

УДК 519.63

ЭКСПОНЕНЦИАЛЬНЫЕ СХЕМЫ ДЛЯ РЕШЕНИЯ ЭВОЛЮЦИОННЫХ УРАВНЕНИЙ НА НЕРЕГУЛЯРНЫХ СЕТКАХ

С.В. Поляков

Аннотация

Рассматривается проблема численного решения эволюционных уравнений на нерегулярных сетках. Для уравнений типа конвекции-диффузии предложены консервативные слабомонотонные конечно-объемные схемы на треугольных и тетраэдральных сетках. Рассмотрены вопросы устойчивости и сходимости предложенных схем. Подход апробирован на задаче вакуумной микроэлектроники, связанной с расчетами полевой эмиссии электронов с поверхности острых кремниевых микрокатодов.

Введение

Традиционной проблемой математического моделирования процессов переноса заряженных частиц в полупроводниках и других материалах с нелинейно изменяющимися свойствами является наличие сильного перепада электрического поля в различных подобластях расчётной области. Оно приводит к тому, что концентрации частиц изменяются на порядки и даже на десятки порядков. В результате многие численные подходы сталкиваются с фундаментальным ограничением на величину приложенного к среде внешнего электрического или магнитного поля, избежать которого практически невозможно. Получение приемлемых по точности результатов достигается несколькими способами. Первый из них 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. Другой способ связан с построением адаптивной локально сгущающейся пространственной сетки, позволяющей выделить области сильного изменения электрического и магнитного полей. При этом может применяться перестроение сетки при переходе на очередной слой по времени. В дополнение к этим двум способам может применяться увеличение числа узлов сетки в расчёте на возможное 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 алгоритмам (схемам). Наиболее распространёнными способами построения таких схем являются метод конечных элементов (МКЭ) и метод конечных объёмов (МКО). В настоящее время все большее число эволюционных задач в областях со сложной геометрией решается методом конечных объёмов ввиду его простоты и экономичности [1, 2]. К тому же метод конечных элементов наиболее эффективен при решении стационарных задач. Эти обстоятельства позволяют ограничиться в данной работе рассмотрением схем, полученных в рамках МКО.

В случае расчётных областей прямоугольной формы известно множество различных методов решения уравнений типа конвекции-диффузии, о которых идет

речь ниже. Основной задачей при построении таких методов было получение на сетке всего спектра свойств дифференциального решения, 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 уравнений рассматриваемого типа примерами таких схем могут служить однородные схемы Самарского [3], слабо монотонные схемы Голанда [4], схемы Кареткиной [5] и т. д.

Последний из указанных подходов фактически является развитием схем экспоненциальной подгонки [6], применяющихся при решении обыкновенных дифференциальных уравнений. На наш взгляд, он имеет большие перспективы при решении нелинейных нестационарных задач электродинамики. Основным его недостатком на сегодняшний день является ограничение сверху на величину $\delta = \max(h|E|/V_0)$ (максимум произведения шага пространственной сетки на величину электрического поля, отнесенного к величине нормировочного потенциала). Однако это же ограничение имеют и другие разностные схемы. К тому же при увеличении δ до единицы и выше большинство схем начинает быстро ухудшаться по точности, а некоторые из них теряют устойчивость вычислений.

Экспоненциальные же схемы устойчиво работают при больших δ (до 150–300 при вычислениях с двойной точностью) и хорошо передают качественные характеристики дифференциального решения, в том числе консервативность и слабую монотонность. Последнее было продемонстрировано в работе [7] при решении задачи о динамике фотоиндуцированных зарядов в полупроводниковой гетероструктуре. Указанный предел величины δ можно повысить до 30000 и более, если проводить вычисления с четвертной точностью, которая аппаратно реализована в рамках новой 64-битной платформы вычислительных систем.

Другим недостатком схем экспоненциальной подгонки является отсутствие обобщения на случай нерегулярной сетки. В частности, автору неизвестны их аналоги для треугольных и тетраэдральных сеток, которые все шире используются при решении практических задач индустриальной направленности. Восполнить этот пробел призвана настоящая работа. В ней построены такие схемы для случая произвольной нерегулярной треугольной сетки и проведено их обобщение на случай тетраэдральной сетки. Проведён теоретический анализ построенных схем, определены условия их устойчивости и сходимости. На примере решения задачи о моделировании электронной эмиссии из кремниевого катодного микроузла продемонстрирована эффективность применения экспоненциальных схем.

