

ФИЗИЧЕСКИЕ АСПЕКТЫ МИКРО- И ОПТОЭЛЕКТРОНИКИ

УДК 519.63

В. П. ИЛЬИН, Г. Я. КУКЛИНА
(Новосибирск)

ОБ ИТЕРАЦИОННОМ РЕШЕНИИ УРАВНЕНИЙ ПЕРЕНОСА ЗАРЯДА В ПОЛУПРОВОДНИКАХ

Введение. Одним из наиболее трудоемких этапов математического моделирования переноса заряда в полупроводниках в рамках диффузионно-дрейфовой модели [1, 2] является численное решение уравнения неразрывности. Для одного из типов носителей заряда (электронов или дырок) в предположении, что распределения потенциала и другого типа носителей известны, соответствующие уравнения переноса могут быть записаны в следующем отнормированном виде:

$$\frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\partial u}{\partial x} + \alpha \frac{\partial \varphi}{\partial x} u \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\frac{\partial u}{\partial y} + \alpha \frac{\partial \varphi}{\partial y} u \right) = R(u, v);$$

$$R(u, v) = \frac{uv - 1}{\tau_u(v + v_1) + \tau_v(u + u_1)}, \quad a \leq x \leq b, \quad c \leq y \leq d, \quad (1)$$

где $\alpha = 1$ при $u = p$, $v = n$ и $\alpha = -1$ для $u = n$, $v = p$. Здесь φ — потенциал электрического поля; n и p — плотности электронов и дырок; R — скорость генерации-рекомбинации; τ_u , τ_v , u_1 , v_1 — положительные постоянные.

Применяя интегральное тождество Марчука на прямоугольной сетке [2], получим систему конечно-разностных уравнений

$$(Au)_{ij} \equiv -a_{ij}u_{i-1j} - b_{ij}u_{ij-1} - c_{ij}u_{i+1j} - d_{ij}u_{ij+1} + e_{ij}u_{ij} = f_{ij};$$

$$a_{ij} = \frac{\alpha(\varphi_{ij} - \varphi_{i-1j})}{h_i^x h_{i-1}^x} \frac{\exp(\alpha\varphi_{i-1j})}{(\exp(\alpha\varphi_{ij}) - \exp(\alpha\varphi_{i-1j}))};$$

$$b_{ij} = \frac{\alpha(\varphi_{ij} - \varphi_{ij-1})}{h_j^y h_{j-1}^y} \frac{\exp(\alpha\varphi_{ij-1})}{(\exp(\alpha\varphi_{ij}) - \exp(\alpha\varphi_{ij-1}))};$$

$$c_{ij} = \frac{\alpha(\varphi_{i+1j} - \varphi_{ij})}{h_i^x h_i^x} \frac{\exp(\alpha\varphi_{i+1j})}{(\exp(\alpha\varphi_{i+1j}) - \exp(\alpha\varphi_{ij}))};$$

$$d_{ij} = \frac{\alpha(\varphi_{ij+1} - \varphi_{ij})}{h_j^y h_j^y} \frac{\exp(\alpha\varphi_{ij+1})}{(\exp(\alpha\varphi_{ij+1}) - \exp(\alpha\varphi_{ij}))};$$

$$e_{ij} = a_{i+1j} + b_{ij+1} + d_{ij-1} + c_{i-1j} + v_{ij}f_{ij},$$

$$f_{ij} = \frac{1}{\tau_u(v_{ij} + v_1) + \tau_v(u_{ij} + u_1)}, \quad i = \overline{1, L}, \quad j = \overline{1, M}. \quad (2)$$

Граничные точки можно исключить из рассмотрения с помощью крайних условий, при этом модифицируются коэффициенты a_{ij} , b_{ij} , c_{ij} , d_{ij} , e_{ij} и правые части f_{ij} [2].

Пятидиагональная матрица A системы линейных алгебраических уравнений (2) является невырожденной, несимметричной и обладает свойством диагонального преобладания по столбцам, причем ее элементы претерпевают сильные изменения, обусловленные поведением потенциала $\varphi(x, y)$ в реальных задачах.

