УДК 518 : 517.9

В. П. ГИНКИН

(Обнинск Калужской обл.)

ЭФФЕКТИВНЫЙ МЕТОД РЕШЕНИЯ ОДНОГО КЛАССА ЗАДАЧ ЭЛЛИПТИЧЕСКОГО ТИПА ПРИ ОТСУТСТВИИ ДИАГОНАЛЬНОГО ПРЕОБЛАДАНИЯ

Пусть дано уравнение

$$L\varphi = f, \tag{1}$$

где L — пятиточечный оператор вида

$$L\varphi_{i,k} = -a_{i,k}\varphi_{i-1,k} - b_{i,k}\varphi_{i,k-1} - c_{i,k}\varphi_{i+1,k} - d_{i,k}\varphi_{i,k+1} + p_{i,k}\varphi_{i,k}, \tag{2}$$

$$i = 1, 2, \ldots, m; \quad k = 1, 2, \ldots, n;$$

$$a_{1,k} = c_{m,k} = 0; \quad b_{i,1} = d_{i,n} = 0.$$

Такие системы возникают при разностной аппроксимации двумерных уравнений диффузии или теплопроводности в задачах численного моделирования технологий полупроводниковых приборов.

Пусть оператор L является конечно-разностным аналогом оператора эллиптического типа в некоторой двумерной области $X = \{x, y\}$ и его элементы удовлетворяют условию диагонального преобладания

$$p_{i,k} \geqslant a_{i,k} + b_{i,k} + c_{i,k} + d_{i,k}, \tag{3}$$

причем

$$p_{i,k} > 0; \quad a_{i,k} \geqslant 0; \quad b_{i,k} \geqslant 0; \quad c_{i,k} \geqslant 0; \quad d_{i,k} \geqslant 0 \tag{4}$$

и неравенство (3) является строгим хотя бы в одной точке X. Задачу (1)—(4) будем называть задачей с диагональным преобладанием (ДП).

Введем в уравнение (1) замену $\varphi = Tu$, где T — диагональный оператор с элементами $t_{i,k} > 0$. Обозначив $L' = LT$, получим уравнение относительно вектора u:

$$L'u = f, \tag{5}$$

здесь оператор L' имеет также вид (2), а его элементы, обозначаемые теми же буквами, что и в (2), но со штрихами, равны

$$a'_{i,k} = a_{i,k}t_{i-1,k}; \quad b'_{i,k} = b_{i,k}t_{i,k-1}; \quad c'_{i,k} = c_{i,k}t_{i+1,k}; \tag{6}$$

$$d'_{i,k} = d_{i,k}t_{i,k+1}; \quad p'_{i,k} = p_{i,k}t_{i,k}.$$

В силу того что $t_{i,k} > 0$, элементы оператора L' так же, как и L, удовлетворяют условию (4). Однако условие диагонального преобладания (3) может не выполняться, т. е. в одной или более точках X имеет место неравенство

$$p'_{i,k} < a'_{i,k} + b'_{i,k} + c'_{i,k} + d'_{i,k}. \tag{7}$$

Такую задачу будем называть задачей без диагонального преобладания (БДП).

Матрица L — M-матрица, а матрица L' — матрица обобщенного M-типа. Для каждой из этих матриц существует обратная матрица, и элементы обратной матрицы положительны.

Один из наиболее эффективных методов решения задачи ДП (1), (3) — метод НФПП, представляющий собой чередование после каждой итерации двух итерационных схем неполной факторизации: схемы h-факторизации [1] (НФ) и схемы параболических прогонок [2] (ПП). В работе [2] на численных примерах показано, что НФПП значительно превосходит по скорости сходимости каждую из схем НФ и ПП в отдельности. В [3] дано теоретическое объяснение этого факта.

Экспериментально установлено, что схема ПП сходится также и при решении задач БДП. Однако схема НФ, а вместе с ней и комбинированная схема НФПП при больших нарушениях диагонального преобладания расходятся.

Покажем, как модифицировать схему НФ, чтобы она сходилась также и для задачи БДП (6), причем с той же асимптотической скоростью сходимости, что и схема НФ для задачи (1).