1. Постановка задачи в двумерном случае

Для иллюстрации предлагаемого подхода рассмотрим в произвольной двумерной ограниченной области D с кусочно-гладкой границей ∂D на конечном интервале времени $[0, T]$ квазилинейное параболическое уравнение вида

$$\frac{\partial u}{\partial t} = Lu + f, \quad Lu = \operatorname{div} \mathbf{W}, \quad \mathbf{W} = \mathbf{K} \operatorname{grad} u + \mathbf{E}u, \quad (1)$$

записанное в безразмерных переменных (x, y, t) относительно неизвестной функции $u(x, y, t)$. Здесь предполагается, что div и grad – обычные операторы дивергенции и градиента, действующие в пространстве переменных (x, y) , \mathbf{W} – обобщённый вектор потока, $\mathbf{E} = \mathbf{E}(x, y, t) = (E_x, E_y)^T$ – кусочно-гладкое заданное векторное поле, \mathbf{K} – тензор второго ранга с кусочно-непрерывными компонентами $k_{ij}(x, y, t, u)$ ($i, j = 1, 2$), удовлетворяющими условию равномерной эллиптичности ($k_{ii} \geq k_0 > 0$, $4k_{11}k_{22} - (k_{12} + k_{21})^2 \geq k_1 > 0$) оператора L в D при $\mathbf{E} \equiv 0$,

Функция $f = f(x, y, t, u)$ кусочно-непрерывна по совокупности своих аргументов в области $D \times (0, T) \times (-\infty, \infty)$.

Уравнение (1) дополняется начальными

$$u(x, y, 0) = u_0(x, y) \tag{2}$$

и граничными условиями

$$\begin{aligned} u(x, y, t) &= g_1(x, y, t), & (x, y) \in \partial D_1, & & t > 0, \\ (\mathbf{W}, \mathbf{n}) &= g_2(x, y, t, u), & (x, y) \in \partial D_2, \end{aligned} \tag{3}$$

Здесь ∂D_i ($i=1,2$) – части границы $\partial D = \partial D_1 \cup \partial D_2$, на которых заданы граничные условия различного типа (Дирихле или Неймана – Ньютона), (\cdot, \cdot) – скалярное произведение векторов в двумерном евклидовом пространстве, \mathbf{n} – внешняя нормаль к границе области.

В дальнейшем предполагается существование классического решения начально-краевой задачи (1)–(3). Ввиду этого будет выполняться и следующее интегральное тождество

$$\frac{\partial}{\partial t} \iint_D u \, dx \, dy = \oint_{\partial D} (\mathbf{W}, \mathbf{n}) \, dl + \iint_D f \, dx \, dy, \tag{4}$$

которое легко получить при интегрировании уравнения (1) по области D , выноса производной по времени за знак интеграла и применении формулы Гаусса – Остроградского в двумерном случае.

2. Построение конечно-объёмной схемы в двумерном случае

Следуя подходу, развитому в [8], построим для примера явную конечно-объёмную схему для задачи (1)–(3). Для этого введём в области D треугольную сетку Ω_{xy} , удовлетворяющую критерию Делоне и такую, что каждый её треугольник имеет центр масс, проектирующийся строго на внутренние части всех его сторон. Пусть для данной сетки число вершин треугольников равно N , а число треугольников – M . На отрезке $[0, T]$ введём равномерную сетку Ω_t с шагом τ и числом интервалов N_t . По аналогии со случаем регулярной прямоугольной сетки можем записать следующую конечно-объёмную схему

$$\frac{U_i^{j+1} - U_i^j}{\tau} = \Lambda U_i^j + \varphi_i^j, \quad i = 1, \dots, N, \quad j = 0, \dots, N_t - 1, \tag{5}$$

с начальным условием

$$U_i^0 = u_0(x_i, y_i), \quad i = 1, \dots, N, \tag{6}$$

и граничным условием Дирихле

$$U_i^j = g_1(x_i, y_i, t_j), \quad (x_i, y_i) \in \partial D_1, \quad j = 0, \dots, N_t. \tag{7}$$

Здесь U_i^j – сеточный аналог функции u в узлах треугольной сетки $P_i = (x_i, y_i)$, Λ – сеточный аналог оператора L , φ_i^j – сеточный аналог правой части уравнения (1) с учетом граничного условия (3) на части границы ∂D_2 . Ниже будут уточнены выражения для Λ и φ .

Схема (5)–(7) в точке сетки (x_i, y_i, t_j) получается с помощью интегрирования уравнения (1) по времени на интервале $[t_j, t_{j+1}]$ и по пространству по медианальному контрольному объёму V_i с центром в точке P_i и внешней границей, образованной отрезками, соединяющими центры рёбер и центры масс примыкающих

к P_i треугольников. После деления полученного интегрального равенства на величину $\tau|V_i|$ (где $|V_i|$ – площадь контрольного объёма), применения теоремы о первообразной для производной u по времени и формулы Гаусса–Остроградского для слагаемого Lu , а также формулы о среднем значении функции в окрестности точки (x_i, y_i, t_j) получаем следующее приближенное равенство (подробнее см. [8])

$$\frac{u_i^{j+1} - u_i^j}{\tau} \approx \frac{1}{|V_i|} \left(\int_{\partial V_{i2}} (\mathbf{W}^j, \mathbf{n}) dl + \int_{\partial V_{i1}} g_2(x, y, t_j, u(x, y, t_j)) dl \right) + f_i^j. \quad (8)$$

Здесь $u_i^j = u(x_i, y_i, t_j)$, $\mathbf{W}^j = \mathbf{W}(x, y, t_j)$, $f_i^j = f(x_i, y_i, t_j, u_i^j)$, $\partial V_{i1} = \partial V_i \cap \partial D_2$, $\partial V_{i2} = \partial V_i \setminus \partial V_{i1}$.