Система (2) может быть симметризована переходом к новым переменным вида $\Phi_p = p \exp(\varphi)$, $\Phi_n = n \exp(-\varphi)$, при этом коэффициенты будут выглядеть следующим образом (ниже \tilde{a} означает Φ_p или Φ_n):

$$\begin{aligned} (\tilde{A}\tilde{u})_{ij} &= -\tilde{a}_{ij}\tilde{u}_{i-1j} - \tilde{b}_{ij}\tilde{u}_{ij-1} - \tilde{c}_{ij}\tilde{u}_{i+1j} - \tilde{d}_{ij}\tilde{u}_{ij+1} + \tilde{e}_{ij}\tilde{u}_{ij} = \tilde{f}_{ij}, \\ \tilde{a}_{ij} &= a_{ij} \exp(-\alpha\varphi_{i-1j}), \quad \tilde{b}_{ij} = b_{ij} \exp(-\alpha\varphi_{ij-1}), \\ \tilde{c}_{ij} &= c_{ij} \exp(-\alpha\varphi_{i+1j}), \quad \tilde{d}_{ij} = d_{ij} \exp(-\alpha\varphi_{ij+1}), \end{aligned} \quad (3)$$

$$\tilde{f}_{ij} = f_{ij}, \quad \tilde{e}_{ij} = \tilde{a}_{ij} + \tilde{b}_{ij} + \tilde{c}_{ij} + \tilde{d}_{ij} + v_{ij} \exp(-\alpha\varphi_{ij}) f_{ij}, \quad i = \overline{1, L}, \quad j = \overline{1, M}.$$

Здесь матрица \tilde{A} симметрична и равна

$$\tilde{A} = AT, \quad T = \{\exp(-\alpha\varphi_{ij})\}, \quad (4)$$

T — диагональная матрица. Однако при решении симметризованной системы (3) есть угроза остановки счета из-за выхода чисел за пределы разрядной сетки. Это возможно при появлении в некоторых задачах больших значений потенциала (в размерных единицах порядка вольт).

Для решения линейных алгебраических систем уравнений вида (2) или (3) применяются различные итерационные методы: блочные методы Зейделя и последовательной верхней релаксации, метод Стоупа и метод сопряженных градиентов с неполным LU -разложением (см., например, [3–6]).

Целью данной работы является построение вариантов итерационных методов неполной факторизации для систем вида (2). В п. 1 описываются два предлагаемых алгоритма — явный и неявный, а в п. 2 приводятся результаты численных экспериментов для характерных практических задач, и на некоторых вариантах сравнивается эффективность рассматриваемых итерационных методов и блочного метода Зейделя.

1. Описание итерационных алгоритмов. Рассмотрим модификации явного и одного из неявных методов неполной факторизации Булеева [7] решения несимметричной системы уравнений (2).

Исходный явный метод в покомпонентном виде записывается следующим образом:

$$\begin{aligned} g_{ij} &= e_{ij} - a_{ij}(\gamma_{i-1j} + \Theta_{ij}\delta_{i-1j}) - b_{ij}(\delta_{ij-1} + \Theta_{ij}\gamma_{ij-1}); \\ \alpha_{ij} &= a_{ij}/g_{ij}, \quad \beta_{ij} = b_{ij}/g_{ij}, \quad \gamma_{ij} = c_{ij}/g_{ij}; \\ \delta_{ij} &= d_{ij}/g_{ij}, \quad \psi_{ij} = f_{ij}/g_{ij}; \\ z_{ij}^{n+1} &= \alpha_{ij}z_{i-1j}^{n+1} + \beta_{ij}z_{ij-1}^{n+1} + \alpha_{ij}\delta_{i-1j}(u_{i-1j+1}^n - \Theta_{ij}u_{ij}^n) + \\ &+ \beta_{ij}\gamma_{ij-1}(u_{i+1j-1}^n - \Theta_{ij}u_{ij}^n) + \psi_{ij}, \quad i, j = 1, 2, \dots; \\ \tilde{u}_{ij}^{n+1} &= \gamma_{ij}u_{i+1j}^{n+1} + \delta_{ij}u_{ij+1}^{n+1} + z_{ij}^{n+1}, \quad ij = \dots, 2, 1; \\ u_{ij}^{n+1} &= \tau_n \tilde{u}_{ij}^{n+1} + (1 - \tau_n) u_{ij}^n. \end{aligned} \quad (5)$$

Здесь Θ_{ij} и τ_n — так называемые компенсирующие и чебышевские итерационные параметры, на выборе которых мы остановимся ниже.

