наука и техника, 1975. – 464 с.
23. *А. Милнс, Д. Фойхт.* Гетеропереходы и переходы металл-полупроводник. – М., Мир, 1975. – 432 с.
24. *Ф. Платцман, П. Вольф.* Волны и взаимодействия в плазме твердого тела. – М., Мир, 1975. – 438 с.
25. *А.С. Давыдов.* Теория твердого тела. – М., Наука, 1976. – 640 с.
26. *В.Л. Бонч-Бруевич, С.Г. Калашиников.* Физика полупроводников. – М., Наука, 1977. – 679 с.
27. *К. Зеегер.* Физика полупроводников. – М., Мир, 1977. – 615 с.
28. *Ю.И. Уханов.* Оптические свойства полупроводников. – М., Наука, 1977. – 358 с.
29. *К. Шимони.* Физическая электроника. – М., Энергия, 1977. – 608 с.
30. *А.И. Ансельм.* Введение в теорию полупроводников. – М., Наука, 1978. – 616 с.
31. *Ч. Киттель.* Введение в физику твердого тела. – М., Наука, 1978. – 792 с.
32. *Н. Ашкрофт, Н. Мермин.* Физика твердого тела. Т. 1, 2. – М., Мир, 1979. – 399, 422 с.
33. *Е.М. Лифшиц, Л.П. Питаевский.* Физическая кинетика. – М., Наука, 1979. – 448 с.
34. Рассеяние света в твердых телах. / Под ред. М. Кардоны. – М., Мир, 1979. – 392 с.
35. NASECODE I-X – Proc. of I-X Int. Conf. “Numerical Analysis of Semiconductor Devices and Integrated Circuits”. – Boole Press, 1979, 1981, 1983, 1985, 1987, 1989; Front Range Press, Colorado, 1991; James & James, London, 1992; Front Range Press, Colorado, 1993; James & James, London. 1994.
36. *В.В. Горбачёв, Л.Г. Спицына.* Физика полупроводников и металлов. – М., Metallurgy, 1982. – 336 с.
37. *С.М. Зи.* Физика полупроводниковых приборов. Т. 1, 2. – М., Мир, 1984. – 454, 456 с.
38. *И. Броудай, Дж. Мерей.* Физические основы микротехнологии. – М., Мир, 1985. – 496 с.
39. *Г.И. Епифанов, Ю.А. Мома.* Твердотельная электроника. – М., Высшая школа, 1986. – 304 с.
40. *Ю.Р. Носов, В.А. Шилин.* Основы физики приборов с зарядовой связью. – М., Наука, 1986. – 320 с.
41. *Дж. Блейкмор.* Физика твёрдого тела. – М., Мир, 1988. – 608 с.
42. *Ю.Р. Носов.* Оптоэлектроника. – М., Радио и связь, 1989. – 360 с.
43. *Л. Росадо.* Физическая электроника и микроэлектроника. – М., Высшая школа, 1991. – 351 с.
44. *Д. Ферри, Л. Эйкерс, Э. Гринич.* Электроника ультрабольших интегральных схем. – М., Мир, 1991. – 327 с.
45. *М. Шур.* Современные приборы на основе арсенида галлия. – М., Мир, 1991. – 632 с.
46. *Дж. Слэтер.* Диэлектрики, полупроводники, металлы. – М., Мир, 1969. – 648 с.
47. *О. Маделунг.* Теория твёрдого тела. – М., Наука, 1980. – 418 с.
48. *У. Фано, А. Фано.* Физика атомов и молекул. – М., Наука, 1980. – 656 с.

49. *А. Анималу.* Квантовая теория кристаллических твердых тел. – М., Мир, 1981. – 576 с.
50. *Ф. Бассани, Дж.П. Парравичини.* Электронные состояния и оптические переходы в твердых телах. – М., Мир, 1982. – 392 с.
51. *У. Харрисон.* Электронная структура и свойства твердых тел. Физика химической связи. Т. 1,2. – М., Мир, 1983. – 381, 334 с.
52. *О. Маделунг.* Физика твёрдого тела. Локализованные состояния. – М., Наука, 1985. – 184 с.
53. *К. Борен, Д. Хафмен.* Поглощение и рассеяние света малыми частицами. – М., Мир, 1986. – 661 с.
54. *М. Херман.* Полупроводниковые сверхрешетки. – М., Мир, 1989. – 240 с.
55. *С. Jacoboni, P. Lugli.* The Monte Carlo Method for Semiconductor Device Simulation. – Wien, Springer-Verlag, 1989.
56. *S. Schmitt-Rink, D.S. Chemla, D.A.B. Miller.* Linear and nonlinear optical properties of semiconductor quantum wells // *Advances in Phys.* – 1989. – V. 38 (2), pp. 89-188.
57. *Э. Зенгуил.* Физика поверхности. – М., Мир, 1990. – 536 с.
58. *К. Hess (Ed.).* Monte Carlo Device Simulation, Full Band and Beyond. – Boston, Kluwer, 1991.
59. *Н.Н. Мусеев.* Асимптотические методы нелинейной механики. – М., Наука, 1969. – 379 с.
60. *A. Bensoussan, I.-L. Lions, G. Papanicolaou.* Asymptotic methods in periodic structures. – North Holland, Amsterdam, Elsevier, 1978. – 721 p.
61. *Маслов В.П.* Асимптотические методы и теория возмущений. – М., Наука, 1988. – 312 с.
62. *М.Н. Holmes.* Introduction to Perturbation Methods. – Springer, 1998. – 351 p.
63. *Н. Cheng.* Advanced Analytic Methods in Applied Mathematics, Science, and Engineering. – Luban Press, 2005. – 502 p.
64. *G.A. Pavliotis and A.M. Stuart.* Multiscale Methods: Averaging and Homogenization. – Springer, 2008. – 307 p.
65. *В.И. Большаков, И.В. Андрианов, В.В. Данишевский.* Асимптотические методы расчета композитных материалов с учетом внутренней структуры. – Днепропетровск, Пороги, 2008. – 196 с.
66. *К. Tomizawa.* Numerical Simulation of Submicron Semiconductor Devices (The Artech House Materials Science Library). – Artech House, Incorporated, 1993.
67. *D. Reid, A. Asenov, J.R. Barker, S.P. Beaumontl.* Parallel Simulation of Semiconductor Devices on MIMD Machines. / *Proc. of the 2nd International Workshop on Computational Electronics (IWCE-2), Leeds, UK, Leeds University (1993), ed C. Snowden, pp. 161-165.* (http://in4.iue.tuwien.ac.at/pdfs/iwce/iwce2_1993/pdfs/pp161-165.pdf)
68. *A.R. Brown, A. Asenov, S. Roy, J.R. Barker.* Development of a Parallel 3D Finite Element Power Semiconductor Device Simulator. / *Proc. IEE Colloquium on Physical Modeling of*

- Semiconductor Devices, Digest No. 1995/064*, 1995, p. 2/1–2/6. (http://www.elec.gla.ac.uk/groups/dev_mod/papers/iee/iee.pdf)
69. *H. Sheng, R. Guerrieri, A.L. Sangiovanni-Vincentelli*. Parallel and Distributed Three-Dimensional Monte Carlo Semiconductor Device Simulation. – University of California, Berkeley, Technical Report No. UCB/ERL M95/52, 1995 (<http://www.eecs.berkeley.edu/Pubs/TechRpts/1995/ERL-95-52.pdf>)
 70. *A. Lumsdaine, J.M. Squyres, J.K. White*. Accelerated Waveform Methods for Parallel Transient Simulation of Semiconductor Devices. // *IEEE Transaction On Computer-Aided Design of Integrated Circuits and Systems*, 1996, 15(7), pp. 716-726.
 71. *В.Н. Абакумов, В.И. Перель, И.Н. Ясиевич*. Безызлучательная рекомбинация в полупроводниках. – СПб., Петербургский институт ядерной физики РАН, 1997. – 376 с.
 72. *K.M. Kramer, W. Nicholas G. Hitchon*. Semiconductor devices: a simulation approach. – Prentice Hall PTR, 1997. – 707 p.
 73. *E.L. Ivchenko, G.E. Pikus*. Superlattices and other heterostructures. // *Solid State Science*. – 1997. – V. 110.
 74. *S.V. Gaponenko*. Optical Properties of Semiconductor Nanocrystals. – Cambridge, Cambridge University Press, 1998.
 75. *A.M. Anile, W. Allegretto, Ch.A. Ringhofer*. Mathematical problems in semiconductor physics: lectures given at the C.I.M.E. summer school held in Cetraro, Italy, July 15-22, 1998. – Springer, 2003. – 141 p.
 76. *M. Lundstrom*. Fundamentals of Carrier Transport. – Boston, Cambridge University Press, 1998.
 77. *D. Bimberg, M. Grundman, N.N. Ledentsov*. Quantum dot heterostructures. – NY., J. Wiley, 1999.
 78. *K.F. Brennan*. The physics of semiconductors: with applications to optoelectronic devices. – Cambridge University Press, 1999. – 762 p.
 79. *Y. Tsididis*. Operational Modeling of the MOS Transistor. 2nd Edition. – McGraw-Hill, New York, 1999.
 80. *А.Ф. Кравченко, В.Н. Овсяк*. Электронные процессы в твёрдотельных системах пониженной размерности. – Новосибирск, Изд-во Новосибирского университета, 2000. – 448 с.
 81. *Л.Е. Воробьев, Л.Г. Голуб, С.Н. Данилов, Е.Л. Ивченко, Д.А. Фирсов, В.А. Шалыгин*. Оптические явления в полупроводниковых квантово-размерных структурах. – СПб., СПб ГТУ, 2000.
 82. *Г.С. Полтников, Г.Б. Зайцев*. Физические основы молекулярной электроники. – М., Физ. ф-т МГУ, 2000. – 164 с.
 83. *М. Праттон*. Введение в физику поверхности. – М., Ижевск: R&C Dynamics, 2000. – 250 с.

84. *А.Я. Шик, Л.Г. Бакуева, С.Ф. Мусихин, С.А. Рыков.* Физика низкоразмерных систем. – СПб., Наука, 2001.
85. *Y. Li, J.-L. Liu, T.-S. Chao, S.M. Sze.* Parallel Dynamic Partition and Adaptive Computation in Semiconductor Device Simulation. / Proc. of The 10th SIAM Conference on Parallel Processing for Scientific Computing, (SIAM PP01), Virginia, March 2001, pp. 685-694.
86. *П. Ю, М. Кардона.* Основы физики полупроводников. – М., Физматлит, 2002. – 560 с.
87. *В.Г. Вакс.* Межатомные взаимодействия и связь в твердых телах. – М., ИздАТ, 2002. – 256 с.
88. *J.-C. Rioual.* Solving linear systems for semiconductor device simulations on parallel distributed computers. LE TITRE DE DOCTEUR DE L'INSTITUT NATIONAL POLYTECHNIQUE DE TOULOUSE, 23 Avril 2002. – France, Toulouse, National Polytechnique Institute, 2002. – 105 p. (http://www.cerfacs.fr/algor/reports/Dissertations/TH_PA_02_49.pdf)
89. *F.S. Levin.* An introduction to quantum theory. –Cambridge University Press, 2002.–793 p.
90. *И.И. Бобров.* Физические основы электроники. – Пермь, ПГТУ, 2003. – 158 с.
91. *В. Денисенко.* Моделирование МОП транзисторов // Компоненты и технологии, 2004, № 7, с.26-29; № 8 с. 56-61; № 9, с.32-39.
92. *E. Kasper, D.J. Paul.* Silicon Quantum Integrated Circuits. Silicon-Germanium Heterostructure Devices. – Berlin, Springer, 2005. – 367 p.
93. *Н.Б. Брандт, В.А. Кульбачинский.* Квазичастицы в физике конденсированного состояния. – М., Физматлит, 2005. – 632 с.
94. *А.И. Гусев.* Наноматериалы, наноструктуры, нанотехнологии. – М., Физматлит, 2005. – 412 с.
95. Оптика наноструктур. / Под ред. Федорова А.В. – СПб., Недра, 2005. – 326 с.
96. *Е.Л. Ивченко.* Физика Низкоразмерных Систем. – СПб., ФТИ им. Иоффе, 2006. – 41с.
97. *N. Seoane, A.J. Garcia-Loureiro, K. Kalna, A. Asenov.* A High-Performance Parallel Device Simulator for High Electron Mobility Transistors. / Proc. of the International Conference ParCo 2005, G.R. Joubert, W.E. Nagel, F.J. Peters, O. Plata, P. Tirado, E. Zapata (Editors), John von Neumann Institute for Computing, Jülich, NIC series, v. 33, pp. 407-414. (<http://www.fz-juelich.de/nic-series/volume33/407.pdf>).
98. *H. Takemiya, Y. Tanaka, S. Sekiguchi, S. Ogata, R.K. Kalia, A. Nakano, P. Vashishta.* Sustainable Adaptive Grid Supercomputing: Multiscale Simulation of Semiconductor Processing across the Pacific. / Proc. of Int. Conf. “High Performance Computing, Networking, Storage and Analysis (SC06)”, (November 2006, Tampa, Florida, USA), 2006. pp. 1-11. (<http://cacs.usc.edu/education/cs596/Takemiya-GridQMMD-SC06.pdf>)
99. *Yu. Gogotsi (Ed.).* Nanomaterials. Handbook. – CRC Press, 2006. – 780 p.
100. *Н.Н. Герасименко, Ю.Н. Пархоменко.* Кремний – материал наноэлектроники. – М., Техносфера, 2007. – 352 с.