В приближенном равенстве (8) можем учесть, что внешняя граница контрольного объёма V_i есть замкнутая ломаная, на каждом звене которой внешняя нормаль есть постоянный вектор. Предположим, что к точке P_i примыкает m_i треугольников. Очевидно, если точка P_i лежит внутри области, то число звеньев ломаной равно $2m_i$, и все они также лежат внутри области. Если точка P_i – граничная, то к $2m_i$ внутренним звеньям ломаной добавляется четное число n_i граничных ребер, исходящих из P_i . На каждом внутреннем звене ломаной зафиксируем некоторое среднее значение вектора потока \mathbf{W} , обозначив его через \mathbf{W}_{ik}^j , и вычислим внешнюю нормаль к звену \mathbf{n}_{ik} и длину звена l_{ik} . На каждом граничном звене ломаной можно определить среднее значение функции g_2 , обозначив его $(g_2)_{ip}^j$, а также длину звена l_{ip} . Если далее применить теорему о среднем значении функции в соответствующих интегралах, то вместо (8) получаем

$$\frac{u_i^{j+1} - u_i^j}{\tau} \approx \frac{1}{|V_i|} \sum_{k=1}^{2m_i} (\mathbf{W}_{ik}^j, \mathbf{n}_{ik}) l_{ik} + \frac{1}{|V_i|} \sum_{p=1}^{n_i} (g_2)_{ip}^j l_{ip} + f_i^j. \quad (9)$$

Рассмотрим вопрос о вычислении средних значений потока и граничной функции. Приближенные равенства (8) и (9) получены со вторым порядком точности по пространству. Это следует из способа аппроксимации пространственных интегралов от слагаемых u_t и f уравнения (1). Данный способ был выбран из соображений минимальности пространственного шаблона схемы. Поэтому будем стремиться сохранить второй порядок пространственной аппроксимации схемы и при вычислении средних значений потока. Для этого достаточно потребовать, чтобы в каждом треугольнике неизвестная функция u была линейной, то есть задавалась плоскостью, построенной по значениям u в вершинах треугольника. Тогда градиент функции u будет постоянным вектором в каждом треугольнике (и кусочно-постоянным во всей области). Последнее позволяет считать, что и средний вектор потока постоянен во всем треугольнике. Аналогично, на ребрах треугольников функция u будет линейной, и ее значение в любой внутренней точке ребра легко получить по двум значениям u на его концах. Последнее позволяет получить средние значения граничной функции.

Прежде, чем перейти к определению средних, заметим, что равенство (9) можно упростить, если учесть, что в каждом треугольнике имеется единственный средний вектор потока \mathbf{W}_{ik}^j , а вектор нормали \mathbf{n}_{ik} можно заменить выражением $\Theta \mathbf{l}_{ik}/l_{ik}$, в котором \mathbf{l}_{ik} – ненормированный вектор конормали (то есть вектор, заданный разностью координат конечной и начальной точек звена ломаной), а Θ – оператор поворота на 90° против часовой стрелки. Можно также учесть, что два последовательных звена ломаной, входящих в один треугольник, можно «спрямить», взяв вместо суммы двух конормалей результирующий вектор (он будет соединять

середины сторон треугольника, прилежащих к точке P_i , и иметь правую ориентацию), который также можно обозначить \mathbf{l}_{ik} . В результате таких тождественных преобразований (9) переходит в следующее равенство

$$\frac{u_i^{j+1} - u_i^j}{\tau} \approx \frac{1}{|V_i|} \sum_{k=1}^{m_i} \left(\mathbf{W}_{ik}^j, \boldsymbol{\theta} \mathbf{l}_{ik} \right) + \frac{1}{|V_i|} \sum_{p=1}^{n_i} (g_2)_{ip}^j l_{ip} + f_i^j. \quad (10)$$

Найдем теперь выражения для средних значений потока \mathbf{W}_{ik}^j . Для этого преобразуем сначала выражение для \mathbf{W} :

$$\mathbf{V} = \text{grad } u + \mathbf{G}u \quad (\mathbf{V} = \mathbf{K}^{-1}\mathbf{W}, \quad \mathbf{G} = \mathbf{K}^{-1}\mathbf{E})$$

и запишем его покомпонентно:

$$V_x = \frac{\partial u}{\partial x} + G_x u, \quad V_y = \frac{\partial u}{\partial y} + G_y u.$$

