

**КАЛУЖСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ
ИМ. К. Э. ЦИОЛКОВСКОГО**

На правах рукописи

СЕРЕГИНА ЕЛЕНА ВЛАДИМИРОВНА

**ИСПОЛЬЗОВАНИЕ ПРОЕКЦИОННОГО МЕТОДА
ДЛЯ МАТЕМАТИЧЕСКОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ СТОХАСТИЧЕСКОГО
РАСПРЕДЕЛЕНИЯ НЕОСНОВНЫХ НОСИТЕЛЕЙ ЗАРЯДА
В ПОЛУПРОВОДНИКОВЫХ МАТЕРИАЛАХ**

**05.13.18 – Математическое моделирование,
численные методы и комплексы программ**

**Диссертация на соискание ученой степени
кандидата физико-математических наук**

**Научный руководитель
доктор физико-математических
наук,
профессор
Степович Михаил Адольфович**

Калуга – 2014

ОГЛАВЛЕНИЕ

ВВЕДЕНИЕ	5	
ГЛАВА 1. СОВРЕМЕННОЕ СОСТОЯНИЕ ПРОБЛЕМЫ ИССЛЕДОВАНИЯ МОДЕЛЕЙ СТОХАСТИЧЕСКИХ ЯВЛЕНИЙ И СИСТЕМ. ЛИТЕРАТУРНЫЙ ОБЗОР		11
1.1. Вводные замечания к задаче нахождения моментных функций решений диф- ференциальных уравнений со случайными коэффициентами	11	
1.2. Матричные операторы в ортогональных базисах	14	
1.3. Ряды Фурье-Лагерра и матричный оператор дифференцирования в базисе многочленов Лагерра	26	
1.4. Математические модели диффузии неосновных носителей заряда в полупро- водниковых материалах	33	
1.5. Выводы и постановка задачи исследования	38	
ГЛАВА 2. ПРОЕКЦИОННАЯ АППРОКСИМАЦИЯ МОДЕЛИ КОЛЛЕКТИВНОГО ДВИЖЕНИЯ НЕОСНОВНЫХ НОСИТЕЛЕЙ ЗАРЯДА В ПОЛУПРОВОДНИКОВЫХ МАТЕРИАЛАХ, ОСНОВАННАЯ НА ПРИМЕНЕНИИ МЕТОДА НАИМЕНЬШИХ КВАДРАТОВ		41
2.1. Проекционная аппроксимация модели коллективного движения носителей за- ряда, основанная на применении модифицированного метода наименьших квадратов	41	
2.2. Условие сходимости.....	45	
2.3. Влияние погрешностей и условие вычислительной устойчивости.....	60	
2.4. Проекционная аппроксимация модели коллективного движения носителей заряда, основанная на применении классического метода наименьших квад- ратов	64	
2.5. Выводы	67	

ГЛАВА 3. РЕШЕНИЕ ЗАДАЧИ СТАТИСТИЧЕСКОГО АНАЛИЗА ДИФФУЗИИ СО СЛУЧАЙНЫМИ ЭЛЕКТРОФИЗИЧЕСКИМИ ПАРАМЕТРАМИ	70
3.1. Использование модели коллективного движения неосновных носителей заряда для нахождения проекционной характеристики математического ожидания их распределения по глубине	70
3.2. Построение сходящихся матричных рядов, аппроксимирующих проекционные характеристики математического ожидания и автокорреляционной функции распределения неосновных носителей заряда по глубине	75
3.3. Оптимизация скорости сходимости итерационных процессов, аппроксимирующих проекционные характеристики математического ожидания и автокорреляционной функции распределения неосновных носителей заряда по глубине.....	91
3.4. Использование модели независимых источников для нахождения математического ожидания и автокорреляционной функции распределения неосновных носителей заряда по глубине	98
3.5. Выводы	101
ГЛАВА 4. ИССЛЕДОВАНИЕ ВЛИЯНИЯ СЛУЧАЙНЫХ СОСТАВЛЯЮЩИХ В ЭЛЕКТРОФИЗИЧЕСКИХ ПАРАМЕТРАХ НА РАСПРЕДЕЛЕНИЕ НЕОСНОВНЫХ НОСИТЕЛЕЙ ЗАРЯДА. РЕЗУЛЬТАТЫ РАСЧЁТОВ ДЛЯ ПАРАМЕТРОВ, ХАРАКТЕРНЫХ ДЛЯ КЛАССИЧЕСКИХ ПОЛУПРОВОДНИКОВЫХ МАТЕРИАЛОВ.....	103
4.1. Исследование влияния случайных составляющих в электрофизических параметрах на распределение носителей заряда по глубине полупроводника при использовании модели коллективного движения	103
4.2. Сравнительный анализ использования модели коллективного движения носителей заряда и модели независимых источников.....	113

4.3. Сравнительный анализ результатов моделирования распределения носителей заряда, генерированных световым и электронным пучком с экспериментальной кривой электрического тока по глубине полупроводника	117
4.4. Выводы.....	123
ЗАКЛЮЧЕНИЕ.....	124
СПИСОК СОКРАЩЕНИЙ	126
СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ.....	127
ПРИЛОЖЕНИЕ. ТЕКСТЫ ПРОГРАММЫ, РЕАЛИЗУЮЩЕЙ	
ПРОЕКЦИОННЫЙ МЕТОД СТАТИСТИЧЕСКОГО	
АНАЛИЗА ДИФФУЗИИ НЕОСНОВНЫХ НОСИТЕЛЕЙ	
ЗАРЯДА В КЛАССИЧЕСКИХ ПОЛУПРОВОДНИКОВЫХ	
МАТЕРИАЛАХ.....	
П 1. Библиотека общих функций проекционного метода, основанного на теории матричных операторов для базиса из модифицированных функций Лагерра ...	141
П. 2. Программа нахождения математического ожидания и автокорреляционной функции распределения носителей заряда по глубине при случайном изменении времени жизни.....	144

ВВЕДЕНИЕ

Актуальность работы

Электронные и световые пучки широко используются для решения различных физических и технологических задач. При этом в исследованиях поверхностных свойств полупроводниковых материалов и структур для получения количественной информации об объектах исследования часто необходимо знать распределение неравновесных неосновных носителей заряда (ННЗ), генерированных внешним энергетическим воздействием, после их диффузии в мишени. На практике локальные значения электрофизических параметров полупроводниковых материалов в силу ряда причин могут иметь случайный разброс относительно своих усредненных по объему значений, и не исключено, что наличие разброса в значениях локальных параметров может оказать существенное влияние на процесс диффузии, а значит, и на распределение неравновесных ННЗ в объеме полупроводника.

Количественное описание влияния разброса в значениях локальных параметров полупроводников на распределение ННЗ в результате их диффузии может быть проведено методами математического моделирования. Однако задача анализа моделей стохастических процессов, подобных процессу диффузии ННЗ, с учетом случайного изменения электрофизических параметров исследуемого полупроводникового материала, является достаточно сложной проблемой, для решения которой существует сравнительно мало методов. Большинство таких методов являются либо слишком сложными для использования на практике, либо требуют принятия слишком грубых упрощающих допущений, например, о малости случайных возмущений параметров; при этом далеко не всегда удается найти точное

аналитическое решение. В силу вышеизложенного разработка новых приближенно-аналитических методов моделирования стохастических процессов диффузии, ориентированных на использование ЭВМ, и создание эффективных вычислительных алгоритмов, является актуальной.

В данной диссертационной работе для исследования результатов стохастических процессов диффузии ННЗ в полупроводниках предлагается использовать проекционный метод, основанный на теории матричных операторов. Суть данного подхода состоит в развитии и обосновании этого метода с целью использования его для определения статистических характеристик распределения неравновесных ННЗ. Возможности метода иллюстрируются результатами вычислительного эксперимента для параметров, характерных для классических полупроводниковых материалов микро- и нанoeлектроники.

Цель работы и задачи исследования

Работа посвящена исследованию результатов развития стохастических процессов диффузии ННЗ в полупроводниковых материалах методами математического моделирования.

Целью работы является решение задачи статистического анализа диффузии ННЗ с учетом случайной составляющей в электрофизических параметрах (времени жизни, коэффициенте диффузии и скорости поверхностной рекомбинации ННЗ) проекционным методом и проведение вычислительного эксперимента по выявлению закономерностей в результатах развития стохастического процесса диффузии ННЗ по глубине полупроводника.

Для достижения поставленной цели необходимо решить следующие **задачи исследования**:

1) разработать схему проекционной аппроксимации стохастической модели диффузии ННЗ; дать порядковую оценку погрешности и получить условие вычислительной устойчивости предложенного проекционного метода исходной задачи;

2) построить сходящиеся матричные ряды и рассмотреть оптимизацию скорости сходимости итерационных процессов, аппроксимирующих проекционные

характеристики математического ожидания и автокорреляционной функции распределения ННЗ по глубине;

3) в рамках вычислительного эксперимента исследовать влияние случайной составляющей в электрофизических параметрах (времени жизни, коэффициенте диффузии и скорости поверхностной рекомбинации ННЗ) на распределение неравновесных ННЗ в полупроводниковых материалах.

Научная новизна работы

В процессе решения поставленной задачи были получены следующие новые результаты:

1) построена стохастическая математическая модель, описывающая распределение ННЗ по глубине в результате их диффузии в полупроводниковом материале;

2) предложена схема проекционной аппроксимации, основанная на применении метода наименьших квадратов, для дифференциального уравнения диффузии со случайной составляющей в электрофизических параметрах полупроводника (времени жизни, коэффициенте диффузии и скорости поверхностной рекомбинации ННЗ); дана порядковая оценка погрешности и получено условие вычислительной устойчивости для этой проекционной схемы;

3) разработан универсальный подход к решению задачи статистического анализа для математической модели, описываемой уравнением диффузии со случайными электрофизическими параметрами проекционным методом; построены сходящиеся матричные ряды и рассмотрена задача оптимизация скорости сходимости итерационных процессов, аппроксимирующих искомые проекционные характеристики, которая укладывается в общую схему итерационных процессов с нарушением стационарности; даны оценки быстроты сходимости этих итерационных процессов в терминах нормы;

4) разработано программное обеспечение для эффективного компьютерного моделирования стохастического явления диффузии с учетом возможности параллельных вычислений.

Практическая значимость работы

Результаты работы могут быть использованы при проектировании изделий электронной техники, для которых разброс в локальных параметрах полупроводника имеет существенное значение и может повлиять на их характеристики.

Работа является частью исследований, проведенных в рамках грантов Российского фонда фундаментальных исследований и правительства Калужской области (№ 07-02-96406, № 09-02-99027 и № 12-02-97519), а также работ, проводимых в рамках государственного задания Минобрнауки РФ (проект № 1.6107.2011).

На защиту выносятся:

1) метод построения стохастической математической модели диффузии неравновесных ННЗ в полупроводниковых материалах;

2) схема проекционной аппроксимации, основанная на применении метода наименьших квадратов, для математической модели диффузии ННЗ по глубине в полупроводниках;

3) метод решения задачи анализа диффузии ННЗ со случайными электрофизическими параметрами, основанный на использовании проекционной модели;

4) результаты статистического анализа диффузии ННЗ в полупроводнике, полученные путем проведения вычислительного эксперимента.

Апробация работы и публикации

Апробация результатов работы проведена на ряде научных конференций, в т.ч.: на VI национальной конференции по применению рентгеновского, синхротронного излучений, нейтронов и электронов для исследования материалов (г. Москва, 2007 г.); VI международной научно-технической конференции «Математическое моделирование, обратные задачи, информационно-вычислительные технологии» (г. Пенза, 2007 г.); IV и V международных конференциях «Математические идеи П.Л. Чебышева и их приложение к современным проблемам естествознания» (г. Обнинск, 2008 и 2011 гг.); XXII, XXIII, XXIV и XXV Российских конференциях по электронной микроскопии (г. Черноголовка, 2008, 2010, 2012 и 2014 гг.); VII национальной конференции по применению рентгеновского, синхротронного излучений, нейтронов и электронов для исследования наносистем и

материалов (г. Москва, 2009 г.); XXI, XXII и XXIII международных научно-технических конференциях по фотоэлектронике и приборам ночного видения (г. Москва, 2010, 2012 и 2014 гг.); XVII и XVIII Российских симпозиумах по растровой электронной микроскопии и аналитическим методам исследования твердых тел (г. Черноголовка, 2011 и 2013 гг.); X и XI Всероссийских семинарах «Проблемы теоретической и прикладной электронной и ионной оптики» (г. Москва, 2011 и 2013 гг.), XIX международной научно-технической конференции «Прикладные задачи математики и механики» (г. Севастополь, 2011 г.), международной конференции «Моделирование, управление и устойчивость» (г. Севастополь, 2012 г.), XXI международной научно-технической конференции «Прикладные задачи математики» (г. Севастополь, 2013 г.), а также на научных семинарах физико-технологического института Калужского государственного университета им. К.Э. Циолковского (2010-2012 гг.) и Института математического моделирования РАН (2011 и 2013 гг.).

Основные результаты диссертационной работы опубликованы в 24 статьях [1-24], из них 8 статей ([1-8]) опубликованы в журналах и изданиях из перечня ВАК Минобрнауки РФ.

Структура и объем работы

Диссертация состоит из введения, четырех глав, заключения, списка литературы и приложения. Работа изложена на 170 страницах, в том числе основного текста 126 страниц, библиографический список из 138 наименований на 13 страницах и приложения на 31 странице.

В ПЕРВОЙ ГЛАВЕ приводится обзор методов исследования случайных явлений, определяются их достоинства и недостатки. Особое внимание уделяется построению стохастической математической модели распределения ННЗ по глубине в полупроводниках. Формулируется постановка задачи диссертационной работы.

ВТОРАЯ ГЛАВА посвящена построению проекционной аппроксимации модели коллективного движения ННЗ, генерированных внешним энергетическим воздействием в полупроводнике. Здесь же дана порядковая оценка погрешности и получено условие вычислительной устойчивости для этой проекционной схемы.

ТРЕТЬЯ ГЛАВА посвящена разработке универсального подхода к решению задачи анализа уравнения диффузии ННЗ со случайными электрофизическими параметрами (временем жизни, коэффициентом диффузии и скоростью поверхностной рекомбинации ННЗ по глубине) с использованием проекционного метода математического моделирования. Построены сходящиеся матричные ряды и рассмотрена оптимизация скорости сходимости итерационных процессов, аппроксимирующих проекционные характеристики математического ожидания и автокорреляционной функции распределения ННЗ, которая укладывается в общую схему итерационных процессов с нарушением стационарности; даны оценки быстроты сходимости этих итерационных процессов в терминах нормы.

ЧЕТВЕРТАЯ ГЛАВА посвящена вычислительному эксперименту по исследованию влияния случайных составляющих в электрофизических параметрах (времени жизни, коэффициенте диффузии и скорости поверхностной рекомбинации ННЗ) на распределение неравновесных ННЗ в классических полупроводниковых материалах из кремния, арсенида галлия и теллурида кадмия. Здесь же представлено сравнение результатов математического моделирования распределения ННЗ по глубине полупроводника с некоторыми экспериментальными результатами. Проведен сравнительный анализ использования двух моделей распределения ННЗ (модели коллективного движения и модели независимых источников).

ГЛАВА 1. СОВРЕМЕННОЕ СОСТОЯНИЕ ПРОБЛЕМЫ ИССЛЕДОВАНИЯ МОДЕЛЕЙ СТОХАСТИЧЕСКИХ ЯВЛЕНИЙ И СИСТЕМ. ЛИТЕРАТУРНЫЙ ОБЗОР

1.1. Вводные замечания к задаче нахождения моментных функций решений дифференциальных уравнений со случайными коэффициентами

Задача анализа стохастических явлений и систем является достаточно сложной фундаментальной проблемой. Дело в том, что даже простая математическая модель стохастической системы, описываемой линейным дифференциальным уравнением со случайными коэффициентами, может вести себя подобно нелинейной системе, поскольку является нелинейной по отношению к параметрическим (мультипликативным) шумам [25]. Нелинейность такого рода во многом определяет специфические особенности поведения стохастических систем, такие, например, как обогащение спектров сигналов, изменение среднего значения выходного сигнала, которые присущи нелинейным системам. И наоборот, анализ стохастических моделей систем в детерминированной постановке, то есть анализ детерминированных систем со случайным входным сигналом или начальными условиями как частного случая стохастических систем обычно не вызывает затруднений. Авторы некоторых работ также относят такие уравнения к стохастическим дифференциальным уравнениям. Наибольший интерес представляют собой стохастические дифференциальные уравнения со случайным дифференциальным оператором без учета традиционных упрощающих допущений типа физически не

реализуемого предположения о белом шуме или замены случайных величин их средними значениями.

Для нахождения первых двух моментов решений дифференциальных уравнений, коэффициенты которых являются случайными, применяется несколько подходов. К числу таких методов, получивших широкое распространение в квантовой теории поля, квантовомеханической проблеме многих тел, теории турбулентности, теории нелинейных стохастических уравнений, а также, начиная с 60-70-х годов, практике расчета и проектирования систем управления, относится метод иерархий (непосредственного усреднения) [25, 26]. Несмотря на широкое распространение, обоснованность этого метода весьма ограничена, и о точной величине погрешности решения можно лишь догадываться. Однако в ряде работ [27-30] оценивалась величина получающейся ошибки. В общем случае этот метод некорректен. Исключение составляет случай, когда случайные флуктуации относительно малы, то есть случай теории возмущений: для уравнений с малыми случайными возмущениями строятся асимптотические приближения [31, 32, 27, 33-36]. Достаточно развита теория стохастических дифференциальных уравнений. Известен подход, основанный на построении цепочек дифференциальных уравнений для моментных функций. Обычно такие цепочки бывают связанными, бесконечными и незамкнутыми, и их иногда удается замкнуть или разорвать [37-39]. Для некоторых задач решение можно записать в явном виде через коэффициенты уравнения, а затем найти моментные функции [40, 41]. Следует упомянуть также метод разложения Дж. Адомиана [40, 42-44], основанный на понятии стохастической функции Грина. В настоящее время существует несколько его вариантов. Этот метод имеет преимущества перед другими методами, область применения которых ограничена, очевидно, малыми флуктуациями. Он также не требует предположений о медленных вариациях или о белом шуме. В случае линейных дифференциальных уравнений задача может быть сведена к дифференциальным уравнениям с вариационными производными [45-47]. Этим способом получены формулы для моментных функций решений линейных дифференциальных урав-

нений в частных производных первого порядка [48] и для дифференциального уравнения теплопроводности (см. [46, 49, 50]).

Другим общим подходом является выполнение приближенного статистического анализа методом статистических испытаний [51-54]. Этот подход применим для любых моделей стохастических явлений и систем, в том числе содержащих нелинейности, но требует значительного объема вычислений, что приводит к большим затратам времени, особенно при анализе математических моделей сложных явлений и систем. Действительно, для каждого опыта (испытания) необходимо сформировать реализации входных случайных сигналов и всех случайных параметров системы в соответствии с определенными для реальных сигналов законами распределения вероятности. Затем в каждом опыте для этих реализаций вычисляются соответствующие реализации выходных сигналов, что может быть сделано, например, численным интегрированием дифференциальных уравнений, описывающих математическую модель системы. И, наконец, выполняется статистическая обработка реализаций выходных сигналов, полученных во множестве опытов. Причем число этих опытов должно быть достаточно большим, поскольку точность результатов, получаемых методом статистических испытаний, относительно медленно возрастает с увеличением числа опытов. Учитывая вероятностную сходимость этого метода, для получения приемлемой точности требуется выполнить от нескольких сотен до нескольких тысяч опытов. Таким образом, метод статистических испытаний больше подходит для контроля результатов, полученных другими методами, предполагающими принятие некоторых упрощающих допущений, например, о линейности или невысоком порядке уравнений модели. Кроме того, такой подход является чисто вычислительным и не дает возможности определить явные зависимости между вероятностными характеристиками выходных сигналов системы и вероятностными характеристиками ее случайных параметров.

В целом большинство существующих методов являются либо слишком сложными для использования на практике, либо требуют принятия слишком грубых упрощающих допущений, например, о малости случайных возмущений па-

раметров. К тому же далеко не всегда удается найти точное аналитическое решение.

Ярко выраженная компьютерная ориентация проекционных методов стала предпосылкой разработки на их основе комбинированных методов анализа моделей стохастических явлений и систем [55-59], [60 гл.6]. Один из первых примеров применения такого подхода к описанию и исследованию моделей систем управления со случайными параметрами можно найти в монографии В.В.Солодовникова и В.В.Семёнова [61]. В его основе лежит использование проекционных аппроксимаций математических моделей явлений и систем со случайными параметрами. Показано использование этих проекционных аппроксимаций для решения задачи анализа стохастического явления диффузии ННЗ в полупроводниковых материалах [3-15, 19-24].

1.2. Матричные операторы в ортогональных базисах

Предпосылкой появления проекционных методов послужил известный из функционального анализа факт возможности матричного представления ограниченных линейных операторов в ортогональных базисах. Например, в монографии [62] этот факт отражается так: «Всякий ограниченный линейный оператор, определенный во всем пространстве, допускает матричное представление в любом ортонормированном базисе, и в этом состоит аналогия сепарабельного пространства Гильберта с конечномерным пространством по отношению к ограниченным линейным операторам: ограниченные операторы допускают матричное представление, которое вполне аналогично известному из линейной алгебры матричному представлению операторов в конечномерных пространствах».

Для численного решения экстремальных задач проекционный метод начал развиваться с работы В. Ритца (1908 г.), а для решения интегральных и дифференциальных уравнений первые проекционные схемы появились в работах И.Г. Бубнова, Б.Г. Галеркина (1915 г.) и Г.И. Петрова. Первые теоремы, обосновывающие проекционные методы, были опубликованы в статьях Н.Н. Боголюбова и Н.М. Крылова, и М.В. Келдыша. Дальнейшее развитие проекционные методы получили в работах Л.В. Канторовича, М.А. Красносельского, Г.И. Марчука, В.И. Агошкова, Г.М. Вайникко, М.К. Гавурина, И.К. Даугавета, П.П. Забрейко, С.Г. Михлина, Н.И. Польского, В.А. Треногина и других.

К настоящему времени разработаны эффективные алгоритмы приближенного решения некоторых задач детерминированного и статистического анализа, идентификации, построения приближенных программных управлений, синтеза корректирующих устройств для линейных систем с сосредоточенными параметрами, основанные на применении матричных операторов, которые были впервые введены в работе [63] для базиса из функций Уолша, а затем распространены на другие ортогональные базисы. Однако авторы большинства работ делают акцент на простоте вычислительной схемы, в то время как вопросам обоснования применяемых методов, уделяется недостаточное внимание.

Основоположниками направления в теории автоматического управления, основанного на матричном представлении операторов в ортогональных базисах, являются В.В. Солодовников и В.В. Семёнов [61, 64, 65].

С 70-х годов это направление интенсивно разрабатывается за рубежом, и к настоящему времени наработано большое количество разнообразных методов и приемов (см., например, монографии [60, 66-68]). Однако, в выборе базиса, метода аппроксимации оператора и т.п. в подавляющем большинстве работ по данной тематике никаких обоснований нет, и он зависит лишь от вкуса и пристрастий исследователя. Это привело к созданию большого числа нерациональных алгоритмов, требующих завышенных расходов энергии, памяти, времени и т.п. В связи с этим представляется важным выделить те способы реализации проекционных методов, которые будут иметь преимущества перед другими с точки зрения тех или

иных критериев. В монографии одного из авторов [69] в качестве такого критерия рассматривался емкостный критерий: изучались проекционные методы, позволяющие аппроксимировать данный класс систем с заданными требованиями на точность, используя минимальный объем памяти компьютера.

Позже техника матричных операторов начала развиваться в работах [70-73] и других для различных конкретных базисов. В работах [74, 75] было сделано первое обобщение на случай базисов из различных ортогональных многочленов.

