

# 半导体瞬态问题的修正迎风有限体积格式\*

杨 青

(山东师范大学数学科学院, 济南 250014)

**摘要** 半导体器件的瞬时状态由包含三个拟线性偏微分方程所组成的方程组的初边值问题来描述. 其中电子位势方程是椭圆型的, 电子和空穴浓度方程是对流扩散型的. 对电子位势方程采用一次元有限体积法来逼近, 对电子浓度和空穴浓度方程采用修正的迎风有限体积方法来逼近, 并进行详细的理论分析, 关于位势得到  $O(h + \Delta t)$  阶的  $H^1$  模误差估计结果, 关于浓度得到  $O(h^2 + \Delta t)$  阶的  $L^2$  模误差估计结果. 最后, 给出数值例子.

**关键词** 半导体, 初边值问题, 修正迎风格式, 有限体积法, 误差估计.

MR(2000) 主题分类号 65M06, 65M15

## 1 引言

记  $J = (0, T]$ , 考虑平面区域  $\Omega \subset R^2$  上的二维半导体瞬态问题, 其数学模型为<sup>[1]</sup>

$$-\Delta\psi = \alpha(p - e + N(x)), (x, t) \in \Omega \times [0, T], \quad (1.1)$$

$$\frac{\partial e}{\partial t} = \nabla \cdot [D_e(x)\nabla e - \mu_e(x)e\nabla\psi] - R(e, p), (x, t) \in \Omega \times J, \quad (1.2)$$

$$\frac{\partial p}{\partial t} = \nabla \cdot [D_p(x)\nabla p + \mu_p(x)p\nabla\psi] - R(e, p), (x, t) \in \Omega \times J, \quad (1.3)$$

其中 (1.1) 为电子位势方程, (1.2) 和 (1.3) 分别是电子和空穴浓度方程, 未知函数为电子位势  $\psi$ , 电子  $e$ , 空穴浓度  $p$ . 方程 (1.1)–(1.3) 中出现的系数均有正的上、下界, 其中  $\alpha = \frac{q}{\epsilon}$ ,  $q \geq 0$  和  $\epsilon \geq 0$  均为正常数, 分别表示电子负电荷和介电常数;  $D_s(x)$  ( $s = e, p$ ) 为扩散系数,  $\mu_s(x)$  ( $s = e, p$ ) 为迁移率, 二者关系为  $D_s(x) = U_T \mu_s(x)$ ,  $U_T$  为热电压;  $N(x) = N_D(x) - N_A(x)$  为给定函数,  $N_D(x)$  和  $N_A(x)$  是分别为施主和受主杂质浓度, 当  $x$  接近半导体  $p-n$  结时  $N(x)$  的变化非常快;  $R_s(e, p)$  ( $s = e, p$ ) 是电子 (空穴) 的产生复合率, 为了此系统简单起见, 取

$$R(e, p) = \frac{ep - e_i^2}{\tau_p(e + e_i) + \tau_e(p + e_i)}$$

和进一步取  $\tau_e = \tau_p = \tau$ , 这里  $e_i = 10^{10} \text{cm}^{-3}$  是固有数.

\* 山东省自然科学基金 (Z2006A02) 和山东省中青年科学家科研奖励基金 (BS01009) 资助项目.  
收稿日期: 2005-05-25, 收到修改稿日期: 2007-02-05.

初始条件和边界条件分别为

$$e|_{t=0} = e_0(x), \quad p|_{t=0} = p_0(x), \quad x \in \Omega, \quad (1.4)$$

$$\psi|_{\partial\Omega} = 0, \quad e|_{\partial\Omega} = 0, \quad p|_{\partial\Omega} = 0, \quad t \in J, \quad (1.5)$$

其中  $\partial\Omega$  为  $\Omega$  的边界,  $\psi$  的初始值可由 (1.1), (1.4) 和 (1.5) 计算出.

著名学者 Gummel H K 于 1964 年提出用序列迭代法计算这类问题<sup>[2-3]</sup>, 开创了半导体数值模拟这一新领域. Douglas 等对一维、二维简单模型 (不考虑温度影响、常系数) 提出了便于实用的差分方法应用于生产实际, 并第一个得到了理论分析成果<sup>[4-5]</sup>. 研究结果已经表明, 对对流占优扩散方程, 如果用普通的有限差分法或者标准有限元法来计算, 将产生严重的振荡失真现象<sup>[6]</sup>. 二十世纪 80 年代初, Douglas 等提出了解对流占优扩散问题的特征有限元法和特征差分法, 可以有效地避免数值振荡<sup>[7]</sup>. 袁益让<sup>[1]</sup>对二维半导体问题提出了特征有限元和特征混合元二类格式, 并得到了最佳阶的  $H^1$  误差估计. 后来梁栋在广义差分法<sup>[8,9]</sup>的基础上对一般的线性定常和非定常对流扩散问题提出了迎风广义差分格式, 通过理论分析和数值实验, 表明此方法处理对流扩散问题可以有效地避免数值振荡<sup>[10-11]</sup>, 但是这种迎风格式关于空间在  $L^2$  范数下仅具有一阶精度. Lazarov 等在文<sup>[12]</sup>中用一种修正的迎风有限体积元格式来求解一般线性定常对流扩散问题, 这种修正的迎风格式关于空间在  $L^2$  范数下具有二阶精度. 本文对上述半导体问题中的位势方程采用椭圆问题的有限体积方法来离散, 而对两个浓度方程采用修正的迎风有限体积格式来离散, 即用一次元有限体积方法离散扩散项, 而用修正的迎风差分格式离散对流项, 并进行了理论分析, 得到了  $L^2$  模误差估计结果. 数值实验的结果也表明该方法的可行性和有效性. 本文的格式保留了迎风格式的优点, 而且关于空间具有二阶精度.

我们假定问题 (1.1)–(1.5) 的精确解具有一定的光滑性,  $R(e, p)$  在解的  $\varepsilon_0$  邻域内关于两个变量均为 Lipschitz 连续的, 即存在正常数  $C$ , 当  $|\varepsilon_i| \leq \varepsilon_0$  ( $1 \leq i \leq 4$ ) 时有

$$|R(e + \varepsilon_1, p + \varepsilon_2) - R(e + \varepsilon_3, p + \varepsilon_4)| \leq C\{|\varepsilon_1 - \varepsilon_3| + |\varepsilon_2 - \varepsilon_4|\}. \quad (1.6)$$

本文结构如下: 第 2 节给出问题 (1.1)–(1.5) 的离散格式; 第 3 节给出几个有关的引理; 第 4 节对数值格式进行收敛性分析; 第 5 节给出数值例子. 文中出现的  $C$  和  $\varepsilon$  分别表示一般正常数和一般正的小量, 不同之处可有不同的含义.