Далее, выберем произвольную точку $P_0 = (x_0, y_0)$ области D и произведем в последних равенствах следующие экспоненциальные преобразования:

$$e_x V_x = \frac{\partial}{\partial x} (e_x u), \quad e_y V_y = \frac{\partial}{\partial y} (e_y u),$$

где

$$e_x = \exp \left[\int_{x_0}^x G_x dx' \right], \quad e_y = \exp \left[\int_{y_0}^y G_y dy' \right].$$

Затем проинтегрируем получившиеся равенства по произвольному треугольнику T_{ik} ($k = 1, \dots, m_i$), примыкающему к P_i , с вершинами в точках P_{ikl} ($l = 1, 2, 3$, нумерация которых осуществляется против часовой стрелки, начиная с точки $P_{ik1} \equiv P_i$) и применим формулы Грина:

$$\int_{T_{ik}} e_x V_x dx dy = + \oint_{\partial T_{ik}} e_x u dy, \quad \int_{T_{ik}} e_y V_y dx dy = - \oint_{\partial T_{ik}} e_y u dx.$$

Учтем далее, что $V_x = \tilde{k}_{11} W_x + \tilde{k}_{12} W_y$, $V_y = \tilde{k}_{21} W_x + \tilde{k}_{22} W_y$ (где \tilde{k}_{ij} – элементы обратной матрицы \mathbf{K}^{-1}), и получим следующие равенства

$$\begin{aligned} \int_{T_{ik}} e_x \tilde{k}_{11} W_x dx dy + \int_{T_{ik}} e_x \tilde{k}_{12} W_y dx dy &= + \oint_{\partial T_{ik}} e_x u dy, \\ \int_{T_{ik}} e_y \tilde{k}_{21} W_x dx dy + \int_{T_{ik}} e_y \tilde{k}_{22} W_y dx dy &= - \oint_{\partial T_{ik}} e_y u dx. \end{aligned}$$

Вынесем теперь средние значения компонент потока за знаки интегралов и приблизим двойные интегралы значениями соответствующих функций в центре треугольника, умноженными на его площадь S_{ik} , а контурные интегралы в левых частях равенств – с помощью формулы трапеций. В результате получим следующие приближенные равенства

$$a_{ik}^{(11)} (W_x)_{ik}^j + a_{ik}^{(12)} (W_y)_{ik}^j \approx b_{ik}^{(1)}, \quad a_{ik}^{(21)} (W_x)_{ik}^j + a_{ik}^{(22)} (W_y)_{ik}^j \approx b_{ik}^{(2)}, \quad (11)$$

где

$$a_{ik}^{(1m)} = \frac{S_{ik}}{3} \left[\sum_{l=1}^3 \left(e_x \tilde{k}_{1m} \right)_{ikl}^j \right], \quad a_{ik}^{(2m)} = \frac{S_{ik}}{3} \left[\sum_{l=1}^3 \left(e_y \tilde{k}_{2m} \right)_{ikl}^j \right], \quad m = 1, 2,$$

$$b_{ik}^{(1)} = +\frac{1}{2} \left[(y_{ik3} - y_{ik1}) \left((e_x u)_{ik2}^j - (e_x u)_{ik1}^j \right) - (y_{ik2} - y_{ik1}) \left((e_x u)_{ik3}^j - (e_x u)_{ik1}^j \right) \right],$$

$$b_{ik}^{(2)} = -\frac{1}{2} \left[(x_{ik3} - x_{ik1}) \left((e_y u)_{ik2}^j - (e_y u)_{ik1}^j \right) - (x_{ik2} - x_{ik1}) \left((e_y u)_{ik3}^j - (e_y u)_{ik1}^j \right) \right].$$

Система уравнений (11) совместна и имеет единственное решение. Это следует из свойств оператора \mathbf{K} и невырожденности треугольников T_{ik} . Поэтому в конечном итоге можно записать следующие приближенные равенства:

$$(W_x)_{ik}^j \approx \tilde{a}_{ik}^{(11)} b_{ik}^{(1)} + \tilde{a}_{ik}^{(12)} b_{ik}^{(2)}, \quad (W_y)_{ik}^j \approx \tilde{a}_{ik}^{(21)} b_{ik}^{(1)} + \tilde{a}_{ik}^{(22)} b_{ik}^{(2)}, \quad (12)$$

где $\tilde{a}_{ik}^{(mn)}$ – элементы соответствующей обратной матрицы ($m, n = 1, 2$).