Причина популярности техники матричных операторов в ее исключительной простоте: сложные системы интегральных или дифференциальных уравнений почти механически сводятся к системам алгебраических уравнений. В этом плане аппарат матричных операторов чем-то близок к популярному операционному методу, но, в отличие от операционного метода, его область применения значительно шире, поскольку охватывает нестационарные системы (дифференциальные уравнения с переменными коэффициентами). Таким образом, матричные операторы могут вводиться и эффективно использоваться для любого базиса.

Осуществив проекционную аппроксимацию системы, исследователь сводит непрерывную систему к дискретной. Аппроксимировав различные условия задачи (некоторые функционалы, ограничения и т.п.), можно перейти от исходной непрерывной ее формулировки к приближенной конечномерной задаче, которую можно решить численно с использованием вычислительной техники.

При сравнении с конечно-разностными методами преимущество предлагаемого подхода проявляется не только в возможности существенно сократить размерности аппроксимированных систем в случае, когда исходная непрерывная система и класс рассматриваемых входных сигналов имеют высокую гладкость. Не менее важен и другой факт: при проекционных аппроксимациях в явном виде сохраняется зависимость того же типа, которая имела место в исходной системе – аппроксимированная система представляет собой линейный оператор, переводящий столбцы из коэффициентов разложения входных векторов в столбцы из коэффициентов разложения соответствующих векторов выхода. Для многих задач сохранение в явном виде такой зависимости не только существенно облегчает по-

нимание задачи и предотвращает от ряда ошибок, но и позволяет применять наиболее эффективные методы при исследовании аппроксимированных систем и явлений.

Что касается сравнения с другими (в частности, с более точными) реализациями проекционных методов, метод, основанный на теории матричных операторов, не является оптимальным по точности среди различных проекционных методов. Но, с точки зрения простоты применения и наглядности, он, безусловно, имеет ряд преимуществ, и может быть рекомендован к широкому применению в математическом моделировании различных физических явлений и технических систем. Что же касается потери точности методов, основанных на применении матричных операторов, по сравнению с оптимальными по точности проекционными методами, то, эта потеря сказывается лишь при очень малом уровне помех. В практических задачах уровнем помех обычно пренебречь нельзя, и точность методов определяется не столько погрешностями методов аппроксимации, сколько уровнем помех.

Таким образом, для математического моделирования физических явлений и сложных технических систем метод проекционных аппроксимаций, основанный на применении матричных операторов, наиболее прост, нагляден, и не уступает существенно в точности другим численным методам.

В работе [76] были введены матричные операторы интегрирования, дифференцирования и умножения для произвольных функциональных пространств с базисами, т.е. в наиболее общей ситуации. Отметим, что за исключением работы [76], ввод матричных операторов для произвольных функциональных пространств с базисами в научной литературе ранее не встречался.

Согласно [77], через B – обозначено некоторое банахово пространство функций с базисом, заданных на отрезке $[t_0, t_f]$, а $\Phi_l(t) = [\varphi_0, \varphi_1, \dots, \varphi_{l-1}]^T$ – столбец из l базисных функций в пространстве B . Отметим, что для ряда популярных базисов нумерация начинается не с нуля, а с единицы, но этот вопрос не принципиален и при рассмотрении конкретных базисов используется принятая для дан-

ного базиса нумерация. Здесь же, для единообразия изложения, нумеруются элементы базиса, начиная с нуля.

Отметим, что в работе [78] была рассмотрена также равномерная метрика, т.е. было положено $B = C[t_0, t_f]$ и среднеквадратичная метрика, т.е. $B = L^2[t_0, t_f]$; сначала считается B произвольным банаховым пространством, удовлетворяющим естественному требованию: если $x(t) \in B$, то более гладкая функция $r(t) = \int_{t_0}^t x(\tau) d\tau$ также лежит в пространстве B .

Если $x(t) \in B$, то справедливо разложение:

$$x(t) \approx x_l(t) = \sum_{i=0}^{l-1} c_i^x \varphi_i(t) = \Phi_l^T(t) C_l^x, \quad (1.1)$$

где $C_l^x = [c_0^x, c_1^x, \dots, c_{l-1}^x]^T$ – столбец из коэффициентов разложения. Напомним, что из того, что $\Phi_l(t)$ – базис, вытекает сходимость разложений $x_l(t)$ к $x(t)$ в метрике пространства B .

Способ вычисления коэффициентов разложения (1.1) определяется выбором проекционного оператора Q_l . Далее считается, что некоторый оператор проектирования Q_l фиксирован.

Для ряда задач часто требуется по разложению (1.1) находить разложения функций $r_l(t) = \int_{t_0}^t x_l(\tau) d\tau$. Так как функции

$$h_i(t) = \int_{t_0}^t \varphi_i(\tau) d\tau$$

являются более гладкими функциями, чем $\varphi_i(t)$, и, по крайней мере, тоже лежат в B , их также можно разложить по базису $\Phi_l(t)$. В работе [76] обозначены коэффициенты этих разложений через $\{h_{ij}\}$:

$$Q_l h_i(t) = \sum_{j=0}^{l-1} h_{ij} \varphi_j(t), \quad i = 0, \dots, l-1. \quad (1.2)$$

Далее была введена квадратная матрица порядка l из коэффициентов разложений (1.8) [76]

$$H_l = \begin{pmatrix} h_{00} & h_{10} & \dots & h_{l-1,0} \\ h_{01} & h_{11} & \dots & h_{l-1,1} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ h_{0,l-1} & h_{1,l-1} & \dots & h_{l-1,l-1} \end{pmatrix}. \quad (1.3)$$

Тогда, в силу линейности оператора проектирования [76]

$$\begin{aligned} Q_l \int_{t_0}^t x_l(\tau) d\tau &= Q_l \int_{t_0}^t \Phi_l^T(\tau) C_l^x d\tau = \sum_{i=0}^{l-1} c_i^x Q_l \int_{t_0}^t \varphi_i(\tau) d\tau = \\ &= \sum_{i=0}^{l-1} c_i^x Q_l h_i(t) = \sum_{i=0}^{l-1} c_i^x \sum_{j=0}^{l-1} h_{ij} \varphi_j(t) = \Phi_l^T(t) H_l C_l^x \end{aligned}$$

справедлива формула [76]:

$$C_l^r = H_l C_l^x, \quad (1.4)$$

где C_l^r - столбец из коэффициентов разложения элемента $r_l(t) = \int_{t_0}^t x_l(\tau) d\tau$.

Матрица H_l называется *операционной матрицей интегрирования в базисе* $\Phi_l(t)$ [76]. Этой матрице соответствует оператор, действующий в l -мерном подпространстве с базисом $\Phi_l(t)$, называемый *матричным оператором интегрирования* [76].

Для аппроксимации дифференциальных уравнений с переменными коэффициентами требуется по разложению функции $x(t)$ находить разложение произведений $v(t) = x_l(t) a_l(t)$, где $a_l(t)$ - разложение некоторой фиксированной функции $a(t)$.

Итак, согласно [76], было обозначено через $a(t)$ - некоторая фиксированная функция из пространства B , $a_l(t)$ - ее разложение по базису $\Phi_l(t)$, а C_l^a - стол-

бец из коэффициентов разложения. Если произведение $\nu(t) = a_l(t)x_l(t) \in B$, тогда $\nu(t)$ также можно разложить по введенному базису. Известно, что для пространства $L^2[t_0, t_f]$ произведение двух функций из этих пространств также лежит в $L^2[t_0, t_f]$, тогда

$$\nu(t) \approx \nu_l(t) = Q_l(a_l(t) x_l(t)) = \Phi_l^T(t) C_l^\nu.$$

В работе [76] установлены формулы, связывающие элементы столбца C_l^ν с элементами столбцов C_l^a и C_l^x . Ясно, что поскольку сомножители можно переставить, то столбец C_l^ν можно выразить двумя способами. Наиболее интересна ситуация, когда одна из функций, $a(t)$, фиксирована, а другая, $x(t)$, может меняться. В этом случае необходима формула, выражающая столбец C_l^ν через переменный столбец C_l^x .

Так как в силу линейности оператора проектирования [76]:

$$\nu_l(t) = Q_l \left(\sum_{i=0}^{l-1} \sum_{j=0}^{l-1} c_i^a c_j^x \varphi_i(t) \varphi_j(t) \right) = \sum_{i=0}^{l-1} \sum_{j=0}^{l-1} c_i^a c_j^x Q_l(\varphi_i(t) \varphi_j(t)),$$

были разложены произведения базисных функций (всего будет $l(l+1)/2$ различных разложений, но для удобства введены как коэффициенты u_{ijk} , так и совпадающие с ними коэффициенты u_{jik}):

$$Q_l(\varphi_i(t) \varphi_j(t)) = \sum_{k=0}^{l-1} u_{ijk} \varphi_k(t), \quad i, j = 0, \dots, l-1.$$

В итоге получено (см. [76]):

$$\nu_l(t) = \sum_{i=0}^{l-1} \sum_{j=0}^{l-1} \sum_{k=0}^{l-1} c_i^a c_j^x u_{ijk} \varphi_k(t). \quad (1.5)$$

Определена квадратная матрица U_l^a порядка l [76]:

$$U_l^a = \begin{pmatrix} \sum_{i=0}^{l-1} u_{i00} c_i^a & \sum_{i=0}^{l-1} u_{i10} c_i^a & \cdots & \sum_{i=0}^{l-1} u_{i,l-1,0} c_i^a \\ \sum_{i=0}^{l-1} u_{i01} c_i^a & \sum_{i=0}^{l-1} u_{i11} c_i^a & \cdots & \sum_{i=0}^{l-1} u_{i,l-1,1} c_i^a \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ \sum_{i=0}^{l-1} u_{i0,l-1} c_i^a & \sum_{i=0}^{l-1} u_{i1,l-1} c_i^a & \cdots & \sum_{i=0}^{l-1} u_{i,l-1,l-1} c_i^a \end{pmatrix}. \quad (1.6)$$

Матрица U_l^a называется *операционной матрицей умножения на элемент $a_l(t)$* , а соответствующий ей оператор – *матричным оператором умножения на функцию $a_l(t)$* [76].

Тогда из формул (1.5), (1.6) вытекает справедливость равенства [76]

$$C_l^v = U_l^a C_l^x. \quad (1.7)$$

Замечание. Изложенный метод позволяет формировать и матрицы умножения на функции $a(t)$. Естественно, в случае отказа от предварительного разложения элемента $a(t)$ по базису будут получаться более точные аппроксимации элементов вида $a(t)x(t)$. Этот факт можно использовать при решении некоторых конкретных задач, однако идеология теории проекционных методов решения прикладных задач состоит в разработке универсальных алгоритмов решения целого набора разнообразных задач, включая и задачу оптимизации, а это наиболее просто реализовать при аппроксимации всех функций, входящих в систему. В связи с этим в качестве основного матричного оператора умножения рассматривается именно оператор умножения на $a_l(t)$ [76].

Для аппроксимации дифференциальных уравнений с переменными коэффициентами разложениями по гладким базисам (полиномиальным или тригонометрическим) используют также матричные операторы дифференцирования. Область применения этих операторов существенно уже, т.к. оператор дифференцирования в пространствах $C[t_0, t_f]$ и $L^2[t_0, t_f]$ неограничен. Тем не менее, в ряде случаев

использование матричного оператора дифференцирования корректно и удобно для применения [78].

Итак, если $x(t)$ – функция из пространства B , имеющая на отрезке $[t_0, t_f]$ производную $g(t) = x'(t) \in B$, тогда эту производную также можно разложить по базису пространства B . Установлена связь между столбцами C_l^x и C_l^g где C_l^g столбец коэффициентов разложения функции $g(t)$ по базису $\Phi_l(t)$ [76].

Предполагается, что элементы базиса $\Phi_l(t)$ дифференцируемы на отрезке $[t_0, t_f]$ и их производные лежат в пространстве B . Если это условие не выполнено, то разложения $x_l(t)$ даже сколь угодно гладких функций (бесконечно дифференцируемых или даже аналитических) нельзя дифференцировать, следовательно, использование оператора дифференцирования не может быть корректным.

По принятому предположению функции $\varphi_i'(t)$ также можно разложить по базису $\Phi_l(t)$. В работе [76], обозначены коэффициенты этих разложений через $\{d_{ij}\}$:

$$Q_l \varphi_i'(t) = \sum_{j=0}^{l-1} d_{ij} \varphi_j(t), \quad i = 0, \dots, l-1 \quad (1.8)$$

и введена в рассмотрение квадратная матрица порядка l из коэффициентов разложений (1.8):

$$D_l = \begin{pmatrix} d_{00} & d_{10} & \cdots & d_{l-1,0} \\ d_{01} & d_{11} & \cdots & d_{l-1,1} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ d_{0,l-1} & d_{1,l-1} & \cdots & d_{l-1,l-1} \end{pmatrix}. \quad (1.9)$$

Тогда, в силу линейности оператора проектирования

$$\begin{aligned} Q_l x_l'(t) &= Q_l \sum_{i=0}^{l-1} c_i^x \varphi_i'(t) = \sum_{i=0}^{l-1} c_i^x Q_l \varphi_i'(t) = \sum_{i=0}^{l-1} c_i^x \sum_{j=0}^{l-1} d_{ij} \varphi_j(t) = \\ &= \sum_{j=0}^{l-1} \left(\sum_{i=0}^{l-1} d_{ij} c_i^x \right) \varphi_j(t), \end{aligned}$$

или в матричной форме [76]:

$$C_l^g = D_l C_l^x. \quad (1.10)$$

Матрица D_l называется *операционной матрицей дифференцирования в базисе* $\Phi_l(t)$ [76]. Этой матрице соответствует оператор, действующий в l -мерном пространстве с базисом $\Phi_l(t)$, называемый *матричным оператором дифференцирования* [76].

В работе [78] приводятся общие оценки погрешностей, возникающих при применении матричных операторов интегрирования и умножения на функцию в пространствах $C[t_0, t_f]$ и $L^2[t_0, t_f]$, а в монографии [69] проекционные методы изучались на существенно более тонкой шкале пространств.

Отметим, что оценки погрешности применения оператора дифференцирования следует проводить для конкретных гладких базисов на подпространствах пространств $C[t_0, t_f]$ и $L^2[t_0, t_f]$ (см. [79]), поскольку этот оператор в общей ситуации является неограниченным.

Далее приведены оценки погрешности применения матричных операторов в пространстве непрерывных функций.

Итак, $B = C[t_0, t_f]$, а $\Phi_l(t)$ - некоторый базис в этом пространстве, а C_l - подпространство $C[t_0, t_f]$ с этим базисом. Оператор интегрирования в пространстве $C[t_0, t_f]$:

$$Hx(t) = \int_{t_0}^t x(s) ds,$$

причем в пространстве непрерывных функций справедливо равенство:

$$\|H\| = t_f - t_0.$$

Матричный оператор интегрирования представим в виде композиции оператора H и оператора проектирования на подпространство C_l [78]:

$$H_l = Q_l H.$$

Тогда, в силу оценки нормы композиции операторов, получено [78]:

$$\|H_l\| \leq (t_f - t_0) \|Q_l\|.$$

Но, операторы проектирования в банаховых пространствах часто неограниченны. Именно такая ситуация и имеет место для полиномиальных и тригонометрических базисов в пространстве $C[t_0, t_f]$ [80] – величины $\|Q_l\|$ неограниченно возрастают при увеличении l с порядком возрастания $\ln l$. Однако, матричный оператор интегрирования обычно применяется к элементам ограниченного множества подпространства C_l , которые в случае базисов из алгебраических полиномов или тригонометрических функций являются аналитическими функциями. В этом случае последняя оценка может быть существенно уточнена [78]:

$$\|H_l\| \leq (t_f - t_0) \|Q_l\|_{K_l},$$

где $\|Q_l\|_{K_l}$ - норма оператора проектирования, рассматриваемого как оператор, действующий на множестве

$$K_l = \{x_l \in C_l : \|x_l\| \leq K\}.$$

Отметим, что множество K_l будет компактным в пространстве $C[t_0, t_f]$ как ограниченное подмножество конечномерного подпространства.

Для ряда задач более важными являются оценки погрешности применения матричных операторов интегрирования типа оценок норм разностей: $\|Hx_l - H_l x_l\|$ и $\|Hx - H_l x_l\|$. Оценки такого типа были установлены для функций из некоторых компактных в $C[t_0, t_f]$ классов K [78]:

$$\Delta_l(K, H, Q_l) = \sup_{x \in K_l} \|Hx_l - H_l x_l\| \leq \|I - Q_l\| \|H_l\| \|Q_l\| \sup_{x \in K} \|x\|,$$

причем, нормы оператора проектирования рассматриваются как нормы операторов, действующих из класса K в пространство $C[t_0, t_f]$.

Далее, если имеются оценки величин

$$e_l(K, Q_l) = \sup_{x \in K} \|x - Q_l x\|,$$

то для любого $x \in K$ можно оценить погрешности вида [78]

$$\|Hx - H_l x_l\| \leq (t_f - t_0)e_l(K, Q_l) + \Delta_l(K, H, Q_l),$$

которые очень важны при оценке точности проекционных методов приближенного решения интегральных уравнений.

Далее в работе [78] рассматривается в пространстве $C[t_0, t_f]$ оператор умножения на функцию $a(t) \in C[t_0, t_f] : U(a)x(t) = a(t)x(t)$. Этот оператор действует в пространстве $C[t_0, t_f]$ и ограничен [78]:

$$\|U(a)\| = \max_{t \in [t_0, t_f]} |a(t)| = \|a\|.$$

Тогда, как и для матричного оператора интегрирования, для гладких базисов была получена оценка для матричного оператора умножения U_l^a на функцию $a_l(t)$ [78]:

$$\|U_l^a\| \leq \|a\| \|Q_l\|_{K_l}.$$

Оценки погрешности применения матричного оператора умножения на функцию [78]:

$$\Delta_l(K_a, K_x, U(a), Q_l) = \sup_{a \in K_a, x \in K_x} \|U(a_l)x_l - U_l^a x_l\| \leq \|I - Q_l\| \sup_{a \in K_a} \|U(a_l)\| \|Q_l\| \sup_{x \in K} \|x\|,$$

причем нормы операторов Q_l можно рассматривать на подпространстве $C_l \cap K_x$, а норму операторов $I - Q_l$ - на подпространстве $C_l \cap K$, где K - класс, состоящий из всевозможных произведений элементов классов K_a и K_x .

Далее приведем оценки погрешности применения матричных операторов в пространстве Лебега.

Итак, $B = L^2[t_0, t_f]$, а $\Phi_l(t)$ - некоторый базис в этом пространстве. Подпространство $L^2[t_0, t_f]$ с этим базисом в работе [78] обозначается через L_m^2 .

Для матричного оператора интегрирования в пространстве $L^2[t_0, t_f]$ справедлива следующая формула и оценка [78]:

$$\|H_l\| = \sqrt{t_f - t_0},$$

$$\Delta_l(K, H, Q_l) \leq \sqrt{t_f - t_0} \|I - Q_l\| \sup_{x \in K} \|x\|.$$

Для матричного оператора умножения на функцию имеет место равенство

$$\|U_l^a\| = \|a_l\|,$$

где под нормой функции $a_l(t)$ понимается ее норма в пространстве $L^2[t_0, t_f]$, а также оценка [78]:

$$\Delta_l(K_a, K_x, U(a), Q_l) \leq \|I - Q_l\| \sup_{a \in K_a} \|a_m\| \sup_{x \in K} \|x\|.$$

1.3. Ряды Фурье-Лагерра и матричный оператор дифференцирования в базисе многочленов Лагерра

В математической физике и практике расчета и проектирования систем управления уже достаточно давно используются спектральные представления, в основе которых лежат интегральное преобразование Фурье и разложения по ортогональным функциям. В случае разложения по тригонометрической системе функций используется аппарат гармонического анализа. Основные положения этого аппарата изучались и применялись на практике с 1882 г., когда была опубликована работа Фурье по теории теплопроводности. Позже стали использоваться и другие ортогональные базисы, например, многочлены Лежандра, Чебышева, Лагерра, Эрмита, Якоби и др.

Как математический аппарат эти многочлены применяются в теоретических исследованиях математиков, в математической физике, в вычислительной математике, в квантовой механике и в прикладной математике. А в последнее время появляются все новые возможности применения классических ортогональных

многочленов при решении различных физических и технических задач. Как известно [81-83], ортогональные многочлены широко применяются в различных задачах теории антенн. Ортогональные многочлены применяются в теории оболочек (И.Н. Векуа), в теории упругости (А.И. Каландия, Ш.Е. Микеладзе), в аэродинамике и гидродинамике (Г.И. Петров), в строительной механике (Я.И. Протусевич) и в других технических науках [84]. В книге Б.Р. Левина [85] все классические ортогональные многочлены применяются для разложения плотности вероятности.

Вопросами разложения функций в ряды Фурье по указанным здесь системам занимались многие математики. Этому посвящены фундаментальные монографии Н. К. Бари, А. Зигмунда, Г. Сегё, Г. Н. Ватсона, Б. М. Левитана, и И. С. Саргсяна и др., а также ряд обзорных статей П. Л. Ульянова, Б. И. Голубова, Л. В. Жижиашвили, В. А. Ильина – Е. М. Никишина – Ш. А. Алимова, В. М. Тихомирова и др [86].

Вернемся теперь к вопросу о разложении функций в ряды Фурье-Лагерра.

Пусть $L_2 = L_2(\mathbb{R}_+; e^{-t}t^\alpha)$ - пространство суммируемых с квадратом функций f на $\mathbb{R}_+ = [0, +\infty)$ с весом $e^{-t}t^\alpha$ $\left(\alpha > -\frac{1}{2}\right)$ и нормой

$$\|f\| = \sqrt{\int_{\mathbb{R}_+} e^{-t}t^\alpha f^2(t) dt}.$$

Согласно, [77] обозначено через

$$E_m(f) = \inf_{P_m} \|f - P_m\| \quad (m = 1, 2, \dots)$$

наилучшее приближение функции $f \in L_2$ алгебраическими многочленами

$$P_m(t) = \sum_{k=0}^{m-1} a_k t^k$$

в пространстве L_2 .

Напомним, что m - *поперечником Колмлгорова* множества $M \subset L_2$ называется величина

$$d_m(M; L_2) = \inf_{F_m \subset L_2} \{ \sup_{f \in M} \{ \inf_{\varphi \in F_m} \|f - \varphi\| \} \},$$

где последний раз точная нижняя грань берется по всем подпространствам $F_m \subset L_2$ размерности $m = 1, 2, \dots$ (см. [87]).

Согласно [88], введены обозначения:

$$D = x \frac{d^2}{dx^2} + (\alpha + 1 - x) \frac{d}{dx};$$

$W_\omega^n(D)$ ($n = 0, 1, \dots$) - класс функций f , заданных на $[0, \infty)$, имеющих там обобщенные производные $f^{(k)}$ ($k = 0, 1, \dots, 2n$), принадлежащие пространству $L_2[0, \infty)$, для которых

$$\|D^n f - D^n f_h\| = O[\omega(h)], \quad (1.11)$$

где

$$f_h(x) = \frac{\Gamma(\alpha+1)2^\alpha}{\sqrt{2\pi}} \int_{-1}^1 f(x+h+2\sqrt{xht}) J_{\alpha-\frac{1}{2}}(\sqrt{xh(1-t^2)}) (\sqrt{xh(1-t^2)})^{-\alpha+\frac{1}{2}} e^{-\sqrt{xht}} (1-t^2)^{\alpha-\frac{1}{2}} dt,$$

$0 < h \leq 1$, $\alpha > -\frac{1}{2}$, $J_p(x)$ - функции Бесселя первого рода порядка p , $f_h(x) \in L_2$ [89], а $\omega(t)$ - заданная мажоранта модулей непрерывности. Здесь и ниже (в определении классов функций) мажорантой модулей непрерывности является функция $\omega(\delta)$, заданная на $[0, \infty)$, для которой $\lim_{\delta \rightarrow 0} \omega(\delta) = \omega(0) = 0$ и при $0 \leq \delta_1 \leq \delta_2$ будет $0 \leq \omega(\delta_2) - \omega(\delta_1) \leq \omega(\delta_2 - \delta_1)$.