Представляя матрицу A исходной системы в виде $A = D - L - U$, где D — диагональная матрица с ненулевыми элементами e_{ij} , а L и U — нижняя и верхняя треугольные матрицы с ненулевыми элементами на строках соответственно a_{ij} , b_{ij} и c_{ij} , d_{ij} (что соответствует поддиагональной упорядоченности узлов сетки), метод (5) можно записать при $\Theta_{ij} = \Theta$ в матричной форме следующим образом [7]:

$$\begin{aligned} K(u^{n+1} - u^n) &= \tau_n(f - Au^n); \\ K &= (G - L)G^{-1}(G - U), \quad G = D - (LG^{-1}U)^{(1)} - \Theta S, \end{aligned} \quad (6)$$

где G — диагональная матрица с элементами g_{ij} , а $(B)^{(1)}$ — диагональная матрица с ненулевыми элементами теми же, что и у B . Здесь S — диагональная матрица с элементами, определяемыми равенством

$$Se = [LG^{-1}U - (LG^{-1}U)^{(1)}]e = He \quad (7)$$

(e — вектор с единичными компонентами).

Если A — симметричная матрица M -типа, то, как показано в [3], при $0 \leq \Theta \leq 1$ и

$$\tau_n = 2/[M + m - (M - m)\cos((2n - 1)\pi/(2N))], \quad n = 1, 2, \dots, N, 1, 2, \dots, \quad (8)$$

где m, M — границы спектра матрицы $K^{-1}A$, метод (6) сходится. Там же получены оценки m, M и числа итераций в зависимости от значений Θ и свойств коэффициентов системы (2). В частности, при $\Theta = 1$ положим

$$m = 1, \quad M = \left[1 - \max_{\substack{i=\overline{1,L}; \\ j=\overline{1,M}}} \{\gamma_{ij} + \delta_{ij}\} \right]^{-1}. \quad (9)$$

Поскольку M вычисляется до начала итераций, то соотношения (7) позволяют определить оптимальную последовательность итерационных параметров τ_n . Если матрица A несимметрична, то можно доказать сходимость итераций только при $\Theta = 0$, $\tau_n = 1$, и вопрос о применимости чебышевского ускорения остается открытым. Рассмотрим теперь модификацию метода для случая, когда матрица A симметризуется умножением справа на невырожденную диагональную матрицу T . Для этого предварительно применим рассматриваемый метод для симметричной системы (3):

$$\begin{aligned} K(\bar{u}^{n+1} - \bar{u}^n) &= \tau_n(f - \bar{A}u^n); \\ K &= (G - L)G^{-1}(G - U), \quad G = \bar{D} - (LG^{-1}U)^{(1)} - \Theta S; \\ Se &= [LG^{-1}U - (LG^{-1}U)^{(1)}]e = He, \end{aligned} \quad (10)$$

где $\bar{D} = DT$, $\bar{L} = LT$, $\bar{U} = UT$. Если $K = KT$ (это автоматически следует из (6), (10) при $\Theta = 0$), то собственные числа матриц $K^{-1}A$ и $K^{-1}\bar{A}$ одинаковы в силу их очевидного подобия и итерационные алгоритмы (6), (10) эквивалентны по скорости сходимости. Однако при $\Theta \neq 0$ равенство $K = KT$ будет выполняться только при условии $S = ST$. Это означает, поскольку $H = HT$, что итерационные процессы (6) и (10) при $\bar{A} = AT$ будут эквивалентны, если для определения S вместо (7) использовать равенства

$$S\bar{e} = [LG^{-1}U - (LG^{-1}U)^{(1)}]\bar{e} = H\bar{e}, \quad \bar{e} = Te. \quad (11)$$

В силу определения матрицы T это означает в некомпонентной записи, что в (5) формулы вычисления g_{ij} и z_{ij}^{n+1} надо заменить на следующие:

$$\begin{aligned} g_{ij} &= e_{ij} - a_{ij}[\gamma_{i-1j} + \Theta\delta_{i-1j}\exp(\alpha(-\varphi_{i-1j+1} + \varphi_{ij}))] - \\ &\quad - b_{ij}[\delta_{ij-1} + \Theta\gamma_{ij-1}\exp(\alpha(-\varphi_{i+1j-1} + \varphi_{ij}))]; \\ z_{ij}^{n+1} &= \alpha_{ij}z_{i-1j}^{n+1} + \beta_{ij}z_{ij-1}^{n+1} + \alpha_{ij}\delta_{i-1j}[u_{i-1j+1}^n - \\ &\quad - \Theta u_{ij}^n \exp(\alpha(-\varphi_{i-1j+1} + \varphi_{ij}))] + \beta_{ij}\gamma_{ij-1}[u_{i+1j-1}^n - \\ &\quad - \Theta u_{ij}^n \exp(\alpha(-\varphi_{i+1j-1} + \varphi_{ij}))] + \psi_{ij}. \end{aligned} \quad (12)$$