101. *N. Arora*. Mosfet Modeling for VLSI Simulation: Theory And Practice. – World Scientific Publishing Company, 2007. – 632 p.
102. *T. Grassler, S. Selberherr*. Simulation of Semiconductor Processes and Devices 2007 / SISPAD 2007. – Springer, 2007. – 460 p.
103. *S. Bounanos, M. Fleury, S. Nicolas, and A. Vickers*. Load-balanced drift-diffusion model simulation: cluster software performance evaluation. // Journal of High Performance Computing Applications, 2007, 21(2), pp. 222-245. (<http://privatewww.essex.ac.uk/~fleum/bounanosFleury.pdf>).
104. *Н.Н. Дегтяренко*. Описание программных пакетов для квантовых расчётов наносистем. – М., МИФИ, 2008. – 180 с.
105. *X. Ye, W. Dong, P. Li, S. Nassif*. MAPS: Multi-Algorithm Parallel Circuit Simulation. / IEEE/ACM Int. Conf. Computer-Aided Design (ICCAD08) (San Jose, California, November 10-13, 2008), Digest of Tech. Papers, pp. 73-78. (<http://www.cecs.uci.edu/~papers/iccad08/PDFs/Papers/01D.1.pdf>)
106. *А.М. Ефремов*. Физические основы моделирования электронных приборов. – 2009. (<http://www.1024.ru/science/txt/mesfet.html>)
107. *F. Benatti*. Dynamics, Information and Complexity in Quantum Systems (Theoretical and Mathematical Physics). – Springer, 2009. – XII, 536 p.
108. *Bharat Bhushan* (Ed.). Springer Handbook of Nanotechnology. – Springer-Verlag, Berlin, Heidelberg, 2010. – XLVII, 1961 p.
109. *P.O.J. Scherer*. Computational Physics: Simulation of Classical and Quantum Systems. – Springer, 2010. – XV, 319 p.
110. *Y. Tsvividis, C. McAndrew*. Operation and Modeling of the MOS Transistor (Oxford Series in Electrical and Computer Engineering). – Oxford University Press, 2010. – 752 p.
111. *D. Vasileska, S.M. Goodnick*. Computational Electronics: Semi-Classical and Quantum Device Modeling and Simulation. – CRC Press, 2010. – 782 p.
112. *D. Vasileska*. Transport Modeling. – Arizona State University, 2010. – 241 p. (http://www.qn-research.com/Computational_Electronics_Tutorial.pdf)
113. *И.М. Ибрагимов, А.Н. Ковшов, Ю.Ф. Назаров*. Основы компьютерного моделирования наносистем. – СПб., Лань, 2010. – 384 с.
114. *Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц*. Механика сплошных сред. – М., Гостехтеоретиздат, 1954.
115. *Л.И. Седов*. Механика сплошной среды. Том 1, 2. – М., Наука, 1974.
116. *А.А. Ильющин*. Механика сплошной среды. – М., МГУ, 1990.
117. *В.А. Алешкевич, Л.Г. Деденко, В.А. Караваев*. Механика сплошных сред. Лекции. – М., Физфак МГУ, 1998.
118. *N. Metropolis, S. Ulam*. The Monte Carlo Method. // J. Amer. statistical assoc. 1949, 44(247), pp. 335-341.
119. *И.М. Соболев*. Численные методы Монте-Карло. – М., Наука, 1973. - 312 с.
120. *И.М. Соболев*. Метод Монте-Карло. – М., Наука, 1978.

121. *С.М. Ермаков.* Метод Монте-Карло и смежные вопросы. – М. Наука, 1985.
122. *Н.А. Михайлов, А.В. Войтушек.* Численное статистическое моделирование. Методы Монте-Карло. – М., Academia, 2006. – 368 с.
123. *B.J. Alder, T.E. Waingwright.* Thase transition for hard sphere system. // J. Chem. Phys. 1957, v. 27, pp. 1208-1209.
124. *J.B. Gibson, A. N. Goland, M.Milgram, G.H. Vineyard.* Dynamics of Radiation Damage. // Phys Rev, 1960, v. 120, pp. 1229-1253.
125. *A. Rahman.* Correlations in the motion of atoms in liquid argon. // Phys. Rev., 1964, v. 136A, pp. 405-411.
126. *L. Verlet.* Computer Experiments on Classical Fluids. I. Thermodynamical Properties of Lennard-Jones Molecules. // Phys Rev, 1967, v. 159, pp. 98-103.
127. *G.C. Schatz, A. Kopperman.* Quantum mechanical reactive scattering: An accurate three-dimensional calculation. // J. Chem. Phys., 1975, v. 62 , pp. 2502-2504.
128. *Л.Н. Лагарьков, В.М. Сергеев.* Метод молекулярной динамики в статистической физике. // Успехи физических наук, 1978, 125(3), с. 409-480.
129. *У. Буркерт, Н. Аллинжер.* Молекулярная механика. – М., Мир, 1986. –364 с.
130. *M.P. Allen, D.I. Tildesley.* Computer Simulation of Liquids. – Clarendon Press, Oxford. – 1987. – 400 p.
131. *J.M. Haile.* Molecular dynamics simulation: Elementary Methods. – Wiley-Interscience, New York, 1992.
132. *D.C. Rapaport.* The Art of Molecular Dynamics Simulation. – Cambridge, Cambridge, 1995.
133. *Ю.К. Товбин.* Метод молекулярной динамики в физической химии. – М., Наука, 1996. – с. 334.
134. *D. Frenkel, B. Smit.* Understanding Molecular Simulation. From Algorithms to Applications. – Academic Press, 2002. – 638 p.
135. *И.В. Морозов, Г.Э. Норман.* Столкновения и плазменные волны в неидеальной плазме. // ЖЭТФ, 2005, 127(2), с. 412-430.
136. *Р. Хокни, Дж. Иствуд.* Численное моделирование методом частиц. – М., Мир, 1987. – 640 с.
137. *В.М. Замалин, Г.Э. Норман, В.С. Филинов.* Метод Монте-Карло в статистической термодинамике. – М., Наука, 1977. – 228 с.
138. *А.М. Попов.* Вычислительные нанотехнологии. – М., Издательский отдел факультета ВМиК МГУ им. М.В.Ломоносова; МАКС Пресс, 2009. – 280 с.
139. *R. Car, M. Parrinello.* Unified approach for molecular dynamics and density functional theory. // Phys. Rev. Lett. 1985, 55, pp. 2471-2474.
140. *А.Р. Хохлов, А.Л. Рабинович, В.А. Иванов.* Методы компьютерного моделирования для исследования полимеров и биополимеров. – М., МГУ, 2009. – 696 с.
141. *Й. Имри.* Введение в мезоскопическую физику. – М., Физматлит, 2002. – 304 с.

142. *R. Stratton*. Diffusion of hot and cold electrons in semiconductor barriers. // *Phys. Rev.*, 1962, 126(6), pp. 2002-2014.
143. *R. Bosch, H.W. Thim*. Computer simulation of transferred electron devices using the displaced Maxwellian approach. // *IEEE Trans.*, 1974, ED-21(1), pp. 16-25.
144. *К. Черчиньяни*. Теория и приложения уравнения Больцмана. – М., Мир, 1978. – 496 с.
145. *W.R. Curtice, Y.-H. Yun*. A temperature model for the GaAs MESFET. // *IEEE Trans.*, 1981, ED-28(8), pp. 954-962.
146. *R.K. Cook, J. Frey*. An efficient technique for two-dimensional simulation of velocity overshoot effects in Si and GaAs devices // *COMPEL*, 1982, 1(2), pp. 65-87.
147. *R.K. Mains, G.I. Haddad, P.A. Blakey*. Simulation of GaAs IPATT diodes including energy and velocity transport equations // *IEEE Trans.*, 1983, ED-30(10), pp. 1327-1338.
148. *V.I. Ryzhii, N.A. Bannov, V.A. Fedirko*. Ballistic transport in semiconductors. // *Sov. Phys. Semicond.*, 1984, 18, p. 481.
149. *В.И. Рыжый, Н.А. Баннов, В.А. Федирко*. Баллистический и квазibalлистический транспорт в полупроводниковых структурах. // *ФТП*, 1984, 18(5), с. 769.
150. *Н.А. Баннов, В.И. Рыжый*. Проблемы математического моделирования субмикронных элементов интегральной электроники. // *Электронная промышленность*, 1984, вып. 9, с. 3-7.
151. *А.А. Кокин, В.И. Толстухин*. О моделировании процессов переноса в монополярных полупроводниковых структурах с субмикронными размерами. // *Микроэлектроника*, 1984, 13(1), с. 24-40.
152. *C.M. Snowden, D. Loret*. Two-dimensional hot-electron models for short-gate-length GaAs MESFET's. // *IEEE Trans.*, 1987, ED-34(2), pp. 212-223.
153. *В.И. Рыжый, Н.А. Баннов*. Математическое моделирование субмикронных элементов интегральной электроники: состояние и проблемы. // *Микроэлектроника*, 1987, 16(6), с. 484-496.
154. *Y.-K. Feng, A. Hintz*. Simulation of submicrometer GaAs MESFET's using full hydrodynamic model // *IEEE Trans.*, 1988, ED-35(9), pp. 1419-1431.
155. *Л.Ю. Бирюкова, В.А. Николаева, В.И. Рыжый, Б.Н. Четверушкин*. Алгоритмы квазигидродинамической модели для расчета процессов в электронной плазме субмикронных полупроводниковых структур. // *Матем. моделирование*, 1989, 1(5), с. 11-22.
156. *Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц*. Статистическая физика. Ч. 1. – М., Наука, 1976.
157. *И.И. Ляпилин*. Введение в теорию кинетических уравнений. – Екатеринбург, УГТУ-УПИ, 2004. – 332 с.
158. *Ж.А. Биттенкорт*. Основы физики плазмы. / Пер. с англ. под общ. ред. Л.М. Зеленого. – М. Физматлит, 2009. – 584 с.
159. *Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц*. Теоретическая физика. Учебное пособие для вузов в десяти томах. Том III. Квантовая механика. Нерелятивистская теория. – М., Физматлит, 2008. – 808 с.