Итак, $L_k(x; \alpha)$ ($k = 0, 1, \dots$) - ортогональная система многочленов Лагерра [90] и

$$f(x) \sim \sum_{k=0}^{\infty} b_k(f) L_k(x; \alpha)$$

$$\left(b_k(f) = \frac{k!}{\Gamma(k+\alpha+1)} \int_0^{\infty} x^\alpha e^{-x} f(x) L_k(x; \alpha) dx \right)$$

ряд Фурье-Лагерра функции $f \in L_2$,

$$S_m(f(x)) = \sum_{k=0}^{m-1} b_k(f) L_k(x; \alpha)$$

- его частичные суммы.

Хорошо известно, что

$$\|f\| = \sqrt{\sum_{k=0}^{\infty} a_k^2(f)},$$

$$E_m(f) = \|f - S_m(f)\| = \sqrt{\sum_{k=m}^{\infty} a_k^2(f)},$$

где

$$a_k^2(f) = \frac{\Gamma(k + \alpha + 1)}{k!} b_k^2(f).$$

Известны следующие утверждения.

Лемма 1. [91] Если $f \in L_2$ и

$$f(x) = \sum_{k=0}^{\infty} b_k(f) L_k(x; \alpha),$$

то

$$f_h(x) = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{L_k(h; \alpha)}{L_k(0; \alpha)} b_k(f) L_k(x; \alpha),$$

причем сходимость рядов справа понимается в смысле пространства L_2 .

Лемма 2. [88] Если $f \in W_{\omega}^n(D)$, то

$$b_k(f) = (-1)^n \frac{1}{k^n} b_k(D^n f) \quad (k = 1, 2, \dots).$$

В работе В. А. Абилова [88] доказаны следующие теоремы, которые устанавливают связь между скоростью сходимости и гладкостью разлагаемой в ряд Фурье -Лагерра функции.

Теорема 1. [88] Для любого модуля непрерывности $\omega(t)$ и для любых m и n ($m = 1, 2, \dots; n = 0, 1, \dots$) справедлива оценка

$$\|f - f^m\| \leq c m^{(-n)} \omega(m^{-1}). \quad (1.12)$$

Здесь, c – положительная постоянная, а функция f принадлежит классу функций $W_\omega^n(D)$, f^m – частичная сумма ряда Фурье функции f по многочленам Чебышева-Лагерра.

Теорема 2. [88] Для любого модуля непрерывности $\omega(t)$ и для любых m и n ($m = 1, 2, \dots; n = 0, 1, \dots$) справедлива оценка

$$d_m(W_\omega^n(D); L_2) \asymp m^{(-n)} \omega(m^{-1}).$$

В работе [92], найдена асимптотическая формула типа формулы А. Н. Колмогорова для величины

$$\xi_m^\alpha(W^n H_\omega^*; x) = \sup_{f \in W^n H_\omega^*} |f(x) - S_m(f; x)|,$$

где H_ω^* – класс функций φ , заданных на $[0, \infty)$ и, удовлетворяющих для любых $t_1, t_2 \in [0, \infty)$ неравенству $|\varphi(t_1) - \varphi(t_2)| \leq \omega(|\sqrt{t_1} - \sqrt{t_2}|)$; $W^n H_\omega^*$ ($n = 1, 2, \dots$) – класс функций f , имеющих n -ю производную $f^{(n)}$, принадлежащую H_ω^* ; H_ω – класс функций g , заданных на $[0, \infty)$, модуль непрерывности которых $\omega(g, \delta)$ не превосходит заданной мажоранты $\omega(\delta)$.

Теорема 3. [92] Для $x > 0$ и $\alpha > -1/2$ справедлива асимптотическая формула

$$\xi_m^\alpha(W^n H_\omega^*; x) = 2^{-1} \pi^{-2} m^{-n/2} x^{n/2} C_\omega^{(p)} \ln m + O(m^{-n/2}) \omega\left(\frac{1}{\sqrt{m}}\right), \quad (1.13)$$

где $p = [2\sqrt{m}]$, $C_\omega^{(p)} = \sup_{\varphi \in H_\omega(2\pi)_{-\pi}} \int_{-\pi}^{\pi} \varphi(t) \sin pt \, dt$, а константа, входящая в остаточный член, зависит только от α , n и x , причем она равномерно ограничена относительно $x \in [\varepsilon, a]$ при любых фиксированных положительных ε и a ($\varepsilon < a$).

Ортонормированные на полуоси $[0, \infty)$ функции Лагерра $\varphi_k(t)$ [90], образующие базис в функциональном пространстве $L_2[0, \infty)$ множества функций с ин-

тегрируемым квадратом на области $[0, \infty)$, определяются через многочлены Чебышева-Лагерра $L_k(t; \alpha)$ следующим образом:

$$\varphi_k(t) = L_k(t; \alpha) \exp(-t/2) \quad (1.14)$$

Получать многочлены Чебышева-Лагерра легко из известных рекуррентных формул [90]

$$(n+1)L_{k+1}(t; \alpha) + (t - 2k - 1 - \alpha)L_k(t; \alpha) + (\alpha + k)L_{k-1}(t; \alpha) = 0, \quad (1.15)$$

справедливых при $k \geq 1$. Так как, $L_0(t; \alpha) = 1$,

$$L_1(t; \alpha) = (\alpha + 1) - t,$$

то из формул (1.15) можно последовательно находить многочлены Чебышева-Лагерра с номерами 2, 3, С помощью линейного преобразования $t = \tau + a$, $a > 0$ можно получить систему многочленов, ортогональную в области $[-a, \infty)$.

Подробнее со свойствами многочленов Чебышева-Лагерра можно ознакомиться по монографии [90].

Функции Лагерра с модифицирующим параметром γ , ускоряющим сходимость ряда Фурье, определяются формулой

$$\varphi_k^{\alpha, \gamma}(t) = \exp(-\gamma t/2) L_k(\gamma t; \alpha)$$

Модифицированные функции Лагерра ортогональны на полуоси $[0, \infty)$ с весовой функцией $h(t) = (\gamma t)^\alpha$. Если $f(t) \in L_2[0, \infty)$, тогда для нее определены коэффициенты Фурье по модифицированным функциям Лагерра

$$c_k^f(\gamma, \alpha) = \frac{k!}{\Gamma(k + \alpha + 1)} \int_0^\infty (\gamma t)^\alpha e^{-\gamma t} f(t) e^{\gamma t/2} L_k(\gamma t; \alpha) d(\gamma t), \quad k = 0, 1, \dots, \quad (1.16)$$

где $k \geq 1$, и ряд Фурье по модифицированным функциям Лагерра:

$$\exp(-\gamma t/2) \sum_{k=0}^{\infty} c_k^f(\gamma, \alpha) L_k(\gamma t; \alpha).$$

Частичная сумма $f_m(t)$ ряда Фурье по модифицированным функциям Лагерра m :

$$f_m(t) = \sum_{k=0}^{m-1} c_k^f(\gamma, \alpha) \varphi_k^{\alpha, \gamma}(t). \quad (1.17)$$

Т. о.:

$$f(z) = \sum_{k=0}^{\infty} c_k^f(\gamma, \alpha) \varphi_k^{\alpha, \gamma}(z) = \exp\left(-\frac{\gamma z}{2}\right) \sum_{k=0}^{\infty} c_k^f(\gamma, \alpha) L_k(\gamma z; \alpha). \quad (1.18)$$

Здесь фактически в ряд Фурье по многочленам Чебышева-Лагерра разлагается функция $f(z) \exp(\gamma z/2)$ [84]. Коэффициенты разложения (1.18) определяются формулой (1.16)

Форма матричного оператора дифференцирования в базисе многочленов и функций Лагерра легко устанавливается на основании следующих известных формул [90]

$$\begin{aligned} L'_k &= L'_{k-1}(t) - L_{k-1}(t) = \\ &= -L_0(t) - L_1(t) - \dots - L_{k-1}(t) \end{aligned} \quad (1.19)$$

Тогда из выражения (1.14) получено

$$\varphi'_k(t) = L'_k(t) \exp(-t/2) - \frac{1}{2} L_k(t) \exp(-t/2).$$

Используя их, легко установить, что матрица дифференцирования в базисе из многочленов Чебышева-Лагерра [93]:

$$D = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 \\ -1 & -1 & 0 & \dots & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ -1 & -1 & -1 & \dots & -1 & 0 \end{pmatrix}.$$

Матрица дифференцирования в базисе из функций Лагерра имеет вид [93]:

$$\tilde{D} = D - \frac{1}{2}E = \begin{pmatrix} -\frac{1}{2} & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 \\ -1 & -\frac{1}{2} & 0 & \dots & 0 & 0 \\ -1 & -1 & -\frac{1}{2} & \dots & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ -1 & -1 & -1 & \dots & -1 & -\frac{1}{2} \end{pmatrix}.$$

Матрица дифференцирования в базисе модифицированных функций Лагерра определяется выражением [93]:

$$D_{[\gamma]} = \gamma D. \quad (1.20)$$

Индекс γ в квадратных скобках в левой части соотношения (1.20) показывает зависимость матриц дифференцирования от значения модифицирующего параметра.

1.4. Математические модели диффузии неосновных носителей заряда в полупроводниковых материалах

Изучение электрических, в т.ч. фотоэлектрических, явлений занимает важное место в общем комплексе исследований свойств полупроводников. Такие явления включают процессы генерации неравновесных носителей заряда, их диффузию и рекомбинацию. Расширение области фотоэлектрических исследований за счет использования разнообразных излучений и инъекции в соединении с использованием методов комплексного изучения неравновесной проводимости в чрезвычайно сильной степени обогатило экспериментальные возможности и привело

к получению новых результатов, важных не только с научной, но и с прикладной точки зрения [94, 95].

Неравновесные носители заряда во многом определяют работу важнейших полупроводниковых устройств, таких как полупроводниковые микросхемы, светодиоды, полупроводниковые преобразователи световой энергии в электрическую, кристаллические и электронно-дырочные счетчики и т. п. [95]. Распределение ННЗ в результате их диффузии в полупроводнике часто необходимо знать при электроннозондовой диагностике материалов и структур полупроводниковой микро- и наноэлектроники [96]. Задача моделирования распределения ННЗ, генерированных электронным пучком, после их диффузии в полупроводниковой мишени ранее решалась для однородных материалов при фиксированных значениях электрофизических параметров мишени [93, 97-101], а в случае многослойных структур – для постоянных значений параметров материала внутри каждого слоя [100, 102, 103]. При проведении таких расчетов для однородного полупроводника использовалась т.н. модель коллективного движения ННЗ, согласно которой на диффузию генерированных внешним энергетическим воздействием неравновесных ННЗ из любого микрообъема полупроводника оказывают влияния другие электроны или дырки из других микрообластей материала [104]. Распределение по глубине ННЗ находится как решение дифференциального уравнения диффузии ННЗ

$$D \frac{d^2 \Delta p(z)}{dz^2} - \frac{\Delta p(z)}{\tau} = -\rho(z) \quad (1.21)$$

с граничными условиями

$$D \left. \frac{d\Delta p(z)}{dz} \right|_{z=0} = v_s \Delta p(0), \quad \Delta p(\infty) = 0. \quad (1.22)$$

Функция $\Delta p(z)$ описывает распределение по глубине ННЗ, генерированных внешним энергетическим воздействием; z – координата, отсчитываемая от плоской поверхности в глубь полупроводника.

Здесь входными данными являются $\rho(z)$ – зависимость от координаты плотности мощности, рассеянной в полупроводниковой мишени, а D , τ и ν_s – электрофизические параметры полупроводниковой мишени: коэффициент диффузии, время жизни и скорость поверхностной рекомбинации НЗ соответственно.

Значения $\rho(z)$ могут быть определены из соотношения для плотности энергии $\rho^*(z)$, выделяемой в этом слое мишени в единицу времени (делением $\rho^*(z)$ на энергию образования электронно-дырочной пары); для широкого электронного пучка справедлива полуэмпирическая формула [97]:

$$\rho^*(z) = \frac{1,085(1-\eta)P_0}{\sqrt{\pi}(1-\eta+\eta z_{ss}/z_{ms})} \left\{ \exp\left[-\left(\frac{z-z_{ms}}{z_{ms}}\right)^2\right] + \frac{\eta}{1-\eta} \exp\left[-\left(\frac{z-z_{ss}}{z_{ss}}\right)^2\right] \right\}.$$

Здесь z_{ms} – глубина максимальных потерь энергии первичными электронами, испытывающими малоугловое рассеяние; z_{ss} – глубина максимальных потерь энергии обратно рассеянными электронами; значение z_{ms} может быть получено из диффузионной модели [105], а z_{ss} определяется как $z_{ss} = Z^{-1/3}z_{ms}$ [104, 106]; η – коэффициент обратного рассеяния электронов зонда, $\eta = 0,024eZ^{1,67}/A$, а Z и A – порядковый номер и атомный вес вещества соответственно. Если внешним воздействием на полупроводник будет пучок света, то скорость генерации электронно-дырочных пар равна: $\rho(z) = \beta\alpha_1 I_0 \exp(-\alpha_1 z)$ [94, 95]. Здесь I_0 – интенсивность света на входе в образец, α_1 – коэффициент поглощения, β – внутренний квантовый выход (каждый поглощенный фотон порождает β электронно-дырочных пар).

В работе [93] было получено решение стационарного уравнения диффузии НЗ проекционным методом. Приближенное решение было найдено в аналитическом виде с использованием сравнительно небольшого числа членов функционального ряда ($m = 15$).

С другой стороны, для количественного описания диффузии неравновесных ННЗ в полупроводнике использовалась т.н. модель независимых источников, согласно которой на диффузию генерированных внешним энергетическим воздействием неравновесных ННЗ из любого микрообъема полупроводника не оказывают влияния другие электроны или дырки из других микрообластей материала. Математически это выражается в том, что сначала решается уравнение диффузии для каждого из точечных источников ННЗ, после чего посредством интегрирования по объему, занимаемому источниками носителей, находится распределение ННЗ в полупроводнике в результате их диффузии. Идея такого подхода заимствована из классической работы [107].

В этом случае для одномерной диффузии в полупроводник распределение по глубине ННЗ находится как решение дифференциального уравнения диффузии ННЗ

$$D \frac{d^2 \Delta p(z, z_0)}{dz^2} - \frac{\Delta p(z, z_0)}{\tau} = -\rho(z) \delta(z - z_0) \quad (1.23)$$

с граничными условиями

$$D \left. \frac{d\Delta p(z, z_0)}{dz} \right|_{z=0} = v_s \Delta p(0, z_0), \quad \Delta p(\infty, z_0) = 0. \quad (1.24)$$

Функция $\Delta p(z, z_0)$ описывает распределение по глубине ННЗ, генерированных плоским бесконечно тонким источником, находящимся на глубине z_0 , $z_0 \in [0, \infty)$; z – координата, отсчитываемая от плоской поверхности в глубь полупроводника.

Здесь входными данными являются $\rho(z)$ – плотность энергии первичного внешнего воздействия, рассеянной в тонком слое мишени на глубине z , а D , τ и v_s – как и ранее, электрофизические параметры полупроводниковой мишени: коэффициент диффузии, время жизни и скорость поверхностной рекомбинации ННЗ соответственно; $\delta(z - z_0)$ – дельта-функция.

В работе [97] получено точное аналитическое решение уравнения (1.23) с граничными условиями (1.24) на интервалах $z \in [0, z_0]$ и $z \in [z_0, \infty)$:

$$\Delta p(z, z_0) = \begin{cases} \Delta p_1(z, z_0) \quad \forall z \in [0, z_0], \\ \Delta p_2(z, z_0) \quad \forall z \in [z_0, \infty). \end{cases} \quad (1.25)$$

где

$$\Delta p_1(z, z_0) = \frac{\rho(z_0)\tau}{2L} \exp\left(-\frac{z_0}{L}\right) \left[\exp\left(\frac{z}{L}\right) - \frac{S-1}{S+1} \exp\left(-\frac{z}{L}\right) \right],$$

$$\Delta p_2(z, z_0) = \frac{\rho(z_0)\tau}{2L} \exp\left(-\frac{z}{L}\right) \left[\exp\left(\frac{z_0}{L}\right) - \frac{S-1}{S+1} \exp\left(-\frac{z_0}{L}\right) \right].$$

Здесь $L = \sqrt{D\tau}$ – диффузионная длина ННЗ, а $S = \frac{v_s L}{D}$ – приведенная скорость поверхностной рекомбинации ННЗ. В этом случае для одномерной диффузии в полубесконечный полупроводник распределение избыточных ННЗ по глубине дается выражением

$$\Delta p(z) = \int_0^{\infty} \Delta p(z, z_0) dz_0. \quad (1.26)$$

Аналогичные (но более сложные) выражения получены для распределений ННЗ в двух- и трехслойных планарных полупроводниковых структурах при фиксированных значениях электрофизических параметров материала внутри каждого слоя [100, 102, 103]. Эта модель может быть применена для количественного описания процессов также и в неоднородных структурах и потому перспективна при изучении структур полупроводниковой электроники.

Локальные значения электрофизических параметров в силу ряда причин могут иметь случайный разброс относительно своих усредненных по объему значений. Не исключено, что случайное изменение электрофизических параметров может оказать существенное влияние на результаты процесса диффузии ННЗ, а значит и на распределение ННЗ. В то же время вопрос о возможном влиянии случайного изменения электрофизических параметров на диффузию ННЗ в полупроводнике ранее не рассматривался.

Однако для исследования такого влияния требуется знание вида функции распределения электрофизических параметров полупроводника, что связано с большими экспериментальными проблемами. Сложность проблемы связана с тем, что в ближайшей перспективе не ожидается существенного совершенствования методов локальной диагностики (например, классическая катодолюминесцентная микроскопия), поскольку в этой области мы находимся вблизи физического предела, ограничивающего возможности дальнейшего улучшения разрешения [96, 108]. Для изучения влияния случайной составляющей в значениях электрофизических параметров на распределение ННЗ по глубине была принята гипотеза о нормальности закона распределения этих параметров.

1.5. Выводы и постановка задачи исследования

В результате анализа литературных данных возникает задача развития и обоснования проекционного метода, основанного на теории матричных операторов, для моделирования распределения ННЗ по глубине со случайными электрофизическими параметрами.

Целью работы является решение задачи статистического анализа диффузии ННЗ (1.21), (1.22) с учетом случайной составляющей в электрофизических параметрах (времени жизни, коэффициенте диффузии и скорости поверхностной рекомбинации ННЗ) проекционным методом и проведение вычислительного эксперимента по выявлению закономерностей в результатах развития стохастического процесса диффузии ННЗ по глубине полупроводника. Наиболее существенным преимуществом этого метода является представление решения в операторной форме в сочетании с возможностью построения эффективных вычислительных алгоритмов.

Для достижения поставленной цели необходимо решить следующие задачи исследования:

1) разработать схему проекционной аппроксимации стохастической модели диффузии ННЗ; дать порядковую оценку погрешности и получить условие вычислительной устойчивости предложенного проекционного метода исходной задачи;

2) построить сходящиеся матричные ряды и рассмотреть оптимизацию скорости сходимости итерационных процессов, аппроксимирующих проекционные характеристики математического ожидания и автокорреляционной функции распределения ННЗ по глубине;

3) в рамках вычислительного эксперимента исследовать влияние случайной составляющей в электрофизических параметрах (времени жизни, коэффициенте диффузии и скорости поверхностной рекомбинации ННЗ) на распределение неравновесных ННЗ в различных классических полупроводниковых материалах.

Сформулированная задача исследования влияния возможных случайных изменений коэффициентов D , τ и ν_s на решение уравнения (1.21), (1.22) представляет собой нахождение статистических характеристик $\Delta p(z)$, а именно математического ожидания и автокорреляционной функции распределения ННЗ по глубине. Напомним, что математическое ожидание случайной функции представляет собой неслучайную усредненную функцию (среднее значение функции), а автокорреляционная функция характеризует линейную статистическую связь между сечениями рассматриваемой случайной функции, а также разброс сечений относительно усредненного значения. При решении поставленной задачи представляется целесообразным провести сравнительный анализ использования двух моделей (т.н. модели коллективного движения ННЗ и т.н. модели независимых источников) для нахождения статистических характеристик распределения ННЗ по глубине. Анализ литературных данных показывает, что для реализации проекционного метода может быть выбран базис из модифицированных функций Лагерра с параметром, ускоряющим сходимость ряда [84], а проекционная аппроксимация математической модели диффузии (1.21) (1.22) может быть проведена с

применением теории матричных операторов [78] при сведении начальной и краевой задачи к задаче минимизации квадратичного функционала, вбирающего в себя как невязку уравнений, так и начальные и граничные условия. Проекционная модель при этом строится с использованием элементарного матричного оператора дифференцирования.

**ГЛАВА 2 ПРОЕКЦИОННАЯ АППРОКСИМАЦИЯ МОДЕЛИ
КОЛЛЕКТИВНОГО ДВИЖЕНИЯ НЕОСНОВНЫХ НОСИТЕЛЕЙ ЗАРЯДА
В ПОЛУПРОВОДНИКОВЫХ МАТЕРИАЛАХ, ОСНОВАННАЯ НА
ПРИМЕНЕНИИ МЕТОДА НАИМЕНЬШИХ КВАДРАТОВ**

**2.1. Проекционная аппроксимация модели коллективного движения
носителей заряда, основанная на применении модифицированного метода
наименьших квадратов**

Обозначим дифференциальный оператор, стоящий в левой части (1.21), через $L_1^{(\Delta p)}$, а дифференциальный оператор из левой части (1.22) - через $L_2^{(\Delta p)}$, дифференциальное уравнение (1.21) и граничные условия (1.22) можно записать в виде

$$L_1^{(\Delta p)}(\Delta p(z)) = -\tau \rho(z)$$

$$L_2^{(\Delta p)}(\Delta p(z)) \Big|_{z=0} = 0, \quad \Delta p(\infty) = 0.$$

Поставленная задача имеет единственное решение $\Delta p(z)$. Эта функция по определению должна быть 2 раза непрерывно дифференцируема.

Если функция $\rho(z)$ имеет непрерывные производные порядка n , то точное решение задачи $\Delta p(z)$ будет также более гладкой функцией.

Таким образом, имеет место следующий результат.

Лемма 3. Пусть функция $\rho(z)$ имеет непрерывные производные до порядка $2n \geq 2$ включительно. Тогда решение дифференциального уравнения (1.21) $\Delta p(z)$ является $2 + 2n$ раз непрерывно дифференцируемой функцией.

Поскольку одно из граничных условий (1.22) задано на бесконечности, то применение конечно-разностных методов решения рассматриваемой задачи затруднительно, поэтому для ее решения можно воспользоваться проекционным методом. Для реализации проекционного метода был выбран базис из модифицированных функций Лагерра с параметром, ускоряющим сходимость ряда [90]. Однако приближение плотности потерь энергии электронного пучка (функция $\rho(z)$) с использованием классических функций Лагерра с точностью, достаточной для реализации проекционного метода, может потребовать довольно большого количества членов разложения [93]. Поэтому для аппроксимации правой части уравнения (1.21) в общем случае предлагается использовать систему из ортонормированных в области $[-a, \infty)$, $a > 0$ модифицированных функций Лагерра. Следует отметить, что рассмотрение интервала $[-a, \infty)$ вместо интервала $[0, \infty)$ гарантирует сходимость ряда Фурье-Лагерра в точке $z = 0$ для любого параметра $\alpha > -1/2$ и класса функций, который описан в первой главе. Однако в данной работе будут использоваться функции, для которых ряд Фурье-Лагерра будет сходиться в точке $z = 0$ при любом $\alpha > -1/2$, а обоснование метода и установление оценок погрешностей для них проведем чуть ниже.