Схема НФ для задачи (1) имеет вид

$$(L+B)\varphi^j = f + B\varphi^{j-1}, \tag{8}$$

где оператор $L+B$ представляется как произведение двух легкообратимых операторов M и N вида

$$\begin{gathered} Mz_{i,k} = z_{i,k} - \alpha_{i,k} z_{i-1,k}; \\ N\varphi_{i,k} = \gamma_{i,k}\varphi_{i,k} - \beta_{i,k}\varphi_{i,k-1} - \delta_{i,k}\varphi_{i,k+1} - \xi_{i,k}\varphi_{i+1,k}, \end{gathered} \tag{9}$$

а оператор B —

$$\begin{aligned} B\varphi_{i,k} = \alpha_{i,k}[&\beta_{i-1,k}(\varphi_{i-1,k-1} + \varphi_{i,k} - \varphi_{i-1,k} - \varphi_{i,k-1}) + \\ &+ \delta_{i-1,k}(\varphi_{i-1,k+1} + \varphi_{i,k} - \varphi_{i-1,k} - \varphi_{i,k+1})]. \end{aligned} \tag{10}$$

Оператор B в схеме НФ характеризуется тем, что при действии этого оператора на функцию ошибки, не зависящую хотя бы от одного из индексов i или k, ошибка обращается в нуль.

Исключая из системы уравнений (9) функцию z и приравнивая выражения $MN\varphi$ и $(L+B)\varphi$, получим рекуррентные формулы

$$\begin{gathered} \alpha_{i,k} = \frac{a_{i,k}}{\gamma_{i-1,k} - \omega_{i-1,k}}; \qquad \xi_{i,k} = c_{i,k}; \\ \beta_{i,k} = b_{i,k} + \alpha_{i,k}\beta_{i-1,k}; \ \delta_{i,k} = d_{i,k} + \alpha_{i,k}\delta_{i-1,k}; \\ \gamma_{i,k} = p_{i,k} + \alpha_{i,k}(\omega_{i-1,k} - \xi_{i-1,k}); \ \omega_{i,k} = \beta_{i,k} + \delta_{i,k}. \end{gathered} \tag{11}$$

Предположим, что схема (8) сходится и спектральный радиус оператора перехода для нее меньше единицы: $\operatorname{spr} H < 1$, где $H = (L+B)^{-1}B$.

Применяя схему НФ к задаче (5), получим

$$(L'+B')u^j = f + B'u^{j-1}. \tag{12}$$

Здесь оператор B' определяется по-прежнему выражением (10), а рекуррентные формулы — выражениями (11), где коэффициенты $a_{i,k}$, $b_{i,k}$, $c_{i,k}$, $d_{i,k}$, $p_{i,k}$ заменены на коэффициенты со штрихом $a'_{i,k}$, $b'_{i,k}$, $c'_{i,k}$, $d'_{i,k}$, $p'_{i,k}$. Отметим, что в этом случае оператор B' не равен ВТ и поэтому нет гарантии, что спектральный радиус оператора перехода для этой схемы $(LT+B')^{-1}B'$ будет меньше единицы. Если же в схеме (12) вместо оператора B' взять оператор ВТ и построить итерационную схему

$$(L'+BT)u^j = f + BTu^{j-1}, \tag{13}$$

то оператор перехода для этой схемы будет равен

$$H' = (LT+BT)^{-1}BT = T^{-1}HT.$$

Отсюда следует, что $\operatorname{spr} H' = \operatorname{spr} H$ и схема (13) сходится с той же асимптотической скоростью, что и схема (8).