160. *Д. Хартри*. Расчёты атомных структур. – М., ИИЛ, 1960.
161. *А.С. Давыдов*. Квантовая механика. – М., Наука, 1973. – 704 с.
162. *В.А. Фок*. Начала квантовой механики. – М., Наука, 1976.
163. *Дж. Слэтер*. Методы самосогласованного поля для молекул и твердых тел. – М., Мир, 1978. – 664 с.
164. *А. Мессиа*. Квантовая механика. Т. 2. – М., Наука, 1979.
165. *И. Майер*. Избранные главы квантовой химии: доказательства теорем и вывод формул. – М., БИНОМ. Лаборатория знаний, 2006. – 384 с.
166. *Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц*. Теоретическая физика. Учебное пособие для вузов в десяти томах. Том VII. Теория упругости. – М., Физматлит, 2007. – 264 с.
167. *Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц*. Теоретическая физика. Учебное пособие для вузов в десяти томах. Том VIII. Электродинамика сплошных сред. – М., Физматлит, 2005. – 656 с.
168. *В.А. Федирко, С.В. Поляков, Ю.Н. Карамзин, А.Ф. Попков, М.И. Калиниченко*. Модель спинового транспорта в магнитной слоистой среде. / В сб. "Фундаментальные физико-математические проблемы и моделирование технико-технологических систем", вып. 9, под ред. Л.А. Уваровой, с. 111-114. – М., "Янус-К", 2006.
169. *И.Г. Каплан*. Введение в теорию межмолекулярных взаимодействий. – М., Наука. Главная редакция физико-математической литературы, 1982. – 312 с.
170. *Л.В. Канторович, В.И. Крылов*. Методы приближенного решения уравнений в частных производных. – Л.-М., ОНТИ, 1936. – 528 с.
171. *Л.В. Канторович, В.И. Крылов*. Приближенные методы высшего анализа. – М.-Л., Физматгиз, (1941, 1949, 1950, 1952) 1962. – 708 с.
172. *А.О. Гельфонд*. Исчисление конечных разностей. – М.-Л., Гостехиздат, 1952. – 479 с.
173. *О.А. Ладыженская*. Смешанная задача для гиперболического уравнения. – М., ГИТТЛ, 1953. – 282 с.
174. *В.С. Рябенский, А.Ф. Филиппов*. Об устойчивости разностных уравнений. – М., ГИТТЛ, 1956. – 172 с.
175. *Н.Н. Яненко*. Введение в теорию разностных схем уравнений математической физики: Курс лекций на физ.-мат. фак. Урал. гос. ун-та. – Б.м.: Б.п., 1958. – 150 с.
176. *Г.И. Марчук*. Численные методы расчета атомных реакторов. – М., Атомная энергия, 1959. – 382 с.
177. *И.С. Березин, Н.П. Жидков*. Методы вычислений. Т. 2. – М., Наука, 1959. – 620 с.
178. *Р. Рихтмайер*. Разностные методы решения краевых задач. – М., ИЛ, 1960.
179. *Б.П. Демидович, И.А. Марон, Э.З. Шувалова*. Численные методы анализа. – М., ГИФЛ, 1961. – 400 с.
180. *С.К. Годунов, В.С. Рябенский*. Введение в теорию разностных схем. – М., Физматгиз, 1962. – 340 с.

181. *С.Г. Михлин, Х.Л. Смолицкий.* Приближенные методы решения дифференциальных и интегральных уравнений. – М., Наука, 1965. – 384 с.
182. *Н.Н. Яненко.* Метод дробных шагов решения многомерных задач математической физики: лекции для студентов НГУ. – Новосибирск, Б.и., 1966. – 255 с.
183. *Г.И. Марчук.* Численные методы в прогнозе погоды. - Л., Гидрометеоздат, 1967. – 356 с.
184. *А.Н. Коновалов.* Численное решение задач теории упругости. – Новосибирск, Наука, Сиб. отд., 1968. – 127 с.
185. *Р.В. Хемминг.* Численные методы. – М., Наука, 1968. – 400 с.
186. *И. Бабушка, Э. Витасек, М. Прагер.* Численные процессы решения дифференциальных уравнений. – М., Мир, 1969. – 368 с.
187. *В.П. Ильин.* Разностные методы решения эллиптических уравнений. – Новосибирск, НГУ, 1970. – 263 с.
188. *А.А. Самарский.* Введение в теорию разностных схем. – М., Наука, 1971. – 552 с.
189. *А.А. Самарский.* Введение в численные методы. – М., Наука, 1971. – 273 с.
190. *М.К. Гавурин.* Лекции по методам вычислений. – М., Наука, 1971. – 248 с.
191. *Р. Рихтмайер, К. Мортон.* Разностные методы решения краевых задач. – М., Мир, 1972. – 422 с.
192. *В.Ф. Дьяченко.* Основные понятия вычислительной математики. – М., Наука, 1972. – 120 с.
193. *Н.С. Бахвалов.* Численные методы. – М., Наука, 1973. – 631 с.
194. *С.К. Годунов, В.С. Рябенкий.* Разностные схемы. – М., Наука, 1973. – 400 с.
195. *А.А. Самарский, А.В. Гулин.* Устойчивость разностных схем. – М., Наука, 1973. – 415 с.
196. *В.П. Ильин.* Численные методы в электрооптике. – Новосибирск, Наука, 1974. – 202 с.
197. *Д. Поттер.* Вычислительные методы в физике. – М., Мир, 1975. – 392 с.
198. *А.А. Самарский, В.Б. Андреев.* Разностные методы для эллиптических уравнений. – М., Наука, 1976. – 352 с.
199. *С.К. Годунов, А.В. Забродин, М.Я. Иванов, А.Н. Крайко, Г.П. Прокопов.* Численное решение многомерных задач газовой динамики. – М., Наука, 1976. – 400 с.
200. *А.А. Самарский.* Теория разностных схем. – М., Наука, 1977. – 616 с.
201. *Г.И. Марчук.* Методы вычислительной математики. – М., Наука, 1977. – 456 с.
202. *Н.Н. Калиткин.* Численные методы. – М., Наука, 1978. – 512 с.
203. *К.И. Бабенко (ред.).* Теоретические основы и конструирование численных алгоритмов задач математической физики. – М., Наука, 1979. – 296 с.
204. *Г.И. Марчук, В.В. Шайдулов.* Повышение точности решений разностных схем. – М., Наука, 1979. – 319 с.
205. *А.А. Самарский, Ю.П. Попов.* Разностные методы решения задач газовой динамики. – М., Наука, 1980. – 352 с.
206. *Г.И. Марчук, В.И. Агошков.* Введение в проекционно-сеточные методы. – М.: Наука, 1981. – 416 с.

207. *Е.А. Волков.* Численные методы. – М., Наука, 1982. – 248 с.
208. *Н.М. Беляев, В.И. Завелион, А.А. Рядно.* Проекционные и разностные методы в задачах теплообмена и термоупругости. – Днепропетровск, ДГУ, 1982. – 104 с.
209. *Н.С. Бахвалов, Н.П. Жидков, Г.М. Кобельков.* Численные методы. – М., Наука, 1987. – 598 с.
210. *Г.И. Марчук.* Методы расщепления. – М., Наука, 1988. – 263 с.
211. *А.А. Самарский, А.В. Гулин.* Численные методы. – М., Наука, 1989. – 430 с.
212. *Р.П. Федоренко.* Введение в вычислительную физику. – М., Изд-во МФТИ, 1994. – 526 с.
213. *О. Зенкевич.* Метод конечных элементов в технике. – М., Мир, 1975. – 541 с.
214. *Ж. Деклу.* Метод конечных элементов. – М., Мир, 1976. – 96 с.
215. *Г. Стренг, Дж. Фикс.* Теория метода конечных элементов. – М., Мир, 1977. – 351 с.
216. *В.Г. Корнеев.* Схемы метода конечных элементов высоких порядков точности. – Л., Изд. Лен. ун-та, 1977. – 205 с.
217. *Ф. Сьярле.* Метод конечных элементов для эллиптических задач. – М., Мир, 1978. – 511 с.
218. *Л. Сегерлинд.* Применение метода конечных элементов. – М., Мир, 1979. – 392 с.
219. *Д. Норри, Ж. де Фриз.* Введение в метод конечных элементов. – М., Мир, 1981. – 304 с.
220. *Э. Митчелл, Р. Уэйт.* Метод конечных элементов для уравнений с частными производными. – М., Мир, 1981. – 213 с.
221. *Р. Галлагер.* Метод конечных элементов. Основы. – М., Мир, 1984. – 428 с.
222. *О. Зенкевич, К. Морган.* Конечные элементы и аппроксимация. – М., Мир, 1986. – 318 с.
223. *К. Бреббия, Ж. Теллес, Л. Вроубел.* Методы граничных элементов. – М., Мир, 1987. – 524 с.
224. *Ж. К. Сабоннадьер, Ж. Л. Кулон.* Метод конечных элементов и САПР. – М., Мир, 1989. – 192 с.
225. *В.Б. Андреев.* Лекции по методу конечных элементов. – М., МГУ, 1997. – 178 с. (3-е изд. – М., Издательский отдел ф-та ВМиК МГУ, МАКС Пресс, 2010. – 264 с.)
226. *С.М. Алейников.* Метод граничных элементов в контактных задачах для упругих пространственно неоднородных оснований. – М., Изд-во "АСВ", 2000. – 754 с.
227. *В.М. Головизнин, А.А. Самарский, А.П. Фаворский.* Вариационный подход к построению конечно-разностных математических моделей. // ДАН СССР, 1977, 235(6), с. 1285-1288.
228. *И.В. Фрязинов.* Метод баланса и вариационно-разностные схемы. // Дифференциальные уравнения, 1980, 16(7), с. 1332-1343.
229. *S.N. Atluri, R.H. Gallagher, and O.C. Zienkiewicz (Eds.).* Hybrid and Mixed Finite Element Methods. – John Wiley & Sons, New York, 1983. – 600 p.
230. *А.А. Самарский, А.В. Колдоба, Ю.А. Повецено, В.Ф. Тишкин, А.П. Фаворский.* Разностные схемы на нерегулярных сетках. – Минск, ЗАО «Критерий», 1996. – 196 с.

231. *R. Li, Zh. Chen, W. Wu.* Generalized difference methods for differential equations. Numerical analysis of finite volume methods. – M. Dekker Inc., 2000. – 459 p.
232. *В.П. Ильин.* Методы конечных разностей и конечных объемов для эллиптических уравнений. – Новосибирск, Изд-во Ин-та математики СО РАН, 2000. – 345 с.
233. *R. Eymard, T. R. Gallouet, R. Herbin.* The finite volume method. / In: “Handbook of Numerical Analysis” (Editors: P.G. Ciarlet and J.L. Lions), 2000, Vol. VII, pp. 713-1020.
234. *Randall J. LeVeque.* Finite Volume Methods for Hyperbolic Problems. – Cambridge University Press, 2002. – 558 p.
235. *T.J. Chung.* Computational Fluid Dynamics. –Cambridge University Press. 2002. – 1022 p.
236. *А.А. Самарский, П.Н. Вабищевич.* Вычислительная теплопередача. – М., Едиториал УРСС, 2003. – 784 с.
237. *Б.Г. Галёркин.* Стержни и пластинки. Ряды в некоторых вопросах упругого равновесия стержней и пластинок. // Вестник инженеров, 1915, 1, с. 897-908.
238. *И.Г. Бубнов.* Труды по теории пластин. – М., ГИТТЛ, 1953. – 423 с.
239. *И.И. Ворович.* О методе Бубнова – Галёркина в нелинейной теории колебания пологих оболочек. // Доклады АН СССР, 1956, 110(5), с. 723-726.
240. *С.Г. Михлин.* Численная реализация вариационных методов. –М., Наука, 1966.–432 с.
241. *С.Г. Михлин.* Вариационные методы в математической физике. – М.-Л., 1970. – 512 с.
242. *Р. Варга.* Функциональный анализ и теория аппроксимации в численном анализе. – М., Мир, 1974. – 128 с.
243. *К. Флетчер.* Численные методы на основе метода Галёркина. –М., Мир, 1988.– 352 с.
244. *П. Жермен-Лакур, П.Л. Жорж, Ф. Пистр и др.* Математика и САПР. Кн. 2: Вычислительные методы. Геометрические методы. – М., Мир, 1989. – 264 с.
245. *Ф. Циглер.* Механика твердых тел и жидкостей. – Ижевск, НИЦ «Регулярная и хаотическая динамика», 2002. – 912 с.
246. *Н.Г. Бураго.* Вычислительная механика. – М., МГТУ им. Н.Э. Баумана, 2007. – 273 с.
247. *А.А. Самарский.* О монотонных разностных схемах для эллиптических и параболических уравнений в случае несамосопряженного эллиптического оператора. // ЖВМиМФ, 1965, 5(3), с. 548-551.
248. *Е.И. Голант.* О сопряженных семействах разностных схем для уравнений параболического типа с младшими членами. // ЖВМиМФ, 1978, 18(5), с. 1162-1169.
249. *Н.В. Кареткина.* Безусловно устойчивая разностная схема для параболических уравнений, содержащих первые производные. // ЖВМиМФ, 1980, 20(1), с. 236-240.
250. *А.А. Фридман.* Уравнения с частными производными параболического типа. – М., Мир, 1968. – 428 с.
251. *О.А. Ладыженская, В.А. Солонников, Н.Н. Уральцева.* Линейные и квазилинейные уравнения параболического типа. – М., Наука, 1967. – 736 с.
252. *Е. Дулан, Дж. Миллер, У. Шилдерс.* Равномерные численные методы решения задач с пограничным слоем. – М., Мир, 1983. – 198 с.
253. *Л.В. Канторович, Г.П. Акилов.* Функциональный анализ. – М., Наука, 1984. – 752 с.