Следуя классическому методу наименьших квадратов, введём в рассмотрение функционал:

$$J(\Delta p(z)) = \left\| L_1^{(\Delta p)}(\Delta p(z)) + \tau \rho(z) \right\|_{L_2}^2 + \left(L_2^{(\Delta p)}(\Delta p(z)) \Big|_{z=0} \right)^2 + (\Delta p(\infty))^2,$$

где $L_1^{(\Delta p)}$, $L_2^{(\Delta p)}$ - операторы, стоящие в левых частях системы уравнений (1.21) и (1.22) соответственно, и решение $\Delta p(z)$ ищется из требования, чтобы оно доставляло минимум функционалу $J(\Delta p(z))$.

В итоге мы имеем модель (1.21), (1.22) и функционал $J(\Delta p(z))$, которые допускают непосредственную проекционную аппроксимацию, процедуру которой рассмотрим далее.

Введём ортонормированный базис из модифицированных функций Лагерра $\varphi_i^{\alpha, \gamma}(z) = \exp(-\gamma(z+a)/2)L_i(\gamma(z+a); \alpha)$ в функциональном пространстве $L_2[-a, \infty)$, которые определяются через многочлены Чебышева-Лагерра $L_i(\gamma(z+a); \alpha)$ [90], $i = 0, 1, 2, \dots$. Здесь параметры γ и α используются для оптимизации вычислительной схемы. Тогда каждую функцию от переменной z , входящую в систему уравнений (1.21), (1.22), аппроксимируем частичной суммой порядка m ее ряда Фурье по системе модифицированных функций Лагерра, а затем последовательно применим к каждому уравнению системы операторы проектирования Q^m на подпространство с базисом из m первых модифицированных функций Лагерра.

Перейдем от системы уравнений (1.21), (1.22) к приближенной системе уравнений:

$$\begin{cases} D\tau Q^m \left(\frac{d}{dz} Q^m \left(\frac{d\Delta p^m(z)}{dz} \right) \right) - \Delta p^m(z) = -\tau \rho^m(z), \\ Q^m \left(\frac{d\Delta p^m(z)}{dz} \right) \Big|_{z=0} - D^{-1} \nu_s \Delta p^m(0) = 0, \end{cases} \quad (2.1)$$

и вместо функционала $J(\Delta p(z))$ можно рассмотреть приближенный функционал [78]:

$$J_m(\Delta p^m(z)) = \left\| \tilde{L}_1^{(\Delta p)}(\Delta p^m(z)) + \tau \rho^m(z) \right\|_{L_2}^2 + \left(\tilde{L}_2^{(\Delta p)}(\Delta p^m(z)) \Big|_{z=0} \right)^2,$$

где $\tilde{L}_1^{(\Delta p)}$ и $\tilde{L}_2^{(\Delta p)}$ - операторы, стоящие в левых частях уравнений системы (2.1) соответственно. Приближенное решение $\Delta p^m(z)$ ищется из требования, чтобы оно доставляло минимум функционалу $J_m(\Delta p^m(z))$.

Обозначим через C_m^p и C_m^ρ столбцы из коэффициентов разложений неизвестной функции $\Delta p(z)$ и известной функции $\rho(z)$ по базису $\varphi_i^{\alpha,\gamma}(z)$ соответственно, далее введем матрицу дифференцирования D^m в базисе $\varphi_i^{\alpha,\gamma}(z)$ и обозначим через $\varphi^m(z)$ столбец из m первых модифицированных функций Лагерра по переменной z . С другой стороны в силу ортогональности функций Лагерра на интервале $[-a, \infty)$, функционал $J_m(\Delta p^m(z))$ можно представить в виде:

$$J_m(\Delta p^m(z)) = J_m(C^p) = (A_p C^p - G)^T (A_p C^p - G),$$

и перейти к рассмотрению от приближенной системы уравнений (2.1) к равносильной алгебраической векторно-матричной системе уравнений

$$A_p C^p = G, \quad (2.2)$$

где A_p – матрица переопределенной системы (2.2), которая имеет вид

$$A_{p(m+1) \times m} = \begin{bmatrix} D\tau D_m^2 - E \\ (\varphi^m(0))^T D_m - D^{-1}v_s (\varphi^m(0))^T \end{bmatrix}.$$

Столбец, стоящий в правой части системы уравнений (2.2) определяется как:

$$G_{(m+1) \times 1} = \begin{bmatrix} -\tau C_m^\rho & 0 \end{bmatrix}^T.$$

Разложение функции $\rho(z)$ по базису из m первых модифицированных функций Лагерра:

$$\rho(z) \approx \rho^m(z) = (\varphi^m(z))^T C_m^\rho, \quad z \in [0, \infty). \quad (2.3)$$

Будем считать, что ранг матрицы A_p равен m . Эта ситуация стандартна для практических задач [78]. Тогда для получения псевдорешения переопределенной системы уравнений (2.2) найдем столбец C^p , который минимизирует сумму квадратов невязок всех уравнений, входящих систему (2.2):

$$J_m(C^p) = (A_p C^p - G)^T (A_p C^p - G) \rightarrow \inf,$$

т.е. решим ее, используя метод наименьших квадратов (МНК) – тогда нормальное псевдорешение переопределенной системы уравнений (2.2) можно найти с помощью псевдообратной матрицы [109]:

$$C^{p^+} = \left(A_p^T A_p \right)^{-1} A_p^T G. \quad (2.4)$$

Получив нормальное псевдорешение C^{p^+} , можно восстановить приближенное решение исходной задачи (1.21), (1.22) по формуле:

$$\Delta p(z) \approx \Delta p_m^+(z) = \left(\varphi^m(z) \right)^T C^{p^+}, \quad z \in [0, \infty). \quad (2.5)$$

Следует отметить следующее обстоятельство. При использовании матричного оператора дифференцирования, применяемого после предварительного перехода исходной задачи к форме описания (2.2) получается явная линейная зависимость между столбцом коэффициентов разложения правой части уравнения (1.21) и искомого решения задачи (1.21), (1.22). Использование этой зависимости позволяет эффективно решать различные задачи анализа и параметрической идентификации.

Таким образом, хотя применение матричного оператора дифференцирования приводит к неявным схемам типа задачи минимизации, использование нормального псевдорешения позволяет сохранить важные преимущества проекционных методов.

2.2. Условие сходимости

Перейдем сейчас к обоснованию метода.

Предположим, что, реализовав изложенную схему, было получено приближенное решение (2.5). Для обоснования метода нужно доказать, что $\|\Delta p(z) - \Delta p_m^+(z)\| \rightarrow 0$ при $m \rightarrow \infty$.

В данном разделе рассматривается теоретический случай, когда погрешности в исходных данных и погрешности вычислений отсутствуют, а учитываются лишь погрешности аппроксимаций (погрешности проекционного метода). Вопросы, связанные с влиянием погрешностей в исходных данных, рассматриваются в 2.3.

Коэффициенты Фурье-Лагерра в общем случае вычисляются с некоторой погрешностью, но в данном разделе считаем, что они известны точно.

Обозначим через $\tilde{W}_\omega^n(D)$ ($n = 0, 1, \dots$) - класс функций f таких, что функции $\tilde{f}(z) = f(z) \exp(\gamma z/2)$ заданы на $[-a, \infty)$ и имеющие там обобщенные производные $\tilde{f}^{(k)}$ ($k = 0, 1, \dots, 2n$), принадлежащие пространству $L_2[-a, \infty)$, для которых выполняется условие (1.11):

$$\|D^n \tilde{f} - D^n \tilde{f}_h\| = O[\omega(h)].$$

Замечание 1. Для базиса из модифицированных функций Лагерра справедлива оценка (1.12) для класса функций $\tilde{W}_\omega^n(D)$ и асимптотическая формула (1.13).

Замечание 2. Отметим, что условие (1.11) будет выполняться, если, например, функция \tilde{f} задана на $[-a, \infty)$, и имеет там обобщенные производные $\tilde{f}^{(k)}$ ($k = 0, 1, \dots, 2n + 2$), принадлежащие пространству $L_2[-a, \infty)$. Действительно, в этом случае из леммы 1 и 2 в силу равенства Парсеваля следует:

$$\|D^n \tilde{f} - D^n \tilde{f}_h\|^2 = \sum_{k=0}^{\infty} \left[1 - \frac{L_k(h; \alpha)}{L_k(0; \alpha)} \right]^2 k^{2n} a_k^2(\tilde{f}).$$

Поскольку $\left| 1 - \frac{L_k(h; \alpha)}{L_k(0; \alpha)} \right| \leq c_1 kh$ ($k = 0, 1, \dots$) [88], тогда

$$\|D^n \tilde{f} - D^n \tilde{f}_h\|^2 \leq ch^2 \sum_{k=0}^{\infty} k^{2n+2} a_k^2(\tilde{f}) \leq \tilde{c}h^2 \sum_{k=0}^{\infty} a_k^2(D^{n+1} \tilde{f}) \leq c\omega^2(h),$$

где c_1, \tilde{c} и c - положительные постоянные.

Далее нам понадобятся два вспомогательных предложения, которыми будем пользоваться ниже.

Лемма 4. Пусть при $n \geq 1$ функция $\rho(z) \in \tilde{W}_\omega^n(D)$, тогда решение задачи (1.21), (1.22) $\Delta p(z) \in \tilde{W}_\omega^{(n+1)}(D)$. Здесь ω – заданная мажоранта модулей непрерывности.

Доказательство. Имеем:

$$\begin{aligned} & \left\| D^{(n+1)}\Delta\tilde{p} - D^{(n+1)}\Delta\tilde{p}_h \right\| = \left\| D^n D\Delta\tilde{p} - D^n D\Delta\tilde{p}_h \right\| = \left\| D^n D\Delta\tilde{p} - D^n (D\Delta\tilde{p})_h \right\| = \\ & = \left\| D^n \left(z \frac{d^2 \Delta\tilde{p}}{dz^2} + (\alpha + 1 - z) \frac{d\Delta\tilde{p}}{dz} \right) - D^n \left(z \frac{d^2 \Delta\tilde{p}}{dz^2} + (\alpha + 1 - z) \frac{d\Delta\tilde{p}}{dz} \right)_h \right\| \leq \\ & \leq \left\| D^n \left(\frac{z}{L^2} \Delta\tilde{p} \right) - D^n \left(\frac{z}{L^2} \Delta\tilde{p} \right)_h \right\| + \left\| D^n \left(\frac{\tau z}{L^2} \tilde{\rho} \right) - D^n \left(\frac{\tau z}{L^2} \tilde{\rho} \right)_h \right\| + \\ & + \left\| D^n (\Delta\tilde{p}_1) - D^n (\Delta\tilde{p}_1)_h \right\| + \left\| D^n (y(z)) - D^n (y(z))_h \right\| + \\ & + \left\| D^n (\tilde{\rho}_1) - D^n (\tilde{\rho}_1)_h \right\|. \end{aligned}$$

Здесь $y(z) = \exp(\gamma z/2)(\alpha - z + 1)c$, c - постоянная,

$$\Delta\tilde{p}_1(z) = \exp(\gamma z/2) \frac{(\alpha - z + 1)}{L^2} \int_0^{\tilde{z}} \Delta p(z) dz, \quad \tilde{\rho}_1(z) = \exp(\gamma z/2) \frac{\tau(\alpha - z + 1)}{L^2} \int_0^{\tilde{z}} \rho(z) dz.$$

значим слагаемые в правой части последнего неравенства через S_1, \dots, S_5 и оценим их сверху. В силу того, что $\rho(z), y(z) \in \tilde{W}_\omega^n(D)$, легко показать, что справедливы оценки:

$$S_2 \leq c\omega(h), \quad S_4 \leq c\omega(h).$$

Поскольку функция $\Delta\tilde{p}(z)$ $2 + 2n$ раз непрерывно дифференцируема и ее производные принадлежат пространству $L_2[-a, \infty)$, то справедливы оценки (см. замечание 2):

$$S_1 \leq c\omega(h), \quad S_3 \leq c\omega(h).$$

Далее, применяя теорему Лагранжа, получаем:

$$\tilde{\rho}_1(z) = \exp(\gamma z/2) \frac{\tau(\alpha - z + 1)}{L^2} \int_0^z \rho(z) dz = \exp(\gamma z/2) \frac{\tau(\alpha - z + 1)}{L^2} z \rho(\theta z), \theta \in (0, 1). \text{ Учи-}$$

тывая последнее, а также соотношение для коэффициентов Фурье-Лагерра [90]:

$$c_k^{\tilde{\rho}_1}(\alpha) = c_k^{\tilde{\rho}_1}(\alpha - 1) - c_{k+1}^{\tilde{\rho}_1}(\alpha - 1) \quad (k = 0, 1, \dots),$$

легко показать, что

$$S_5 \leq c\omega(h).$$

Остальное ясно.

Лемма 5. Если функция $f(z)$ имеет непрерывную производную первого порядка, принадлежащую пространству $L_2[-a, \infty)$, то справедливо:

$$\sum_{i=0}^{\infty} c_i^f \left(\left(\varphi_i^{\alpha, \gamma}(z) \right)^{(1)} + \gamma/2 \varphi_i^{\alpha, \gamma}(z) \right) = \sum_{i=0}^{\infty} -\gamma c_{i+1}^f \varphi_i^{\alpha+1, \gamma}(z) \quad (2.6)$$

Доказательство. Применим формулу дифференцирования для функций Лагерра [84]:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dz} \left(\varphi_i^{\alpha, \gamma}(z) \right) &= \frac{d}{dz} \left(\exp(-\gamma(z+a)/2) L_i(\gamma(z+a); \alpha) \right) = \\ &= -\gamma/2 \exp(-\gamma(z+a)/2) L_i(\gamma(z+a); \alpha) - \gamma \exp(-\gamma(z+a)/2) L_{i-1}(\gamma(z+a); \alpha+1) = \\ &= -\gamma/2 \varphi_i^{\alpha, \gamma}(z) - \gamma \varphi_{i-1}^{\alpha+1, \gamma}(z). \end{aligned}$$

Имеем

$$\frac{d}{dz} \left(\varphi_i^{\alpha, \gamma}(z) \right) + \gamma/2 \varphi_i^{\alpha, \gamma}(z) = -\gamma \varphi_{i-1}^{\alpha+1, \gamma}(z).$$

Известно, что многочлены Чебышева-Лагерра $L_k(x; \alpha)$ удовлетворяют дифференциальному уравнению второго порядка [84]:

$$zL_i''(z; \alpha) + (\alpha - z + 1)L_i'(z; \alpha) + iL_i(z; \alpha) = 0.$$

Умножая обе части этого уравнения на $z^\alpha e^{-z}$, получим:

$$z^\alpha e^{-z} L_i(z; \alpha) = -\frac{1}{i} \frac{d}{dz} \left(z^{\alpha+1} e^{-z} L_i'(z; \alpha) \right), \quad (2.7)$$

тогда, учитывая (2.7), интегрирование по частям дает

$$\begin{aligned}
c_i^f(\gamma, \alpha) &= \frac{i!}{\Gamma(\alpha + i + 1)} \int_{-a}^{\infty} (\gamma(z+a))^\alpha e^{-\gamma(z+a)/2} L_i(\gamma(z+a); \alpha) f(z) d(\gamma z) = \\
&= -\frac{(i-1)!}{\gamma \Gamma(\alpha + i + 1)} \int_{-a}^{\infty} (\gamma(z+a))^{\alpha+1} e^{-\gamma(z+a)/2} \frac{\gamma}{2} L_{i-1}(\gamma(z+a); \alpha + 1) f(z) d(\gamma z) - \\
&\quad -\frac{(i-1)!}{\gamma \Gamma(\alpha + i + 1)} \int_{-a}^{\infty} (\gamma(z+a))^{\alpha+1} e^{-\gamma(z+a)/2} L_{i-1}(\gamma(z+a); \alpha + 1) f'(z) d(\gamma z) = \\
&= \frac{1}{\gamma} \left(-\frac{\gamma}{2} c_{i-1}^f(\gamma, \alpha + 1) - c_{i-1}^{f'}(\gamma, \alpha + 1) \right)
\end{aligned}$$

или

$$c_i^{f'}(\gamma, \alpha + 1) + \frac{\gamma}{2} c_i^f(\gamma, \alpha + 1) = -\gamma c_{i+1}^f(\gamma, \alpha).$$

Т.о. получили, что

$$f'(z) + \gamma/2 f(z) \sim \sum_{i=0}^{\infty} -\gamma c_{i+1}^f \varphi_i^{\alpha+1, \gamma}(z),$$

т.е. ряд $\sum_{i=0}^{\infty} -\gamma c_{i+1}^f \varphi_i^{\alpha+1, \gamma}(z)$ является рядом Фурье функции $f'(z) + \gamma/2 f(z)$ по мо-

дифицированным функциям Лагерра $\varphi_i^{\alpha+1, \gamma}(z)$.

Лемма доказана.

Из этого следует лемма 6.

Лемма 6. Если при $n \geq 1$ функция $\rho(z) \in \tilde{W}_\omega^n(D)$ и имеет непрерывные производные до $2n$ - го порядка включительно, то справедливо неравенство:

$$\left\| \Delta p^{(k)}(z) - \Delta p_m^{(k)}(z) \right\|_{L_2} \leq \frac{M_k}{m^{[(2+2n-k)/2]}} \omega(m^{-1}), \quad k = 0, \dots, 2. \quad (2.8)$$

Здесь ω – заданная мажоранта модулей непрерывности.

Доказательство. Случай $k = 0$ уже рассмотрен в теореме 1. Докажем неравенство при $k = 1$. Тогда используя результаты леммы 4 и 5, а также теоремы 1, имеем:

$$\begin{aligned}
& \left\| \Delta p^{(1)}(z) - \Delta p_m^{(1)}(z) \right\|_{L_2} = \left\| \Delta p^{(1)}(z) + \gamma/2 \Delta p_m(z) - \left(\Delta p^{(1)}(z) + \gamma/2 \Delta p(z) \right)_m \right\|_{L_2} \leq \\
& \leq \left\| \Delta p^{(1)}(z) + \gamma/2 \Delta p(z) - \left(\Delta p^{(1)}(z) + \gamma/2 \Delta p(z) \right)_m \right\|_{L_2} + \left\| \gamma/2 \Delta p(z) - \gamma/2 \Delta p_m(z) \right\|_{L_2} \leq \\
& \leq \frac{C_1}{m^n} \omega(m^{-1}) + \frac{C_0}{m^{(n+1)}} \omega(m^{-1}) \leq \frac{M_1}{m^n} \omega(m^{-1}).
\end{aligned}$$

Это неравенство справедливо в силу условия: $\Delta p^{(1)}(z) \in \tilde{W}_\omega^n(D)$,

$\Delta p(z) \in \tilde{W}_\omega^{(n+1)}(D)$. Здесь $\Delta p_m(z)$ и $\left(\Delta p^{(1)}(z) + \gamma/2 \Delta p(z) \right)_m$ - частичные суммы со-

ответствующих рядов Фурье-Лагерра: $\sum_{i=0}^{\infty} c_i^p \varphi_i^{\alpha, \gamma}(z)$ и $\sum_{i=0}^{\infty} -\gamma c_{i+1}^p \varphi_i^{\alpha+1, \gamma}(z)$.

Аналогично можно показать, что

$$\left\| \Delta p^{(2)}(z) - \Delta p_m^{(2)}(z) \right\|_{L_2} \leq \frac{M_2}{m^n} \omega(m^{-1}).$$

Лемма доказана.

Если погрешности в исходных данных и погрешности вычислений отсутствуют, а учитываются лишь погрешности аппроксимаций, тогда имеет место следующее утверждение.

Лемма 7. Пусть функция $\rho(z) \in \tilde{W}_\omega^n(D)$ и имеет непрерывные производные до порядка $2n \geq 2$ включительно. Тогда для разложения в частичную сумму Фурье-Лагерра $\Delta p^m(z)$ порядка m точного решения $\Delta p(z)$ задачи (1.21), (1.22) при $m \geq 4$ справедливы оценки

$$\left\| L_1^{(\Delta p)}(\Delta p^m(z)) + \tau \rho(z) \right\|_{L_2} \leq C_0(n; \alpha; \gamma) m^{-n} \omega(m^{-1}), \quad (2.9)$$

$$\begin{aligned}
& \left| L_2^{(\Delta p)}(\Delta p^m(z)) \Big|_{z=0} \right| \leq C_1(n; \alpha; \gamma) m^{-(2n+1)/2} \ln m C_\omega^{([2\sqrt{m}])} + \\
& + C_2(n; \alpha; \gamma) m^{-(2n+1)/2} \omega(m^{-1/2}), \quad (2.10)
\end{aligned}$$

где положительные постоянные C_i , $i = 0, 1, 2$ не зависят от m , а $L_1^{(\Delta p)}$ и $L_2^{(\Delta p)}$ - дифференциальные операторы, стоящие в левых частях задачи (1.21), (1.22).

Доказательство. Так как для точного решения

$$L_1^{(\Delta p)}(\Delta p(z)) + \tau \rho(z) = 0,$$

справедливо равенство

$$\begin{aligned} \Delta_m &= \left\| L_1^{(\Delta p)}(\Delta p^m(z)) + \tau \rho(z) \right\|_{L_2} = \left\| L_1^{(\Delta p)}(\Delta p^m(z)) - L_1^{(\Delta p)}(\Delta p(z)) + L_1^{(\Delta p)}(\Delta p(z)) + \right. \\ &\quad \left. + \tau \rho(z) \right\|_{L_2} = \left\| L_1^{(\Delta p)}(\Delta p(z) - \Delta p^m(z)) \right\|_{L_2}. \end{aligned}$$

Но в силу оценок (2.8) при $m \geq 4$ получим оценку

$$\begin{aligned} \Delta_m &= \left\| L_1^{(\Delta p)}(\Delta p(z) - \Delta p^m(z)) \right\|_{L_2} \leq D\tau \left\| \Delta p^{(2)}(z) - \Delta p_m^{(2)}(z) \right\|_{L_2} + \left\| \Delta p(z) - \Delta p_m(z) \right\|_{L_2} \leq \\ &\leq D\tau \frac{M_2}{m^n} \omega(m^{-1}) + \frac{M_0}{m^{(n+1)}} \omega(m^{-1}) \leq \frac{C_0(n; \alpha; \gamma)}{m^n} \omega(m^{-1}). \end{aligned}$$

Таким образом, справедливость оценки (2.9) установлена.

Для доказательства неравенства (2.10) воспользуемся результатом теоремы 3 и условиями (1.22).

Тогда при $m \geq 4$ имеем

$$\begin{aligned} \left| L_2^{(\Delta p)}(\Delta p^m(z)) \Big|_{z=0} \right| &= \left| D \frac{d}{dz}(\Delta p_m(z)) \Big|_{z=0} - D \frac{d}{dz}(\Delta p(z)) \Big|_{z=0} + D \frac{d}{dz}(\Delta p(z)) \Big|_{z=0} - \right. \\ &\quad \left. - \nu_s(\Delta p^m(0)) - \nu_s(\Delta p(0)) + \nu_s(\Delta p(0)) \right| = \left| D \frac{d}{dz}(\Delta p_m(z)) \Big|_{z=0} - D \frac{d}{dz}(\Delta p(z)) \Big|_{z=0} - \right. \\ &\quad \left. - \nu_s(\Delta p^m(0)) + \nu_s(\Delta p(0)) \right| \leq D \left| \frac{d}{dz}(\Delta p_m(z)) \Big|_{z=0} - \frac{d}{dz}(\Delta p(z)) \Big|_{z=0} \right| + \\ &\quad + \nu_s \left| (\Delta p^m(0)) - (\Delta p(0)) \right| \leq Q_1 m^{-(2n+1)/2} \ln m C_\omega^{([\frac{2\sqrt{m}}{1}])} + Q_2 m^{-(2n+1)/2} \omega(m^{-1/2}) + \\ &\quad + Q_3 m^{-(n+1)} \ln m C_\omega^{([\frac{2\sqrt{m}}{1}])} + Q_4 m^{-(n+1)} \omega(m^{-1/2}) \leq \\ &\leq C_1(n; \alpha; \gamma) m^{-(2n+1)/2} \ln m C_\omega^{([\frac{2\sqrt{m}}{1}])} + C_2(n; \alpha; \gamma) m^{-(2n+1)/2} \omega(m^{-1/2}). \end{aligned}$$

Лемма доказана.