Нетрудно заметить, что при определении потоков из равенств (12) понадобится вычислить не сами значения величин e_x, e_y , а их отношения в точках шаблона P_i . Это обстоятельство позволяет вычислять указанные величины по простым приближенным формулам:

$$\frac{(e_x)_{ikm}^j}{(e_x)_{ik1}^j} \approx \exp \left[0.5 (x_{ikm} - x_{ik1}) \left((G_x)_{ikm}^j + (G_x)_{ik1}^j \right) \right],$$

$$\frac{(e_y)_{ikm}^j}{(e_y)_{ik1}^j} \approx \exp \left[0.5 (y_{ikm} - y_{ik1}) \left((G_y)_{ikm}^j + (G_y)_{ik1}^j \right) \right], \quad m = 2, 3.$$

Средние значения граничной функции g_2 определим, применив формулу трапеций для приближения граничных интегралов. В результате получим:

$$(g_2)_{ip}^j \approx \frac{3}{4} (g_2)_{ip1}^j + \frac{1}{4} (g_2)_{ip2}^j, \quad (13)$$

где $P_{ip1} = P_i, P_{ip2}$ – концы граничного ребра треугольника T_{ip} , часть которого входит в контрольный объем V_i , а само ребро принадлежит ∂D_2 .

Если теперь в приближенных равенствах (10)–(13) заменить функцию u на ее разностный аналог U , то нетрудно видеть, что (10) переходит в уравнение конечно-объемной схемы (5), в котором

$$\Lambda U_i^j = \frac{1}{|V_i|} \sum_{k=1}^{m_i} \left(\mathbf{w}_{ik}^j, \boldsymbol{\theta} \mathbf{l}_{ik} \right), \quad \varphi_i^j = f_i^j + \frac{1}{|V_i|} \sum_{p=1}^{n_i} (g_2)_{ip}^j l_{ip}, \quad (14)$$

и соответствующие средние значения определяются по точным равенствам (11)–(13).

Для иллюстрации разработанного подхода рассмотрим частный случай краевой задачи (1)–(3), когда матрица \mathbf{K} является изотропной:

$$k_{11} = k_{22} = k_0, \quad k_{12} = k_{21} \equiv 0,$$

вектор $\mathbf{W} = k_0 \text{grad } u + \mathbf{E} u$, а на всей границе выполняются условия 3-го рода

$$(\mathbf{W}, \mathbf{n}) = g_2, \quad (x, y) \in \partial D.$$

Дополнительно предположим, что задача является линейной, то есть $k_0 = k_0(x, y, t)$, $g_2 = -\eta(u - u_0)$, и пусть $\eta = \text{const}$. В этих условиях можно записать построенную схему в более привычном виде, а именно выписать итоговый вид оператора Λ и правой части φ :

$$\begin{aligned} \Lambda U_i^j &= \frac{1}{|V_i|} \sum_{k=1}^{m_i} \left(-(W_x)_{ik}^j (l_y)_{ik} + (W_y)_{ik}^j (l_x)_{ik} \right) - \\ &\quad - \frac{\eta}{|V_i|} \sum_{p=1}^{n_i} \left(\frac{3}{4} U_i^j + \frac{1}{4} U_{ip2}^j \right) l_{ip}, \\ \varphi_i^j &= f_i^j + \frac{\eta}{|V_i|} \sum_{p=1}^{n_i} \left(\frac{3}{4} (u_0)_i^j + \frac{1}{4} (u_0)_{ip2}^j \right) l_{ip}, \end{aligned} \quad (15)$$

где

$$\begin{aligned} (W_x)_{ik}^j &= + \frac{3}{2S_{ik}} \frac{\Delta y_{ik3} \left((\tilde{e}_x)_{ik2}^j U_{ik2}^j - U_i^j \right) - \Delta y_{ik2} \left((\tilde{e}_x)_{ik3}^j U_{ik3}^j - U_i^j \right)}{(1/k_0)_i^j + (\tilde{e}_x/k_0)_{ik2}^j + (\tilde{e}_x/k_0)_{ik3}^j}, \\ (W_y)_{ik}^j &= - \frac{3}{2S_{ik}} \frac{\Delta x_{ik3} \left((\tilde{e}_y)_{ik2}^j U_{ik2}^j - U_i^j \right) - \Delta x_{ik2} \left((\tilde{e}_y)_{ik3}^j U_{ik3}^j - U_i^j \right)}{(1/k_0)_i^j + (\tilde{e}_y/k_0)_{ik2}^j + (\tilde{e}_y/k_0)_{ik3}^j}, \\ (\tilde{e}_x)_{ikm}^j &= \exp \left[0.5 \Delta x_{ikm} \left((E_x/k_0)_{ikm}^j + (E_x/k_0)_i^j \right) \right], \\ (\tilde{e}_y)_{ikm}^j &= \exp \left[0.5 \Delta y_{ikm} \left((E_y/k_0)_{ikm}^j + (E_y/k_0)_i^j \right) \right], \\ \Delta x_{ikm} &= x_{ikm} - x_i, \quad \Delta y_{ikm} = y_{ikm} - y_i, \quad m = 2, 3. \end{aligned}$$

Сделаем далее несколько замечаний. Во-первых, аналогичным способом можно построить целое семейство схем по времени

$$\begin{aligned} \frac{U_i^{j+1} - U_i^j}{\tau} &= \sigma \left(\Lambda U_i^{j+1} + \varphi_i^{j+1} \right) + (1 - \sigma) \left(\Lambda U_i^j + \varphi_i^j \right), \\ i &= 1, \dots, N, \quad j = 0, \dots, N_t - 1, \end{aligned} \quad (16)$$

где σ – вес схемы, принимающий значения 0, 0.5 и 1.