254. *А.Н. Колмогоров, С.В. Фомин.* Элементы теории функций и функционального анализа. – М., Наука, 1976 г. – 544 с.
255. *И.Г. Захарова, Ю.Н. Карамзин, С.В. Поляков, В.А. Трофимов.* Численные методы для задач стимулирования химических реакций в газе световым импульсом. // Диф. уравнения, 1989, 25(7), с. 1219-1227.
256. *Ю.Н. Карамзин, С.В. Поляков, В.А. Трофимов.* Разностные схемы для задач абсорбционной бистабильности в полупроводниках. // Диф. уравнения, 1991, 27(7), с. 1185-1196.
257. *М.И. Калиниченко, С.В. Поляков.* Численные методы для задач распространения дифрагирующих световых пучков в химически активных газах с термодиффузией. // Мат. моделирование, 1992, 4(2), с. 95-109.
258. *Ю.Н. Карамзин, С.В. Поляков, В.А. Трофимов.* Оптическая бистабильность на основе полупроводников в условиях конечного времени термализации поглощенной световой энергии. I. Численные методы. Условия существования бистабильности. / Мат. Моделирование, 1993, 5(4), с. 3-13.
259. *М.И. Калиниченко, С.В. Поляков.* Численные методы для двумерной модели распространения лазерного излучения в химически активном газе в случае развитой термодиффузии. // ЖВМиМФ, 1997, 37(3), с. 334-347.
260. *Г.М. Фихтенгольц.* Курс дифференциального и интегрального исчисления. Т. 3. – М., Физматлит, 2001. – 662 с.
261. *И.В. Попов, С.В. Поляков.* Построение адаптивных нерегулярных треугольных сеток для двумерных многосвязных невыпуклых областей. // Математическое моделирование. 2002, 14(6), с. 25-35.
262. *W. Lui, M. Fukuma.* Exact solution of the Shrodinger equation across an arbitrary one-dimensional piecewise-linear potential barrier // Appl. Phys. 1986, 60(5), pp.1555-1559.
263. *Y. Ando, T. Itoh* Calculation of transmission tunneling current across arbitrary potential barriers // Appl. Phys. 1987, 61(4), pp.1497-1502.
264. *А.Н. Тихонов, В.Я. Арсенин.* Методы решения некорректных задач. – М., Наука, 1979. – 288 с.
265. *Ф.П. Васильев.* Численные методы решения экстремальных задач. – М., Наука, 1988. – 552 с.
266. *В.И. Смирнов.* Курс высшей математики, т.2. – М., Наука, 1974 (ОНТИ,1930). – 656 с.
267. *И.И. Привалов.* Ряды Фурье. – М., ОНТИ, 1934.
268. *Д. Джексон.* Ряды Фурье и ортогональные полиномы. – М., ИЛ,1948.
269. *Е. Титчмарш.* Введение в теорию интегралов Фурье. – М., ОГИЗ, 1948.
270. *А.Н. Тихонов, А.А. Самарский.* Уравнения математической физики. – Изд-во МГУ, 2004 (Физматлит, 1951). – 799 с.
271. *И. Снеддон.* Преобразования Фурье. – М.: ИЛ, 1955. – 668 с.
272. *Н.К. Бари.* Тригонометрические ряды. – М., ФМ, 1961.
273. *Н. Винер.* Интеграл Фурье и некоторые его применения. – М., ФМ, 1963.

274. *К. Зигмунд*. Тригонометрические ряды, т. 1-2. – М., Мир, 1965.
275. *П.Н. Князев*. Интегральные преобразования. – Минск, Высшэйшая школа, 1969.
276. *Г.Е. Шилов*. Математический анализ. Функции одного переменного, ч.3. – М., Наука, 1970.
277. *А.В. Бицадзе*. Уравнения математической физики. – М., Наука, 1976.
278. *У. Katznelson*. An introduction to harmonic analysis. – N.Y., Dover publications, 1976.
279. *Г.П. Толстов*. Ряды Фурье. – М., Наука, 1980.
280. *У. Миллер*. Симметрия и разделение переменных. – М., Мир, 1981.
281. *Р. Эдвардс*. Ряды Фурье в современном изложении, т.1-2. – М., Мир, 1985.
282. *А.Я. Дороговцев*. Математический анализ. – Киев, Вища школа, 1985.
283. *А.А. Самарский, Е.С. Николаев*. Методы решения сеточных уравнений. – М., Наука, 1978. – 592 с.
284. *J.M. Ortega, R.G. Voigt*. Solution of Partial Differential Equations on Vector and Parallel Computers. / SIAM Review, 1985, v. 27, No. 2, p. 149-240.
285. *Г. Нуссбаумер*. Быстрое преобразование Фурье и алгоритмы вычисления свёрток. – М., Радио и связь, 1985. – 248 с.
286. *Ronald N. Bracewell*. The Fourier Transform and its Applications (second edition, revised). – McGraw-Hill Book Company, 1986.
287. *Блейхут Р.* Быстрые алгоритмы цифровой обработки сигналов. – М., Мир, 1989. – 448 с.
288. “Fastest Fourier Transform in the West” – <http://www.fftw.org/>
289. *E. Chu, A. George*. Inside the FFT Black Box. Serial and Parallel Fast Fourier Transform Algorithms. – CRC Press, Boca Raton – London– New-York – Washington, 2000. – 306 p.
290. *А.Б. Барский*. Параллельные информационные технологии. Серия: Основы информационных технологий. - С.-Пб., "Интернет-университет информационных технологий - ИНТУИТ.ру", "БИНОМ. Лаборатория знаний", 2007. – 504 с.
291. *В.П. Гергель*. Теория и практика параллельных вычислений. – СПб., "Интернет-университет информационных технологий – ИНТУИТ.ру", "БИНОМ. Лаборатория знаний", 2007. – 424 с.
292. *А.С. Семёнов*. Одномерное быстрое преобразование Фурье на суперкомпьютере с мультитредово-поточковой архитектурой. / Труды международной научной конференции "Параллельные вычислительные технологии" (ПаВТ'2008) (Санкт-Петербург, 28 января – 1 февраля 2008 г.), с. 224-231. (http://omega.sp.susu.ac.ru/books/conference/PaVT2008/papers/full_papers/024.pdf)
293. *В.П. Ильин, Д.В. Кныш*. Параллельные алгоритмы разделяющихся краевых задач. / Труды международной научной конференции "Параллельные вычислительные технологии" (ПаВТ'2008) (Санкт-Петербург, 28 января – 1 февраля 2008 г.) с. 107-117. (http://omega.sp.susu.ac.ru/books/conference/PaVT2008/papers/full_papers/011.pdf)
294. *В.П. Ильин, Д.В. Кныш*. Быстрый параллельный прямой метод решения трехмерных краевых задач с разделяющимися переменными. / Труды международной научной

- конференции "Параллельные вычислительные технологии" (PaVT2009), (Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского, г. Нижний Новгород, 30 марта - 3 апреля 2009 г.), с. 496-502. (http://omega.sp.susu.ac.ru/books/conference/PaVT2009/papers/short_papers/026.pdf)
295. *В.А. Кашкарлов, С.В. Мушкаев.* Организация параллельных вычислений в алгоритмах БПФ на процессоре NM6403. // Цифровая обработка сигналов, 2001, No. 1, с. 53-58.
 296. *Р. Отнес, Л. Эноксен.* Прикладной анализ временных рядов. Основные методы. – М., Мир, 1982. – 340 с.
 297. *В.В. Воеводин, Вл.В. Воеводин.* Параллельные вычисления. – СПб.: БХВ-Петербург, 2002. – 608 с.
 298. *А.Н. Коновалов.* Введение в вычислительные методы линейной алгебры. – Новосибирск: ВО "Наука", Сибирская издательская фирма, 1993.
 299. *В.П. Ильин, Ю.А. Кузнецов.* Трёхдиагональные матрицы и их приложения. – М., Наука, 1985. – 208 с.
 300. *Дж. Ортега, В. Рейнболдт.* Итерационные методы решения нелинейных систем уравнений со многими неизвестными. – М., Мир, 1975. – 560 с.
 301. *В.Я. Арсенин.* Методы математической физики и специальные функции. – М., Наука, 1984. – 384 с.
 302. *В.С. Рябенький.* Метод разности потенциалов для некоторых задач механики сплошных сред. – М., Наука, 1987. – 320 с.
 303. *В.И. Агошков, П.Б. Дубовский, В.П. Шутяев.* Методы решения задач математической физики. – М., Физматлит, 2002. – 320 с.
 304. *В.С. Рябенький.* Метод разностных потенциалов и его приложения. – М., Физматлит, 2010. – 432 с.
 305. *Д.К. Фаддеев, В.Н. Фаддеева.* Вычислительные методы линейной алгебры. – М., Физматгиз, 1963 (2002). – 656 с.
 306. *В.В. Воеводин.* Численные методы алгебры. Теория и алгоритмы. – М., Наука, 1966. – 248 с.
 307. *Дж. Форсайт, К. Молер.* Численное решение систем линейных алгебраических уравнений. – М., Мир, 1969. – 167 с.
 308. *Дж. Ортега.* Введение в параллельные и векторные методы решения линейных систем. – М., Мир, 1971. – 367 с.
 309. *Р. Тьюарсон.* Разряженные матрицы. – М., Мир, 1977. – 171 с.
 310. *С.К. Годунов.* Решение систем линейных уравнений. – Новосибирск, Наука, 1980. – 177 с.
 311. *Х.Д. Икрамов.* Численное решение матричных уравнений. Ортогональные методы. – М., Наука, 1984. – 192 с.
 312. *В.В. Воеводин, Ю.А. Кузнецов.* Матрицы и вычисления. – М., Наука, 1984. – 320 с.
 313. *В.В. Воеводин, Е.Е. Тыртышников.* Вычислительные процессы с теплицевыми матрицами. – М., Наука, 1987. – 320 с.

314. *M.J. Quinn*. Designing Efficient Algorithms for Parallel Computers. – McGraw-Hill, New York, 1987.
315. *A. Gibbons and W. Rytter*. Efficient Parallel Algorithms. – Cambridge University Press, New York, 1988.
316. *Х.Д. Икрамов*. Численные методы для симметричных линейных систем. – М., Наука, 1988. – 160 с.
317. *С. Писсанецки*. Технология разреженных матриц. – М., Мир, 1988. – 410 с.
318. *S.G. Akl*. The Design and Analysis of Parallel Algorithms. – Prentice Hall, Englewood Cliffs, NJ, 1989.
319. *В.П. Ильин, В.В. Карпов, А.М. Масленников*. Численные методы решения задач строительной механики. – Минск, Выш. школа, 1990. – 349 с.
320. *J. Dongarra et. al.* Solving Linear Systems on Vector and Shared Memory Computers. – SIAM, 1991.
321. *T.L. Freeman and C. Phillips*. Parallel Numerical Algorithms. – Prentice Hall, Englewood Cliffs, NJ, 1992.
322. *G. Golub and J. Ortega*. Scientific Computing: An Introduction with Parallel Computing. – Academic Press, Boston, 1993.
323. *V. Kumar*. Introduction to Parallel Computing: Design and Analysis of Parallel Algorithms. – Addison-Wesley, 1994.
324. *В.П. Ильин*. Методы неполной факторизации для решения линейных систем. – М., Физматлит, 1995. – 288 с.
325. *Й. Абаффи, Э. Спедикато*. Математические методы для линейных и нелинейных уравнений: проекционные ABS-алгоритмы. – М., Мир, 1996. – 268 с.
326. *S.G. Akl*. Parallel Computation: Models and Methods, Prentice Hall, Upper Saddle River, NJ, 1997.
327. *K.A. Berman and J.L. Paul*. Fundamentals of Sequential and Parallel Algorithms, PWS Publishing, Boston, 1997.
328. *Д. Каханер, К. Моулер, С. Нэш*. Численные методы и программное обеспечение. – М., Мир, 1998. – 575 с.
329. *Дж. Голуб, Ч. Ван Лоун*. Матричные вычисления. – М., Мир, 1999. – 548 с.
330. *Yu. Saad*. Iterative Methods for Sparse Linear Systems. Second Edition with corrections. – 2000, by Yousef Saad.
331. *S.H. Roosta*. Parallel Processing and Parallel Algorithms. – Springer Verlag, 2000.
332. *М.Ю. Баландин, Э.П. Шурина*. Методы решения СЛАУ большой размерности. – Новосибирск, Изд-во НГТУ, 2000. – 70 с.
333. *Л.И. Турчак, П.В. Плотников*. Основы численных методов. – М., Физматлит, 2002 – 304 с.
334. *J. Dongarra, I. Foster, J. Fox, W. Gropp, K. Kennedy, L. Torczon, A. White*. Sourcebook of Parallel Computing. – Morgan Kauffman, 2003. – 852 p.
335. *Е.Е. Тыртышников*. Методы численного анализа. – М., 2006. – 291 с.