Лемма 8. Пусть функция $\rho(z) \in \tilde{W}_\omega^n(D)$ и имеет непрерывные производные до порядка $2n \geq 2$ включительно. Тогда на столбце из $m \geq 4$ коэффициентов Фурье-Лагерра S^p разложения точного решения $\Delta p(z)$ задачи (1.21), (1.22), значе-

ние неотрицательного функционала $J(C^p)$ при $m \geq 4$ оценивается следующим образом:

$$J(C^p) \leq C(n; \alpha; \gamma) m^{-2n+1} \omega^2(m^{-1}), \quad (2.11)$$

где положительная постоянная $C(n; \alpha; \gamma)$ не зависит от m и обычно возрастает при увеличении n .

Доказательство. Еще раз отметим, что в силу ортогональности функций Лагерра на интервале $[a, \infty)$, функционал $J(C^p)$ на столбце C^p можно представить в виде:

$$J(C^p) = (A_p C^p - G)^T (A_p C^p - G) = \left\| \tilde{L}_1^{(\Delta p)}(\Delta p^m(z)) + \tau \rho^m(z) \right\|_{L_2}^2 + \left(\tilde{L}_2^{(\Delta p)}(\Delta p^m(z)) \Big|_{z=0} \right)^2,$$

где $\tilde{L}_1^{(\Delta p)}$ и $\tilde{L}_2^{(\Delta p)}$ - дифференциальные операторы, получаемые из операторов $L_1^{(\Delta p)}$ и $L_2^{(\Delta p)}$ последующем применении операторов проектирования. Тогда

$$\sqrt{J(C^p)} \leq \left\| L_1^{(\Delta p)}(\Delta p^m(z)) + \tau \rho(z) \right\|_{L_2} + \left\| (L_1^{(\Delta p)} - \tilde{L}_1^{(\Delta p)}) \Delta p^m(z) \right\|_{L_2} + \left\| \tau \rho(z) - \tau \rho^m(z) \right\|_{L_2} + \left| L_2^{(\Delta p)}(\Delta p^m(z)) \Big|_{z=0} \right| + \left| (L_2^{(\Delta p)} - \tilde{L}_2^{(\Delta p)}) \Delta p^m(z) \Big|_{z=0} \right|.$$

Обозначим слагаемые в правой части последнего неравенства через S_1, \dots, S_5 и оценим их сверху. В силу оценки (2.9)

$$S_1 = \left\| L_1^{(\Delta p)}(\Delta p^m(z)) + \tau \rho(z) \right\|_{L_2} \leq C_0(n; \alpha; \gamma) m^{-n} \omega(m^{-1}).$$

Аналогичным образом, используя оценку (2.10) и следующее соотношение для верхней грани $[2\sqrt{m}]$ -го коэффициента Фурье [110]:

$$C_\omega^{([2\sqrt{m}])} = O\left(\omega\left([2\sqrt{m}]^{-1}\right)\right),$$

и в силу того, что [111]:

$$\omega(st) = O(s+1)\omega(t), \quad s \geq 0,$$

получаем, что при $m \geq 4$

$$\begin{aligned}
S_4 &= \left| L_2^{(\Delta p)} \left(\Delta p^m(z) \right) \Big|_{z=0} \right| \leq C_1(n; \alpha; \gamma) m^{-(2n+1)/2} \ln m C_\omega^{([2\sqrt{m}])} + \\
&+ C_2(n; \alpha; \gamma) m^{-(2n+1)/2} \omega(m^{-1/2}) \leq C_1(n; \alpha; \gamma) m^{-n} C_\omega^{([2\sqrt{m}])} + \\
&+ C_2(n; \alpha; \gamma) m^{-(2n+1)/2} \omega(m^{-1/2}) \leq \tilde{C}_1(n; \alpha; \gamma) m^{-n} \omega\left([2\sqrt{m}]^{-1}\right) + \\
&+ C_2(n; \alpha; \gamma) m^{-(2n+1)/2} \omega(m^{-1/2}) \leq \tilde{C}_2(n; \alpha; \gamma) m^{-n} \omega(m^{-1/2}) + \\
&+ C_2(n; \alpha; \gamma) m^{-(2n+1)/2} \omega(m^{-1/2}) \leq \tilde{C}(n; \alpha; \gamma) m^{-n} \omega(m^{-1/2}).
\end{aligned}$$

Оценка величины S_3 вытекает из условия $\rho(z) \in \tilde{W}_\omega^n(D)$:

$$S_3 \leq C_2(n; \alpha; \gamma) m^{-n} \omega(m^{-1}).$$

Наконец, оценим слагаемые S_2 и S_5 . Имеем:

$$S_2 = \left\| (L_1^{(\Delta p)} - \tilde{L}_1^{(\Delta p)}) \Delta p^m(z) \right\|_{L_2} = \tau D \left\| \frac{d^2}{dz^2} \Delta p^m(z) - Q^m \left(\frac{d}{dz} Q^m \left(\frac{d}{dz} \Delta p^m(z) \right) \right) \right\|_{L_2}.$$

Введем обозначение:

$$V = \frac{d}{dz} \Delta p^m(z).$$

Тогда

$$\begin{aligned}
S_2 &= \tau D \left\| V^{(1)} - Q^m \left(\frac{d}{dz} Q^m(V) \right) \right\|_{L_2} = \tau D \left\| V^{(1)} - Q^m(V_m^{(1)}) \right\|_{L_2} = \\
&= \tau D \left\| V^{(1)} - V_m^{(1)} + V_m^{(1)} - Q^m(V_m^{(1)}) \right\|_{L_2} \leq \tau D \left\| V^{(1)} - V_m^{(1)} \right\|_{L_2} + \tau D \left\| V_m^{(1)} - Q^m(V_m^{(1)}) \right\|_{L_2} \leq \\
&\leq \tau D \left\| V^{(1)} + \gamma/2V - Q^m(V^{(1)} + \gamma/2V) \right\|_{L_2} + \tau D(\gamma/2) \|V - V_m\|_{L_2} + \tau D \left\| V_m^{(1)} - Q^m(V_m^{(1)}) \right\|_{L_2}.
\end{aligned}$$

Поскольку функции V , $V^{(1)} + \gamma/2V$ и $V_m^{(1)}$ имеют вид: $\exp(-\gamma z/2) P_m(z)$, где $P_m(z)$ - это некоторый многочлен степени m , то первое, второе и третье слагаемое в правой части последнего неравенства обращаются в нуль, если погрешности вычислений отсутствуют. Действительно, в этом случае с помощью линейных преобразований можно точно найти все коэффициенты Фурье-Лагерра функций

V , $V^{(1)} + \gamma/2V$ и $V_m^{(1)}$. Поэтому $S_2 = 0$. Аналогично рассуждая, получим, что $S_5 = 0$.

Далее отметим некоторое свойство модуля непрерывности $\omega(t)$, которым воспользуемся [111]:

$$\frac{\omega(t_2)}{t_2} \leq 2 \frac{\omega(t_1)}{t_1} \text{ при } 0 < t_1 \leq t_2.$$

Собрав все оценки вместе, с учетом последнего свойства, получаем оценку для функционала:

$$\begin{aligned} \sqrt{J(C^p)} &\leq C_0 m^{-n} \omega(m^{-1}) + C_2 m^{-n} \omega(m^{-1}) + \tilde{C}_1(n; \alpha; \gamma) m^{-n} \omega(m^{-1/2}) \leq \\ &\leq C m^{-n + \frac{1}{2}} \omega(m^{-1}). \end{aligned}$$

Получили, что правая часть последнего неравенства не превосходит некоторой величины $C m^{-n + \frac{1}{2}} \omega(m^{-1})$, что и доказывает лемму.

С помощью леммы 8 легко устанавливается справедливость следующего результата.

Теорема 4. Пусть функция $\rho(z) \in \tilde{W}_\omega^n(D)$ и имеет непрерывные производные до порядка $2n \geq 2$ включительно. Для $m \geq 4$ обозначим через C_m^{p+} нормальное псевдорешение – решение задачи минимизации функционала $J(C^p)$, построенного с помощью проектирования на подпространство с базисом из первых m модифицированных функций Лагерра. Тогда последовательность $\{C_m^{p+}\}$ будет минимизирующей для функционала $J(C^p)$ и

$$J(C_m^{p+}) \leq C(n; \alpha; \gamma) m^{-2n+1} \omega^2(m^{-1}), \quad m \rightarrow \infty. \quad (2.12)$$

Доказательство. Фиксируем произвольное $m \geq 4$. Так как $C_m^{p^+}$ является наименьшим значением неотрицательного функционала $J(C^p)$, справедливо неравенство

$$0 \leq J(C_m^{p^+}) \leq J(C^p).$$

Но тогда оценка (2.12) вытекает из оценки (2,11) леммы 8. Далее, из условий теоремы следует, что $n \geq 1$. Но тогда

$$J(C_m^{p^+}) \leq C m^{-2n+1} \omega^2(m^{-1}) \rightarrow 0, \quad m \rightarrow \infty,$$

т.е. последовательность $\{C_m^{p^+}\}$ будет минимизирующей для функционала $J(C^p)$.

Теорема доказана.

Из доказанной теоремы вытекает теоретическое обоснование изложенной схемы аппроксимации задачи (1.21), (1.22): если погрешности в исходных данных и погрешности машинных округлений пренебрежимо малы (допустимая степень их величины устанавливается в следующем разделе), то суммы Фурье-Лагерра $\Delta p_m^+(z)$ с коэффициентами, получаемыми по формулам (2.4), будут при достаточно больших m удовлетворять с приближенно малыми погрешностями условиям (1.22), и иметь малую невязку в уравнении (1.21).

Действительно, если $J(C_m^{p^+}) \leq \varepsilon$, то

$$\left(D \frac{d\Delta p_m^+(z)}{dz} \Big|_{z=0} - v_s \Delta p_m^+(0) \right)^2 \leq \varepsilon.$$

Но тогда будет

$$\left| D \frac{d\Delta p_m^+(z)}{dz} \Big|_{z=0} - v_s \Delta p_m^+(0) \right| \leq \varepsilon^{1/2}.$$

Аналогично, при тех же условиях, имеем

$$\left\| L_1^{(\Delta p)}(\Delta p_m^+(z)) + \tau \rho^m(z) \right\|_{L_2} \leq \varepsilon^{1/2}. \quad (2.13)$$

Но в процессе доказательства леммы 8 было установлено, что

$$\left\| \tau \rho(z) - \tau \rho^m(z) \right\|_{L_2} \leq C(n; \alpha; \gamma) m^{-n} \omega(m^{-1}).$$

Тогда получаем

$$\begin{aligned} \left\| L_1^{(\Delta p)}(\Delta p_m^+(z)) + \tau \rho(z) \right\|_{L_2} &\leq \left\| L_1^{(\Delta p)}(\Delta p_m^+(z)) + \tau \rho^m(z) \right\|_{L_2} + \\ &+ \left\| \tau \rho(z) - \tau \rho^m(z) \right\|_{L_2} \leq \varepsilon + C(n; \alpha; \gamma) m^{-n} \omega(m^{-1}). \end{aligned} \quad (2.14)$$

Установленные неравенства (2.13) и (2.14) означают, что приближенные решения $\Delta p_m^+(z)$ при больших m дают малую невязку в метрике пространства $L_2[-a, \infty)$ дифференциальному уравнению (1.21), а также хорошо приближают условия (1.22).

Отметим, что в этом разделе установлен не только факт сходимости по функционалу, но и получена оценка (2.12).

Дадим теперь условия сходимости ряда Фурье-Лагерра в точке $z = 0$. Для этого воспользуемся следующей леммой.

Лемма 9. [92] Если $\rho(z) \in W^{2n} H_\omega^*$, то для ее коэффициентов Фурье-Лагерра справедлива асимптотическая формула

$$C_m^\rho = O\left(m^{-(\alpha+2n)/2-1/4}\right) \omega\left(m^{-1/2}\right), \quad (2.15)$$

причем константа, входящая в остаточный член, зависит только от α и n .

Далее отметим следующее известное предложение для многочленов Чебышева-Лагерра [90], которым воспользуемся:

$$c_1 m^\alpha \leq L_m(0; \alpha) \leq c_2 m^\alpha, \quad m = 0, 1, 2, \dots \quad (2.16)$$

Здесь c_1 и c_2 - некоторые фиксированные положительные постоянные, зависящие, быть может, только от α .

С помощью соотношений (2.15) и (2.16) легко устанавливается справедливость следующего результата.

Лемма 10. Пусть функция $\rho(z)$ для любого $n \geq 1$ $\rho(z) \in W^{2n} H_\omega^*$, тогда для отклонения сумм Фурье-Лагерра справедлива следующая оценка:

$$|\rho(0) - S_m(\rho; 0)| = O\left(m^{\frac{(\alpha-2n)+3}{2} + \frac{3}{4}}\right) \omega(m^{-1/2}) \quad (2.17)$$

при $n > \alpha/2 + 3/4$.

Доказательство. Пусть функция $\rho(z)$ для любого $n \geq 1$ $\rho(z) \in W^{2n} H_\omega^*$, $\alpha > -1/2$, тогда в точке $z = 0$ имеем

$$\rho(0) = \sum_{k=0}^{\infty} c_k^\rho(\gamma, \alpha) L_k(0; \alpha).$$

Тогда в силу (2.15), (2.16) и $\sum_{k=m}^{\infty} k^{-\mu} = O(m^{-\mu+1})$ при $\mu > 1$ для отклонения сумм

Фурье-Лагерра находим

$$\begin{aligned} \Delta(\rho; 0) &= \rho(0) - S_{m-1}(\rho; 0) = \sum_{k=m}^{\infty} c_k^\rho(\gamma, \alpha) L_k(0; \alpha) = \\ &= O(1) \sum_{k=m}^{\infty} k^{\frac{(\alpha-2n)-1}{2} + \frac{1}{4}} \omega(k^{-1/2}) = O\left(m^{\frac{(\alpha-2n)+3}{2} + \frac{3}{4}}\right) \omega(m^{-1/2}). \end{aligned}$$

Заметим, что последнее имеет место если $n > \alpha/2 + 3/4$. Ясно, что если функция $\rho(z)$ бесконечное число раз непрерывно дифференцируема, то при любом фиксированном $\alpha > -1/2$ всегда можно подобрать $n = n_0$ так, начиная с которого, бу-

дет сходиться ряд $\sum_{k=0}^{\infty} k^{\frac{(\alpha-2n)-1}{2} + \frac{1}{4}} \omega(k^{-1/2})$. Т.е. в этом случае будем учитывать, что

оценка (2.17) справедлива при любом $n > \alpha/2 + 3/4$.

Лемма доказана.

Используя результат леммы 10, получим оценку для функционала $J(C_m^{p+})$.

Теорема 5. Пусть функция $\rho(z) \in \tilde{W}_\omega^n(D)$ и имеет непрерывные производные до порядка $2n > \alpha + 3/2$. Для $t \geq 4$ обозначим через C_m^{p+} нормальное псевдорешение – решение задачи минимизации функционала $J(C^p)$, построенного с помощью проектирования на подпространство с базисом из первых t модифици-

рованных функций Лагерра. Тогда последовательность $\{C_m^{p^+}\}$ будет минимизирующей для функционала $J(C^p)$ и

$$J(C_m^{p^+}) \leq C(n; \alpha; \gamma) m^{-2n+\alpha+5/2} \omega^2(m^{-1}), \quad m \rightarrow \infty. \quad (2.18)$$

Доказательство. Фиксируем произвольное $m \geq 4$. Так как $C_m^{p^+}$ является наименьшим значением неотрицательного функционала $J(C^p)$, справедливо неравенство

$$0 \leq J(C_m^{p^+}) \leq J(C^p).$$

Используя соотношение (2.17), получим оценку для функционала $\sqrt{J(C_m^{p^+})}$.

Тогда имеем

$$\begin{aligned} 0 \leq \sqrt{J(C_m^{p^+})} &\leq \sqrt{J(C^p)} \leq C_0 m^{-n} \omega(m^{-1}) + C_2 m^{-n} \omega(m^{-1}) + \\ &+ \tilde{C}_1(n; \alpha; \gamma) m^{-(2n+1-\alpha-1)/2+3/4} \omega(m^{-1/2}) + \tilde{C}_2(n; \alpha; \gamma) m^{-(2n+2-\alpha)/2+3/4} \omega(m^{-1/2}) \leq \\ &\leq C m^{-(2n-\alpha)/2+5/4} \omega(m^{-1}) \rightarrow 0, \quad m \rightarrow \infty. \end{aligned}$$

т.е. последовательность $\{C_m^{p^+}\}$ будет минимизирующей для функционала $J(C^p)$.

Теорема доказана.

Замечание 3. Если $\alpha = 0$, то при любом $n \geq 1$ справедлива оценка для функционала $J(C_m^{p^+})$:

$$J(C_m^{p^+}) \leq C(n; \alpha; \gamma) m^{-2n+5/2} \omega^2(m^{-1}), \quad m \rightarrow \infty.$$

Замечание 4. Если функция $\rho(z)$ имеет непрерывные производные до порядка $n \geq 2$ включительно, принадлежащие пространству $L_2[0, \infty)$, то можно установить результат, аналогичный теореме 5.

Теорема 6. Пусть функция $\rho(z)$ имеет непрерывные производные до порядка n . Для $m \geq 4$ обозначим через $C_m^{p^+}$ нормальное псевдорешение – решение

задачи минимизации функционала $J(C^p)$, построенного с помощью проектирования на подпространство с базисом из первых m модифицированных функций Лагерра. Тогда последовательность $\{C_m^{p^+}\}$ будет минимизирующей для функционала $J(C^p)$ и

$$J(C_m^{p^+}) \leq \begin{cases} C(n; \alpha; \gamma) m^{-n+\alpha+5/2} \omega^2(m^{-1}), & \alpha \geq 1/2, n > \alpha + 3/2, \\ C(n; \alpha; \gamma) m^{-n+3} \omega^2(m^{-1}), & -1/2 < \alpha < 1/2, n > 2, m \rightarrow \infty. \end{cases}$$

Доказательство. Фиксируем произвольное $m \geq 4$. Поскольку функция $\rho(z)$ имеет непрерывные производные до порядка $n \geq 2$ включительно, принадлежащие пространству $L_2[0, \infty)$, тогда $\rho(z) \in \tilde{W}_\omega^{[n/2]-1}(D)$ и $\Delta p(z) \in \tilde{W}_\omega^{[n/2]}(D)$ (см. замечание 2).

Используя соотношение (2.17), получим оценку для функционала $\sqrt{J(C_m^{p^+})}$.

Тогда имеем

$$\begin{aligned} 0 &\leq \sqrt{J(C_m^{p^+})} \leq \sqrt{J(C^p)} \leq C_0 m^{-[n/2]+1} \omega(m^{-1}) + C_2 m^{-[n/2]+1} \omega(m^{-1}) + \\ &+ C_3(n; \alpha; \gamma) m^{-(n+1-\alpha-1)/2+3/4} \omega(m^{-1/2}) + C_4(n; \alpha; \gamma) m^{-(n+2-\alpha)/2+3/4} \omega(m^{-1/2}) \leq \\ &\leq \tilde{C}_1 m^{-n/2+3/2} \omega(m^{-1}) + \tilde{C}_2 m^{-(n-\alpha)/2+5/4} \omega(m^{-1}) \leq \\ &\leq \begin{cases} C(n; \alpha; \gamma) m^{-(n-\alpha)/2+5/4} \omega(m^{-1}) \rightarrow 0, & \alpha \geq 1/2, n > \alpha + 3/2, \\ C(n; \alpha; \gamma) m^{-(n-3)/2} \omega(m^{-1}) \rightarrow 0, & -1/2 < \alpha < 1/2, n > 2, m \rightarrow \infty. \end{cases} \end{aligned}$$

т.е. последовательность $\{C_m^{p^+}\}$ будет минимизирующей для функционала $J(C^p)$.

Теорема доказана.

2.3. Влияние погрешностей и условие вычислительной устойчивости

Важнейшей характеристикой алгоритмов решения приближенных уравнений является их вычислительная устойчивость. Следует отметить, что приведенная в данной работе схема проекционной аппроксимации вычислительно неустойчива: небольшие погрешности в исходной информации или небольшие погрешности, возникающие в процессе вычислений, могут сильно отклонить аппроксимированную систему от исходной, а решение, полученной из аппроксимированной системы при увеличении m может неограниченно отклоняться от точного. Это явление хорошо известно (см., например, [112]), и объясняется неограниченностью оператора дифференцирования.

Если же в функционал $J(C^p)$ внести дополнительную погрешность – заменить функцию $\rho(z)$ на некоторую возмущенную функцию $\tilde{\rho}(z)$, то, очевидно, что при фиксированном уровне погрешностей повышать неограниченно величину m в функционале $J(C^p)$ нельзя. Эта ситуация является стандартной для некорректно поставленных задач, в которых добиться получения приближенных решений, сходящихся к точному, можно лишь при условии согласования размерности аппроксимирующего подпространства m с уровнем погрешностей σ [113-115].

Установим условия согласования между уровнем погрешностей и возможным выбором размерности аппроксимирующего подпространства m для изложенного проекционного метода.

Итак, считаем, что вычисление коэффициентов Фурье по модифицированным функциям Лагерра функции $\rho(z)$ производится с некоторой погрешностью

$\sigma > 0$. Тогда вместо минимизации функционала $J(C^p)$ фактически минимизируется функционал

$$\tilde{J}(C^p) = \left\| \tilde{L}_1^{(\Delta p)}(\Delta p^m(z)) + \tau \tilde{\rho}^m(z) \right\|_{L_2}^2 + \left(\tilde{L}_2^{(\Delta p)}(\Delta p^m(z)) \Big|_{z=0} \right)^2. \quad (2.19)$$

У функционалов $J(C^p)$ и $\tilde{J}(C^p)$ отличаются лишь первые слагаемые

$$I(C^p) = \left\| \tilde{L}_1^{(\Delta p)} \Delta p^m + \tau \rho^m \right\|_{L_2}^2, \quad \tilde{I}(C^p) = \left\| \tilde{L}_1^{(\Delta p)} \Delta p^m + \tau \tilde{\rho}^m \right\|_{L_2}^2,$$

в которых теоретическое (точное) разложение $\rho^m(z)$ заменено на приближенное $\tilde{\rho}^m(z)$.

Известно [116], что минимизирующая последовательность для функционала $\tilde{I}(C^p)$ может быть минимизирующей при различных погрешностях заданного уровня и для функционала $I(C^p)$ лишь при условии малости возмущений в операторе и свободном члене:

$$\left\| \tau \rho^m - \tau \tilde{\rho}^m \right\|_{L_2} \leq \zeta_m \rightarrow 0, \quad \text{при } m \rightarrow \infty. \quad (2.20)$$

Но тогда необходимым условием для того, чтобы минимизирующая последовательность для функционала $\tilde{J}(C^p)$ была минимизирующей при различных погрешностях заданного уровня и для функционала $J(C^p)$, является условие (2.20).

Установим зависимость величины ζ_m от уровня погрешности в коэффициентах Фурье по модифицированным функциям Лагерра σ и величины m .