## 2 离散格式的建立

假设  $\Omega = (0, 1)^2$ , 取正整数  $M$ , 记  $h = \frac{1}{M}$ , 对  $\Omega$  作基于正方形网格的直角三角剖分  $\Omega_h = \{E\}$ , 如图 1, 正方形的边长为  $h$ , 网格点为

$$P = (x_{1,i}, x_{2,j}) = (ih, jh), \quad i, j = 0, 1, \dots, M.$$

记

$$\bar{\omega} = \{(x_{1,i}, x_{2,j}) : i, j = 0, 1, 2, \dots, M\}, \quad \omega = \bar{\omega} \cap \Omega, \quad \gamma = \bar{\omega} \setminus \omega,$$

$$\omega_i^\pm = \omega \cup \gamma_i^\pm, \quad \gamma_i^\pm = \{x \in \gamma : \cos(x_i, \mathbf{n}) = \pm 1\},$$

其中  $\mathbf{n}$  为  $\partial\Omega$  的单位外法向量. 试探函数空间  $U_h$  取为  $\Omega_h$  上的分片线性多项式空间, 且满足  $U_h \in H_0^1(\Omega)$ ,  $\{\varphi_P\}$  为  $U_h$  的一组基.

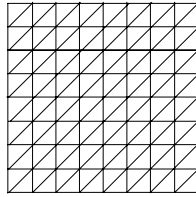


图 1 剖分示意图

下面让我们来建立  $\Omega_h$  的对偶剖分  $\Omega_h^*$ . 对任意的内节点  $P$ , 考虑所有以  $P$  为顶点的三角形, 连接三角形的外心及三角形各边的中点, 这个过程将每个三角形分成三部分, 所有以  $P$  为顶点的子区域的并集为以  $P$  为中心边长为  $h$  的正方形, 称为对应于节点  $P$  的对偶单元, 记为  $E_{i,j}^*$ , 对边界点可类似建立对偶单元. 所有对偶单元构成  $\Omega_h$  的外心对偶剖分, 记为  $\Omega_h^*$ . 检验函数空间  $V_h$  取为  $\Omega_h^*$  上的分片常数空间, 且满足零边值条件,  $\{\bar{\varphi}_P\}$  为  $V_h$  的一组基.

对  $u \in H_0^1(\Omega)$ , 定义两个插值算子

$$\Pi_h : H_0^1(\Omega) \rightarrow U_h, \quad \Pi_h^* : H_0^1(\Omega) \rightarrow V_h,$$

分别满足

$$\Pi_h u = \sum_{P \in \omega} u(P) \varphi_P(x), \quad \Pi_h^* u = \sum_{P \in \omega} u(P) \bar{\varphi}_P(x).$$

定义在  $\omega$  上的函数为网格函数. 对任意的网格函数  $\phi$ , 记

$$\begin{aligned} \phi_{i,j} &= \phi(x_{1,i}, x_{2,j}), \quad \phi_{i \pm \frac{1}{2}, j} = \phi(x_{1, i \pm \frac{1}{2}}, x_{2,j}) = \phi\left(x_{1,i} \pm \frac{h}{2}, x_{2,j}\right), \\ \phi_{i, j \pm \frac{1}{2}} &= \phi(x_{1,i}, x_{2, j \pm \frac{1}{2}}) = \phi\left(x_{1,i}, x_{2,j} \pm \frac{h}{2}\right). \end{aligned}$$

对给定函数  $\phi(P)$ ,  $v(P)$ ,  $P \in \bar{\omega}$ , 我们定义如下的离散内积和范数

$$\begin{aligned} (\phi, v)_h &= \sum_{P \in \omega} h^2 \phi(P) v(P), \quad \|\phi\|_{0,h} = (\phi, \phi)_h^{\frac{1}{2}}; \\ (\phi, v)_l &= \sum_{P \in \omega_l^\pm} h^2 \phi(P) v(P), \quad \|\phi\|_l = (\phi, \phi)_l^{\frac{1}{2}}, \quad l = 1, 2. \end{aligned}$$

对网格函数  $\phi(P)$ , 我们引入如下的差分 and 差商记号

- i) 向前差分  $\Delta_1 \phi_{i,j} = \phi_{i+1,j} - \phi_{i,j}$ , 向前差商  $\delta_{x_1} \phi_{i,j} = \frac{\Delta_1 \phi_{i,j}}{h}$ ;
- ii) 向后差分  $\bar{\Delta}_1 \phi_{i,j} = \phi_{i,j} - \phi_{i-1,j}$ , 向后差商  $\delta_{\bar{x}_1} \phi_{i,j} = \frac{\bar{\Delta}_1 \phi_{i,j}}{h}$ ;
- iii) 二阶中心差商

$$\delta_{x_1 \bar{x}_1} \phi_{i,j} = \frac{\Delta_1 \phi_{i,j} - \bar{\Delta}_1 \phi_{i,j}}{h^2}.$$

在  $x_2$  方向上有类似的定义.

下面我们引入离散的  $H^1$ -模

$$|\phi|_{1,h}^2 = \|\delta_{\bar{x}_1} \phi\|_1^2 + \|\delta_{\bar{x}_2} \phi\|_2^2, \quad \|\phi\|_{1,h}^2 = |\phi|_{1,h}^2 + \|\phi\|_{0,h}^2.$$

取正整数  $N$ , 时间步长  $\Delta t = \frac{T}{N}$ ,  $t^n = n\Delta t$ ,  $n = 0, 1, \dots, N$ , 对任何在  $t = t^n$  处有定义的函数  $\phi(t)$ , 记  $\phi^n = \phi(t^n)$ . 下面对问题 (1.1)–(1.5) 中的各个方程分别进行离散. 设  $\psi_h, e_h, p_h : \{t^0, t^1, \dots, t^N\} \rightarrow U_h$  为相应于  $\psi, e, p$  的近似解. 对  $n \geq 0$ , 若  $e_h^n$  和  $p_h^n$  已求得,  $\psi_h^n$  由下面的格式确定

$$-(\delta_{x_1 \bar{x}_1} \psi_{h,i,j}^n + \delta_{x_2 \bar{x}_2} \psi_{h,i,j}^n) = \frac{\alpha}{h^2} \int_{E_{i,j}^*} (p_h^n - e_h^n + N(x)) dx, \quad i, j = 1, 2, \dots, M-1. \quad (2.1)$$

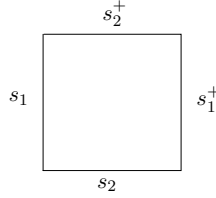


图 2 对偶单元  $E_{i,j}^*$

下面对浓度方程进行离散, 以电子浓度方程为例. 对  $P \in \omega$ , 在  $E_{i,j}^*$  上积分方程 (1.2) 两端, 并对空间导数项应用 Green 公式, 可得

$$\int_{E_{i,j}^*} \frac{\partial e}{\partial t} dx - \int_{\partial E_{i,j}^*} D_e \frac{\partial e}{\partial \mathbf{n}} ds + \int_{\partial E_{i,j}^*} (-\mu_e \mathbf{u} \cdot \mathbf{n}) eds = - \int_{E_{i,j}^*} R dx, \quad (2.2)$$

