

Конструирование и анализ адекватных вычислительных алгоритмов и их применение в задачах физики полупроводников

Краткое изложение заявки (summary)

Данная работа посвящена конструированию, обоснованию и исследованию новых вычислительных методов, основанных на идеях схем без насыщения и принципе адекватности. Созданные методы использованы для моделирования процессов физики полупроводников.

В рамках проведённых исследований разработаны и теоретически обоснованы два новых подхода для поиска стационарных численных решений уравнений гидродинамической МЕР модели переноса заряда в полупроводниковых устройствах. Первый подход является оригинальным сочетанием набора регуляризаций, идей схем без насыщения, сплайн-интерполяций и метода установления; второй подход представляет новый способ конструирования и исследования устойчивых разностных схем для нелинейных задач. Предлагаемые подходы используют две идеи, являющиеся основополагающими для настоящей работы. Идея о схемах без насыщения с целенаправленным применением полиномов Чебышева позволяет априори учесть свойства гладкости разыскиваемого решения и минимизировать погрешность аппроксимации. Данная идея полностью соответствует второму важному принципу, использованному в работе - принципу адекватности, который утверждает, что вычислительная модель должна соответствовать всем свойствам исходной дифференциальной задачи и только этим свойствам, т. е. быть адекватной. Необходимо отметить, что алгоритмы без насыщения строились в работах К. И. Бабенко, С. Д. Алгазина и А. Л. Афондикова в основном на примерах модельных линейных краевых задач и использовались при поиске решений уравнений Навье-Стокса для вязкой несжимаемой жидкости. Принцип адекватности, сформулированный в работах А. М. Блохина, Р. Д. Алаева, также использовался только в линейном случае. Первый подход, предложенный в данной работе, имеет целью построить и обосновать универсальный алгоритм без насыщения для решения нелинейных задач с использованием нестационарных регуляризаций и итерационного метода установления. Второй подход реализует принцип адекватности также на нелинейном уровне для уравнений МЕР модели при помощи построения и анализа априорных оценок на нормы решений рассматриваемых задач, а также разностных аналогов этих оценок.

В последующих исследованиях планируется осуществить расширение и обобщение предложенных подходов, а именно:

1. Использовать в рамках первого подхода два вида интерполяционных полиномов с Чебышевскими узлами для решения задач со смешанными краевыми условиями.
2. Построить и обосновать эффективный алгоритм без насыщения для решения 2D задач.
3. Повысить эффективность разработанного алгоритма за счёт анализа предложенных нестационарных регуляризаций.
4. Создать для уравнений МЕР модели «устойчивую» разностную схему с высоким порядком аппроксимации, основанную на принципе адекватности.
5. Сконструировать и реализовать на основе «устойчивых» разностных схем второго подхода алгоритм для решения 2D краевых задач физики полупроводников.