Далее в силу соотношения $\frac{m!}{\Gamma(\alpha + m + 1)} = m^{-\alpha} (1 + O(m^{-1}))$ для функций Лагерра

имеем:

$$\begin{aligned}
\|\tau\rho^m - \tau\tilde{\rho}^m\|_{L_2} &= \left\| \sum_{i=1}^m \tau(c_i^p - \tilde{c}_i^p)\varphi_i(z) \right\|_{L_2} = \left(\sum_{i=1}^m \tau^2(c_i^p - \tilde{c}_i^p)^2 \int_0^\infty (\gamma z)^\alpha \varphi_i^2(z) d(\gamma(z)) \right)^{1/2} = \\
&= \left(\sum_{i=1}^m \tau^2(c_i^p - \tilde{c}_i^p)^2 \frac{\Gamma(\alpha + i + 1)}{i!} \right)^{1/2} = \left(\sum_{i=1}^m \tau^2(c_i^p - \tilde{c}_i^p)^2 \frac{1}{i^{-\alpha}(1 + O(i^{-1}))} \right)^{1/2} \leq \\
&\leq \tau\sigma \left(\sum_{i=1}^m i^\alpha \right)^{1/2}.
\end{aligned}$$

Тогда имеем

$$\|\tau\rho^m - \tau\tilde{\rho}^m\|_{L_2} \leq \tau\sigma \left(\sum_{i=1}^m i^\alpha \right)^{1/2} \leq \begin{cases} \tau\sigma m^{(\alpha+1)/2}, & \alpha \geq 0, \\ \tau\sigma m^{1/2}, & -1/2 < \alpha < 0. \end{cases} \quad (2.21)$$

Но из установленной оценки (2.21) и ее порядковой неулутшаемости вытекает, что при постоянном уровне погрешностей вычисления коэффициентов Фурье по модифицированным функциям Лагерра увеличивать m можно лишь до некоторого предела. Но при этом нельзя достичь высокой точности аппроксимации в силу погрешностей метода – напомним, что в силу утверждения теоремы 5 наименьшее значение функционала даже при точной информации убывает к нулю со скоростью $m^{-2n+\alpha+5/2}\omega^2(m^{-1})$. Таким образом, применяя изложенную схему, получить сколь угодно малые значения функционала $J(C^p)$ можно лишь в случае, когда увеличение размерности аппроксимирующего подпространства сопровождается повышением точности вычисления коэффициентов Фурье по модифицированным функциям Лагерра функции $\rho(z)$, т.е. величина σ должна зависеть от m : $\sigma = \sigma_m$, и убывать к нулю при $m \rightarrow \infty$.

Используя установленную оценку (2.21) при $\alpha \geq 0$, приходим к следующему результату.

Теорема 7. Пусть функция $\rho(z) \in \tilde{W}_\omega^n(D)$ и имеет непрерывные производные до порядка $2n > \alpha + 3/2$. Предположим, что при увеличении числа m погрешность σ_m в вычислении коэффициентов Фурье-Лагерра функции $\rho(z)$ можно неограниченно уменьшать так, что

$$\lim_{m \rightarrow \infty} \sigma_m m^{(\alpha+1)/2} = 0. \quad (2.22)$$

Тогда, если для $m \geq 4$ обозначить через \tilde{C}_m^{p+} решение задачи минимизации возмущенного функционала $\tilde{J}(C^p)$, построенного с помощью проектирования на подпространство с базисом из первых m модифицированных функций Лагерра, то последовательность $\{\tilde{C}_m^{p+}\}$ будет минимизирующей и для функционала $J(C^p)$.

Оценка, фигурирующая в теореме 5, и условие (2.22) теоремы 6 являются порядковыми, и применять на практике их нельзя, поскольку оценка существенно зависит от неизвестного постоянного множителя. Если этот множитель велик, то даже при практическом отсутствии погрешностей, для получения достаточно хорошего приближения к точному нужно брать большое m . В то же время, если постоянный множитель очень мал, то даже при наличии заметных погрешностей $\sigma > 0$ можно найти приемлемое приближение при небольшом m .

К сожалению, получить оценки такого типа с точными постоянными практически невозможно, поскольку они зависят от очень большого числа различных факторов. Таким образом, полученные результаты имеют лишь теоретическое значение и означают, что при фиксированном малом уровне погрешностей σ_m при увеличении размерности аппроксимирующего подпространства m до некоторого предела m_0 нормальные псевдорешения \tilde{C}_m^{p+} будут доставлять все меньшие значения функционалу $J(\tilde{C}_m^{p+})$, поскольку погрешности метода будут уменьшаться, но, начиная с m_0 , дальнейшее увеличение m может привести к быстрому росту погрешностей, возникающих за счет неточностей в коэффициентах Фурье-Лагерра, что приведет к росту $J(\tilde{C}_m^{p+})$.

2.4. Проекционная аппроксимация модели коллективного движения носителей заряда, основанная на применении классического метода наименьших квадратов

Согласно классическому методу МНК [117] приближенное решение $\Delta p^m(z)$ ищется из требования, чтобы оно доставляло минимум функционалу:

$$J(\Delta p^m(z)) = \left\| L_1^{(\Delta p)}(\Delta p^m(z)) + \tau \rho(z) \right\|_{L_2}^2 + k \left(L_2^{(\Delta p)}(\Delta p^m(z)) \Big|_{z=0} \right)^2,$$

здесь k - весовая константа.

Предварительно опишем входящие дифференциальные операторы:

$$\begin{aligned} L_1^{(\Delta p)}(\Delta p^m(z)) &= L_1^{(\Delta p)} \left[\sum_{i=0}^{m-1} c_i^p \varphi_i^{\alpha, \gamma}(z) \right] = \sum_{i=0}^{m-1} c_i^p L_1^{(\Delta p)}(\varphi_i^{\alpha, \gamma}(z)) = \\ &= \sum_{i=0}^{m-1} c_i^p \varphi_i^{L_1^{(\Delta p)}}(z) \end{aligned}$$

и

$$\begin{aligned} L_2^{(\Delta p)}(\Delta p^m(z)) \Big|_{z=0} &= L_2^{(\Delta p)} \left[\sum_{i=0}^{m-1} c_i^p \varphi_i^{\alpha, \gamma}(z) \right] \Big|_{z=0} = \sum_{i=0}^{m-1} c_i^p L_2^{(\Delta p)}(\varphi_i^{\alpha, \gamma}(z)) \Big|_{z=0} = \\ &= \sum_{i=0}^{m-1} c_i^p \varphi_i^{L_2^{(\Delta p)}}(z) \Big|_{z=0}. \end{aligned}$$

Здесь $\varphi_i^{L_1^{(\Delta p)}}(z)$ - образ i -й базисной функции при воздействии линейного дифференциального оператора $L_1^{(\Delta p)}$, $\varphi_i^{L_2^{(\Delta p)}}(z)$ - образ i -й базисной функции при воз-

действию оператора начальных условий $L_2^{(\Delta p)}$. Таким образом, функционал $J(\Delta p^m(z))$ примет вид:

$$J(\Delta p^m(z)) = \int_0^\infty (\gamma z)^\alpha \left(\tau \rho(z) + \sum_{i=0}^{m-1} c_i^p \varphi_i^{L_1^{(\Delta p)}}(z) \right)^2 d\gamma z + \\ + k \left(\sum_{i=0}^{m-1} c_i^p \varphi_i^{L_2^{(\Delta p)}}(z) \Big|_{z=0} \right)^2$$

Невязка имеет в развернутом виде следующее представление:

$$J(\Delta p^m(z)) = \int_0^\infty (\gamma z)^\alpha (\tau \rho(z))^2 d\gamma z - \\ - 2 \sum_{i=0}^{m-1} c_i^p \int_0^\infty (\gamma z)^\alpha (\tau \rho(z)) \varphi_i^{L_1^{(\Delta p)}}(z) d\gamma z + \\ + \sum_{i=0}^{m-1} c_i^p \sum_{j=0}^{m-1} c_j^p \int_0^\infty (\gamma z)^\alpha \varphi_i^{L_1^{(\Delta p)}}(z) \varphi_j^{L_1^{(\Delta p)}}(z) d\gamma z + \\ + k \varphi_i^{L_2^{(\Delta p)}}(z) \varphi_j^{L_2^{(\Delta p)}}(z) \Big|_{z=0}.$$

После преобразования получим

$$J(\Delta p^m(z)) = \int_0^\infty (\gamma z)^\alpha (\tau \rho(z))^2 d\gamma z - \\ - 2 \sum_{i=0}^{m-1} c_i^p U_i + \sum_{i=0}^{m-1} c_i^p \sum_{j=0}^{m-1} c_j^p \Phi_{i,j}^{L_1^{(\Delta p)}} + \Phi_{i,j}^{L_2^{(\Delta p)}},$$

где

$$U_i = \int_0^\infty (\gamma z)^\alpha (-\tau \rho(z)) \varphi_i^{L_1^{(\Delta p)}}(z) d\gamma z, \\ \Phi_{i,j}^{L_1^{(\Delta p)}} = \int_0^\infty (\gamma z)^\alpha \varphi_i^{L_1^{(\Delta p)}}(z) \varphi_j^{L_1^{(\Delta p)}}(z) d\gamma z, \\ \Phi_{i,j}^{L_2^{(\Delta p)}} = \varphi_i^{L_2^{(\Delta p)}}(z) \varphi_j^{L_2^{(\Delta p)}}(z) \Big|_{z=0}, \quad i, j = \overline{0, m-1}.$$

Из последнего выражения следует, что относительно c_i^p функционал J является квадратичным. Минимум функционала J по переменным c_i^p достигается в

стационарной точке, которая находится из системы линейных алгебраических уравнений:

$$\frac{\partial J}{\partial c_i^p} = 0, \quad i = \overline{0, m-1}. \quad (2.23)$$

В развернутом виде (2.23) запишем в виде:

$$\begin{aligned} & -2 \int_0^\infty (\gamma z)^\alpha \left[-\tau \rho(z) - \sum_{i=0}^{m-1} c_i^p \varphi_i^{L_1^{(\Delta p)}}(z) \right] \varphi_j^{L_1^{(\Delta p)}}(z) d\gamma z + \\ & + 2k \sum_{i=0}^{m-1} c_i^p \varphi_i^{L_2^{(\Delta p)}}(z) \varphi_j^{L_2^{(\Delta p)}}(z) \Big|_{z=0} = 0, \quad j = \overline{0, m-1}. \end{aligned} \quad (2.24)$$

После преобразований (2.24) получим:

$$\sum_{i=0}^{m-1} c_i^p \left[\Phi_{i,j}^{L_1^{(\Delta p)}} + k \Phi_{i,j}^{L_2^{(\Delta p)}} \right] = U_j, \quad j = \overline{0, m-1}. \quad (2.25)$$

Систему (2.25) можно записать также и в матричном виде. Пусть \tilde{c}_i^p - решение в общем случае численной системы (2.25). С учетом последних соотношений можно найти минимум функционала J по переменным \tilde{c}_i^p , $i = \overline{0, m-1}$:

$$J = \int_0^\infty (\gamma z)^\alpha (\tau \rho(z))^2 d\gamma z - \sum_{i=0}^{m-1} \tilde{c}_i^p U_i.$$

Ясно, что все оценки, полученные в пунктах 2.2 и 2.3 справедливы и для классического метода МНК.

Подчеркнем важную черту использования МНК [117]: элементы системы базисных функций (приближенное решение) не обязаны удовлетворять граничным условиям, не требуется самосопряженности оператора, стоящего в левой части уравнения (1.21), и, наконец, функцию, входящую в правую часть уравнения (1.21) можно задавать лишь в смысле L_2 , а не поточечно. Некоторым недостатком с точки зрения практических вычислений является то, что матрица, которая используется для определения приближенного решения (2.2), (2.25) имеет число обусловленности равно приблизительно квадрату числа обусловленности, соответствующей матрицы в методе Галеркина.

2.5. Выводы

1) Предложена схема проекционной аппроксимации, основанная на использовании матричного оператора дифференцирования, и применении метода наименьших квадратов для дифференциального уравнения диффузии; дана порядковая оценка погрешности и получено условие вычислительной устойчивости для этой проекционной схемы в виде предельного соотношения.

2) Алгоритмически данный метод прост. Как видно из приведенной схемы (2.2), матрица A_p и столбец G легко вычисляются с помощью матричного оператора дифференцирования. В то же время, этот метод дает лишь приближения в среднеквадратичной метрике и в общем случае вычислительно неустойчив. Однако в случае применения изложенного метода и невозможности увеличивать точность вычисления коэффициентов Фурье-Лагерра, следует начинать с малых m ($m = 4, 5$ и т.п.), увеличивая затем m на единицу, получать для каждого m псевдорешения \tilde{C}_m^{p+} , вычислять величину $J(\tilde{C}_m^{p+})$, и сравнивать ее с величиной функционала на предыдущем шаге $J(\tilde{C}_{m-1}^{p+})$. Как только будет

$$J(\tilde{C}_m^{p+}) > J(\tilde{C}_{m-1}^{p+}),$$

вычисления следует прекратить, а в качестве наилучшего приближения к точному решению при данном уровне погрешностей следует принять функцию $\Delta p^{m-1}(z)$. Если есть возможность снизить уровень погрешностей в вычислении коэффициентов Фурье-Лагерра, то его необходимо осуществить, а затем повторить ту же процедуру, но это можно сделать, начиная с большего m , или увеличивая m не на единицу, а на большую величину. Тем не менее, изложенный метод является уни-

версальным, и проходит для любой формы краевых или начальных условий. Действительно, с помощью матричных операторов легко аппроксимировать любое краевое (начальное) условие.

3) При применении изложенного метода всегда следует делать проверку тем или иным способом.

4) Сравнивая алгоритмы расчета матриц в классическом МНК (2.25) и модифицированном МНК (2.2), которые используются для определения приближенного решения исходной задачи (1.21), (1.22), делаем вывод, что переход к системе (2.2) целесообразен с вычислительной и методической точек зрения, поскольку уравнение (1.21) и начальное условие (1.22) автоматически заменяются на равносильное им алгебраическое уравнение. Действительно, сравнивая уравнения (1.21), (1.22) и (2.2) видим, что третье получается из первых двух заменой непрерывных функций на столбцы из коэффициентов их разложений, а операторов, действующих в пространстве функций, на соответствующие им матричные операторы. Следует отметить, что при изменении дифференциального оператора в левой части уравнения (1.21) (для определенности рассмотрим стационарный случай) матрица системы уравнений (2.2) заново будет рассчитана или только с помощью элементарных операций над матрицами, т.е. с помощью уже вычисленной ранее матрицы дифференцирования D_m или, если необходимо использовать большую размерность аппроксимирующего подпространства $\tilde{m} > m$, то с помощью матрицы дифференцирования $D_{\tilde{m}}$, нахождение которой осуществляется с помощью добавления новых элементов к ранее вычисленной матрице D_m , а расчет матрицы системы уравнений (2.25) необходимо будет провести заново с помощью операций дифференцирования и интегрирования. Те же замечания касаются расчета столбцов, стоящих в правых частях систем (2.2) и (2.25). То модифицированный метод МНК наиболее прост, нагляден и предотвращает от ряда ошибок, а также аналогичен операционному методу, являющемуся одним из основных при исследовании стационарных систем, но в отличие от него область его применения

значительно шире, поскольку охватывает нестационарные системы и линейные дифференциальные уравнения в частных производных.

5) Затраты машинного времени на расчет распределения ННЗ по глубине для параметров, характерных для полупроводниковых материалов из кремния, арсенида галлия и теллурида кадмия с использованием модифицированного МНК составили приблизительно в 3 раза быстрее по сравнению с применением классического МНК.

6) По сравнению с классическим МНК, использование модифицированного МНК в ряде случаев может привести к возникновению дополнительных погрешностей (например, для нестационарных систем).

ГЛАВА 3. РЕШЕНИЕ ЗАДАЧИ СТАТИСТИЧЕСКОГО АНАЛИЗА ДИФФУЗИИ СО СЛУЧАЙНЫМИ ЭЛЕКТРОФИЗИЧЕСКИМИ ПАРАМЕТРАМИ

3.1. Использование модели коллективного движения неосновных носителей заряда для нахождения проекционной характеристики математического ожидания их распределения по глубине

Задачу статистического анализа будем рассматривать в смысле определения статистических характеристик решения уравнения (1.21), (1.22) при условии, что время жизни τ , коэффициент диффузии D , и скорость поверхностной рекомбинации ν_s ННЗ являются случайными величинами и имеют гауссов закон распределения. При этом нас будет интересовать вопрос влияния случайных изменений каждого из указанных коэффициентов исходной модели на распределение ННЗ по глубине.

Далее в работе будет подробно рассмотрен случай, когда коэффициент τ , входящий в дифференциальное уравнение (1.21), (1.22), является случайной величиной. Для остальных случайных коэффициентов D и ν_s рассмотрение проводится аналогично, поэтому приводятся только результаты такого анализа.

Если полученная выше проекционная модель (2.2) включает случайный параметр τ , потому решение $\Delta p(z)$ будет случайной функцией. Таким образом, возникает задача статистического анализа, которая в данной работе формулирует-

ся следующим образом: необходимо определить статистические характеристики решения уравнения (1.21), (1.22) $\Delta p(z)$, а именно, математическое ожидание и автокорреляционную функцию, при условии, что время жизни τ является случайной величиной, которая распределена по нормальному закону, с математическим ожиданием m_τ и дисперсией D_τ .

Положим $\tau = \bar{\tau} + \Delta\tau$, где $\bar{\tau} = m_\tau$, а $\Delta\tau$ – случайная величина с нулевым математическим ожиданием и дисперсией D_τ , тогда среднее квадратическое отклонение (СКО) $\sigma_\tau = \sqrt{D_\tau}$. Справедливо следующее (см. [118]): $P(|\tau - m_\tau| < 3 \cdot \sigma_\tau) = 0,9973$. Здесь $P(\cdot)$ означает вероятность.

Для решения сформулированной задачи анализа воспользуемся проекционной моделью (2.2). Полученное решение требует осреднения проекционной модели.

Поскольку решение дифференциального уравнения (1.21), (1.22) $\Delta p(z)$ представляет собой непрерывную функцию коэффициентов и начальных условий [119], то на основе теоремы Фубини при весьма общих предположениях из уравнения (2.4) находим проекционную характеристику математического ожидания решения уравнения (1.21), (1.22):

$$C^{m_{p^+}} = \int_{\tau_1}^{\tau_2} C^{p^+}(\tau) f(\tau) d\tau = M[C^{p^+}] = M\left[\left(A_p^T A_p\right)^{-1} A_p^T G\right], \quad (3.1)$$

где функция $f(\tau) = \frac{c}{\sigma_\tau \sqrt{2\pi}} \exp\left(-\frac{(\tau - m_\tau)^2}{2\sigma_\tau^2}\right)$ представляет собой плотность нормального усеченного закона распределения [120] случайной величины τ ,

$$c = \frac{1}{\Phi\left(\frac{\tau_2 - m_\tau}{\sigma_\tau}\right) - \Phi\left(\frac{\tau_1 - m_\tau}{\sigma_\tau}\right)}, \quad \text{где } \Phi(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^x \exp(-z^2/2) dz - \text{ функция нор-}$$

мального распределения. Символ $M[\cdot]$ обозначает операцию нахождения математического ожидания.

Из уравнения (2.4) находим

$$M \left[C^{p^+} \right] = M \left[\left(A_p^T A_p \right)^{-1} A_p^T G \right]. \quad (3.2)$$

Обозначим

$$W_p = A_p^T A_p, \quad (3.3)$$

тогда имеем:

$$W_p = \left[D\tau \left(D_m^2 \right)^T - E \quad \left(D_m \right)^T \varphi^m(0) - D^{-1} \nu_s \varphi^m(0) \right] \times \\ \left[\begin{array}{c} D\tau D_m^2 - E \\ \left(\varphi^m(0) \right)^T D_m - D^{-1} \nu_s \left(\varphi^m(0) \right)^T \end{array} \right]. \quad (3.4)$$

После такого перемножения выражение (3.3) с учетом (3.4) примет вид:

$$W_p = \tau^2 W_1 + \tau W_2 + W_3,$$

где

$$W_1 = D^2 \left(D_m^2 \right)^T D_m^2, \quad W_2 = -D \left(D_m^2 \right)^T - D D_m^2, \\ W_3 = D^{-2} \nu_s^2 \varphi^m(0) \left(\varphi^m(0) \right)^T - D^{-1} \nu_s \varphi^m(0) \left(\varphi^m(0) \right)^T D_m - \\ - D^{-1} \nu_s \left(D_m \right)^T \varphi^m(0) \left(\varphi^m(0) \right)^T + E + \left(D_m \right)^T \varphi^m(0) \left(\varphi^m(0) \right)^T D_m.$$

Найдем $A_p^T G$:

$$Y_p = A_p^T G = -D\tau^2 \left(D_m^2 \right)^T C_m^\rho + \tau C_m^\rho = \tau^2 Y_1 + \tau Y_2, \quad (3.5)$$

где $Y_1 = D \left(D_m^2 \right)^T C_m^\rho$ и $Y_2 = C_m^\rho$.

Тогда выражение (3.2) с учетом (3.5) примет следующий вид:

$$M \left[C^{p^+} \right] = M \left[\left(A_p^T A_p \right)^{-1} Y_p \right]. \quad (3.6)$$

Для того чтобы найти математическое ожидание распределения по глубине ННЗ, необходимо найти математическое ожидание от обратной случайной матрицы, умноженной на некоторую случайную матрицу Y_p .

Для нахождения математического ожидания от обратной случайной матрицы, умноженной на случайную матрицу Y_p , можно обратную матрицу разложить

в ряд, представляющий собой геометрическую прогрессию, осреднить которую значительно проще [61, 121], то есть:

$$M\left[W_p^{-1}Y_p\right] = M\left[\left(E - (E - W_p)\right)^{-1}Y_p\right] = M\left[\sum_{\nu=0}^{\infty}(E - W_p)^{\nu}Y_p\right] = \sum_{\nu=0}^{\infty}M\left[(E - W_p)^{\nu}Y_p\right].$$

Обозначим

$$\tilde{W}_p = E - W_p,$$

тогда

$$\begin{aligned} M\left[C^{p^+}\right] &= M\left[W_p^{-1}Y_p\right] = M\left[\left(E - \tilde{W}_p\right)^{-1}Y_p\right] = \sum_{\nu=0}^{\infty}M\left[\left(\tilde{W}_p^{\nu}\right)Y_p\right] = \\ &= \sum_{\nu=0}^{\infty}M\left[\left(E - \tau^2W_1 - \tau W_2 - W_3\right)^{\nu}Y_p\right] = E + M\left[\left(E - \tau^2W_1 - \tau W_2 - W_3\right)Y_p\right] + \quad (3.7) \\ &+ M\left[\left(E - \tau^2W_1 - \tau W_2 - W_3\right)^2Y_p\right] + \dots + M\left[\left(E - \tau^2W_1 - \tau W_2 - W_3\right)^{\nu}Y_p\right] + \dots \end{aligned}$$

Сравнивая последующее ν -е приближение в (3.7) с предыдущим, находим оценку абсолютной погрешности приближения матрицы-столбца $M\left[W_p^{-1}Y_p\right]$. Это дает возможность контролировать выполнение условия $\nu \leq \nu_0$, достигая наибольшей возможной точности приближения вблизи ν_0 .

Далее матрицу $\tilde{W}_p = E - W_p$ можно представить в виде суммы некоторой известной неслучайной матрицы \bar{W}_p и случайной матрицы W_p^{cl} . Это соответствует представлению случайного коэффициента τ в виде суммы неслучайной и случайной составляющей: $\tau = \bar{\tau} + \Delta\tau$, то есть,

$$\begin{aligned} \bar{W}_p &= E - \bar{\tau}^2W_1 - \bar{\tau}W_2 - W_3, \\ W_p^{cl} &= -2\bar{\tau}\Delta\tau W_1 - \Delta\tau^2W_1 - \Delta\tau W_2. \end{aligned}$$

Тогда имеем:

$$\begin{aligned} \left(E - \tilde{W}_p\right)^{-1} &= \left(E - \bar{W}_p - W_p^{cl}\right)^{-1} = \left[\left(E - \bar{W}_p\right) \cdot \left(E - \left(E - \bar{W}_p\right)^{-1}W_p^{cl}\right)\right]^{-1} = \\ &= \left(E - \left(E - \bar{W}_p\right)^{-1}W_p^{cl}\right)^{-1} \cdot \left(E - \bar{W}_p\right)^{-1}. \end{aligned}$$

Обозначим

$$W_{p^0} = (E - \bar{W}_p)^{-1},$$

где W_{p^0} – детерминированная матрица, тогда

$$(E - \tilde{W}_p(\Delta\tau))^{-1} Y_p = (E - W_{p^0} W_p^{cl}(\Delta\tau))^{-1} \cdot W_{p^0} Y_p \sim \sum_{\nu=0}^{\infty} (W_{p^0} W_p^{cl}(\Delta\tau))^{\nu} \cdot W_{p^0} Y_p. \quad (3.8)$$

Ряд (3.8) является асимптотическим разложением [122] вблизи $\Delta\tau = 0$ матрицы $(E - W_{p^0} W_p^{cl}(\Delta\tau))^{-1} \cdot W_{p^0} Y_p(\Delta\tau)$.