其中  $\mathbf{u} = -\nabla \psi$  表示电场强度,  $\mathbf{n}$  为  $\partial E_{i,j}^*$  的单位外法向量. 记  $\partial E_{i,j}^* = s_1^+ \cup s_2^+ \cup s_1^- \cup s_2^-$ , 如图 2, 则 (2.2) 式中左端第二项和第三项可写为

$$\begin{aligned} & - \left\{ \int_{s_1^+} + \int_{s_2^+} + \int_{s_1^-} + \int_{s_2^-} \right\} D_e \frac{\partial e}{\partial \mathbf{n}} d\gamma + \left\{ \int_{s_1^+} + \int_{s_2^+} + \int_{s_1^-} + \int_{s_2^-} \right\} (-\mu_e \mathbf{u} \cdot \mathbf{n}) ed\gamma \\ &= - \int_{s_1^+} D_e \frac{\partial e}{\partial x_1} d\gamma - \left( - \int_{s_1^-} D_e \frac{\partial e}{\partial x_1} d\gamma \right) - \int_{s_2^+} D_e \frac{\partial e}{\partial x_2} d\gamma - \left( - \int_{s_2^-} D_e \frac{\partial e}{\partial x_2} d\gamma \right) \\ &+ \int_{s_1^+} (-\mu_e u_1) ed\gamma - \int_{s_1^-} (-\mu_e u_1) ed\gamma + \int_{s_2^+} (-\mu_e u_2) ed\gamma - \int_{s_2^-} (-\mu_e u_2) ed\gamma. \end{aligned}$$

下面我们考虑对上式中右端各项的逼近. 首先, 对于扩散项, 我们自然想到下面的逼近

$$- \int_{s_1} D_e \frac{\partial e}{\partial x_1} d\gamma = -k_{1,i,j} \bar{\Delta}_1 e_{i,j} + O(h^2),$$

其中

$$k_{e,1,i,j} = \frac{1}{h} \int_{s_1} D_e d\gamma.$$

记

$$b_{e,1,i,j} = -(\mu_e u_1)_{i-\frac{1}{2},j},$$

对于对流项, 如果用迎风的方法来逼近, 有

$$\begin{aligned} \int_{s_1} (-\mu_e u_1) e d\gamma &= \frac{1}{2} (b_{e,1,i,j} h - |b_{e,1,i,j} h|) e_{i,j} + \frac{1}{2} (b_{e,1,i,j} h + |b_{e,1,i,j} h|) e_{i-1,j} + O(h) \\ &= I_1 + O(h), \end{aligned}$$

而如果用中心差分的思想来处理, 则有

$$\int_{s_1} (-\mu_e u_1) e d\gamma = b_{e,1,i,j} h \frac{e_{i,j} + e_{i-1,j}}{2} + O(h^2) = I_2 + O(h^2).$$

我们现在的目的就是通过对迎风格式进行修正, 来得到一种关于空间具有二阶精度的迎风格式, 我们将通过下面的方法来实现这一目的. 易知

$$\begin{aligned} & - \int_{s_1} D_e \frac{\partial e}{\partial x_1} d\gamma + \int_{s_1} (-\mu_e u_1) e d\gamma \\ &= -k_{e,1,i,j} \bar{\Delta}_1 e_{i,j} + I_2 + O(h^2) \\ &= -\left(k_{e,1,i,j} - \frac{1}{2} |b_{e,1,i,j} h|\right) \bar{\Delta}_1 e_{i,j} + I_1 + O(h^2) \\ &= -\frac{k_{e,1,i,j}}{1 + \frac{|b_{e,1,i,j} h|}{2k_{e,1,i,j}}} \bar{\Delta}_1 e_{i,j} \\ & \quad - \left(k_{e,1,i,j} - \frac{1}{2} |b_{e,1,i,j} h| - \frac{k_{e,1,i,j}^2}{k_{e,1,i,j} + \frac{|b_{e,1,i,j} h|}{2}}\right) \bar{\Delta}_1 e_{i,j} + I_1 + O(h^2) \\ &= -\frac{k_{e,1,i,j}}{1 + \frac{|b_{e,1,i,j} h|}{2k_{e,1,i,j}}} \bar{\Delta}_1 e_{i,j} + \frac{b_{e,1,i,j}^2 h^2 \bar{\Delta}_1 e_{i,j}}{4(k_{e,1,i,j} + \frac{1}{2} |b_{e,1,i,j} h|)} + I_1 + O(h^2) \\ &= -\frac{k_{e,1,i,j}}{1 + \frac{|b_{e,1,i,j} h|}{2k_{e,1,i,j}}} \bar{\Delta}_1 e_{i,j} + I_1 + O(h^2). \end{aligned}$$

上述分析使我们容易得到所需要的格式, 若对时间导数项采用 Euler 向后差商逼近, 则对电子浓度方程和空穴浓度方程的离散格式为: 假设  $\{\psi_h^{n-1}, e_h^{n-1}, p_h^{n-1}\}$  已知,  $\{e_h^n, p_h^n\}$  由下述格式确定

$$\begin{aligned} & \frac{1}{h^2} \int_{E_{i,j}^*} \frac{e_h^n - e_h^{n-1}}{\Delta t} dx - \frac{1}{h^2} \sum_{l=1}^2 (\tilde{K}_{e,l,i,j}^+ \Delta_l e_{h,i,j}^n - \tilde{K}_{e,l,i,j}^- \bar{\Delta}_l e_{h,i,j}^n) \\ & + \frac{1}{2h^2} [(B_{e,1,i,j}^+ h - |B_{e,1,i,j}^+ h|) e_{h,i+1,j}^n + (B_{e,1,i,j}^+ h + |B_{e,1,i,j}^+ h|) e_{h,i,j}^n] \\ & - \frac{1}{2h^2} [(B_{e,1,i,j} h - |B_{e,1,i,j} h|) e_{h,i,j}^n + (B_{e,1,i,j} h + |B_{e,1,i,j} h|) e_{h,i-1,j}^n] \\ & + \frac{1}{2h^2} [(B_{e,2,i,j}^+ h - |B_{e,2,i,j}^+ h|) e_{h,i,j+1}^n + (B_{e,2,i,j}^+ h + |B_{e,2,i,j}^+ h|) e_{h,i,j}^n] \\ & - \frac{1}{2h^2} [(B_{e,2,i,j} h - |B_{e,2,i,j} h|) e_{h,i,j}^n + (B_{e,2,i,j} h + |B_{e,2,i,j} h|) e_{h,i,j-1}^n] \\ & = -\frac{1}{h^2} \int_{E_{i,j}^*} R_h^{n-1} dx, \end{aligned} \tag{2.3}$$

$$\begin{aligned}
& \frac{1}{h^2} \int_{E_{i,j}^*} \frac{p_h^n - p_h^{n-1}}{\Delta t} dx - \frac{1}{h^2} \sum_{l=1}^2 (\tilde{K}_{p,l,i,j}^+ \Delta_l p_{h,i,j}^n - \tilde{K}_{p,l,i,j}^- \bar{\Delta}_l p_{h,i,j}^n) \\
& + \frac{1}{2h^2} [(B_{p,1,i,j}^+ h - |B_{p,1,i,j}^+ h|) p_{h,i+1,j}^n + (B_{p,1,i,j}^+ h + |B_{p,1,i,j}^+ h|) p_{h,i,j}^n] \\
& - \frac{1}{2h^2} [(B_{p,1,i,j} h - |B_{p,1,i,j} h|) p_{h,i,j}^n + (B_{p,1,i,j} h + |B_{p,1,i,j} h|) p_{h,i-1,j}^n] \\
& + \frac{1}{2h^2} [(B_{p,2,i,j}^+ h - |B_{p,2,i,j}^+ h|) p_{h,i,j+1}^n + (B_{p,2,i,j}^+ h + |B_{p,2,i,j}^+ h|) p_{h,i,j}^n] \\
& - \frac{1}{2h^2} [(B_{p,2,i,j} h - |B_{p,2,i,j} h|) p_{h,i,j}^n + (B_{p,2,i,j} h + |B_{p,2,i,j} h|) p_{h,i,j-1}^n] \\
& = -\frac{1}{h^2} \int_{E_{i,j}^*} R_h^{n-1} dx, \tag{2.4}
\end{aligned}$$