Во-вторых, используя приведенную процедуру, нетрудно построить схемы для трехмерного уравнения типа (1) на тетраэдральной сетке с барицентрическими контрольными объёмами.

В-третьих, если реализация явных схем вполне очевидна, то в случае неявных нелинейных схем придется использовать итерации по нелинейности по пространственным переменным. В настоящей работе использовались как явные схемы, так и полунеявные (чтобы не использовать итерации по нелинейности). Для реализации последних использовался метод бисопряженных градиентов с диагональным предобусловливателем.

Сформулируем теперь следующую теорему:

Теорема 1. *Конечно-объёмные схемы (6), (7), (16) при $\sigma = 0$ и 1 имеют порядок аппроксимации $\Psi = O(\hbar^2 + \tau)$ и $\Psi = O(\hbar^2 + \tau^2)$ при $\sigma = 0.5$. Все три схемы*

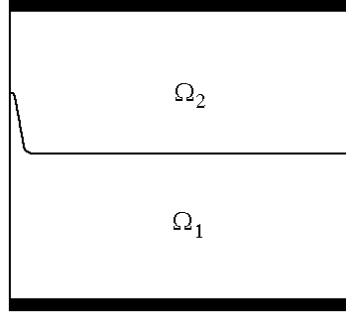


Рис. 1. Расчетная область

консервативны, и при выполнении условий

$$h_{\min} < C_1, \quad \tau < C_2 h_{\min}^\alpha, \quad \alpha = 2, 2, 1 \quad \text{для } \sigma = 0, 0.5, 1, \quad (17)$$

они обладают свойством слабой монотонности, являются устойчивыми в обычном и асимптотическом смысле и сходятся к дифференциальному решению задачи (1)–(3) с точностью Ψ в норме $L_2(\Omega_{xy}) \times C(\Omega_t)$. Здесь h и h_{\min} – средний и минимальный размеры рёбер треугольников пространственной сетки, C_1 , C_2 – положительные константы, не зависящие от параметров пространственной сетки.

Доказательство Теоремы 1 состоит из нескольких этапов. Порядок аппроксимации и консервативность схем вытекают из способа их построения и могут быть проверены непосредственно. Доказательство устойчивости и сходимости вытекает из условий выполнения слабого принципа максимума. При этом в случае неявной и симметричной схем можно построить оценки численного решения на слое по времени в энергетической норме (см., например, [3, 9]).

3. Тестовая задача и результаты расчетов

Конечно-объёмная схема (16), (6), (7) была опробована на примере расчетов динамики электронов в кремниевом автокатоде. Постановка задачи включала следующую систему безразмерных уравнений (подробнее см. [10])

$$\frac{\partial n}{\partial t} = \mu_1 \operatorname{div} \mathbf{j}_n, \quad \mathbf{j}_n = n \mu_n \mathbf{E} + D_1 \operatorname{grad}(D_n n), \quad (18)$$

$$\frac{\partial w_n}{\partial t} = \mu_2 \operatorname{div} \mathbf{Q}_n + (\mathbf{j}_n, \mathbf{E}) - (w_n - 1), \quad \mathbf{Q}_n = w_n \mu_n \alpha \mathbf{E} + D_2 \operatorname{grad}(D_n \alpha w_n), \quad (19)$$

$$\operatorname{div}(\varepsilon \mathbf{E}) = -\gamma(1 - n), \quad \mathbf{E} = -\operatorname{grad} \varphi, \quad (20)$$

где n и $w_n = n T_n$ – концентрация и энергия электронов (T_n – электронная температура), \mathbf{j}_n и \mathbf{Q}_n – ток и поток энергии электронов, \mathbf{E} и φ – вектор напряженности и потенциал электрического поля, α , μ_n , D_n – нелинейные коэффициенты, зависящие от электронной температуры, μ_k , D_k , ε , γ – безразмерные константы.