Верхняя граница M спектра матрицы $K^{-1}A$ есть

$$\begin{aligned} M &= \max_{\substack{i=\overline{1,L}; \\ j=\overline{1,M}}} \{[1 - \gamma_{ij}\exp(\alpha(-\varphi_{i+1j} + \varphi_{ij})) - \\ &\quad - \delta_{ij}\exp(\alpha(-\varphi_{ij+1} + \varphi_{ij}))]^{-1}\}. \end{aligned} \quad (13)$$

Рассмотрим теперь вариант неявного метода неполной факториза-

ции. Решение исходной системы пятиточечных уравнений будем искать с помощью рекуррентных соотношений с неопределенными коэффициентами α_{ij} , γ_{ij} , δ_{ij} , z_{ij} :

$$u_{ij} - \alpha_{ij}u_{i-1j} - \gamma_{ij}u_{i+1j} = \delta_{ij}u_{ij+1} + z_{ij}. \quad (14)$$

Выразим с помощью (14) u_{ij-1} и подставим его в левую часть уравнения, получаемого из (2) прибавлением к обеим частям члена $\kappa_{ij}u_{ij-1}$. В результате получим равенство

$$[e_{ij} - (b_{ij} + \kappa_{ij})\delta_{ij-1}]u_{ij} - \alpha_{ij}u_{i-1j} - \gamma_{ij}u_{i+1j} = -\kappa_{ij}u_{ij-1} + d_{ij}u_{ij+1} + (b_{ij} + \kappa_{ij})z_{ij-1} + f_{ij} + (b_{ij} + \kappa_{ij})(\alpha_{i-1}u_{i-1j-1} + \gamma_{i-1}u_{i+1j-1}). \quad (15)$$

Величину κ_{ij} определим теперь из условия «компенсации»:

$$\kappa_{ij} = \Theta b_{ij}(\alpha_{i-1} + \gamma_{i-1}) / (1 - \alpha_{i-1} - \gamma_{i-1}) \quad (16)$$

(Θ — параметр релаксации), смысл которого состоит в том, что если в (16) $\Theta = 1$, то в правой части (15) сумма коэффициентов при членах с u равна нулю. Сравнивая далее соотношения (15) и (16), получим формулы для α_{ij} , γ_{ij} , δ_{ij} , z_{ij} и определим итерационный процесс:

$$g_{ij} = e_{ij} - (b_{ij} + \kappa_{ij})\delta_{ij-1} = e_{ij} - b_{ij}\delta_{ij-1}(1 + r_{ij});$$

$$\alpha_{ij} = a_{ij}/g_{ij}, \quad \beta_{ij} = b_{ij}(1 + r_{ij})/g_{ij}, \quad r_{ij} = \Theta(\alpha_{i-1} + \gamma_{i-1}) / (1 - \alpha_{i-1} - \gamma_{i-1});$$

$$\gamma_{ij} = c_{ij}/g_{ij}, \quad \delta_{ij} = d_{ij}/g_{ij}, \quad \varphi_{ij} = f_{ij}/g_{ij}; \quad (17)$$

$$z_{ij}^{n+1} = \beta_{ij}(z_{ij-1}^n + \alpha_{i-1}u_{i-1j-1}^n - r_{ij}u_{ij-1}^n / (1 + r_{ij})) + \gamma_{ij-1}u_{i+1j-1}^n + \psi_{ij}, \quad i, j = 1, 2, \dots;$$

$$u_{ij}^{n+1} - \alpha_{ij}u_{i-1j}^{n+1} - \gamma_{ij}u_{i+1j}^{n+1} = \delta_{ij}u_{ij+1}^{n+1} + z_{ij}^{n+1}, \quad j, i = \dots, 2, 1.$$

Видно, что значения u_{ij}^{n+1} на каждой итерации легко вычисляются с помощью прогонки, а все остальные находятся из простого рекуррентного счета.