$$e_h^0 = \Pi_h e_0, \quad p_h^0 = \Pi_h p_0, \tag{2.5}$$

其中

$$\begin{aligned}
B_{e,1,i,j} &= (-\mu_e U_h^{n-1})_{i-\frac{1}{2},j}, \quad B_{e,1,i,j}^+ = B_{e,1,i+1,j}, \\
\tilde{K}_{e,1,i,j} &= \frac{k_{e,1,i,j}}{1 + \frac{|B_{e,1,i,j} h|}{2k_{e,1,i,j}}}, \quad \tilde{K}_{e,1,i,j}^+ = \tilde{K}_{e,1,i+1,j}.
\end{aligned}$$

其余有关符号类似

$$R_h^{n-1} = R(e_h^{n-1}, p_h^{n-1}).$$

方程 (2.1) 和 (2.3)–(2.5) 构成了问题 (1.1)–(1.5) 的数值计算格式, 其计算过程为:

- i) 由 (2.5) 可得  $\{e_h^0, p_h^0\}$ , 然后由 (2.1) 计算  $\psi_h^0$ ;
- ii) 对  $n = 1, 2, \dots, N$ , 假设  $\{e_h^{n-1}, p_h^{n-1}, \psi_h^{n-1}\}$  已求得, 分别由 (2.3) 和 (2.4) 求出  $e_h^n$  和  $p_h^n$ , 然后由 (2.1) 求出  $\psi_h^n$ .

### 3 误差分析

设  $H^m(\Omega)$ ,  $H_0^m(\Omega)$  为通常的 Sobolev 空间,  $\|\cdot\|_m$  和  $|\cdot|_m$  分别表示  $H^m(\Omega)$  上的全范数和半范数.

**引理 3.1** 在  $U_h$  上,  $|\cdot|_{1,h}$  和  $|\cdot|_1$  一致;  $\|\cdot\|_{0,h}$  和  $\|\cdot\|_{1,h}$  分别与  $\|\cdot\|$  和  $\|\cdot\|_1$  等价.

**引理 3.2**

i)  $(w_h, \Pi_h^* \bar{w}_h) = (\bar{w}_h, \Pi_h^* w_h), \forall w_h, \bar{w}_h \in U_h$ ;

ii) 令  $\|w_h\| = (w_h, \Pi_h^* w_h)^{\frac{1}{2}}$ , 则在  $U_h$  上有  $\|\cdot\|$  与  $\|\cdot\|_{0,h}$  和  $\|\cdot\|$  等价.

注 引理 3.1 和引理 3.2 的证明均见广义差分法专著 [13], 这里不再证明.

下面我们对第 2 节中提出的格式进行收敛性分析. 记  $\theta = \psi_h - \Pi_h \psi$ ,  $\xi_e = e_h - \Pi_h e$ ,  $\zeta_e = e - \Pi_h e$ ,  $\xi_p$  和  $\zeta_p$  类似.

首先, 对位势方程, 易得其误差方程为

$$-(\delta_{x_1\bar{x}_1}\theta_{i,j}^n + \delta_{x_2\bar{x}_2}\theta_{i,j}^n) = \frac{1}{h^2} \int_{E_{i,j}^*} \alpha(p_h^n - p^n + e^n - e_h^n) dx + \sum_{l=1}^2 \frac{1}{h} (\chi_{l,i,j}^+ - \chi_{l,i,j}), \quad (3.1)$$

其中

$$\chi_{l,i,j} = \delta_{\bar{x}_l} \psi_{i,j}^n - \frac{1}{h} \int_{s_l} \frac{\partial \psi^n}{\partial x_l} d\gamma.$$

(3.1) 两端同乘以  $\theta_{i,j}^n h^2$  并关于节点  $P \in \omega$  求和, 利用分部求和公式, 可得

$$\begin{aligned} |\theta^n|_{1,h}^2 &\leq C \{ \|\zeta_e^n\|^2 + \|\zeta_e^n\|^2 + \|\zeta_p^n\|^2 + \|\zeta_p^n\|^2 \} \\ &\quad + \varepsilon \|\theta^n\|_{0,h}^2 + C \sum_{l=1}^2 \|\chi_l\|_l^2 + \varepsilon |\theta^n|_{1,h}^2. \end{aligned}$$

**引理 3.3** 设  $\psi \in H^3(\Omega)$ , 则有

$$\|\chi_l\|_l \leq Ch^2 \|\psi^n\|_3, \quad l = 1, 2.$$

证 定义变量变换

$$x_1 = x_{1,i} + z_1 h, \quad x_2 = x_{2,j} + z_2 h,$$

则在此变换下, 区域

$$E = \left\{ (x_1, x_2) : x_{1,i-1} < x_1 < x_{1,i}, |x_2 - x_{2,j}| < \frac{h}{2} \right\}$$

变成

$$\widehat{E} = \left\{ (z_1, z_2) : -1 < z_1 < 0, |z_2| < \frac{1}{2} \right\}.$$

对任意的函数  $\phi(x_1, x_2)$ , 记

$$\widehat{\phi}(z_1, z_2) = \phi(x_{1,i} + z_1 h, x_{2,j} + z_2 h).$$

在下面的证明中我们将省略上标  $n$ . 由定义

$$\begin{aligned} \chi_{1,i,j} &= \frac{1}{h} \left\{ \psi(x_{1,i}, x_{2,j}) - \psi(x_{1,i-1}, x_{2,j}) - \int_{x_{2,j-1/2}}^{x_{2,j+1/2}} \frac{\partial \psi}{\partial x_1}(x_{1,i-\frac{1}{2}}, x_2) dx_2 \right\} \\ &= \frac{1}{h} \left\{ \widehat{\psi}(0, 0) - \widehat{\psi}(-1, 0) - \int_{-\frac{1}{2}}^{\frac{1}{2}} \frac{\partial \widehat{\psi}}{\partial z_1} \left( -\frac{1}{2}, z_2 \right) dz_2 \right\} = \frac{1}{h} I, \end{aligned}$$

易知  $I$  是  $\widehat{\psi} \in H^3(\widehat{E})$  的线性泛函,

$$|I| \leq C_0 \|\widehat{\psi}\|_{3,E},$$

且有  $I = 0$ , 对  $\widehat{\psi} = 1, z_1, z_2, z_1^2, z_2^2, z_1 z_2$ , 于是, 由 Bramble-Hilbert 引理<sup>[14]</sup> 和积分变换, 我们有

$$|I| \leq C_0 |\widehat{\psi}|_{3,\widehat{E}} \leq C_0 h^2 |\psi|_{3,E},$$

因此

$$|\chi_{1,i,j}| \leq Ch|\psi|_{3,E},$$

于是我们得到

$$\|\chi_1\|_1 = \left( \sum_{x \in \omega_1^+} h^2 \chi_{1,i,j}^2 \right)^{\frac{1}{2}} \leq Ch^2 \left( \sum_{x \in \omega_1^+} |\psi|_{3,E}^2 \right)^{\frac{1}{2}} \leq Ch^2 |\psi_3|.$$

对  $\chi_{2,i,j}$  有类似的结果, 引理得证.