336. *Е.В. Чижонков.* Лекции по курсу «Численные методы». – М., Изд-во ЦПИ при мех.-мат. факультете МГУ, 2006. – 168 с.
337. *Е.Е. Тыртышников.* Матричный анализ и линейная алгебра. – М., Физматлит, 2007. – 480 с.
338. *Марчук Г.И., Кузнецов Ю.А.* Некоторые вопросы итерационных методов. / Вычислительные методы линейной алгебры. – Новосибирск, 1972, с. 4-20.
339. *Ж.-П. Обен.* Приближенное решение эллиптических краевых задач. – М., Мир, 1977. – 383 с.
340. *В.И. Цурков.* Декомпозиция в задачах большой размерности. – М., Наука 1981. – 352 с.
341. *Ю.А. Кузнецов.* Итерационные методы в подпространствах. – М., Наука, 1984. – 133 с.
342. *В.И. Агошков, В.И. Лебедев.* Операторы Пуанкаре-Стеклова и методы разделения области в вариационных задачах. // Вычислительные процессы и системы. Вып.2 / Под ред. Г.И. Марчука. – М., Наука, 1985. – С. 173-227.
343. *А.М. Мацокин, С.В. Непомнящих.* Метод альтернирования Шварца в подпространстве. // Известия высш. учебных заведений. Математика. 1985, 10, с. 61-66.
344. *В.И. Лебедев.* Метод композиции. – М., ОВМ АН СССР, 1986. – 191 с.
345. *В.И. Цурков.* Динамические задачи большой размерности. – М., Наука, 1988. – 288 с.
346. *В.И. Агошков.* Методы разбиения области в задачах математической физики // Вычислительные процессы и системы. Вып. 8. / Под ред. Г.И. Марчука. – М., Наука, 1991. – С. 4-50.
347. *В.И. Цурков, И.С. Литвинчев.* Декомпозиция в динамических задачах с перекрестными связями. Ч. 1-2. – М., Наука, 1994. – 332 с.
348. *Ю.М. Лаевский, А.М. Мацокин.* Методы декомпозиции решения эллиптических и параболических краевых задач. // Сиб. Ж. Выч. Мат., РАН, Сиб. отдел., Новосибирск, 1999, 2(4), с. 361-372.
349. *А.А. Самарский, П.Н. Вабищевич.* Аддитивные схемы для задач математической физики. – М.: Наука. 1999. – 319 с.
350. *А.В. Ланин.* Декомпозиция области и параллельные решения задач со свободными границами. / Труды Матем. Центра им. Н.И. Лобачевского. – Казань, 2001, Т. 13, с. 90-126.
351. <http://www.ddm.org/> – официальный сайт по методам разделения областей.
352. *H. Schwarz.* Uber einige Abbildungsaufgaben. // J. Reine Angew. Math. 1869. V 70, pp. 105-120.
353. Proc. Second Int. Symp. on Domain Decomposition Methods for Partial Differential Equations (Los Angeles, 1988), T. Chan, R. Glowinski, J. Periaux, and O. Widlund, eds. – Philadelphia: SIAM, 1989.
354. *J. Xu.* Iterative Methods by Space Decomposition and Correction // SIAM Review. 1992. V. 34. P. 581-613.

355. Domain Decomposition Methods 10. The Tenth Int. Conf. on Domain Decomposition Methods (August 10-14, 1997, Boulder, CO), Jan Mandel, Charbel Farhat, Xiao-Chuan Cai, Eds. – American Mathematical Society, Providence, Rhode Island, 1998. – 561 p.
356. *A. Quarteroni, A. Valli.* Domain Decomposition Methods for Partial Differential Equations. – Oxford Science Publications, 1999. – 376 p.
357. *B.I. Wohlmuth.* Discretization Methods and Iterative Solvers Based on Domain Decomposition (Lecture Notes in Computational Science and Engineering). – Springer Verlag, Berlin, 2001. – 216 p.
358. *J. Metzger, O. Steinbach.* Stability Estimates for Hybrid Coupled Domain Decomposition Methods. – Springer, Berlin, 2003. – 120 p.
359. *A. Toselli, O. Widlund.* Domain Decomposition Methods – Algorithms and Theory (Springer Series in Computational Mathematics, Vol. 34). – Springer, Berlin, 2005. – XV, 450 p.
360. *J. Kruis.* Domain Decomposition Methods for Distributed Computing. – Saxe-Coburg Publications, 2007. – 180 p.
361. Domain Decomposition Methods in Science and Engineering XIX. Series: Lecture Notes in Computational Science and Engineering, Vol. 78. Huang, Y.; Kornhuber, R.; Widlund, O.; Xu, J. (Eds.), 1st Edition., Springer, Berlin, 2011. - XV, 460 p.
362. *W. Hackbusch.* Multi-grid methods and applications. – Springer, Berlin, 1985.
363. *B.B. Шайдуров.* Многосеточные методы конечных элементов. – М., Наука, 1989. – 288 с.
364. *P. Oswald.* Multilevel Finite Element Approximation: Theory and Applications, Teubner Skripten zur Numerik, B. G. Teubner, Stuttgart, 1994.
365. *B. Smith, P. Bjorstad, and W. Gropp.* Domain Decomposition: Parallel Multilevel Methods for Elliptic Partial Differential Equations. – Cambridge University Press, 1996. – 225 p.
366. *W. L. Briggs, V. E. Henson, S. McCormick.* A Multigrid Tutorial, 2nd edition. – SIAM, 2000.
367. *М.А. Ольшанский.* Лекции и упражнения по многосеточным методам. – М., Физматлит, 2005. – 168 с.
368. *S.I. Martynenko.* Robust Multigrid Technique for black box software. // *Comp. Meth. in Appl. Math.*, 2006, 6(4), pp. 413–435.
369. *С.И. Мартыненко.* Универсальная многосеточная технология. // *Математическое моделирование*, 2009, 21(9), p. 66–79.
370. *М.П. Галанин, Е.Б. Савенков.* Методы численного анализа математических моделей. – М., МГТУ им. Баумана, 2010. – 591 с.
371. *В.Я. Карпов.* Решение уравнения Пуассона на многопроцессорной ЭВМ. // *Математическое моделирование*, 1997, 9(9), с. 18-26.
372. *Б.Н. Четверушкин.* Об одном итерационном алгоритме решения разностных уравнений. // *ЖВМиМФ*, 1976, 16(2), с. 519-524.

373. *Б.Н. Четверушкин, Н.Г. Чурбанова.* О применении принципа геометрического параллелизма для $(\alpha\text{-}\beta)$ -итерационного алгоритма. // Математическое моделирование, 1991, 3(3), с. 123-129.
374. *О.Ю. Милукова.* Parallel approximate factorization method for solving discrete elliptic equations. // Parallel Computing, 2001, 27, pp. 1365-1379.
375. *О.Ю. Милукова.* Параллельные итерационные методы с факторизованной матрицей предобусловливания для дискретных эллиптических уравнений на неравномерной сетке. // Математическое моделирование, 2003, 15(4), с. 3–15.
376. *О.Ю. Милукова.* Некоторые параллельные итерационные методы с факторизованными матрицами предобусловливания для решения эллиптических уравнений на треугольных сетках. // Журн. вычисл. матем. и матем. физ. 2006, 46(7), с.1096-1112.
377. *О.Ю. Милукова.* Новые параллельные итерационные методы с факторизованными матрицами предобусловливания для решения эллиптических уравнений на треугольных сетках // Математическое моделирование, 2007, 19(9), с. 27-48.
378. *О.Ю. Милукова, И.В. Попов.* О некоторых параллельных итерационных методах решения эллиптических уравнений на тетраэдральных сетках. // Матем. модел., 2009, 21(12), с. 3-20.
379. *G. Karypis and V. Kumar.* A fast and high quality multilevel scheme for partitioning irregular graphs. – Technical Report TR 95-035, Department of Computer Science, University of Minnesota, 1995.
380. *G. Karypis and V. Kumar.* Analysis of multilevel graph partitioning. – Technical Report TR 95-037, Department of Computer Science, University of Minnesota, 1995.
381. *G. Karypis, V. Kumar.* METIS: A Software Package for Partitioning Unstructured Graphs, Partitioning Meshes, and Computing Fill-Reducing Orderings of Sparse Matrices (version 3.0.3). University of Minnesota / Army HPC Research Center, November 1997. (the METIS homepage is at <http://wwwusers.cs.umn.edu/~karypis/metis/metis/main.shtml>).
382. *G. Karypis, K. Schloegel, V. Kumar.* ParMETIS: Parallel Graph Partitioning and Sparse Matrix Ordering Library. University of Minnesota, version 2.0 edition, July 1997. (the ParMETIS homepage is at <http://www-users.cs.umn.edu/~karypis/metis/parmetis/main.shtml>).
383. *G. Karypis, K. Schloegel, V. Kumar.* Graph Partitioning for High Performance Scientific Simulations. – CRPC Parallel Computing Handbook, Morgan Kaufmann, 2000.
384. *A. Grama, A. Gupta, G. Karypis, V. Kumar.* Introduction to Parallel Computing, (Second Edition). – Addison-Wesley, 2003.
385. METIS - Family of Multilevel Partitioning Algorithms, <http://glaros.dtc.umn.edu/gkhome/views/metis>, 2009.
386. *М.В. Якововский.* Обработка сеточных данных на распределенных вычислительных системах // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Математическое моделирование физических процессов, 2004, вып. 2, с. 40-53.

387. *М.В. Якобовский*. Инкрементный алгоритм декомпозиции графов. // Вестник ННГУ. Серия «Матем. Моделирование и оптим. управление», вып. 1(28), с. 243-250.
388. *Е.Н. Головченко*. Комплекс программ параллельной декомпозиции сеток. / Труды XII всероссийской конференции «Научный сервис в сети Интернет: суперкомпьютерные центры и задачи» (20–25 сентября 2010 года, Новороссийск) – М., МГУ, 2010. – с. 568-573.
389. *В.В. Воеводин*. Математические модели и методы в параллельных процессах. – М., Наука, 1986. – 296 с.
390. *В.В. Воеводин*. Математические основы параллельных вычислений. – М., Изд-во МГУ, 1991. – 345 с.
391. *Б.Н. Четверушкин, В.А. Гасилов, С.В. Поляков, М.В. Якобовский, Е.Л. Карташева, И.В. Абалакин, В.Г. Бобков, А.С. Болдарев, С.Н. Болдырев, С.В. Дьяченко, П.С. Кринов, А.С. Минкин, И.А. Нестеров, О.Г. Ольховская, И.В. Попов, С.А. Суков*. Пакет прикладных программ GIMM для решения задач гидродинамики на многопроцессорных вычислительных системах. // Математическое моделирование, 2005, 17(6), с. 58-74.
392. <http://gmplib.org/> – Библиотека арифметических вычислений с повышенной точностью.
393. *Y. Hida, X.S. Li, D.H. Bailey*. Library for Double-Double and Quad-Double Arithmetic. (December 29 2007). (<http://web.mit.edu/tabbott/Public/quaddouble-debian/qd-2.3.4/docs/qd.pdf>)
394. <http://www.tecplot.com/> – Официальный сайт разработчиков программы TecPlot.
395. *М.В. Якобовский*. Вычислительная среда для моделирования задач механики сплошной среды на высокопроизводительных системах. Диссертация на соискание степени доктора физ.мат. наук по специальности 05.13.18. – М., 2006 г., 225 с.
396. Транспьютеры. Архитектура и программное обеспечение. / Под ред. Г. Харпа. – М., Радио и связь, 1993.
397. *М.В. Якобовский*. Распределенные системы и сети. – М., МГТУ "СТАНКИН", 2000. – 118 с.
398. *О.Ю. Милюкова, Н.Г. Чурбанова*. О построении параллельных алгоритмов решения двумерных задач радиационной газовой динамики. // Математическое моделирование, 1994, 6(9), с. 53–60.
399. *О.Ю. Милюкова*. Параллельный итерационный метод решения двумерного уравнения переноса излучения. // Математическое моделирование, 1996, 8(2), с. 19-28.
400. <http://www.top500.org> – Список 500 самых мощных суперкомпьютеров мира.
401. *В.В. Корнеев*. Параллельные вычислительные системы. – М., Нолидж, 1999. – 320 с.
402. *Б.Я. Цилькер, С.А. Орлов*. Организация ЭВМ и систем. – СПб., Питер, 2007. – 672 с.
403. *В.Г. Хорошевский*. Архитектура вычислительных систем. – М., МГТУ им. Баумана, 2008. – 520 с.