Известно, что асимптотические разложения можно формально умножать на ограниченные функции и формально интегрировать в окрестности точки $\Delta\tau = 0$ (см. [122-124]). Следует отметить, что асимптотические ряды играют важную роль как в теории дифференциальных уравнений [125, 126] так и в небесной механике.

Учитывая выражение (3.8), столбец $M \left[C^{p^+} \right]$ может быть формально представлен в виде:

$$\begin{aligned} M \left[C^{p^+} \right] &= \int_{\Delta\tau_1}^{\Delta\tau_2} (E - \tilde{W}_p(\Delta\tau))^{-1} Y_p(\Delta\tau) f(\Delta\tau) d(\Delta\tau) = M \left[(E - \tilde{W}_p)^{-1} Y_p \right] = \\ &= M \left[(E - W_{p^0} W_p^{cl})^{-1} W_{p^0} Y_p \right] = \sum_{\nu=0}^{\infty} M \left[(W_{p^0} W_p^{cl})^{\nu} W_{p^0} Y_p \right] = \\ &= \sum_{\nu=0}^{\infty} (W_{p^0})^{\nu} M \left[(-2\bar{\tau} \Delta\tau W_1 - \Delta\tau^2 W_1 - \Delta\tau W_2)^{\nu} W_{p^0} Y_p(\Delta\tau) \right], \end{aligned} \quad (3.9)$$

где $f(\Delta\tau)$ - плотность распределения случайной величины $\Delta\tau$.

Как показала практика [121], при решении многих практических задач разложение (3.7) оказывается расходящимся даже с номера $\nu = 1$. Ряд (3.9) также не во всех случаях является сходящимся уже с первых номеров приближений, поэтому требуемая точность приближения не обеспечивается. Это связано с тем, что все собственные значения матриц \tilde{W}_p и $W_{p^0} W_p^{cl}$ далеко не всегда по модулю меньше единицы. Члены такого ряда сначала быстро убывают по абсолютной величине, потом они возрастают до бесконечности.

Однако в ряде случаев частичные суммы расходящегося ряда (3.9) могут служить хорошими приближениями матрицы-столбца $M \left[C^{p^+} \right]$, в том или ином смысле «породившей» этот ряд, даже когда статистический разброс в коэффициентах уравнения составляет более 100% относительно их средних значений (см. [122]). Следует отметить практическую важность применения расходящихся рядов в приближенных вычислениях, достаточно упомянуть о том, что этим методом привычно пользуются астрономы для предвычисления положения небесных тел, причем точность получаемых результатов является вполне удовлетворительной [122].

3.2. Построение сходящихся матричных рядов, аппроксимирующих проекционные характеристики математического ожидания и автокорреляционной функции распределения неосновных носителей заряда по глубине

Перейдем непосредственно к алгоритму построения сходящихся матричных рядов, аппроксимирующих проекционные характеристики математического ожидания и автокорреляционной функции решения исходной задачи.

Для решения указанной проблемы воспользуемся методом, предложенным в [127, 128], который состоит в предварительной подготовке системы (2.2).

Перейдем от системы (2.2) к равносильной системе

$$W_p C^p = Y_p, \quad (3.10)$$

где

$$W_p = A_p^T A_p.$$

Известно [118], что справедливо следующее представление: $\tau = m_\tau + r\sqrt{D_\tau}$, где r – непрерывная случайная величина, распределенная по нормальному закону, и имеющая нулевое математическое ожидание и единичную дисперсию.

Известно [129], что сходимость матричных рядов можно оценить по сходимости соответствующих рядов из собственных значений, т.е. условием сходимости матричных рядов

$$(E - \tilde{W}_p(r_i))^{-1} = \sum_{\nu=0}^{\infty} (\tilde{W}_p(r_i))^\nu \quad \forall r_i \in [r_1, r_2] \quad (3.11)$$

является сходимость соответствующих рядов

$$(1 - \lambda_j(\tilde{W}_p(r_i)))^{-1} = \sum_{\nu=0}^{\infty} (\lambda_j(\tilde{W}_p(r_i)))^\nu \quad \forall r_i \in [r_1, r_2], j = \overline{1, m}, \quad (3.12)$$

где

$$\tilde{W}_p = E - W_p.$$

Таким образом, условием сходимости рядов (3.12), а, значит, и рядов (3.11) является выполнение условия: $|\lambda_j(\tilde{W}_p(r_i))| < 1 \quad \forall r_i \in [r_1, r_2], j = \overline{1, m}$.

В результате исследование сходимости матричного ряда

$$(E - \tilde{W}_p(r))^{-1} = \sum_{\nu=0}^{\infty} (\tilde{W}_p(r))^\nu \quad (3.13)$$

сводится к исследованию сходимости соответствующих рядов из собственных значений:

$$(1 - \lambda_j(r))^{-1} = \sum_{\nu=0}^{\infty} (\lambda_j(r))^\nu, \quad j = \overline{1, m}. \quad (3.14)$$

Из алгебры известно, что собственные значения $\lambda_j(r) \quad \forall j = \overline{1, m}$ являются непрерывными функциями переменной r [130], и ряды $\sum_{\nu=0}^{\infty} (\lambda_j(r))^\nu$ будут сходиться равномерно на отрезке $[r_1, r_2]$, если на этом отрезке будет выполнено условие:

$$|\lambda_j(r)| \leq K < 1, \quad \forall j = \overline{1, m}. \quad (3.15)$$

Если условие (3.15) выполняется $\forall r \in [r_1, r_2]$, то ряды (3.14) и соответствующий матричный ряд (3.13) будут равномерно сходиться на этом отрезке. Поэтому, если $\forall r \in [r_1, r_2]$ выполняется условие (3.15), то из того, что $P(r_1 \leq r \leq r_2) = 1$ следует, что $P(|\lambda_j(r)| \leq K < 1) = 1 \quad \forall j = \overline{1, m}$.

Поэтому из $P(|\lambda_j(r)| \leq K < 1) = 1 \quad \forall j = \overline{1, m}$ будет следовать, что ряды $\sum_{\nu=0}^{\infty} (\lambda_j(r))^\nu$ будут сходиться равномерно с вероятностью 1 [36] на отрезке $[r_1, r_2]$, а это повлечет за собой сходимость на этом отрезке с вероятностью 1 матричного ряда (3.13).

Тогда ряд (3.13) можно умножить на матрицу $Y_p(r)$ и на ограниченную функцию $f(r)$, представляющую собой плотность распределения случайной величины r , и проинтегрировать в пределах от r_1 до r_2 [131]:

$$\begin{aligned} \int_{r_1}^{r_2} (E - \tilde{W}_p(r))^{-1} Y_p(r) f(r) dr &= \int_{r_1}^{r_2} \sum_{\nu=0}^{\infty} (\tilde{W}_p(r))^\nu Y_p(r) f(r) dr = \\ &= \sum_{\nu=0}^{\infty} \int_{r_1}^{r_2} (\tilde{W}_p(r))^\nu Y_p(r) f(r) dr. \end{aligned} \quad (3.16)$$

Выражение (3.16) можно записать следующим образом:

$$\int_{r_1}^{r_2} (E - \tilde{W}_p(r))^{-1} Y_p(r) f(r) dr = M \left[(E - \tilde{W}_p(r))^{-1} Y_p(r) \right] = \sum_{\nu=0}^{\infty} M \left[(\tilde{W}_p(r))^\nu Y_p(r) \right].$$

Для выполнения условия: $|\lambda_j(r_i)| \leq K < 1 \quad \forall j = \overline{1, m} \quad \forall r_i \in [r_1, r_2]$ необходимо, чтобы каждая детерминированная матрица $W_p(r_i) \quad \forall r_i \in [r_1, r_2]$ в том или ином смысле была бы близка к единичной [127].

Если это условие не выполнено или плохо выполнено, то каждую систему

$$W_p(r_i) C^p = Y_p(r_i) \quad \forall r_i \in [r_1, r_2] \quad (3.17)$$

целесообразно предварительно подготовить к разложению в сходящийся матричный ряд.

Подготовка состоит в переходе от каждой системы из (3.17) к равносильной системе [127]

$$HW_p(r_i)C^p = HY_p(r_i) \quad \forall r_i \in [r_1, r_2],$$

где H – некоторая неособенная матрица, которая выбирается так, чтобы каждая матрица $HW_p(r_i) \forall r_i \in [r_1, r_2]$ была бы близка к единичной.

Выбор матрицы H может быть осуществлен с использованием частных особенностей данной системы.

Пусть мы имеем довольно поверхностные сведения о матрицах $W_p(r_i) \forall r_i \in [r_1, r_2]$.

Каждая матрица $W_p(r_i)$ является положительно определенной, т.к. имеет следующую структуру:

$$W_p(r_i) = A_p^T(r_i)A_p(r_i) \quad \forall r_i \in [r_1, r_2],$$

тогда каждая система из (3.17) $\forall r_i \in [r_1, r_2]$ может быть подготовлена к разложению в сходящийся матричный ряд [127].

Для оптимизации вычислительной схемы перейдем сначала от системы (3.10) к равносильной системе

$$W_{p_0}(r)W_p(r)C^p = W_{p_0}(r)Y_p, \quad (3.18)$$

где $W_{p_0}(r)$ – матрица, определяемая следующим образом:

$$W_{p_0}(r) = \exp(-r^2/\mu) \cdot W_0, \quad W_0 = (W_p(0))^{-1},$$

здесь $\mu > 0$ - параметр оптимизации.

Матрица $\hat{W}_p(r) = W_{p_0}(r)W_p(r)$ также является положительно определенной и имеет следующую структуру:

$$\hat{W}_p(r) = \exp(-r^2/\mu) \cdot W_0 \cdot (\tau^2(r)W_1 + \tau(r)W_2 + W_3),$$

тогда все собственные значения матрицы $\hat{W}_p(r)$ принадлежат некоторому конечному неотрицательному промежутку [127], то есть

$$\lambda_j(\hat{W}_p(r)) \in (m_1, M), \quad \forall r \in [r_1, r_2], \quad j = \overline{1, m}, \quad 0 \leq m_1 < M < \infty.$$

Определитель матрицы $\hat{W}_p(r)$ имеет вид:

$$\begin{aligned} D_k(r) &= |\hat{W}_p(r)| = \exp(-2mr^2/\mu) |\tau^2(r)W_0W_1 + \tau(r)W_0W_2 + W_0W_3| = \\ &= \exp(-2mr^2/\mu) |W_0W_p(r)|. \end{aligned}$$

Далее, обозначим

$$d_k(r) = |W_0W_p(r)|,$$

тогда

$$D_k(r) = \exp(-2mr^2/\mu) d_k(r).$$

Определитель $d_k(r)$ представляет собой многочлен степени k . Уравнение $d_k(r) = 0$ в силу основной теоремы алгебры имеет конечное число корней r_i , $i = \overline{1, k}$, причем некоторые из них могут быть действительными.

В силу того, что уравнение $\exp(-2mr^2/\mu) = 0$ не имеет корней, поэтому корнями уравнения $D_k(r) = 0$ будут корни уравнения $d_k(r) = 0$.

Случай $d_k(r) \equiv 0$ нестандартен для практических задач, то есть может иметь место лишь в специально подобранных исключительных примерах (см. [78]). Однако и в этом случае, если решение задачи существует (не обязательно единственное), то метод сходится к решению, ближайшему к начальному приближению (см [132, 133]), однако скорость сходимости приближенного решения к точному может быть сколь угодно медленной.

Поскольку матрица $\hat{W}_p(r) = W_{p_0}(r)W_p(r)$ из (3.18) $\forall r \in [r_1, r_2]$ положительно определена, поэтому систему (3.18) можно подготовить к виду [127]:

$$HW_{p_0}(r)W_p(r)C^p = HW_{p_0}(r)Y_p. \quad (3.19)$$

где

$$H = \frac{2}{\max_j \left(\max_r \left(\lambda_j \left(\hat{W}_p(r) \right) \right) \right) + \min_j \left(\min_r \left(\lambda_j \left(\hat{W}_p(r) \right) \right) \right)} E.$$

Перепишем систему (3.19) в виде

$$\left[E - \left(E - HW_{p_0}(r)W_p(r) \right) \right] C^p = HW_{p_0}(r)Y_p \quad (3.20)$$

Обозначим

$$\tilde{W}_p(r) = E - HW_{p_0}(r)W_p(r),$$

тогда (3.20) примет следующий вид:

$$\left[E - \tilde{W}_p(r) \right] C^p = HW_{p_0}(r)Y_p. \quad (3.21)$$

Из (3.21) находим:

$$C^{p+} = \left(E - \tilde{W}_p(r) \right)^{-1} HW_{p_0}(r)Y_p.$$

Тогда почти все собственные значения матрицы $\tilde{W}_p(r) = E - HW_{p_0}(r)W_p(r)$ будут заключены в открытом интервале $(-1,1)$ [127].

Поскольку $\forall r \in [r_1, r_2]$ выполняется условие: $|\lambda_j(\tilde{W}_p(r))| \leq K < 1 \quad \forall j = \overline{1, m}$, за исключением, быть может конечного числа r_i , $i = \overline{1, l}$ для которых $|\lambda_j(\tilde{W}_p(r_i))| = 1$, то из того, что $P(r_1 \leq r \leq r_2) = 1$ следует, что $P(|\lambda_j(\tilde{W}_p(r))| \leq K < 1) = 1, \quad j = \overline{1, m}$.

Поэтому из того, что: $P(|\lambda_j(\tilde{W}_p(r))| \leq K < 1) = 1, \quad j = \overline{1, m}$ следует, что ряды

$\sum_{\nu=0}^{\infty} \left(\lambda_j(\tilde{W}_p(r)) \right)^{\nu}$ с вероятностью 1 сходятся равномерно [36] на $[r_1, r_2]$, а это влечет

за собой сходимость с вероятностью 1 матричного ряда

$$\left(E - \tilde{W}_p(r) \right)^{-1} = \sum_{\nu=0}^{\infty} \left(\tilde{W}_p(r) \right)^{\nu}, \quad (3.22)$$

и ряда:

$$C^{p+} = \left(E - \tilde{W}_p(r) \right)^{-1} HW_{p_0}(r)Y_p = \sum_{\nu=0}^{\infty} \left(\tilde{W}_p(r) \right)^{\nu} HW_{p_0}(r)Y_p. \quad (3.23)$$

Тогда ряд (3.23) можно умножить на ограниченную функцию $f(r)$, представляющую собой плотность распределения случайной величины r и проинтегрировать в пределах от r_1 до r_2 [131], то есть:

$$\begin{aligned}
& \int_{r_1}^{r_2} C^{p+}(r) f(r) dr = \int_{r_1}^{r_2} (E - \tilde{W}_p(r))^{-1} HW_{p_0}(r) Y_p(r) f(r) dr = \\
& = \int_{r_1}^{r_2} \sum_{\nu=0}^{\infty} (\tilde{W}_p(r))^{\nu} HW_{p_0}(r) Y_p(r) f(r) dr = \\
& = \sum_{\nu=0}^{\infty} \int_{r_1}^{r_2} (\tilde{W}_p(r))^{\nu} HW_{p_0}(r) Y_p(r) f(r) dr = \\
& = c/\sqrt{2\pi} \sum_{\nu=0}^{\infty} \int_{r_1}^{r_2} (\tilde{W}_p(r))^{\nu} HW_0 Y_p(r) \exp(-r^2/\mu) \cdot \exp(-r^2/2) dr.
\end{aligned} \tag{3.24}$$

Интеграл $\int_{r_1}^{r_2} (E - \tilde{W}_p(r))^{-1} HW_{p_0}(r) Y_p(r) f(r) dr$ понимается либо в смысле

главного значения, если существуют особые точки r_i $i = \overline{1, l}$, в которых матрица $E - \tilde{W}_p(r)$ вырождается, если же особые точки являются кратными, то будет существовать конечная часть расходящегося интеграла (см. [134]). Выражение (3.24) справедливо как для интеграла Лебега, так и для несобственного интеграла Римана.

Действительно, если определитель матрицы $E - \tilde{W}_p(r)$ тождественно не равен нулю, то обратная матрица $(E - \tilde{W}_p(r))^{-1}$ существует и имеет в общем случае следующую структуру

$$\begin{aligned}
(E - \tilde{W}_p(r))^{-1} &= \left\{ \frac{P_{i,j}(r)}{Q(r)} \right\} = S_{i,j}(r) + \\
&+ \frac{A_{11}}{r - a_1} + \frac{A_{12}}{(r - a_1)^2} + \dots + \frac{A_{1l_1}}{(r - a_1)^{l_1}} + \dots + \frac{A_{f1}}{r - a_f} + \\
&+ \frac{A_{f2}}{(r - a_f)^2} + \dots + \frac{A_{fl_f}}{(r - a_f)^{l_f}} + \frac{B_{11}r + C_{11}}{r^2 + p_1r + q_1} + \dots + \frac{B_{1k_1}r + C_{1k_1}}{(r^2 + p_1r + q_1)^{k_1}} + \dots + \\
&+ \frac{B_{s1}r + C_{s1}}{r^2 + p_sr + q_s} + \dots + \frac{B_{sk_s}r + C_{sk_s}}{(r^2 + p_sr + q_s)^{k_s}},
\end{aligned}$$

здесь $P_{i,j}(r)$, $Q(r)$, $S_{i,j}(r)$ - многочлены переменной r . Для определения числителей элементов обратной матрицы $(E - \tilde{W}_p(r))^{-1}$, то есть коэффициентов A, B, C и коэффициентов многочленов $S_{i,j}(r)$, $i, j = \overline{1, m}$ обычно прибегают к методу неопределенных коэффициентов [122].

Рассмотрим интегралы $I_1 = c/\sqrt{2\pi} \int_{r_1}^{r_2} \frac{e^{-r^2/2}}{r - a_1} dr$ и $I_{l_1} = c/\sqrt{2\pi} \int_{r_1}^{r_2} \frac{e^{-r^2/2}}{(r - a_1)^{l_1}} dr$, где

$a_1 \in [r_1, r_2]$. Первый интеграл существует в смысле главного значения (*V.P.*) (см. [122]). Второй интеграл не существует даже в смысле главного значения и является расходящимся. Однако для него существует конечная часть [134].

Обозначим через δ строго положительную переменную, которую будем затем предполагать стремящейся к нулю. Под $B(a_1, \delta)$ будем понимать шар на множестве $M = [r_1, r_2]$ с центром в a_1 и радиусом δ . Наконец, положим $A(a_1, \delta) = M \setminus B(a_1, \delta)$.

Начнем с исследования расходящегося интеграла I_{l_1} , в котором подынтегральная функция $f_1(r) = e^{-r^2/2}/(r - a_1)^{l_1}$ интегрируема на $A(a_1, \delta)$ для любого $\delta > 0$. (Это означает, что интеграл I_{l_1} расходится из-за плохого поведения интегрируемой функции $f_1(r)$ лишь в a_1 .)

Основная идея заключается в том, чтобы получить равенство [134]

$$\int_{A(a_1, \delta)} f_1(r) dr = I(\delta) + F(\delta) \quad (\delta > 0), \quad (3.25)$$

где $I(\delta)$ - функция специального вида, неограниченная при $\delta \rightarrow 0$, в то время как предел $F(0) = \lim_{\delta \rightarrow 0} F(\delta)$ существует и конечен. Бесконечная часть $I(\delta)$ должна быть конечной линейной комбинацией степеней $\delta^{-\lambda}$, где λ - комплексное число, $\lambda \neq 0$, $\operatorname{Re} \lambda \geq 0$, и, возможно, логарифмического члена $\log(1/\delta)$, то есть [134]

$$I(\delta) = \sum_k A_k \left(\frac{1}{\delta}\right)^{\lambda_k} + B \log \frac{1}{\delta}, \quad (3.26)$$

где сумма конечна, а коэффициенты A_k и B комплексные.

Теперь напомним определение конечной части интеграла.

Определение [134]. Пусть функция f на M интегрируема на $A(a_1, \delta)$ для любого $\delta > 0$. Если имеет место разложение (3.25), где бесконечная часть $I(\delta)$ имеет вид (3.26), и если существует конечный предел $\lim_{\delta \rightarrow 0} F(\delta)$, то по определению

$$F.P. \int f d\mu = \lim_{\delta \rightarrow 0} F(\delta).$$

Далее, с помощью метода математической индукции докажем, что существует конечная часть расходящегося интеграла I_{l_1} .

Действительно, при $l_1 = 1$ интеграл I_1 существует в смысле главного значения и, следовательно, у него существуют конечная часть, равная главному значению (см. [134]).

Пусть $l_1 = 2$, тогда с помощью интегрирования по частям приведем интеграл I_2 к виду (3.25).

$$\begin{aligned}
& \frac{c}{\sqrt{2\pi}} \int_{A(a_1, \delta)} \frac{e^{-r^2/2}}{(r-a_1)^2} dr = -\frac{c}{\sqrt{2\pi}} \frac{e^{-r^2/2}}{r-a_1} \Big|_{r_1}^{a_1-\delta} - \frac{c}{\sqrt{2\pi}} \frac{e^{-r^2/2}}{r-a_1} \Big|_{a_1+\delta}^{r_2} - \frac{c}{\sqrt{2\pi}} \int_{r_1}^{a_1-\delta} \frac{r e^{-r^2/2}}{r-a_1} dr - \\
& - \frac{c}{\sqrt{2\pi}} \int_{a_1+\delta}^{r_2} \frac{r e^{-r^2/2}}{r-a_1} dr = \frac{c}{\sqrt{2\pi}} \frac{e^{-(a_1-\delta)^2/2}}{\delta} + \frac{c}{\sqrt{2\pi}} \frac{e^{-(a_1+\delta)^2/2}}{\delta} + const - \frac{ca_1}{\sqrt{2\pi}} \int_{r_1}^{a_1-\delta} \frac{e^{-r^2/2}}{r-a_1} dr - \\
& - \frac{ca_1}{\sqrt{2\pi}} \int_{a_1+\delta}^{r_2} \frac{e^{-r^2/2}}{r-a_1} dr = \frac{c}{\sqrt{2\pi}} \frac{e^{-(a_1-\delta)^2/2}}{\delta} + \frac{c}{\sqrt{2\pi}} \frac{e^{-(a_1+\delta)^2/2}}{\delta} + const - ca_1 I_1.
\end{aligned}$$

Поскольку интеграл I_1 существует в смысле главного значения, поэтому бесконечная часть $I(\delta)$ интеграла I_2 имеет вид:

$$I(\delta) = \frac{c}{\sqrt{2\pi}} \frac{e^{-(a_1-\delta)^2/2}}{\delta} + \frac{c}{\sqrt{2\pi}} \frac{e^{-(a_1+\delta)^2/2}}{\delta},$$

то есть имеет вид (3.26), следовательно, существует конечная часть $F.P.I_2 = const - ca_1 V.P.I_1$.