利用引理 3.1, 引理 3.3 及插值理论, 我们得到下面的估计式

$$\|\theta^n\|_{1,h} \leq C\{\|\xi_e^n\| + \|\xi_p^n\| + h^2\}. \quad (3.2)$$

其次估计浓度方程. 由于相应于电子浓度方程和空穴浓度方程的数值格式具有完全类似的形式, 所以我们下面将仅对 (2.3) 进行详细的分析. 在下面的过程中, 为简单起见, 我们将省略前面所定义的符号  $B$  及  $K$  的下标中的  $e$ , 即  $B_{l,i,j} = B_{e,l,i,j}$ , 等等. 记

$$\begin{aligned} W_{l,i,j} &= -\left(\tilde{K}_{l,i,j} + \frac{1}{2}|B_{l,i,j}h|\right)\delta_{\bar{x}_l} e_{h,i,j}^n, \quad l = 1, 2, \\ w_{l,i,j} &= -\left(\tilde{k}_{l,i,j} + \frac{1}{2}|b_{l,i,j}h|\right)\delta_{\bar{x}_l} e_{i,j}^n, \quad l = 1, 2, \\ W_{1,i,j}^+ &= W_{1,i+1,j}, \quad W_{2,i,j}^+ = W_{2,i,j+1}, \\ w_{1,i,j}^+ &= w_{1,i+1,j}, \quad w_{2,i,j}^+ = w_{2,i,j+1}, \\ V_{1,i,j} &= \frac{1}{2}B_{1,i,j}(e_{h,i,j}^n + e_{h,i-1,j}^n), \quad V_{2,i,j} = \frac{1}{2}B_{2,i,j}(e_{h,i,j}^n + e_{h,i,j-1}^n), \\ V_{1,i,j}^+ &= V_{1,i+1,j}, \quad V_{2,i,j}^+ = V_{2,i,j+1}, \\ v_{1,i,j} &= \frac{1}{2}b_{1,i,j}(e_{i,j}^n + e_{i-1,j}^n), \quad v_{2,i,j} = \frac{1}{2}b_{2,i,j}(e_{i,j}^n + e_{i,j-1}^n), \\ v_{1,i,j}^+ &= v_{1,i+1,j}, \quad v_{2,i,j}^+ = v_{2,i,j+1}. \end{aligned}$$

由 (1.2) 和 (2.3) 可得电子浓度方程的误差方程为

$$\begin{aligned} & \frac{1}{h^2} \int_{E_{i,j}^*} \frac{\xi_e^n - \xi_e^{n-1}}{\Delta t} dx + \sum_{l=1}^2 \frac{1}{h} (W_{l,i,j}^+ - W_{l,i,j}) - \sum_{l=1}^2 \frac{1}{h} (w_{l,i,j}^+ - w_{l,i,j}) \\ & + \sum_{l=1}^2 \frac{1}{h} (V_{l,i,j}^+ - V_{l,i,j}) - \sum_{l=1}^2 \frac{1}{h} (v_{l,i,j}^+ - v_{l,i,j}) \\ & = \frac{1}{h^2} \int_{E_{i,j}^*} \left( \frac{\partial e^n}{\partial t} - \frac{e^n - e^{n-1}}{\Delta t} \right) dx + \frac{1}{h^2} \int_{E_{i,j}^*} \frac{\zeta_e^n - \zeta_e^{n-1}}{\Delta t} dx \\ & + \frac{1}{h^2} \int_{E_{i,j}^*} (R^n - R_h^{n-1}) dx + \sum_{l=1}^2 \frac{1}{h} (\eta_{l,i,j}^+ - \eta_{l,i,j}) + \sum_{l=1}^2 \frac{1}{h} (\rho_{l,i,j}^+ - \rho_{l,i,j}), \quad (3.3) \end{aligned}$$



其中

$$\begin{aligned}\eta_{l,i,j} &= \frac{1}{h} \left[ \int_{s_l} -D_e \frac{\partial e^n}{\partial x_l} d\gamma - h w_{l,i,j} \right], & \eta_{l,i,j}^+ &= \frac{1}{h} \left[ \int_{s_l^+} -D_e \frac{\partial e^n}{\partial x_l} d\gamma - h w_{l,i,j}^+ \right], \\ \rho_{l,i,j} &= \frac{1}{h} \left[ \int_{s_l} (-\mu_e u_l) e^n d\gamma - h v_{l,i,j} \right], & \rho_{l,i,j}^+ &= \frac{1}{h} \left[ \int_{s_l^+} (-\mu_e u_l) e^n d\gamma - h v_{l,i,j}^+ \right].\end{aligned}$$

(3.3) 两端同乘以  $\xi_{e,i,j}^n h^2$  并关于  $P \in \omega$  求和, 利用分部求和公式, 得到

$$\begin{aligned}& \sum_{P \in \omega} \int_{E_{i,j}^*} \frac{\xi_e^n - \xi_e^{n-1}}{\Delta t} dx \xi_{e,i,j}^n - \sum_{l=1}^2 \sum_{P \in \omega_l^+} (W_{l,i,j} - w_{l,i,j}) \delta_{\bar{x}_l} \xi_{e,i,j}^n h^2 \\ &= \sum_{P \in \omega} \int_{E_{i,j}^*} \left( \frac{\partial e^n}{\partial t} - \frac{e^n - e^{n-1}}{\Delta t} \right) dx \xi_{e,i,j}^n + \sum_{P \in \omega} \int_{E_{i,j}^*} \frac{\xi_e^n - \xi_e^{n-1}}{\Delta t} dx \xi_{e,i,j}^n \\ & \quad + \sum_{P \in \omega} \int_{E_{i,j}^*} (R^n - R_h^{n-1}) dx \xi_{e,i,j}^n - \sum_{l=1}^2 \sum_{P \in \omega_l^+} \eta_{l,i,j} \delta_{\bar{x}_l} \xi_{e,i,j}^n h^2 \\ & \quad - \sum_{l=1}^2 \sum_{P \in \omega_l^+} \rho_{l,i,j} \delta_{\bar{x}_l} \xi_{e,i,j}^n h^2 + \sum_{l=1}^2 \sum_{P \in \omega_l^+} (V_{l,i,j} - v_{l,i,j}) \delta_{\bar{x}_l} \xi_{e,i,j}^n h^2 \\ &= \sum_{m=1}^6 T_m,\end{aligned}\tag{3.4}$$

下面逐项估计 (3.4) 左端和右端各项.