Из построения алгоритма следует, что если итерационный процесс (17) сходится, то именно к решению исходной системы уравнений. Сходимость алгоритма легко доказывается с помощью теоремы Варги о регулярном разложении [8], если $\Theta = 0$ и матрица A относится к M -типу. Кроме того, если начальное приближение u_{ij}^0 и точное решение не зависят от i , то метод при $\Theta = 1$ (случай полной компенсации) сходится за одну итерацию.

Отметим, что данный итерационный процесс в отличие от явного является несимметризуемым и вопросы его обоснования при $\Theta > 0$ или оптимизации остаются открытыми.

2. Численные эксперименты. Серия методических численных экспериментов проводилась для уравнения (1) с одномерным характером решения в прямоугольнике $a = 0$, $b = 4$, $c = 0$, $d = 1$ на кусочно-равномерной сетке

$$h_j^y = 0,2, \quad 1 \leq j \leq M - 1; \quad \bar{h}_i^x = 0,15, \quad 1 \leq i \leq 10;$$

$$h_i^x = 0,05, \quad 11 \leq i \leq 30; \quad \bar{h}_i^x = 0,15, \quad 31 \leq i \leq L - 1;$$

$$x_i = x_{i-1} + \bar{h}_{i-1}^x, \quad y_j = y_{j-1} + h_{j-1}^y, \quad i = \overline{2, L}, \quad j = \overline{2, M}, \quad L = 41, \quad M = 6.$$

Алгебраическая система уравнений (2) решалась как для электронов, так и для дырок в предположении, что распределение носителей противоположного типа задано и все функции в системе уравнений не зависят от y . В качестве краевых были выбраны однородные условия Неймана при $y = c$, $y = d$ и условия Дирихле для $x = a$, $x = b$:

$$n(a, y) = 8 \cdot 10^{-10}, \quad n(b, y) = 1,25 \cdot 10^4,$$

$$p(a, y) = 1,25 \cdot 10^9, \quad p(b, y) = 8 \cdot 10^{-5}, \quad c \leq y \leq d,$$

отвечающие условиям термодинамического равновесия при концентрациях примеси 10^{20} и 10^{15} см⁻³ в окрестности анода и катода соответственно

i	φ_i	f_i	ρ_i^n	n_i^n	n_i^p	ρ_i^p
1	-20,95	10^{-12}	$1,25 \cdot 10^9$	$8 \cdot 10^{-10}$	$8 \cdot 10^{-10}$	$1,25 \cdot 10^9$
5	-20,09	10^{-11}	$4,1 \cdot 10^8$	30	1,1	$7,5 \cdot 10^8$
10	-15,94	10^{-9}	$4,6 \cdot 10^7$	$1,5 \cdot 10^3$	10^2	$1,8 \cdot 10^7$
15	-13,08	10^{-8}	$1,8 \cdot 10^6$	$2,7 \cdot 10^4$	$2,7 \cdot 10^3$	$9,7 \cdot 10^5$
20	-11,76	10^{-9}	$3,3 \cdot 10^4$	$1,1 \cdot 10^6$	$1,4 \cdot 10^4$	$2,1 \cdot 10^5$

но. Уравнения переноса для обоих типов носителей решались с использованием двух видов распределения потенциала $\varphi(x)$. Одно из них было взято из практической задачи решения полной фундаментальной системы уравнений (в виде массива $\{\varphi_i\}_{i=1,L}$, некоторые значения которого приведены в таблице). Там же даны массивы ρ^n, n^n (используемый (ρ^n) и получаемый при расчете переноса электронов (n^n)), а также аналогичные массивы ρ^p, p^p .