404. CUDA: Новая архитектура для вычислений на GPU. (http://www.nvidia.ru/content/cudazone/download/ru/CUDA_rus.pdf).
405. PARIX Release 2.1. – Parsytec Computer GmbH, 1993. – 500 с.
406. *A. Geist, A. Beguelin, J. Dongarra, W. Jiang, R. Manchek, V. Sunderam.* PVM 3 User's Guide and Reference Manual // Technical report, Oak Ridge National Laboratory ORNL/TM-12187. – 1993.
407. <http://www.mpi-forum.org/> – Сайт стандартов MPI.
408. *D.W. Walker.* The design of a standard message-passing interface for distributed memory concurrent computers // *Parallel Computing*, 1994, 20(4), pp. 657-673.
409. OpenMP Forum, "OpenMP: A Proposed Industry Standard API for Shared Memory Programming," October, 1997. (<http://www.openmp.org>.)
410. *Н.А. Коновалов, В.А. Крюков, С.Н. Михайлов, А.А. Погребцов.* FORTRAN DVM – язык для разработки мобильных параллельных программ // *Программирование*, 1995, 1, с. 49-54.
411. *Н.А. Коновалов, В.А. Крюков, Ю.Л. Сазанов.* C-DVM – язык разработки мобильных параллельных программ // *Программирование*, 1999, 1, с. 54-65.
412. *А.С. Антонов.* Введение в параллельные вычисления. – М., Изд-во МГУ, 2002. – 69 с.
413. *В.А. Крюков.* Разработка параллельных программ для вычислительных кластеров и сетей. // *Информационные технологии и вычислительные системы*. 2003, 1-2, с. 42-61.
414. *К.Ю. Богачев.* Основы параллельного программирования. – М., БИНОМ. Лаборатория знаний, 2003. – 342 с.
415. *А.С. Антонов.* Параллельное программирование с использованием технологии MPI. – М., Изд-во МГУ, 2004. – 71 с.
416. *М.В. Якововский, Е.Ю. Кулькова.* Решение задач на многопроцессорных вычислительных системах с разделяемой памятью. – М., "СТАНКИН", 2004. – 30 с.
417. *А.С. Антонов.* Параллельное программирование с использованием технологии OpenMP. – М., Изд-во МГУ, 2009. – 77 с.
418. *A.L. Mc Whorter, R.H. Rediker.* // *Proc. IRE*, 1959, 47(7), p. 1207.
419. *P. Hendriks, E. Zwaal, J.G.A. Dubois, F. Blom, and J. Wolter.* Electric field induced parallel conduction in GaAs/AlGaAs. // *J. Appl. Phys.*, 1991, 69(1), pp. 302–306.
420. *E.A.E. Zwaal, M.J.M. Vermuelen, P.Hendriks, J. E. M. Haverkort, and J. H. Wolter.* Observation of current filaments in GaAs/Al_xGa_{1-x}As heterostructures using a time resolved imaging technique. // *J. Appl. Phys.*, 1992, 71(7), pp. 3330-3335.
421. *E.A.E. Zwaal, P. Hendriks, M.J.M. Vermuelen, P. T. J. van Helmond, J. E. M. Haverkort, and J. H. Wolter.* Origin of current instabilities in GaAs/Al_xGa_{1-x}As heterostructures: Avalanche ionization in the Al_xGa_{1-x}As layer. // *J. Appl. Phys.*, 1993, 73(5), pp. 2381-2385.
422. *J.H. Wolter, J.E.M. Hakerkort, P. Hendriks, E.A.E. Zwaal.* Real-space transfer and current filamentation in AlGaAs/GaAs heterojunctions subjected to high-electric fields. / In:

- “Ultrafast Phenomena in Semiconductors”, David K. Ferry; Henry M. van Driel (editors), SPIE Proc., 1994, v. 2142, pp.296-313.
423. *L.L.Bonilla, S.M. Teitsworth.* // Physica D, 1991, **50**, p. 545.
424. *L.L.Bonilla.* // Phys. Rev. B, 1992, **45**, p. 11642.
425. *A.M. Kahn, D.J. Mor, and R.M. Westerfeld.* // Phys. Rev. B, 1992, **45**, p. 8342.
426. *K. Aoki, K. Yamamoto, N. Mugibayshi.* // J. Phys. Soc. Jap., 1988, **57**, p. 26.
427. *G. Hupper and E. Schoell.* // Phys. Rev. Lett., 1991, **66**, p. 2372.
428. *J. Spangler, U. Margull, W. Prettl.* // Phys.Rev. B, 1992, **45**, 12137.
429. Э. Шёлль. Самоорганизация в полупроводниках. – М., Мир, 1991. – 459 с.
430. *W. Clauss, A. Kittel, U. Rau, J. Parisi, J. Peinke and R.P. Huebener.* // Europhys. Lett., **12**, 423 (1990)
431. *О.А. Рябушкин, В.А. Бадер, Д.Ю. Бабкин.* // Письма в ЖТФ, 1992, **18**, с. 56.
432. *О.А. Ryabushkin, V.A. Sablikov, N.S. Platonov, et al..* / Proc. of SPIE’s 1992 Intern. Symposium on Optical Appl. Science and Engineering, San Diego, USA, 1992, **1751**, pp. 189-196.
433. *A.A. Kastalskiy.* // Phys. stat. solidi (a), 1973, **15**, p. 599.
434. *E. Schoell.* // Z. Phys. B - Condensed Matter, 1982, **46**, p. 23.
435. *И. Акасахи, Т. Хара.* / Труды IX международной конференции по физике полупроводников, т. 2, с. 833. – Л., Наука, 1969.
436. *J. Parizi, U. Rau, J. Peinke, К.М. Mayer.* // Z. Phys. B - Condensed Matter, 1988, **72**, p. 225.
437. *А.Ф. Волков, Ш.М. Коган.* // УФН, 1968, 96, с. 633.
438. *Z.S. Kachlishvili.* // Phys. stat. sol.(b), 1971, **48**, p. 65.
439. *Л.А. Вайнштейн, И.И. Собельман, Е.А. Юков.* Возбуждение атомов и уширение спектральных линий. – М., Наука, 1979. – 319 с.
440. *В.Ф. Банная, Л.И. Веселова, Е.М. Гершензон, В.А. Чуенков,* // ФТП, 1973, **7**, с. 1972.
441. *В.Ф. Гантмахер, И.В. Левинсон.* Рассеяние носителей тока в металлах и полупроводниках. – М., Наука, 1984. – 352 с.
442. *Б.И. Шкловский, А.А. Эфрос.* Электронные свойства легированных полупроводников. – М., Наука, 1979. – 416 с.
443. *Ю.Я. Ткач, Е.В. Ченский.* // ЖЭТФ, 1992, **100**, p. 1683.
444. *A.L. Efros, Nguen Van Lien, B.I. Shklovskii.* // J. Phys. C, 1979, **12**, p. 1869.
445. *Н.В. Агринская, В.И. Козуб.* // ЖЭТФ, 1991, **99**, p. 929.
446. *В.Н. Абакумов, В.И. Перель, И.Н. Ясиевич.* // ФТП, 1978, **12**, p. 3.
447. *G.R. Allan, A.Black, C.R. Pidgeom, E. Gornik et al.* // Phys.Rev. B, 1985, **31**, p. 3560.
448. *T. Kurosawa.* // J. Phys. Soc. Japan, 1965, **20**, p. 1405.
449. *Б.И. Шкловский.* // ФТП, 1979, **13**, p. 93.
450. *G.D. Gilliland, D.J. Wolford, T.F. Kuech, J.A. Bradley.* // Appl. Phys. Lett., 1991, 59, p. 216.

451. *G.D. Gilliland, D.J. Wolford, T.F. Kuech, J.A. Bradley, H.P. Hjalmarson.* // *J. Appl. Phys.*, 1993, 73, p. 8386.
452. *Z.W. Wang, J. Windscheif, D.J. As, W. Jantz.* // *J. Appl. Phys.*, 1993, 73, p. 1430.
453. *Q.X. Zhao, B. Monemar, P.O. Holtz, T. Lundstrom, M. Sundarat, J.L. Merz, A.C. Gossardet.* // *Phys. Rev. B*, 1994, 50, p. 7514.
454. *И.А. Авруцкий, О.П. Осауленко, В.Г. Плотченко, Ю.Н. Пырков.* // *ФТП*, 1992, 26, p. 1907.
455. *J.S. Massa, G.S. Buller, A.C. Walker, G. Horsburgh, J.T. Mullins, K.A. Prior, B.C. Cavenett.* // *Appl. Phys. Lett.*, 1995, 66, p. 1346.
456. *M. Sydor, J.R. Engholm, M.O. Manasreh, et al.* Indirect photoreflectance from high-electron-mobility transistor structures. // *Physical Review B*, 1992, 45(23), pp. 13796-13798.
457. *К.В. Шалимова.* Физика полупроводников. – М., Энергия, 1976. – 416 с.
458. *J.S. Blakemore* // *J. Appl. Phys.*, **53**, R123 (1982)
459. *М.К. Шейнкман, А.Я. Шук.* // *ФТП*, **10**, 209 (1976)
460. *А.В. Ржанов.* Электронные процессы на поверхности полупроводников. – М., Наука, 1971. – 480 с.
461. *Т. Андо, А. Фаулер, Ф. Стерн.* Электронные свойства двумерных систем. М.: Мир, 1985. – с.
462. *С.М. Рывкин, Д.В. Тархин.* // *ФТП*, 1973, 7, p. 1447.
463. *J.E. Carnes, W.F. Kosonocky, E.F. Ramberg.* // *IEEE Trans. Electron. Dev.*, 1972, ED-19, p. 798.
464. *Л.В. Беляков, Д.Н. Горячев, С.М. Рывкин, О.М. Сресели, Р.А. Сурис.* // *ФТП*, 1979, 13, p. 2173.
465. *А.Г. Денисов, Г.С. Дорджин, Ю.Г. Садофьев, Л.В. Шаронова, А.Я. Шук, Ю.В. Шмарцев.* // *ФТП*, 1982, 16, p. 2152.
466. *О.А. Ryabushkin, V.A. Sablikov, V.G. Mokerov, Yu.V. Fyodorov.* // International Symposium 'NANOSTRUCTURES: Physics and Technology - 95', St.-Petersburg, Russia, 1995, Abstracts of invited lectures and contributed papers, pp. 52-55.
467. *В.Е. Борисенко, А.И. Воробьева, Е.А. Уткина.* Нанoeлектроника. – М., БИНОМ. Лаборатория знаний, 2009. – 224 с.
468. *А.Н. Игнатов, Н.Е. Фадеева, В.Л. Савиных.* Классическая электроника и нанoeлектроника. – М., Флинта, 2009. – 728 с.
469. *С.С. Анлеснин.* Основы спинтроники. – М., Лань, 2010. – 288 с.
470. *S.A. Wolf, D.D. Awschalom, R.A. Buhrman, J.M. Daughton, S. von Molnar, M.L. Roukes, A.Y. Chtchelkanova, and D.M. Treger.* A Spin-Based Electronics Vision for the Future. // *Science*, **294**, pp. 1488-1495 (2001).
471. *S.M. Cronenwett, H.J. Lynch, D. Goldhaber-Gordon, L.P. Kouwenhoven, C.M. Marcus, K. Hirose, N. S. Wingreen, and V. Umansky.* Low-Temperature Fate of the 0.7 Structure in a