对于左端第一项, 由引理 3.2, 有

$$\sum_{P \in \omega} \int_{E_{i,j}^*} \frac{\xi_e^n - \xi_e^{n-1}}{\Delta t} dx \xi_{e,i,j}^n = \left( \frac{\xi_e^n - \xi_e^{n-1}}{\Delta t}, \Pi_h^* \xi_e^n \right) \geq \frac{1}{2\Delta t} (\|\xi_e^n\|^2 - \|\xi_e^{n-1}\|^2).\tag{3.5}$$

为了估计 (3.4) 左端第二项, 我们提出如下归纳假设

$$\max_{P \in \omega_1^+} |u_{h1,i-\frac{1}{2},j}^{n-1}| + \max_{P \in \omega_2^+} |u_{h2,i,j-\frac{1}{2}}^{n-1}| \leq C_1, \quad 1 \leq n \leq L,\tag{3.6}$$

其中  $L \geq 1$  为正整数. 利用上述假设并注意到我们对格式的构造过程, 我们知道

$$\begin{aligned}\tilde{K}_{l,i,j} + \frac{1}{2} |B_{l,i,j} h| &= \frac{k_{l,i,j}}{1 + \frac{|B_{l,i,j} h|}{2k_{l,i,j}}} + \frac{1}{2} |B_{l,i,j} h| = k_{l,i,j} + C_1(x) h^2, \\ \tilde{k}_{l,i,j} + \frac{1}{2} |b_{l,i,j} h| &= \frac{k_{l,i,j}}{1 + \frac{|b_{l,i,j} h|}{2k_{l,i,j}}} + \frac{1}{2} |b_{l,i,j} h| = k_{l,i,j} + C_2(x) h^2,\end{aligned}$$

其中  $C_1(x) \sim (\mu_e u_{h,l}^{n-1})^2$ ,  $C_2(x) \sim (\mu_e u_l^n)^2$ . 于是, 有

$$-(W_{l,i,j} - w_{l,i,j}) = k_{l,i,j} \delta_{\bar{x}_l} \xi_{e,i,j}^n + C_1(x) \delta_{\bar{x}_l} e_{h,i,j}^n h^2 - C_2(x) \delta_{\bar{x}_l} e_{i,j}^n h^2,$$

和

$$\begin{aligned}
& - \sum_{l=1}^2 \sum_{P \in \omega_l^+} (W_{l,i,j} - w_{l,i,j}) \delta_{\bar{x}_l} \xi_{e,i,j}^n h^2 \\
& \geq C_0 \sum_{l=1}^2 \|\delta_{\bar{x}_l} \xi_e^n\|_l^2 - \sum_{l=1}^2 \sum_{P \in \omega_l^+} C_1(x) (\delta_{\bar{x}_l} \xi_{e,i,j}^n)^2 h^4 \\
& \quad - \sum_{l=1}^2 \sum_{P \in \omega_l^+} |(C_1(x) - C_2(x))| |\delta_{\bar{x}_l} e_{i,j}^n \delta_{\bar{x}_l} \xi_{e,i,j}^n| h^4 \\
& \geq \frac{3}{4} C_0 |\xi_e^n|_{1,h}^2 - C(C_1) h^4. \tag{3.7}
\end{aligned}$$

下面估计 (3.4) 右端各项. 对  $T_1$  和  $T_2$ , 容易得到如下的估计

$$|T_1| \leq \frac{1}{2} \int_{t^{n-1}}^{t^n} \left\| \frac{\partial^2 e}{\partial t^2} \right\|^2 dt \Delta t + \frac{1}{2} \|\xi_e^n\|_{0,h}^2, \tag{3.8}$$

$$|T_2| \leq \left\| \frac{\xi_e^n - \xi_e^{n-1}}{\Delta t} \right\| \|\xi_e^n\|_{0,h} \leq C\{h^4 + \|\xi_e^n\|_{0,h}^2\}. \tag{3.9}$$

对  $T_3$ , 由条件 (1.6) 及插值理论, 我们得到

$$|T_3| \leq C\{\|\xi_e^{n-1}\|^2 + \|\xi_p^{n-1}\|^2 + h^4 + (\Delta t)^2\}. \tag{3.10}$$

为了估计  $T_4$  和  $T_5$ , 我们首先给出如下的引理.

**引理 3.4** 设  $e, p \in H^3(\Omega)$ ,  $\mu_e, D_e \in W_\infty^1(\Omega)$ , 则有

$$\|\eta_l\|_l \leq Ch^2 \|e^n\|_3, \quad l = 1, 2, \tag{3.11}$$

$$\|\rho_l\|_l \leq Ch^2 \|e^n\|_2, \quad l = 1, 2. \tag{3.12}$$

证 我们仍使用引理 3.3 中的变换及相关的记号, 并省略上标  $n$ . 首先证明 (3.11) 式. 由定义

$$\eta_{1,i,j} = \frac{1}{h} \left\{ \left( \tilde{k}_{1,i,j} + \frac{1}{2} |b_{1,i,j} h| \right) (e_{i,j} - e_{i-1,j}) - \int_{s_1} D_e \frac{\partial e}{\partial x_1} d\gamma \right\},$$

由 Taylor 展开定理得

$$\begin{aligned}
\tilde{k}_{1,i,j} + \frac{1}{2} |b_{1,i,j} h| &= \frac{k_{1,i,j}}{1 + \frac{1}{2} |b_{1,i,j} h| / k_{1,i,j}} + \frac{1}{2} |b_{1,i,j} h| \\
&= k_{1,i,j} + C_1(x) h^2, \quad C_1(x) \sim b_1^2(x),
\end{aligned}$$

于是

$$\eta_{1,i,j} = C_1(x) h (e_{i,j} - e_{i-1,j}) + \frac{1}{h} \left\{ k_{1,i,j} (e_{i,j} - e_{i-1,j}) - \int_{s_1} D_e \frac{\partial e}{\partial x_1} d\gamma \right\}. \tag{3.13}$$

对 (3.13) 右端第一项, 由文 [12] 知

$$|e_{i,j} - e_{i-1,j}| \leq C(|e|_{1,E} + h^2|e|_{3,E}).$$

对 (3.13) 右端第二项, 记  $\{\}$  中的部分为  $I$ , 使用引理 3.3 中的变换, 并定义

$$a = \int_{-\frac{1}{2}}^{\frac{1}{2}} \widehat{D}_e \left( -\frac{1}{2}, z_2 \right) dz_2, \quad b = \int_{-\frac{1}{2}}^{\frac{1}{2}} \int_{-1}^0 \frac{\partial \widehat{e}}{\partial z_1}(z_1, z_2) dz_1 dz_2,$$

我们得到  $I = I_1 + I_2$ , 这里

$$I_1 = \frac{1}{h} a \left[ \widehat{e}(0,0) - \widehat{e}(-1,0) - \int_{-\frac{1}{2}}^{\frac{1}{2}} \frac{\partial \widehat{e}}{\partial z_1} \left( -\frac{1}{2}, z_2 \right) dz_2 \right],$$

$$I_2 = \frac{1}{h} \int_{-\frac{1}{2}}^{\frac{1}{2}} \left[ a - \widehat{D}_e \left( -\frac{1}{2}, z_2 \right) \right] \left[ \frac{\partial \widehat{e}}{\partial z_1} \left( -\frac{1}{2}, z_2 \right) - b \right] dz_2,$$