Оператор $L'+BT$ так же, как и выше, представляется в виде произведения двух операторов M и N, и схема (12) сводится к последовательному решению двух уравнений

$$\begin{gathered} Mz^j = f + BTu^{j-1}; \\ Nu^j = z^j. \end{gathered} \tag{14}$$

Операторы M и N имеют вид (9). Оператор BT и элементы операторов M и N определяются следующими выражениями:

$$BTu_{i,k} = \alpha_{i,k}\{\beta_{i-1,k}[u_{i-1,k-1} + (t_{i,k}u_{i,k} - t_{i-1,k}u_{i-1,k} - t_{i,k-1}u_{i,k-1})/t_{i-1,k-1}] + \\ + \delta_{i-1,k}[u_{i-1,k+1} + (t_{i,k}u_{i,k} - t_{i-1,k}u_{i-1,k} - t_{i,k+1}u_{i,k+1})/t_{i-1,k+1}]\}; \quad (15)$$

$$\alpha_{i,k} = \frac{a'_{i,k}}{\gamma_{i-1,k} - t_{i-1,k}\omega_{i-1,k}}; \qquad \xi_{i,k} = c'_{i,k};$$

$$\beta_{i,k} = b'_{i,k} + \alpha_{i,k}\beta_{i-1,k}\frac{t_{i,k-1}}{t_{i-1,k-1}}; \quad \delta_{i,k} = d'_{i,k} + \alpha_{i,k}\delta_{i-1,k}\frac{t_{i,k+1}}{t_{i-1,k+1}}; \quad (16)$$

$$\gamma_{i,k} = p'_{i,k} + \alpha_{i,k}(t_{i,k}\omega_{i-1,k} - \xi_{i-1,k}); \quad \omega_{i,k} = \frac{\beta_{i,k}}{\ldots} + \frac{\delta_{i,k}}{\ldots}$$

Схема параболических прогонок не модифицируется и определяется следующими выражениями:

$$\begin{aligned} &z_{i,k} - \beta_{i,k}z_{i,k-1} - \delta_{i,k}z_{i,k+1} - \alpha_{i,k}z_{i-1,k} = \gamma_{i,k}f_{i,k} + Bu^{j-1}_{i+1,k}; \\ &u^j_{i,k} - \beta_{i,k}u^j_{i,k-1} - \delta_{i,k}u^j_{i,k+1} - \xi_{i,k}u^j_{i+1,k} = \gamma_{i,k}f_{i,k} + \alpha_{i,k}z_{i-1,k}; \end{aligned} \quad (17)$$

$$\begin{aligned} &Bu_{i+1,k} = \beta_{i+1,k}\beta_{i+1,k-1}y_{i+1,k-2}u_{i+1,k-2} + \delta_{i+1,k}\delta_{i+1,k+1}y_{i+1,k+2}u_{i+1,k+2}; \\ &\gamma_{i,k} = (p'_{i,k} - a'_{i,k}y_{i-1,k})^{-1}; \quad \alpha_{i,k} = a'_{i,k}\gamma_{i,k}; \quad \xi_{i,k} = c'_{i,k}\gamma_{i,k}; \end{aligned} \quad (18)$$

$$\begin{aligned} &\beta_{i,k} = \gamma_{i,k}b'_{i,k} + \alpha_{i,k}\beta_{i-1,k}y_{i-1,k}; \quad \delta_{i,k} = \gamma_{i,k}d'_{i,k} + \alpha_{i,k}\delta_{i-1,k}y_{i-1,k}; \\ &y_{i,k} = (1 - \beta_{i,k}\delta_{i,k-1} - \delta_{i,k}\beta_{i,k+1})^{-1}. \end{aligned} \quad (19)$$

Сходимость описанных выше схем исследовалась на модельных задачах и сравнивалась со сходимостью блочного метода Зейделя с переменой направлений прогонок (БМЗ):

$$\begin{aligned} &p'_{i,k}z_{i,k} - a'_{i,k}z_{i-1,k} - c'_{i,k}z_{i+1,k} = f_{i,k} + b'_{i,k}u^{j-1}_{i,k-1} + d'_{i,k}u^{j-1}_{i,k+1}; \\ &p'_{i,k}u^j_{i,k} - b'_{i,k}u^j_{i,k-1} - d'_{i,k}u^j_{i,k+1} = f_{i,k} + a'_{i,k}z_{i-1,k} + c'_{i,k}z_{i+1,k}. \end{aligned} \quad (20)$$

Все три схемы (14), (17), (20) требуют приблизительно одинакового количества арифметических операций, поэтому сравнение схем производилось по числу итераций для достижения заданной точности.