Уравнения (18)–(19) решаются в подобласти кремниевого катода Ω_1 , имеющего форму прямоугольника с небольшим острием в левом верхнем углу (см. рис. 1). Уравнение (20) для электрического поля решается во всей области $\Omega = [0, L_x] \times [0, L_y]$, содержащей катод и вакуумный слой Ω_2 , примыкающий сверху

к катоду. Приведенные уравнения дополняются следующими начальными и граничными условиями

$$n(x, y, 0) = 1, \quad w_n(x, y, 0) = 1, \quad \mathbf{E}(x, y, 0) = 0, \quad (x, y) \in \Omega_1, \quad (21)$$

$$(\mathbf{j}_n, \mathbf{n}) = \mathbf{j}_n^0, \quad (\mathbf{Q}_n, \mathbf{n}) = \mathbf{Q}_n^0, \quad (x, y) \in \partial\Omega_1, \quad (22)$$

$$\varphi(x, 0) = 0, \quad \varphi(x, L_y) = V_a, \quad (\mathbf{E}, \mathbf{n}) = 0, \quad x = 0, L_x. \quad (23)$$

Здесь \mathbf{n} – внешняя нормаль к границе соответствующей подобласти. На границе раздела вакуум-кремний ставятся известные условия сопряжения на нормальную и тангенциальную компоненты вектора \mathbf{E} :

$$\varepsilon_1 E_n^{(1)} = \varepsilon_2 E_n^{(2)}, \quad E_r^{(1)} = E_r^{(2)}, \quad (x, y) \in \Omega_1 \cap \Omega_2. \quad (24)$$

Задача (18)–(24) возникла в связи с разработкой устройств микровакуумной электроники [10], использующих в качестве силового элемента кремниевые автокатоды малой размерности (порядка нескольких микрон и меньше). Основной проблемой при их создании оказывается сильный разогрев катода вблизи эмиттирующей поверхности (в нашем случае раздел областей Ω_k) в силу большой величины электрического поля, который приводит к быстрому выходу прибора из строя.

Для моделирования указанной задачи на основе разработанной выше методики был создан комплекс программ и проведено предварительное исследование электронных процессов в кремниевых катодах микронных размеров. В качестве иллюстрации приведем расчеты для области, изображенной на рис. 1, с размерами 1.5×3 мкм. Полуширина анода была равна 1.5 мкм, высота катода – 1.5 мкм, высота острья – 0.3 мкм, радиус скругления острья – 20 нм, полуширина основания острья – 0.06 мкм. Потенциал на аноде был равен 1000 В. Расчет проводился на треугольной сетке с параметрами: число узлов сетки во всей области составляло 35480, в области катода – 17660; число треугольников во всей области – 70049, в области катода – 34666. Целью расчетов был поиск области катода, подвергающейся наибольшему воздействию электрического поля.

На рис. 2 и 3 показаны изолинии модуля электрического поля и энергии электронов в области острья во время переходного процесса. Видно, что электрическое поле глубоко проникает в объём острья, разогрев электронов достигает значительной величины в верхней его части. Именно это приводит к наблюдаемому на опыте весьма высоким плотностям тока автоэмиссии у вершины острья, а также, как можно полагать, служит причиной деградации вершины острья в процессе эмиссии [11]. Таким образом, расчеты позволяют найти участки катода, наиболее подверженные деградации. Дальнейшая цель моделирования состоит в оптимизации эмиссионных и прочностных характеристик катодов при их применении в таких устройствах, как автокатодные и наплемные дисплеи, эмиссионные зонды и др.

Заключение

В работе представлен новый численный подход к решению эволюционных краевых задач со структурой пространственного оператора типа нелинейной конвекции-диффузии. Особенностью численного алгоритма является применение схем экспоненциальной подгонки в случае решения задачи на нерегулярных треугольных и тетраэдральных сетках. В работе проведено подробное построение экспоненциальной конечно-объёмной схемы для модельного уравнения параболического типа общего вида, сформулирована теорема устойчивости и сходимости