其中  $I_2$  中利用了

$$\int_{-\frac{1}{2}}^{\frac{1}{2}} \left[ a - \widehat{D}_e \left( -\frac{1}{2}, z_2 \right) \right] b dz_2 = 0.$$

对  $I_1$ , 利用引理 3.3 中的证明方法, 易得

$$|I_1| \leq C_0 |D_e|_{0,\infty} h |e|_{3,E}.$$

对  $I_2$ , 利用同样的方法, 有

$$|I_2| \leq C_0 h^{-1} \sup_{(z_1, z_2) \in \widehat{E}} \left| \frac{\partial \widehat{D}_e}{\partial z_2} \right| \left( \int \int_{\widehat{E}} \left( \left( \frac{\partial^2 \widehat{e}}{\partial z_1^2} \right)^2 + \left( \frac{\partial^2 \widehat{e}}{\partial z_1 \partial z_2} \right)^2 \right) dz_1 dz_2 \right)^{\frac{1}{2}}$$

$$\leq C_0 |D_e|_{1,\infty} h |e|_{2,E}.$$

因此, 综合以上估计, 我们得到

$$|\eta_{1,i,j}| \leq Ch \sum_{k=2}^3 |e|_{k,E},$$

于是

$$\|\eta_1\|_1 = \left( \sum_{x \in \omega_1^+} h^2 \eta_{i,j}^2 \right)^{\frac{1}{2}} \leq Ch^2 \left( \sum_{x \in \omega_1^+} \|e\|_{3,E}^2 \right)^{\frac{1}{2}} \leq Ch^2 \|e_3\|.$$

对  $\eta_2$  有类似的估计式. 至此, (3.11) 得证.

下面我们证明 (3.12). 由定义

$$\rho_{1,i,j} = \frac{1}{h} \int_{x_{2,j-\frac{1}{2}}}^{x_{2,j+\frac{1}{2}}} b_1(x_{1,i-\frac{1}{2}}, x_2) e(x_{1,i-\frac{1}{2}}, x_2) dx_2 - b_{1,i-\frac{1}{2},j} \frac{e_{i,j} + e_{i-1,j}}{2}$$

$$= \widehat{b}_1 \left( -\frac{1}{2}, 0 \right) \frac{\widehat{e}(0,0) + \widehat{e}(-1,0)}{2} - \int_{-\frac{1}{2}}^{\frac{1}{2}} \widehat{b}_1 \left( -\frac{1}{2}, z_2 \right) \widehat{e} \left( -\frac{1}{2}, z_2 \right) dz_2,$$

由文 [12] 中的引理 3.4, 我们得到

$$|\rho_{1,i,j}| \leq Ch\|e\|_{2,E},$$

于是有

$$\|\rho_1\| \leq Ch^2\|e\|_2.$$

对  $\rho_2$  有类似的结果成立, 即 (3.12) 式成立. 引理证毕.

利用引理 3.4, 我们可以对  $T_4$  和  $T_5$  做如下的估计

$$|T_4 + T_5| \leq C \sum_{l=1}^2 (\|\eta_l\|_l^2 + \|\rho_l\|_l^2) + \varepsilon |\xi_e^n|_{1,h}^2 \leq Ch^4 + \varepsilon |\xi_e^n|_{1,h}^2. \quad (3.14)$$

下面我们来估计 (3.4) 式右端最后一项. 利用归纳假设 (3.6), 有

$$\begin{aligned} |V_{1,i,j} - v_{1,i,j}| &= \frac{1}{2} |\mu_{e,i-\frac{1}{2},j}| \cdot |u_{h,1,i-\frac{1}{2},j}^{n-1} (e_{h,i,j}^n + e_{h,i-1,j}^n) - u_{1,i-\frac{1}{2},j}^n (e_{i,j}^n + e_{i-1,j}^n)| \\ &\leq C(C_1) \{ |\xi_{e,i,j}^n| + |\xi_{e,i-1,j}^n| + h^2 + \Delta t + |\delta_{\bar{x}_1} \theta_{i,j}^n| \}, \end{aligned}$$

于是, 对  $T_6$ , 我们可以得到

$$|T_6| \leq C(C_1) \{ \|\xi_e^n\|_{0,h}^2 + \|\xi_e^{n-1}\|_0^2 + \|\xi_p^n\|_0^2 + h^4 + (\Delta t)^2 \} + \varepsilon |\xi_e^n|_{1,h}^2. \quad (3.15)$$

现在, 我们得到了 (3.4) 式左端和右端所有各项的估计, 将这些估计结果代入 (3.4) 式, 并取  $\varepsilon$  足够小, 可得

$$\begin{aligned} &\frac{1}{2\Delta t} \{ \|\xi_e^n\|^2 - \|\xi_e^{n-1}\|^2 \} + \frac{C_0}{2} |\xi_e^n|_{1,h}^2 \\ &\leq C(C_1) \left\{ \|\xi_e^n\|_{0,h}^2 + \|\xi_e^{n-1}\|_{0,h}^2 + \|\xi_p^{n-1}\|_{0,h}^2 + \int_{t^{n-1}}^{t^n} \left\| \frac{\partial^2 e}{\partial t^2} \right\|^2 dt + h^4 + (\Delta t)^2 \right\}. \quad (3.16) \end{aligned}$$

(3.16) 两端同乘以  $2\Delta t$  并关于  $n$  从 1 到  $L$  求和, 并利用引理 3.2, 得

$$\|\xi_e^L\|_{0,h}^2 + \Delta t \sum_{n=1}^L |\xi_e^n|_{1,h}^2 \leq C(C_1) \left\{ \sum_{n=0}^L \|\xi_e^n\|_{0,h}^2 \Delta t + \sum_{n=0}^L \|\xi_p^n\|_{0,h}^2 \Delta t + h^4 + (\Delta t)^2 \right\}. \quad (3.17)$$

同理, 对空穴浓度方程有类似的估计结果

$$\|\xi_p^L\|_{0,h}^2 + \Delta t \sum_{n=1}^L |\xi_p^n|_{1,h}^2 \leq C(C_1) \left\{ \sum_{n=0}^L \|\xi_e^n\|_{0,h}^2 \Delta t + \sum_{n=0}^L \|\xi_p^n\|_{0,h}^2 \Delta t + h^4 + (\Delta t)^2 \right\}. \quad (3.18)$$

将 (3.17) 和 (3.18) 两式相加, 并利用离散的 Gronwall 引理, 则可得到

$$\|\xi_e^L\|_{0,h}^2 + \|\xi_p^L\|_{0,h}^2 + \Delta t \sum_{n=1}^L (|\xi_e^n|_{1,h}^2 + |\xi_p^n|_{1,h}^2) \leq C(C_1) \{ h^4 + (\Delta t)^2 \}. \quad (3.19)$$