Для анализа влияния вида потенциала на ход итерационного процесса в дополнение к реальному было взято линейное задание функции

$$\varphi_i = \varphi_1 + (\varphi_L - \varphi_1) \cdot (x_i - a) / (b - a). \quad (18)$$

Сравнение эффективности различных алгоритмов проводилось по числу итераций N , при котором выполняется условие

$$\max_{i=1,L; j=1,M} \left\{ \frac{|u_{ij}^{N+1} - u_{ij}^N|}{\max(u_{ij}^{N+1}, u_{ij}^N)} \right\} \leq \varepsilon = 10^{-7}.$$

Знак « ∞ » далее применяется для обозначения расходимости итерационного процесса. Вначале опишем эксперименты с использованием реального распределения потенциала для решения системы уравнений (2) явным методом (15) в случае расчета переноса электронов при $\Theta = 1$ и различных постоянных τ :

τ	1/24	1/12	1/10	1/9	1/8,8	1/8,6	1/8,55	1/8,5	1/8,45
N	380	186	154	138	35	32	133	167	315

В дальнейшем будем описывать использование явного метода неполной факторизации вида (5), (12) либо с постоянными, либо с чебышевскими итерационными параметрами. Требуемое значение величины M находим степенным методом при $\Theta = \tau = 1$: $M = \rho_{n_1}$, где n_1 — номер итерации, на которой впервые

$$|\rho_n - \rho_{n-1}| \leq \varepsilon_1;$$

$$\rho_n = \max_{i=1,L; j=1,M} |u_{ij}^{n+1} - u_{ij}^n| \quad \max_{i=1,L; j=1,M} |u_{ij}^n - u_{ij}^{n-1}|.$$

Отметим, что найденные степенным методом значения M являются не совсем точными, поскольку без применения дополнительной норми-

ровки переполнение арифметического устройства ЭВМ прерывает процесс нахождения M , так как $\rho_n > 1$. Для уравнений переноса электронов и дырок найденные степенным методом значения M равнялись 22,6 и 13 соответственно. С целью уточнения значений M были проведены эксперименты с различными постоянными параметрами τ для электронов и дырок:

τ	2/23	2/24	2/25	2/26	2/27	2/30	2/35	2/46
N	∞	419	172	178	185	205	237	419
τ	2/13	2/14	2/14,5	2/15	2/15,5	2/16	2/20	2/25
N	∞	381	131	105	109	112	139	173

При этом использовалась зависимость оптимальной величины τ_0 от границ спектра. Как видно, минимальное количество итераций приходится на случаи $\tau = 2/25$ и $\tau = 2/15$, что отвечает уточненным значениям M , равным 24 и 14 для электронов и дырок соответственно ($\tau_0 = 2/(M + m)$).

Сравнение показывает, что для постоянных параметров τ неявный метод неполной факторизации дает существенно лучшие результаты.

Теперь перейдем к использованию чебышевских ускоряющих циклических параметров (8), что возможно лишь в случае применения явного метода Булеева. Приведем значения N для различных периодов N_0 в случае переноса дырок и использования найденного степенным методом значения $M = 13$:

N_0	4	8	16	32
N_+	158	124	54	251
N_-	193	147	101	200

Здесь обозначение N_+ отвечает использованию τ_n , вычисленных непосредственно по формуле (8), а N_- соответствует обратной упорядоченности циклических параметров, т. е. в (8) $i = N_0, N_0 - 1, \dots, 2, 1; 2N_0, \dots, N_0 + 1, \dots$. Обозначение типа «>200» означает, что итерационный процесс при заданной величине периода становится неустойчивым. Для электронов при $M = 22,6$ результаты не приводятся, поскольку ни для одного из периодов N_0 итерационный процесс не сошелся. Таким образом, выражение для чебышевских параметров (8) чувствительно к выбору оценки величины M , поскольку небольшие отличия в значениях M ведут к существенно различным результатам. Приведем количество итераций для переноса электронов и дырок при $M = 24$ и $M = 14$ соответственно:

N_0	4	8	16	32
N_+	59	56	48	100
N_-	54	48	63	200
N_0	4	8	16	32
N_+	43	40	48	95
N_-	40	33	32	>200

Для исследования возможностей ускорения чебышевских алгоритмов были проведены также расчеты с использованием итерационных T -параметров [9] с циклом $N_0 = 18$ и трехчленных итерационных процессов:

$$\begin{aligned}
 u^n &= (1 + \alpha_n) [\tau \hat{u}^n + (1 - \tau) u^{n-1}] - \alpha_n u^{n-2}; \\
 \tau &= 2/(m + M), \quad \alpha_n = \kappa(1 + \kappa^{n-2})/(1 + \kappa^n); \\
 \kappa &= (\gamma - \sqrt{\gamma^2 - 1})^2, \quad \gamma = (M + m)/(M - m),
 \end{aligned} \tag{19}$$

где \hat{u}_n определяется из соотношений (5), (12).