- Point Contact: A Kondo-like Correlated State in an Open System. // *Phys. Rev. Lett.*, **88**(22), p. 6805 (2002).
472. *D. J. Reilly, T. M. Buehler, J. L. O'Brien, A. R. Hamilton, A. S. Dzurak, R. G. Clark, B. E. Kane, L. N. Pfeiffer, and K. W. West.* Density-Dependent Spin Polarization in Ultra-Low-Disorder Quantum Wires. // *Phys. Rev. Lett.*, **89**(24), p. 6801 (2002).
473. *K. Hirose, Y. Meir, and N.S. Wingreen.* Local Moment Formation in Quantum Point Contacts. // *Phys. Rev. Lett.*, **90**(2), p. 6804 (2003).
474. *A.C. Graham, K.J. Thomas, M. Pepper, N.R. Cooper, M.Y. Simmons, and D.A. Ritchie.* Interaction Effects at Crossings of Spin-Polarized One-Dimensional Subbands. // *Phys. Rev. Lett.*, **91**(13), p. 6404 (2003).
475. *Jonathan P. Bird and Yuichi Ochiai.* Electron Spin Polarization in Nanoscale Constrictions. // *Science*, **303**(3), p. 1621 (2004).
476. *У. Хэпписон.* Теория твердого тела. – М., Мир, 1972. – 616 с.
477. *D. Temple.* // *Mater. Scie. & Engineer.* 1999. V. R24. P. 185-239.
478. *Н.А. Дюжев, Ю.И. Тишин, В.А. Федирко.* // *Электронная промышленность: наука, технология, изделия*, 2004, 3, с. 55-58.
479. *K.L. Jensen, R.J. Nemanich, P. Holloway, T. Trottier, W. Mackie, D. Temple, J. Itoh.* Electron-Emissive Materials, Vacuum Microelectronics and Flat-Panel Displays. / *Pub. Materials Research Society*, 2004.
480. *Татаренко Н.И., Кравченко В.Ф.* Автоэмиссионные наноструктуры и приборы на их основе. – М.: ФИЗМАТЛИТ, 2006. – 192 с.
481. *Дьячков П.Н.* Углеродные нанотрубки: строение, свойства, применение / П.Н. Дьячков. – М.: БИНОМ. Лаборатория знаний, 2006. – 293 с.
482. *Н. Кобаяси.* Введение в нанотехнологию. – М., БИНОМ, Лаборатория знаний, 2008. – 134 с.
483. *H.F. Gray.* // *Techn. Dig. of the 11th IVMC'98*, 1998, p. 278.
484. *J.L. Shaw, H.F. Gray.* // *Techn Dig. of the 11th IVMC'98*, 1998, p. 146.
485. *L. Wang, R. Stevans, E. Hug, et al.* // *JVST*, 2004, B22(3), p. 1407-1410.
486. *H. Miura, T. Ukeba, H. Shimawaki, K. Yokoo.* // *JVST*, 2004, B22(3), pp. 1218-1221.
487. *T. Matzukawa, S. Kanemaru, K. Tokunaga, J. Itoh.* // *JVST*, 2000, B18(2), pp. 1111-1114.
488. *M. Ding, H. Kim, A.I. Akinwade.* // *IEEE El. Dev. Lett.*, 2000, 21(2), pp. 66-99.
489. *V.A. Fedirko, N.A. Duzhev, V.A. Nikolaeva.* *Suppl a la Revue "Le Vide, les Couches Minces"*, (papers from the 7th IVMC'94), 1994, 271, p. 158.
490. *В.А. Федирко, В.А. Николаева.* Полевая эмиссия из кремния. // *Математическое моделирование*, 1997, 9(9), с. 75–82.
491. *Л.Н. Добрецов, М.В. Гомоюнова.* Эмиссионная электроника. – М., Наука, Ф.-М., 1966. – 564 с.
492. *С.В. Поляков, Т.А. Кудряшова, А.А. Свердлин, Э.М. Кононов, О.А. Косолапов.* Параллельный программный комплекс для решения задач механики сплошной

- среды на современных многопроцессорных системах. // Математическое моделирование, 2010, 22(6), с. 132-146.
493. *М. Шлее*. Qt 4.5 Профессиональное программирование на C++. – СПб., «БХВ-Петербург», 2010. – 896 с.
494. *И.В. Попов, С.В. Поляков, Ю.Н. Карамзин*. Новый подход к построению треугольных и тетраэдральных сеток. / Сеточные методы для краевых задач и приложения. Материалы Четвертого Всероссийского семинара (Казань, 13-16 сентября 2002 г.), с. 84-89. – Казань, Издательство Казанского Математического общества, 2002.
495. *I.V. Popov, I.V. Sedukh*. Construction of 3D convex and weakly nonconvex hulls in problems of mathematical physics. // Russ. J. Numer. Anal. Math. Modelling, 2007, 22(6), pp. 591-600.
496. *Si Hang*. TetGen: A Quality Tetrahedral Mesh Generator. – <http://tetgen.berlios.de/>, 2009.
497. *С.А. Суков*. Параллельные алгоритмы моделирования газодинамического обтекания тел на нерегулярных тетраэдральных сетках. / Диссертация на соискание ученой степени канд. физ.-мат. наук по специальности 05.13.18. – М., 2004.
498. PETSc: <http://www-fp.mcs.anl.gov/petsc/index.html>.
499. *P.S. Krinov, S.V. Muravyov, M.V. Jakobovski*. Large Data Volume Visualization on Distributed Multiprocessor Systems. Parallel Computational Fluid Dynamics: Advanced numerical methods software and applications. Proc. of the Parallel CFD 2003 Conference Moscow, Russia (May 13-15, 2003) (Ed. By B.Chetverushkin et al.), Elsevier, Amsterdam, 2004. – pp.433-438.
500. *J.R. Lloyd*. Electromigration in integrated circuits conductors. // J. Phys. D: Appl. Phys., 1999, 32, pp. R109-R118.
501. *J.R. Lloyd, J. Clemens, R. Snede*. Copper metallization reliability. // Microelectronics reliability, 1999, 39, pp. 1595-1602.
502. *J.W. Cahn, J.E. Hilliard*. Free Energy of a Nonuniform System. I. Interfacial Free Energy. // J. Chemical Physics, 1958, 28(2), pp. 258-267.
503. *J.W. Barrett, J.F. Blowey*. Finite Element Approximation of an Allen-Cahn/Cahn-Hilliard System. // IMA J. Numer. Anal. 22 (1) (2002), pp. 11-71.
504. *D.N. Bhate, A. Kumar, A.F. Bower*. Diffuse interface model for electromigration and stress voiding. J. Applied Physics, 2000, 87(4), p. 1712- 1721.
505. *J.A. Sethian*. Level Set Methods and Fast Marching Methods: Evolving Interfaces in Computational Geometry, Fluid Me. Cambridge University Press, 1999. – 400 p.
506. *V. Sukharev*. Physically-Based Simulation of Electromigration Induced Failures in Copper Dual-Damascene Interconnect. 5th International Symposium on Quality Electronic Design (ISQED'04), special issue 2f, 2004, pp. 225-231.
507. *V. Sukharev*. Physically based simulation of electromigration-induced degradation mechanisms in dual-inlaid copper interconnects. // IEEE Trans. On CAD of Integrated Circuits and Systems. 2005, 24(9), pp. 1326-1335.

508. *V. Sukharev*. Simulation of Microstructure Influence on EM-Induced Degradation In Cu Interconnects. 8th International Stress-Induced Phenomena in Metallization, held 12-14 September 2005 in Dresden, Germany. AIP Conference Proceedings, Vol. 817. Edited by Ehrenfried Zschech, Karen Maex, Paul S. Ho, and Tomoji Nakamura. – Melville, NY, American Institute of Physics, 2006, pp. 244-253.
509. *С.З. Бокиштейн*. Диффузия и структура металлов. – М., Metallurgia, 1973. – 206 с.
510. *Я.Е. Гегузин*. Диффузионная зона. – М., Наука, 1979. – 344 с.
511. *В.Н. Чеботин*. Явления переноса в ионных кристаллах. – Свердловск, Изд-во УрГУ, 1968. – 181 с.
512. *В.Н. Чеботин*. Химическая диффузия в твердых телах. – М., Наука, 1989. – 208 с.
513. *V.I. Lebedev*. Extremal polynomials and methods of optimization of numerical algorithms. // SB MATH, 2004, 195(10), pp. 1413-1459.

Список работ по теме диссертации

- A1. *S.V. Polyakov*. Simulation of steady state characteristics in models with non-local nonlinearity. Application to the impurity breakdown in GaAs. / In: «Book of Abstracts of Third International Congress on Industrial and Applied Mathematics», 3-7 July, 1995, Hamburg, Germany (Ed. J. Sourer), p. 402. – GAMM, Regensburg, 1995.
- A2. *В.А. Сабликов, С.В. Поляков, О.А. Рябушкин*. О механизме низкотемпературного примесного пробоя. // ФТП, 1996, 30(7), с. 1251-1264. (**Из списка ВАК**)
- A3. *V.A. Sablikov, O.A. Ryabushkin, S.V. Polyakov, and V.G. Mokerov*. Lateral transfer of light-induced charge carriers in heterostructures with 2D electron gas. / In: “Nanostructures: Physics and Technology – 96”, Int. Symposium, St.-Petersburg, Russia, 1996. Abstracts of invited lectures and contributed papers, Russian Academy of Sciences, 1996, pp. 26-29.
- A4. *В.А. Сабликов, С.В. Поляков, О.А. Рябушкин*. Эффект латерального переноса фотоиндуцированных носителей заряда в гетероструктуре с двумерным электронным газом // ФТП, 1997, 31(4), с. 393-399. (**Из списка ВАК**)
- A5. *V.A. Sablikov, O.A. Ryabushkin, S.V. Polyakov, and V.G. Mokerov*. Lateral Transfer of Light-Induced Charge Carriers and Electric Field in Locally Illuminated Modulation Doped AlGaAs/GaAs Heterostructures. / In: “Compound Semiconductors 1996”, (Eds. R. Suris and M. Shur), pp. 941-944. – IOP Publishing Ltd, Bristol and Philadelphia, 1997.
- A6. *V.A. Sablikov, S.V. Polyakov*. Optical-beam-induced currents in modulation doped heterostructures. / In: “Nanostructures: Physics and Technology”, 5th Int. Symposium, St.Petersburg, Russia, June 23-27, 1997, proceedings (Eds. Zh. Alferov and L. Esaki), pp. 555-558. – Published by Ioffe Physico-Technical Institute, St.-Petersburg, 1997.
- A7. *С.В. Поляков, В.А. Сабликов*. Латеральный перенос фотоиндуцированных носителей заряда в гетероструктурах с двумерным электронным газом // Математическое моделирование, 1997, 9(12), с. 76-86. (**Из списка ВАК**)