再由 (3.2), 有

$$\|\theta^L\|_{1,h} \leq C(C_1) \{ h^2 + \Delta t \}. \quad (3.20)$$

下面我们验证归纳假设 (3.6). 我们设剖分参数满足如下关系

$$\Delta t = o(h). \quad (3.21)$$

由于我们最后得到的误差估计结果是  $O(h^2 + \Delta t)$ , 因此假设 (3.21) 是合理的. 由 (2.6), 有  $\xi_e^0 = \xi_p^0 = 0$ , 于是由 (3.2) 和逆估计以及 (3.21) 知 (3.6) 对  $L = 1$  成立; 假设 (3.6) 对  $1 \leq L < N$  成立, 则由 (3.21) 和逆估计以及 (3.21) 知 (3.6) 对  $L + 1$  成立, 由归纳假设原理, (3.6) 对所有的  $0 \leq n \leq N$  均成立, 即  $C_1$  为和剖分参数无关的正常数. 利用引理 3.1 并联合插值误差估计, 我们得到下面的定理

**定理** 设  $\{e, p, \psi\}$  是问题 (1.1)–(1.5) 的精确解,  $e, p \in H^3(\Omega)$ ,  $\psi \in H^3(\Omega)$ ,  $\{e_h, p_h, \psi_h\}$  是由数值计算格式 (2.1) 以及 (2.3)–(2.5) 确定的数值解, 则有误差估计

$$\max_{0 \leq n \leq \frac{T}{\Delta t}} \{\|e - e_h\|(t^n) + \|p - p_h\|(t^n) + h\|\psi - \psi_h\|_1(t^n)\} \leq C\{h^2 + \Delta t\}. \quad (3.22)$$

## 4 数值例子

考虑如下问题

$$\frac{\partial u}{\partial t} + k \frac{\partial u}{\partial x} + k \frac{\partial u}{\partial y} = \varepsilon \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \varepsilon \frac{\partial^2 u}{\partial y^2}, \quad (x, y) \in (0, 2) \times (0, 2), \quad t > 0, \quad (4.1)$$

其精确解为

$$u(x, y, t) = \frac{1}{4t + 1} \exp\left(-\frac{(x - kt - 0.5)^2}{\varepsilon(4t + 1)} - \frac{(y - kt - 0.5)^2}{\varepsilon(4t + 1)}\right).$$

我们用本文提出的修正迎风有限体积元方法求解问题 (4.1), 结果见表 1 和表 2, 其中  $E = u - u_h$  为误差函数,  $\|E\|_{l^2}$  表示误差的离散  $L^2$  范数, rate 表示误差下降率,  $\beta$  表示误差关于  $h$  的阶数. 表 1 给出的是扩散项系数  $\varepsilon = 0.2$  和对流项系数  $k = 0.2$  时的结果; 表 2 给出的是扩散项系数  $\varepsilon = 0.2$  和对流项系数  $k = 10$  时的结果. 结果表明, 两种情况下, 方法都是稳定和收敛的, 第一种情况下, 收敛阶大于 2, 第二种情况下, 即当问题是对流占优的时候, 收敛阶小于 2, 而且需要更小的步长才能达到和第一种情况类似的精度, 这也说明对流占优问题对数值方法的要求更高.

表 1  $\varepsilon = 0.2, k = 0.2, \frac{\Delta t}{h^2} = 1, t = 0.125$

$M$	8	16	32	64
$\ E\ _{l^2}$	$0.67250 \times 10^{-2}$	$0.17479 \times 10^{-2}$	$0.44062 \times 10^{-3}$	$0.88263 \times 10^{-4}$
rate		1.94	1.99	2.31
$\beta$	3.61	3.05	2.78	2.69

表 2  $\varepsilon = 0.2, k = 10, \frac{\Delta t}{h^2} = 1, t = 0.78125 \times 10^{-2}$

$M$	32	64	128	256
$\ E\ _{l^2}$	$0.21541 \times 10^{-1}$	$0.68665 \times 10^{-2}$	$0.20051 \times 10^{-2}$	$0.52896 \times 10^{-3}$
rate		1.65	1.78	1.92
$\beta$	1.38	1.44	1.49	1.55

## 参 考 文 献

- [1] 袁益让. 半导体器件数值模拟的特征有限元法和分析. 数学物理学报, 1993, **13**(3): 241–251.
- [2] Gummel H K. A self-consistent iterative scheme for one-dimensional steady-state transistor calculation. *IEEE Trans. Electron Device*, 1964, **ED-11**: 455–465.
- [3] 何野, 魏同立. 半导体器件的计算机模拟方法. 北京: 科学出版社, 1989.
- [4] Douglas J Jr and Yuan Yirang. Finite difference methods for the transient behavior of a semiconductor device. *Mat. Apli. Comp.*, 1987, **6**(1): 25–38.
- [5] Yuan Y R, Ding L Y and Yang H. A new method and theoretical analysis of numerical analog of semiconductor. *Chinese Science Bulletin*, 1982, **27**(7): 790–795.
- [6] Spalding D B. A novel finite difference formulation for differential equations involving both first and second derivatives. *Int. J. Num. Meth. Engan.*, 1973, **4**: 551–559.
- [7] Douglas J Jr and Russell T F. Numerical methods for convection-dominated diffusion problems based on combining the method of characteristics with finite element or finite difference procedures. *SIAM J. Numer. Anal.*, 1982, **19**(5): 871–885.
- [8] 李荣华, 祝丕琦. 二阶椭圆偏微分方程的广义差分法(三角网情形). 高等学校计算数学学报, 1982, **2**: 140–156.
- [9] 袁益让. 关于抛物型方程离散算子数值解法的稳定性和收敛性. 高等学校计算数学学报, 1982, **3**: 209–221.
- [10] 梁栋. 对流扩散方程的迎风广义差分格式. 应用数学学报, 1990, **13**(4): 456–466.
- [11] 梁栋. 对流扩散方程的一类迎风格式. 计算数学, 1991, **2**: 133–143.
- [12] Lazarov R D, Ilyad Mishev and Vassilevski P S. Finite volume methods for convection-diffusion problems. *SIAM J. Numer. Anal.*, 1996, **33**(1): 31–55.
- [13] 李荣华, 陈仲英. 微分方程广义差分法. 长春: 吉林大学出版社, 1994.
- [14] Bramble J H and Hilbert S R. Estimation of linear functionals on Sobolev spaces with application to Fourier transformations and spline interpolation. *SIAM J. Numer. Anal.*, 1970, **7**: 112–124.

## MODIFIED UPWIND FINITE VOLUME SCHEME FOR SEMICONDUCTOR DEVICE

YANG Qing

(School of Mathematics Science, Shandong Normal University, Jinan 250014)

**Abstract** The mathematical model of the semiconductor device is described by the initial boundary value problem for a system of three quasilinear partial differential equations, where the electrostatic potential equation is elliptic, the electronic conservation equation and the hole concentration equation are convection-dominated diffusive. The electrostatic potential equation is approximated with the aid of finite volume method, while the electron and hole concentration equations are approximated with modified upwind finite volume schemes. Error order  $O(h + \Delta t)$  in  $H^1$ -norm and error order  $O(h^2 + \Delta t)$  in  $L^2$ -norm are obtained, respectively for potential and concentration.

**Key words** Semiconductor device, initial boundary value problem, upwind scheme, finite volume method, error estimates.