В этих экспериментах были получены значения $N^n = 37$, $N^p = 33$ для последовательности T -параметров и $N^n = 42$, $N^p = 31$ для трехчленных процессов (индексы n , p означают электроны и дырки соответственно).

На реальных распределениях потенциала было проведено также сравнение результатов, полученных с помощью явного метода Булеева и блочного метода Зейделя, оказавшегося наилучшим для наших задач из класса методов блочной последовательной верхней релаксации. Для каждого из уравнений переноса (и дырок, и электронов) блочный метод Зейделя потребовал числа итераций N более 500, а ограничение $N = 500$ приводило к снижению точности на два порядка и более. Отметим, что в экспериментах с другими распределениями потенциалов, когда метод Зейделя сходился, число итераций для него оказалось в 3—7 раз больше, чем в явном методе Булеева при $\Theta = 1$, $\tau = 0,2$.

Теперь опишем эксперименты по расчету переноса электронов и дырок с линейным распределением потенциала (18). В этом случае применялся также модифицированный явный метод Булеева, когда в формуле (5) пересчет узлов сетки ведется не в обычном порядке, а в обратном. Найденные степенным методом значения M равнялись 6,6 и 24,6 для электронов и 20 и 10 для дырок соответственно для прямого и обратного счета. Приведем результаты решения уравнения переноса электронов при прямом и обратном направлениях счета:

τ	2/8	2/9	2/10	2/11	2/12	2/13
N	256	72	81	89	98	106
τ	2/26	2/26,5	2/27	2/27,5	2/28	2/29
N	∞	313	219	224	228	235

Аналогичные данные для переноса дырок примут вид:

τ	2/23	2/23,5	2/24	2/24,5	2/25	2/27
N	∞	204	160	163	166	173
τ	2/11	2/11,5	2/12	2/13	2/13,5	2/15
N	∞	200	90	87	91	101

Можно отметить, что при расчетах с реальным немонотонным поведением потенциала изменение направления пересчета узлов сетки практически не влияет на результат.

Анализ проведенных экспериментов показывает, что при расчете реальных задач переноса носителей заряда возможно использование различных вариантов методов неполной факторизации. Описанные результаты позволяют сделать следующие выводы:

1. При постоянных итерационных параметрах неявный метод неполной факторизации дает значительно лучшие результаты, чем явный.
2. Применение чебышевских итерационных параметров существенно ускоряет процесс, причем обратное упорядочивание в (8) предпочтительнее прямого.
3. Использование циклической T -последовательности улучшает результаты, а реализация трехчленных итерационных процессов практически их не меняет, но требует дополнительной памяти ЭВМ.
4. Практически применение формулы (13) для вычисления M реально (она дает сильно завышенное значение), поэтому может быть рекомендован степенной приближенный метод оценки M_0 . При вычислении циклических параметров найденную оценку M следует брать с запасом 5—10 %.
5. Применение предлагаемых алгоритмов существенно улучшает результаты, получаемые с помощью блочного метода Зейделя, которые практически неприменимы к задачам с более немонотонным поведением потенциала.
6. Эффективность рассматриваемых алгоритмов может сильно зависеть от выбора направления счета при вычислении приближений на каждой итерации.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Посов Ю. Р., Петросянец К. О., Шилин В. А. Математические модели элементов интегральной электроники.— М.: Сов. радио, 1976.
2. Ильин В. П. Численные методы решения задач электрофизики.— М.: Наука, 1985.
3. Ильин В. П., Косицына Л. К. О скорости сходимости итераций явного метода Булеева.— Новосибирск, 1987.— (Препр./ВЦ СО АН СССР; 755).
4. Польский Б. С. Численное моделирование полупроводниковых приборов.— Рига: Зинатне, 1986.
5. Гадяк Г. В., Гинкин В. П., Обрехт М. С. и др. Программа расчета стационарных характеристик МДП-транзистора MOS-1 // Автометрия.— 1987.— № 1.
6. Toyabe T., Masuda H., Aoki Y. e. a. Three-dimensional device simulator Caddeth бирск, 1982.— (Препр./ВЦ СО АН СССР; 98).
9. Марчук Г. И. Методы вычислительной математики.— М.: Наука, 1977.

Поступила в редакцию 5 мая 1988 г.