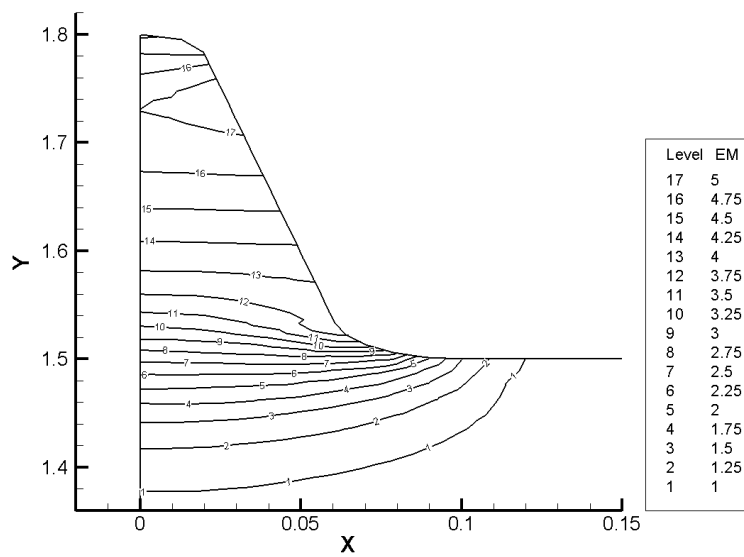


Рис. 2. Изолинии модуля электрического поля в области острия катода

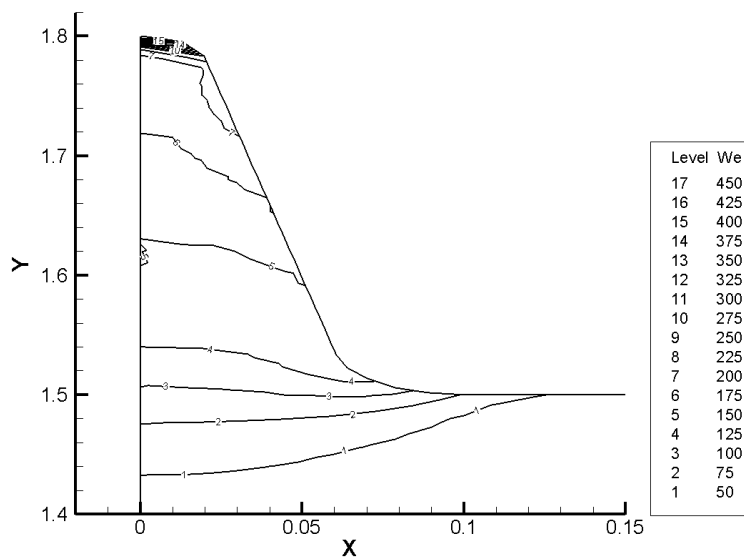


Рис. 3. Изолинии энергии электронов в области острия катода

схемы в энергетической норме. Эффективность предложенного подхода продемонстрирована на примере задачи вакуумной микроэлектроники по расчету эмиссионных характеристик кремниевого автокатодного микроузла в случае двумерной реальной геометрии.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (проекты № 05-07-90054-в, 06-01-00097-а, 07-01-12079-офи).

Summary

S.V. Polyakov. Exponential finite volume schemes for solving of evolutionary equations on irregular grids.

A numerical solution of evolutionary equations on irregular grids is considered. The conservative weakly monotone finite volume schemes on both triangular and tetrahedral grids for convection-diffusion type equations are proposed. The conditions of stability and convergence of these schemes are formulated. The proposed numerical approach are illustrated for one vacuum microelectronics problem connected with computations of electron emission from edge surface of silicon microcathode.

Литература

1. *Chung T.J.* Computational fluid dynamics. – Cambridge: Cambridge Univ. Press, 2002. – 1022 p.
2. *Li R., Chen Zh., Wu W.* Generalized difference methods for differential equations. Numerical analysis of finite volume methods. – M. Dekker Inc., 2000. – 459 p.
3. *Самарский А.А.* Теория разностных схем. – М.: Наука, 1983. – 616 с.
4. *Голанд Е.И.* О сопряженных семействах разностных схем для уравнений параболического типа с младшими членами // Журн. вычисл. матем. и матем. физ. – 1978. – Т. 18, № 5. – С. 1162–1169.
5. *Кареткина Н.В.* Безусловно устойчивая разностная схема для параболических уравнений, содержащих первые производные // Журн. вычисл. матем. и матем. физ. – 1980. – Т. 20, № 7. – С. 236–240.
6. *Дулан Е., Миллер Дж., Шилдерс У.* Равномерные численные методы решения задач с пограничным слоем. – М.: Мир, 1983. – 198 с.
7. *Поляков С.В., Сабликов В.А.* Латеральный перенос фотоиндуцированных носителей заряда в гетероструктурах с двумерным электронным газом // Матем. моделирование. – 1997. – Т. 9, № 12. – С. 76–86.
8. *Карамзин Ю.Н., Попов И.В., Поляков С.В.* Разностные методы решения задач механики сплошной среды на неструктурированных треугольных и тетраэдральных сетках // Матем. моделирование. – 2003. – Т. 15, № 11. – С. 3–12.
9. *Калиниченко М.И., Поляков С.В.* Численные методы для двумерной модели распространения лазерного излучения в химически активном газе в случае развитой термодиффузии // Журн. вычисл. матем. и матем. физ. – 1997. – Т. 37, № 3. – С. 334–347.
10. *Федирко В.А., Поляков С.В.* Моделирование на МВС устройств вакуумной микроэлектроники // Фундаментальные физико-математические проблемы и моделирование технико-технологических систем / Под ред. Л.А. Уваровой. – М.: Янус-К, ИЦ МГТУ «Станкин», 2004. – Вып. 7. – С. 138–147.
11. *Дюжеев Н.А., Махиборода М.А., Федирко В.А.* Исследование различных режимов автоэлектронной эмиссии кремниевого кантилевера // XIV науч.-техн. конф. с участием зарубежных специалистов «Вакуумная наука и техника»: материалы конф. / Под ред. проф. Д.В. Быкова. – М.: МИЭМ, 2007. – С. 248–251.

Поступила в редакцию
02.11.07

Поляков Сергей Владимирович – кандидат физико-математических наук, заместитель директора Института математического моделирования РАН.

E-mail: polyakov@imamod.ru