- A8. В.А. Федирко, Ю.Н. Карамзин, И.Г. Захарова, С.В. Поляков. Двумерная модель полевой эмиссии электронов из кремниевого микроатода. / В сб. "Фундаментальные физико-математические проблемы и моделирование технико-технологических систем" под ред. Л.А. Уваровой, с. 97-105. – М., Изд-во "СТАНКИН", 1998.
- A9. V.A. Sablikov and S.V. Polyakov. Dynamic Conductance of Interacting Electrons in a Mesoscopic Quantum Wire. // Phys. Low-Dim. Struct., 1998, V. 5/6, pp. 101-110.
- A10. V.A. Sablikov, S.V. Polyakov and B.S. Shchamkhalova. Coulomb interaction and charging effects in conductance of mesoscopic quantum wire structures. / In: "Nanostructures: Physics and Technology", 6th Int. Symposium, St.Petersburg, Russia, June 22-26, 1998, proceedings (Eds. Zh. Alferov and L. Esaki), pp. 87-90. Published by Ioffe Physico-Technical Institute, St.-Petersburg, 1998.
- A11. В.А. Федирко, Ю.Н. Карамзин, И.Г. Захарова, С.В. Поляков. Параллельный алгоритм расчета полевой эмиссии из кремниевого микроатода реальной геометрии. / В сб. "Фундаментальные физико-математические проблемы и моделирование технико-технологических систем", вып. 2, под ред. Л.А. Уваровой, с. 143-150. – М., Изд-во "СТАНКИН", 1999.
- A12. V.A. Fedirko and S.V. Polyakov. Modelling of 2D Electron Field Emission from Silicon Microcathode. / In: "Mathematical Models of Non-Linear Excitations, Transfer, Dynamics, and Control in Condensed Systems and Other Media" (Eds. L.A. Uvarova, A.E. Arinshtein, and A.V. Latyshev), pp. 221-228. – Plenum press, New York, 1999.
- A13. В.А. Федирко, С.В. Поляков, Ю.Н. Карамзин, И.Г. Захарова. Моделирование полевой эмиссии горячих электронов из кремниевого микроатода. // Прикладная физика, 1999, вып. 1, с. 102-111. **(Из сниска ВАК)**
- A14. V. Fedirko, Yu. Karamzin, S. Polyakov, I. Zakharova. Numerical modelling of 2D field emission from silicon wedge microcathode. / In: "Recent Advances in Numerical Methods and Applications II". (Eds. O.P. Iliev, M.S. Kaschiev, S.D. Margenov, B.H. Sendov and P.S. Vassilevski), Proc. of Fourth Int. Conf., NMA'98, Sofia, Bulgaria, 19-23 August 1998, pp. 890-897. – World scientific, Singapore/N-Jersey/London/H-Kong, 1999.
- A15. V.A. Sablikov, S.V. Polyakov. Charging effects in a quantum wire with leads. / In: "Nanostructures: Physics and Technology", 7th Int. Symposium, St.Petersburg, Russia, June 14-18, 1999, Proceedings (Eds. Zh. Alferov and L. Esaki), pp. 463-466. – Published by Ioffe Physico-Technical Institute, St.Petersburg, 1999.
- A16. V.A. Sablikov, S.V. Polyakov and M. Buttiker. Charging Effects in a Quantum Wire with Leads. // Cond. Mat., 1999, No. 9908395, 11 pp.
- A17. В.А. Федирко, С.В. Поляков. Численное моделирование переноса горячих электронов в полупроводниковом автоэммитере. / В сб. "Фундаментальные физико-математические проблемы и моделирование технико-технологических систем", вып. 3, под ред. Л.А. Уваровой, с. 117-122. – М., Изд-во "СТАНКИН", 2000.
- A18. V.A. Sablikov, S.V. Polyakov, M. Buttiker. Charging effects in a quantum wire with leads. // Phys. Rev. B, 2000, 61(20), pp. 13763-13773.

- A19. *V.A. Sablikov, S.V. Polyakov*. Electron transport in a mesoscopic wire: the charging and exchange interaction effects. / In: "Nanostructures: Physics and Technology", 8th Int. Symposium, St.Petersburg, Russia, June 19-23, 2000, Proceedings (Eds. Zh. Alferov and L. Esaki), pp. 526-529. – Published by Ioffe Physico-Technical Institute, St.-Petersburg, 2000.
- A20. *С.В. Поляков*. Моделирование на МВС процессов нелинейного электронного транспорта в квантовых каналах. / В кн. "Высокопроизводительные вычисления и их приложения: Труды Всероссийской научной конференции (30 октября - 2 ноября 2000 г., г. Черноголовка)", с. 231-235. – М., Изд-во МГУ, 2000.
- A21. *V.A. Fedirko, S.V. Polyakov*. Hot Electron Transport in Semiconductor Field Microemitter. / In: "Fourth All-Russian Seminar on Problems of Theoretical and Applied Electron Optics", Anatoly M. Filachev, Editor, Proceedings of SPIE, Vol. 4187 (2000), pp. 94-99.
- A22. *S.V. Polyakov*. A numerical method for simulation of nonlinear electron transport in a quantum wire. In: Proc. of the 3rd International Conference FDS2000, September 1-4, 2000, Palanga, Lithuania, "Finite Difference Schemes: Theory and Applications", R. Ciegis, A. Samarskii and M. Sapagovas (Eds.). – IMI, Vilnius, 2000, pp. 173-180.
- A23. *В.А. Федирко, С.В. Поляков*. Численное моделирование электронного переноса в полупроводниковом автоэммиттере. // Прикладная физика, 2000, вып. 3, с. 7-13. (**Из списка ВАК**)
- A24. *V.A. Fedirko, S.V. Polyakov*. Simulation of semiconductor field emitter array microcell. / Proc. No. 165 of Int. Conf. "Displays and Vacuum Electronics (DVE 2001)", May 2-3, 2001, Garmish-ParteanKirche, pp. 431-438.
- A25. *В.А. Федирко, С.В. Поляков*. Моделирование ударной ионизации в полупроводниковом автоэммиттере. / В сб. "Фундаментальные физико-математические проблемы и моделирование технико-технологических систем", вып. 4, под ред. Л.А. Уваровой, с. 128-135. – М., Изд-во "СТАНКИН", 2001.
- A26. *V.A. Fedirko, Yu.N. Karamzin, and S.V. Polyakov*. Simulation of electron transport in semiconductor microstructures: field emission from nanotip. / In: "Mathematical Modeling. Problems, Methods, Applications." (Edited by L.A. Uvarova and A.V. Latyshev), pp. 79-90, Kluwer Academic/Plenum Publishers, New York, Boston, Dordrecht, London, Moscow, 2001.
- A27. *Т.А. Кудряшова, С.В. Поляков*. О некоторых методах решения краевых задач на многопроцессорных вычислительных системах. / Труды четвертой международной конференции по математическому моделированию, 27 июня - 1 июля 2000 г., г. Москва (под ред. Л.А. Уваровой), том 2, с. 134-145. – М., Изд-во "СТАНКИН", 2001.
- A28. *S.V. Polyakov*. Simulation of nonlinear electron transport in a quantum wires. // Journal of Computational Methods in Sciences and Engineering (JCMSE). 2002, 2(1s-2s), pp. 207-212.

- A29. *Ю.Н. Карамзин, С.В. Поляков, И.В. Попов.* Разностные схемы для параболических уравнений на треугольных сетках. // Известия высших учебных заведений. Серия Математика, 2003, 1(488), с. 53-59. **(Из списка ВАК)**
- A30. *Т.А. Кудряшова, С.В. Поляков.* Параллельные алгоритмы решения многомерных краевых задач для параболических уравнений. / В сб. "Фундаментальные физико-математические проблемы и моделирование технико-технологических систем", вып. 6, под ред. Л.А. Уваровой, с. 212-226. – М., Изд-во "Janus-K", 2003.
- A31. *Ю.Н. Карамзин, И.В. Попов, С.В. Поляков.* Разностные методы решения задач механики сплошной среды на неструктурированных треугольных и тетраэдральных сетках. // Математическое моделирование, 2003, 15(11), с. 3-12. **(Из списка ВАК)**
- A32. *I.V. Popov, S.V. Polyakov, Yu.N. Karamzin.* High Accuracy Difference Schemes On Unstructured Triangle Grids, In: "Numerical methods and Applications, 5th Int. Conf., NMA 2002, Borovets (Bulgaria), August 2002, Revised Papers" (Eds. I. Dimov, I. Lirkov, S. Margenov, and Z. Zlatev), pp. 555-562. – Springer, Berlin – Heidelberg – New York – Hong Kong – London – Milan – Paris – Tokyo, 2003.
- A33. *V.A. Sablikov, S.V. Polyakov.* Spin-Charge Structure of Quantum Wires Coupled To Electron Reservoirs. // International Journal of Nanoscience (IJN), 2003, 2(6), pp. 487-494. (World Scientific Publishing Company)
- A34. *В.А. Федирко, С.В. Поляков.* Моделирование на МВС устройств вакуумной микроэлектроники, / В сб. "Фундаментальные физико-математические проблемы и моделирование технико-технологических систем", вып. 7, под ред. Л.А. Уваровой. – М.: Янус-К, ИЦ МГТУ "Станкин", 2004, с. 138-147.
- A35. *Ю.Н. Карамзин, С.В. Поляков, И.В. Попов.* Разностные схемы на треугольных сетках для параболических уравнений общего вида. / В кн. "Сеточные методы для краевых задач и приложения", Материалы Пятого Всероссийского семинара, посвященного 200-летию Казанского государственного университета (Казань, 17-21 сентября 2004 г.), с. 97-100. – Казань: Казанский государственный университет, 2004.
- A36. *С.В. Поляков.* Методы решения современных задач микроэлектроники на многопроцессорных вычислительных системах. / В кн. "Сеточные методы для краевых задач и приложения", Материалы Пятого Всероссийского семинара, посвященного 200-летию Казанского государственного университета (Казань, 17-21 сентября 2004 г.), с. 199-201. – Казань: Казанский гос. университет, 2004.
- A37. *S.V. Polyakov.* Simulation of electron transport in quantum structures. / In: "Mathematical modeling: modern methods and applications". The book of scientific articles/edited by Lyudmila A. Uvarova, pp. 183-195. – Moscow: Yanus-K, 2004.
- A38. *В.А. Сабликков, С.В. Поляков.* Спонтанная спиновая поляризация и электронные корреляции в мезоскопических квантовых проводках. // Известия академии наук. Серия физическая, 2004, 68(1), с. 39-41. **(Из списка ВАК)**

- A39. С.В. Поляков. Численные методы для моделирования электронных процессов в квантовых структурах. // Вестник ННГУ. Серия "Математическое моделирование и оптимальное управление". 2005, вып. 1(28), с. 200-207. **(Из списка ВАК)**
- A40. С.В. Поляков. Моделирование электронного транспорта в условиях спонтанной спиновой поляризации. // Вестник ННГУ. Серия "Математическое моделирование и оптимальное управление". 2005, вып. 2(29), с. 192-200. **(Из списка ВАК)**
- A41. Ю.Н. Карамзин, С.В. Поляков, И.В. Попов, Г.М. Кобельков, С.Г. Кобельков, Jim Ho Choу. Моделирование процессов образования и миграции пор в межсоединениях электрических схем. // Математическое моделирование, 2007, 19(10), с. 29-43. **(Из списка ВАК)**
- A42. С.В. Поляков. Экспоненциальные схемы для решения эволюционных уравнений на нерегулярных сетках. // Ученые записки казанского государственного университета. Серия "Физико-математические науки", 2007, т. 149, кн. 4, с. 121-131. **(Из списка ВАК)**
- A43. С.В. Поляков, В.А. Федирко. Программный комплекс для моделирования катодного микроузла с полупроводниковым автоэммиттером. // Прикладная физика, 2008, вып. 2, с. 48-55. **(Из списка ВАК)**
- A44. В.А. Федирко, Д.А. Зенюк, С.В. Поляков. Численное моделирование стационарного туннелирования электронов через потенциальный барьер. / В сб. "Фундаментальные физико-математические проблемы и моделирование технико-технологических систем", вып. 12, под ред. Л.А. Уваровой. Том 1, с. 170-184. – М.: "Янус-К", 2009.
- A45. S. Polyakov, M. Jakobovski. GEOMETRICAL SIMULATION AND VIZUALIZATION IN NANOELECTRONICS PROBLEMS. // COMPUTER GRAPHICS & GEOMETRY, 2009, Spring, V. 11, N. 1, pp. 44-68. (<http://www.cgg-journal.com/2009-1/05/index.html>).
- A46. С.В. Поляков. Моделирование с помощью МВС процессов электронной эмиссии с поверхности наноструктур. / Труды Всероссийской суперкомпьютерной конференции "Научный сервис в сети ИНТЕРНЕТ. Масштабируемость, параллельность, эффективность" (Абрау-Дюрсо, 21-26 сентября 2009 г.). с. 1-4.
- A47. С.В. Поляков, М.В. Якобовский. Геометрическое моделирование и визуализация в задачах современной электроники. // "Научная визуализация", 2009, 1(1), с. 19-65. (<http://sv-journal.com/2009-1/index.php?lang=ru>).
- A48. В.А. Федирко, С.В. Поляков, Д.А. Зенюк. Матричный метод для моделирования туннельного переноса. // Математическое моделирование, 2010, 22(5), с. 3-14. **(Из списка ВАК)**
- A49. Ю.Н. Карамзин, С.В. Поляков. Экспоненциальные конечно-объемные схемы для решения эллиптических и параболических уравнений общего вида на нерегулярных сетках. / В кн. "Сеточные методы для краевых задач и приложения. Материалы Восьмой Всероссийской конференции, посвященной 80-летию со дня рождения А.Д. Ляшко", с. 234-248. – Казань, Казанский университет, 2010.