Решалась задача Дирихле для уравнения Лапласа в квадратной области с постоянным и одинаковым шагом по обоим направлениям. На границе ставилось условие $\varphi_{i,k} = 1$, так что точное решение задачи равно единице во всей области. Осуществлялась замена

$$\varphi_{i,k} = e^{\lambda(x_i + y_k)}u_{i,k},$$

где $x_i = ih$; $y_k = kh$; $h = 1/(n+1)$ — шаг сетки; n — число узлов по одному направлению; λ — константа. После этого отыскивалось решение задачи (5). Начальное приближение задавалось равным:

$$u^0_{i,k} = \sin(\pi x_i)\, e^{20(y_k - 1)}.$$

Выход из итераций осуществлялся по критерию

$$\varepsilon^j < 10^{-4}; \; \varepsilon^{j-1} < 10^{-4},$$

где $\varepsilon^j = \max\limits_{i,k}\left|\frac{u^j_{i,k} - u^{j-1}_{i,k}}{u^j_{i,k}}\right|$. Затем вычислялась функция $\varphi^j_{i,k}$ и погрешность

$$\delta = \max_{i,k}|\varphi^j_{i,k} - 1|.$$

Схема	δ, J	λ			
		0	1	5	10
	J	136	133	229	419
БМЗ	δ 10⁻³	4,363	4,387	4,413	4,363
НФПП	J	15	19	Расходится	Расходится
	δ 10⁻⁵	6,862	2,540	—	—
ПП	J	54	53	76	130
	δ 10⁻⁴	4,558	4,973	5,129	4,985
МНФ	J	30	41	107	212
	δ 10⁻⁴	2,011	3,357	6,291	6,493
МНФПП	J	15	18	29	45
	δ 10⁻⁵	5,446	4,523	3,673	2,823

Отметим, что при $\lambda=0$ решаемая задача является задачей ДП, а при $\lambda>0$ — задачей БДП, причем с ростом λ неравенство (7) усиливается. В таблице даны количества итераций J и погрешности δ по разным схемам при $n=30$ и разных λ. Отсюда следует, что модифицированная схема МНФ, а также комбинированная схема МНФПП сходятся и в случае отсутствия диагонального преобладания в матрице коэффициентов исходной системы уравнений, причем наибольшей скоростью сходимости обладает схема МНФПП.

Приведем зависимости числа итераций J и δ для схемы МНФПП от числа узлов по одному направлению и при $\lambda=10$:

n	15	20	25	30
J	24	31	37	45
$\delta 10^{-5}$	1,827	1,309	4,123	2,823

Видно, что зависимость J от n линейная.

ЛИТЕРАТУРА

1. **Гинкин В. П.** Метод h-факторизации для решения двумерных уравнений эллиптического типа // Вычислительные методы линейной алгебры.— Новосибирск: ВЦ СО АН СССР, 1977.
2. **Гинкин В. П.** Метод параболических прогонок для решения двумерных уравнений эллиптического типа.— Обнинск, 1981.— (Препринт/ФЭИ; 1153).
3. **Гинкин В. П., Кончиц А. П.** Элементы теории блочных итерационных методов.— Обнинск, 1985.— (Препринт/ФЭИ; 1738).

Поступила в редакцию 12 июня 1987 г.

УДК 537.222.2

И. В. ТРАВКОВ, В. А. ШВЕЙГЕРТ

(Новосибирск)

МОДЕЛИРОВАНИЕ ПЕРЕНОСА ЗАРЯДА В ДИЭЛЕКТРИКЕ СО СЛУЧАЙНО РАСПОЛОЖЕННЫМИ ГЛУБОКИМИ ЦЕНТРАМИ ЗАХВАТА С УЧЕТОМ ЭФФЕКТОВ РАЗОГРЕВА ЭЛЕКТРОНОВ

Возросший в последние годы интерес к теоретическому и экспериментальному изучению переноса заряда через аморфные вещества обусловлен все более интенсивным использованием диэлектрических материалов при создании полупроводниковых приборов. Особую роль в про-