Пусть при $l_1 = 3, \dots, l_1 - 1$ существуют конечные части соответствующих интегралов I_3, \dots, I_{l_1-1} , тогда с помощью интегрирования по частям приведем интеграл I_{l_1} к виду (3.26).

$$\begin{aligned}
& \frac{c}{\sqrt{2\pi}} \int_{A(a_1, \delta)} \frac{e^{-r^2/2}}{(r-a_1)^{l_1}} dr = -\frac{c}{\sqrt{2\pi}} \frac{e^{-r^2/2}}{(l_1-1)(r-a_1)^{l_1-1}} \Big|_{r_1}^{a_1-\delta} - \\
& - \frac{c}{\sqrt{2\pi}} \frac{e^{-r^2/2}}{(l_1-1)(r-a_1)^{l_1-1}} \Big|_{a_1+\delta}^{r_2} - \frac{c}{\sqrt{2\pi}} \int_{r_1}^{a_1-\delta} \frac{r e^{-r^2/2}}{(l_1-1)(r-a_1)^{l_1-1}} dr - \\
& - \frac{c}{\sqrt{2\pi}} \int_{a_1+\delta}^{r_2} \frac{r e^{-r^2/2}}{(l_1-1)(r-a_1)^{l_1-1}} dr = -\frac{c}{\sqrt{2\pi}} \frac{e^{-(a_1-\delta)^2/2}}{(l_1-1)(-\delta)^{l_1-1}} +
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& + \frac{c}{\sqrt{2\pi}} \frac{e^{-(a_1+\delta)^2/2}}{(l_1-1)(\delta)^{l_1-1}} + const - \frac{c}{\sqrt{2\pi}} \int_{r_1}^{a_1-\delta} \frac{e^{-r^2/2}}{(l_1-1)(r-a_1)^{l_1-2}} dr - \\
& - \frac{c}{\sqrt{2\pi}} \int_{a_1+\delta}^{r_2} \frac{e^{-r^2/2}}{(l_1-1)(r-a_1)^{l_1-2}} dr - \frac{ca_1}{\sqrt{2\pi}} \int_{r_1}^{a_1-\delta} \frac{e^{-r^2/2}}{(l_1-1)(r-a_1)^{l_1-1}} dr - \\
& - \frac{ca_1}{\sqrt{2\pi}} \int_{a_1+\delta}^{r_2} \frac{e^{-r^2/2}}{(l_1-1)(r-a_1)^{l_1-1}} dr.
\end{aligned}$$

Поскольку для последних интегралов:

$$-\frac{c}{\sqrt{2\pi}} \int_{r_1}^{a_1-\delta} \frac{e^{-r^2/2}}{(l_1-1)(r-a_1)^{l_1-2}} dr - \frac{c}{\sqrt{2\pi}} \int_{a_1+\delta}^{r_2} \frac{e^{-r^2/2}}{(l_1-1)(r-a_1)^{l_1-2}} dr$$

и

$$-\frac{ca_1}{\sqrt{2\pi}} \int_{r_1}^{a_1-\delta} \frac{e^{-r^2/2}}{(l_1-1)(r-a_1)^{l_1-1}} dr - \frac{ca_1}{\sqrt{2\pi}} \int_{a_1+\delta}^{r_2} \frac{e^{-r^2/2}}{(l_1-1)(r-a_1)^{l_1-1}} dr$$

справедливо разложение (3.25), поэтому бесконечная часть $I(\delta)$ интеграла I_{l_1} имеет вид:

$$I(\delta) = -\frac{1}{\sqrt{2\pi}} \frac{e^{-(a_1-\delta)^2/2}}{(l_1-1)(-\delta)^{l_1-1}} + \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \frac{e^{-(a_1+\delta)^2/2}}{(l_1-1)(\delta)^{l_1-1}},$$

то есть имеет вид (3.26), следовательно, существует конечная часть расходящегося интеграла $F.P.I_{l_1} = -\frac{c}{l_1-1} F.P.I_{l_1-2} - \frac{ca_1}{l_1-1} F.P.I_{l_1-1} + const$.

Таким образом, с помощью метода математической индукции мы доказали существование конечной части расходящегося интеграла I_{l_1} .

Другие примеры можно найти в книге Гельфанда и Шилова [135, стр. 62-132].

Теперь с учетом выше изложенного выражение (3.24) можно записать следующим образом:

$$\int_{r_1}^{r_2} C^{p^+}(r) f(r) dr = M \left[C^{p^+} \right] = M \left[\left(E - \tilde{W}_p(r) \right)^{-1} HW_{p_0}(r) Y_p(r) \right] =$$

$$= \sum_{\nu=0}^{\infty} M \left[\left(\tilde{W}_p(r) \right)^{\nu} HW_{p_0}(r) Y_p(r) \right].$$

Выбирая указанным образом матрицу $W_{p_0}(r)$ можно отслеживать оптимально точное приближение, достигаемое при определенном значении ν_0 номера ν :

$$M \left[C^{p^+} \right] = \sum_{\nu=0}^{\infty} M \left[\left(\tilde{W}_p(r) \right)^{\nu} HW_{p_0}(r) Y_p(r) \right] =$$

$$= \sum_{\nu=0}^{\infty} M \left[\left(\tilde{W}_p(r) \right)^{\nu} \exp(-r^2/\mu) HW_0 Y_p(r) \right] =$$

$$= \sum_{\nu=0}^{\infty} M \left[\left(E - \exp(-r^2/\mu) \cdot \left(\tau^2(r) HW_0 W_1 - \tau(r) HW_0 W_2 - HW_0 W_3 \right) \right)^{\nu} \times \right.$$

$$\left. \times \exp(-r^2/\mu) HW_0 \left(\tau^2(r) Y_1 + \tau(r) Y_2 \right) \right].$$

Теперь можно записать выражения для ν -го приближения детерминированных матриц \bar{W}_1 и \bar{W}_2 , которые представляют собой математическое ожидания от обратной случайной матрицы, умноженной соответственно на $\exp(-r^2/\mu)\tau^2(r)$ и $\exp(-r^2/\mu)\tau(r)$:

$${}_{\nu} \bar{W}_1 = {}_{\nu-1} \bar{W}_1 + M \left[\left(E - \exp(-r^2/\mu) \cdot \tau^2(r) HW_0 W_1 - \exp(-r^2/\mu) \cdot \tau(r) HW_0 W_2 - \right. \right.$$

$$\left. - \exp(-r^2/\mu) \cdot HW_0 W_3 \right)^{\nu} \cdot \exp(-r^2/\mu) \tau^2(r) \Big],$$

$${}_{\nu} \bar{W}_2 = {}_{\nu-1} \bar{W}_2 + M \left[\left(E - \exp(-r^2/\mu) \cdot \tau^2(r) HW_0 W_1 - \exp(-r^2/\mu) \cdot \tau(r) HW_0 W_2 - \right. \right.$$

$$\left. - \exp(-r^2/\mu) \cdot HW_0 W_3 \right)^{\nu} \cdot \exp(-r^2/\mu) \tau(r) \Big].$$

В практических расчетах μ желательно брать $\mu \geq 2$, так как на ЭВМ вычисления ведутся с конечным числом знаков, в связи, с чем имеются числа, являющиеся машинной бесконечностью и машинным нулем.

Дадим оценку быстроты сходимости матричных рядов, аппроксимирующих \bar{W}_i , $i=1,2$ в терминах нормы.

Теорема 8. *Справедлива следующая оценка:*

$$\|\bar{W}_i - \bar{W}_i^v\| \leq \int_{r_1}^{r_2} \frac{\|\tilde{W}_p(r)\|^{v+1} \tilde{\varphi}_i(r)}{1 - \|\tilde{W}_p(r)\|} dr.$$

Здесь $\tilde{\varphi}_i(r) = C_i \exp(-(\mu+2)r^2/2\mu)$, C_i - некоторые постоянные, $i=1,2$.

Доказательство. Действительно, имеем:

$$\begin{aligned} \|\bar{W}_i - \bar{W}_i^v\| &= \left\| \int_{r_1}^{r_2} (E - \tilde{W}_p(r))^{-1} \cdot \tilde{\varphi}_i(r) dr - \left(\int_{r_1}^{r_2} E \cdot \tilde{\varphi}_i(r) dr + \right. \right. \\ &\quad \left. \left. + \int_{r_1}^{r_2} \tilde{W}_p(r) \cdot \tilde{\varphi}_i(r) dr + \dots + \int_{r_1}^{r_2} \tilde{W}_p^v(r) \cdot \tilde{\varphi}_i(r) dr \right) \right\| = \\ &= \left\| \int_{r_1}^{r_2} \tilde{W}_p^{v+1}(r) \cdot \tilde{\varphi}_i(r) dr + \int_{r_1}^{r_2} \tilde{W}_p^{v+2}(r) \cdot \tilde{\varphi}_i(r) dr + \dots \right\| \leq \\ &\leq \left\| \int_{r_1}^{r_2} \tilde{W}_p^{v+1}(r) \cdot \tilde{\varphi}_i(r) dr \right\| + \left\| \int_{r_1}^{r_2} \tilde{W}_p^{v+2}(r) \cdot \tilde{\varphi}_i(r) dr \right\| + \dots \leq \\ &\leq \int_{r_1}^{r_2} \|\tilde{W}_p^{v+1}(r)\| \cdot \tilde{\varphi}_i(r) dr + \int_{r_1}^{r_2} \|\tilde{W}_p^{v+2}(r)\| \cdot \tilde{\varphi}_i(r) dr + \dots \leq \\ &\leq \int_{r_1}^{r_2} \|\tilde{W}_p(r)\|^{v+1} \cdot \tilde{\varphi}_i(r) dr + \int_{r_1}^{r_2} \|\tilde{W}_p(r)\|^{v+2} \cdot \tilde{\varphi}_i(r) dr + \dots \leq \\ &\leq \int_{r_1}^{r_2} \frac{\|\tilde{W}_p(r)\|^{v+1} \tilde{\varphi}_i(r)}{1 - \|\tilde{W}_p(r)\|} dr. \end{aligned}$$

Здесь $\|\tilde{W}_p(r)\| = \frac{M(r) - m_1(r)}{M(r) + m_1(r)}$ [128], а функции $m_1(r)$ и $M(r)$ такие, что выпол-

няется неравенство $m_1(r) \leq \lambda_j(\hat{W}_p(r)) \leq M(r) \quad \forall j = \overline{1, m}$ для всех r .

Теорема доказана.

Найдем ν -е приближение математического ожидания распределения ННЗ по глубине:

$$\begin{aligned} \nu m_{\Delta p_m^+}(z) &= \left(\varphi^m(z)\right)_\nu^T M\left[C^{p^+}\right], \quad z \in [0, \infty) \\ \nu M\left[C^{p^+}\right] &= \nu \bar{W}_1 H W_0 Y_1 + \nu \bar{W}_2 H W_0 Y_2. \end{aligned}$$

Найдем автокорреляционную функцию распределения ННЗ по глубине. Для этого запишем проекционную характеристику решения исходной задачи в виде:

$$C^{p^+} = \left(E - \tilde{W}_p\right)^{-1} H W_{p_0} Y_p. \quad (3.27)$$

Для нахождения автокорреляционной функции решения уравнения (1.21), (1.22) воспользуемся разложением центрированной случайной функции:

$$\Delta p^0(z) = \Delta p(z) - M[\Delta p(z)] \approx \left(\varphi^m(z)\right)^T C^{p^0}, \quad z \in [0, \infty),$$

по базису из модифицированных функций Лагерра.

Так как

$$M\left[C^{p^+}\right] = M\left[\left(E - \tilde{W}_p\right)^{-1} H W_{p_0} Y_p\right], \quad (3.28)$$

то, вычитая из уравнения (3.27) уравнение (3.28), получим

$$C^{p^0} = C^{p^+} - M\left[C^{p^+}\right] = \left[\left(E - \tilde{W}_p\right)^{-1} H W_{p_0} Y_p - M\left[\left(E - \tilde{W}_p\right)^{-1} H W_{p_0} Y_p\right]\right]. \quad (3.29)$$

Автокорреляционная функция решения дифференциального уравнения (1.21), (1.22) находится по формуле:

$$R_p(z_1, z_2) = M\left[\Delta p^0(z_1) \cdot \Delta p^0(z_2)\right].$$

Дисперсия решения дифференциального уравнения (1.21), (1.22) находится по формуле:

$$D_p(z) = R_p(z_1, z_2) \Big|_{z_1=z_2=z}.$$

Второй начальный момент решения дифференциального уравнения (1.21), (1.22) находится по формуле:

$$\Theta_p(z_1, z_2) = M\left[\Delta p(z_1) \cdot \Delta p(z_2)\right]. \quad (3.30)$$

Тогда для приближенного решения дифференциального уравнения (1.21), (1.22) имеем:

$$\begin{aligned} R_p^m(z_1, z_2) &= M \left[\Delta p_m^0(z_1) \cdot \Delta p_m^0(z_2) \right] = M \left[\left(\varphi^m(z_1) \right)^T C^{p^0} \left(C^{p^0} \right)^T \varphi^m(z_2) \right] = \\ &= \left(\varphi^m(z_1) \right)^T M \left[C^{p^0} \left(C^{p^0} \right)^T \right] \varphi^m(z_2) \end{aligned}$$

Выражение $C^{R_p^m} = M \left[C^{p^0} \left(C^{p^0} \right)^T \right]$ представляет собой проекционную характеристику автокорреляционной функции R_p^m , тогда

$$R_p^m(z_1, z_2) = \left(\varphi^m(z_1) \right)^T C^{R_p^m} \varphi^m(z_2).$$

В силу (3.29) найдем

$$\begin{aligned} C^{R_p^m} &= M \left[C^{p^0} \left(C^{p^0} \right)^T \right] = M \left[\left(C^{p^+} - M \left[C^{p^+} \right] \right) \cdot \left(C^{p^+} - M \left[C^{p^+} \right] \right)^T \right] = \\ &= M \left[C^{p^+} \left(C^{p^+} \right)^T \right] - M \left[C^{p^+} \right] \cdot \left(M \left[C^{p^+} \right] \right)^T. \end{aligned}$$

Выражение $C^{\Theta_p^m} = M \left[C^{p^+} \left(C^{p^+} \right)^T \right]$ представляет собой проекционную характеристику второго начального момента, тогда

$$C^{R_p^m} = C^{\Theta_p^m} - C^{m_{p^+}} \left(C^{m_{p^+}} \right)^T.$$

В силу сходимости ряда (3.24) следующий ряд

$$\begin{aligned} C^{p^+}(r) \left(C^{p^+}(r) \right)^T &= \left(E - \tilde{W}_p(r) \right)^{-1} H W_{p_0}(r) Y_p Y_p^T W_{p_0}^T(r) H^T \left(\left(E - \tilde{W}_p(r) \right)^{-1} \right)^T = \\ &= \left(\sum_{\nu_1=0}^{\infty} \left(\tilde{W}_p(r) \right)^{\nu_1} \right) H W_{p_0}(r) Y_p Y_p^T W_{p_0}^T(r) H^T \left(\sum_{\nu_2=0}^{\infty} \left(\left(\tilde{W}_p(r) \right)^T \right)^{\nu_2} \right) = \\ &= \sum_{\nu_1=0}^{\infty} \sum_{\nu_2=0}^{\infty} \left(\tilde{W}_p(r) \right)^{\nu_1} H W_{p_0} Y_p Y_p^T W_{p_0}^T H^T \left(\left(\tilde{W}_p(r) \right)^T \right)^{\nu_2} \end{aligned}$$

также сходится с вероятностью 1 на отрезке $[r_1, r_2]$ [36].

Тогда можем записать выражение для проекционной характеристики второго начального момента:

$$\begin{aligned}
C^{\Theta_p^m} &= M \left[\left(E - \tilde{W}_p \right)^{-1} H W_{p_0} Y_p Y_p^T W_{p_0}^T H^T \left(\left(E - \tilde{W}_p \right)^{-1} \right)^T \right] = \\
&= M \left[\left(\sum_{v_1=0}^{\infty} \left(\tilde{W}_p \right)^{v_1} \right) H W_{p_0} Y_p Y_p^T W_{p_0}^T H^T \left(\sum_{v_2=0}^{\infty} \left(\left(\tilde{W}_p \right)^T \right)^{v_2} \right) \right] = \\
&= \sum_{v_1=0}^{\infty} \sum_{v_2=0}^{\infty} M \left[\left(\tilde{W}_p \right)^{v_1} H W_{p_0} Y_p Y_p^T W_{p_0}^T H^T \left(\left(\tilde{W}_p \right)^T \right)^{v_2} \right]
\end{aligned} \tag{3.31}$$

и автокорреляционной функции:

$$\begin{aligned}
C^{R_p^m} &= M \left[\left(E - \tilde{W}_p \right)^{-1} H W_{p_0} Y_p Y_p^T W_{p_0}^T H^T \left(\left(E - \tilde{W}_p \right)^{-1} \right)^T \right] - M \left[\left(E - \tilde{W}_p \right)^{-1} H W_{p_0} Y_p \right] \times \\
&\times M \left[Y_p^T W_{p_0}^T H^T \left(\left(E - \tilde{W}_p \right)^{-1} \right)^T \right] = M \left[\left(\sum_{v_1=0}^{\infty} \left(\tilde{W}_p \right)^{v_1} \right) H W_{p_0} Y_p Y_p^T W_{p_0}^T H^T \times \right. \\
&\times \left. \left(\sum_{v_2=0}^{\infty} \left(\left(\tilde{W}_p \right)^T \right)^{v_2} \right) \right] - M \left[\left(\sum_{v_1=0}^{\infty} \left(\tilde{W}_p \right)^{v_1} \right) H W_{p_0} Y_p \right] \cdot M \left[Y_p^T W_{p_0}^T H^T \left(\sum_{v_2=0}^{\infty} \left(\left(\tilde{W}_p \right)^T \right)^{v_2} \right) \right] = \\
&= \sum_{v_1=0}^{\infty} \sum_{v_2=0}^{\infty} M \left[\left(\tilde{W}_p \right)^{v_1} H W_{p_0} Y_p Y_p^T W_{p_0}^T H^T \left(\left(\tilde{W}_p \right)^T \right)^{v_2} \right] - \\
&- \left(\sum_{v_1=0}^{\infty} \sum_{v_2=0}^{\infty} M \left[\left(\tilde{W}_p \right)^{v_1} H W_{p_0} Y_p \right] \right) \cdot \left(\sum_{v_1=0}^{\infty} \sum_{v_2=0}^{\infty} M \left[Y_p^T W_{p_0}^T H^T \left(\left(\tilde{W}_p \right)^T \right)^{v_2} \right] \right).
\end{aligned}$$

Теперь можно найти ν -е приближение второго начального момента и автокорреляционной функции решения задачи (1.21), (1.22):

ν -е приближение проекционной характеристики второго начального момента распределения ННЗ по глубине:

$${}_{\nu} C^{\Theta_p^m} = \sum_{v_1=0}^{\nu} \sum_{v_2=0}^{\nu} M \left[\left(\tilde{W}_p \right)^{v_1} H W_{p_0} Y_p Y_p^T W_{p_0}^T H^T \left(\left(\tilde{W}_p \right)^T \right)^{v_2} \right];$$

ν -е приближение проекционной характеристики автокорреляционной функции распределения ННЗ по глубине:

$$\begin{aligned} {}_{\nu}C^{R_p^m} = & \sum_{\nu_1=0}^{\nu} \sum_{\nu_2=0}^{\nu} M \left[(\tilde{W}_p)^{\nu_1} H W_{p_0} Y_p Y_p^T W_{p_0}^T H^T \left((\tilde{W}_p)^T \right)^{\nu_2} \right] - \\ & - \left(\sum_{\nu_1=0}^{\nu} \sum_{\nu_2=0}^{\nu} M \left[(\tilde{W}_p)^{\nu_1} H W_{p_0} Y_p \right] \right) \cdot \left(\sum_{\nu_1=0}^{\nu} \sum_{\nu_2=0}^{\nu} M \left[Y_p^T W_{p_0}^T H^T \left((\tilde{W}_p)^T \right)^{\nu_2} \right] \right); \end{aligned}$$

ν -е приближение второго начального момента распределения ННЗ по глубине:

$${}_{\nu}\Theta_p^m(z_1, z_2) = \left(\varphi^m(z_1) \right)_\nu^T C^{\Theta_p^m} \varphi^m(z_2);$$

ν -е приближение автокорреляционной функции распределения ННЗ по глубине:

$$\begin{aligned} {}_{\nu}R_p^m(z_1, z_2) = & \left(\varphi^m(z_1) \right)_\nu^T C^{\Theta_p^m} \varphi^m(z_2) - \\ & - \left(\varphi^m(z_1) \right)^T \left({}_{\nu}M \left[C^{P_m^+} \right] \right) \left({}_{\nu}M \left[C^{P_m^+} \right] \right)^T \cdot \varphi^m(z_2). \end{aligned}$$

3.3. Оптимизация скорости сходимости итерационных процессов, аппроксимирующих проекционные характеристики математического ожидания и автокорреляционной функции распределения неосновных носителей заряда по глубине

Сходимость процесса последовательных приближений можно сильно улучшить, применяя различные приемы ускорения. Процесс последовательных приближений с применением приемов ускорения сходимости в большинстве случаев укладывается в общую схему итерационных процессов с нарушением стационарности. Целесообразный выбор приемов ускорения требует предварительной информации о расположении собственных значений матрицы [127, 128].

Рассмотрим систему, равносильную исходной системе (2.2):

$$H_{k-1} \left(W_{p_0} W_p \right) W_{p_0} W_p C^P = H_{k-1} \left(W_{p_0} W_p \right) W_{p_0} Y_p. \quad (3.32)$$

Для того чтобы улучшить сходимость рядов, аппроксимирующих проекционные характеристики математического ожидания и автокорреляционной функции решения дифференциального уравнения (1.21), (1.22), естественно определить полином $H_{k-1}(\lambda)$ из условия, чтобы $\max_{\lambda \in [\hat{m}, \hat{M}]} |1 - \lambda H_{k-1}(\lambda)|$ был минима-

лен [136]. Здесь \hat{m} и \hat{M} определяются следующим образом:
 $\hat{M} = \max_j \left(\max_r \left(\lambda_j \left(\hat{W}_p(r) \right) \right) \right)$, $\hat{m} = \min_j \left(\min_r \left(\lambda_j \left(\hat{W}_p(r) \right) \right) \right)$, т.е. спектр матрицы $\text{Sp}(\hat{W}_p(r)) \in [\hat{m}, \hat{M}]$. Напомним, что $\hat{W}_p(r) = W_{p_0}(r)W_p(r)$.

Если обозначить $\Psi_k(\lambda) = 1 - \lambda H_{k-1}(\lambda)$, то $\Psi_k(\lambda)$ будет полиномом k -ой степени, наименее уклоняющемся от нуля в промежутке $[\hat{m}, \hat{M}]$, причем $\Psi_k(0) = 1$. Как известно [137, 138],

$$\Psi_k(\lambda) = \frac{T_k \left(\frac{2\lambda - \hat{M} - \hat{m}}{\hat{M} - \hat{m}} \right)}{T_k \left(-\frac{\hat{M} + \hat{m}}{\hat{M} - \hat{m}} \right)}, \quad (3.33)$$

как обычно, T_k - многочлены Чебышева 1-го рода.

Таким образом, многочлен $H_{k-1}(W_{p_0}W_p)$ степени $k-1$ от матрицы $W_{p_0}W_p$ может быть найден из следующей формулы:

$$H_{k-1}(W_{p_0}W_p) = \left(E - T_k \left(\frac{2W_{p_0}W_p - (\hat{M} + \hat{m})E}{\hat{M} - \hat{m}} \right) \left(T_k \left(-\frac{\hat{M} + \hat{m}}{\hat{M} - \hat{m}} \right) \right)^{-1} \right) (W_{p_0}W_p)^{-1}.$$

Обозначим

$$\tilde{W}_p^k(r) = E - H_{k-1}(W_{p_0}(r)W_p(r))W_{p_0}(r)W_p(r).$$

Собственные значения матрицы $\tilde{W}_p^k(r)$ почти все будут заключены в открытом интервале $(-1, 1)$ [136]. Таким образом, можно предложить следующий итерационный процесс для нахождения проекционной характеристики математического ожидания решения уравнения диффузии ННЗ.

Зададимся последовательностью значений $i_0 = 0 < i_1 < i_2 < \dots$, при этом рассмотрим случай, когда $i_\nu = \nu k$. Тогда, обозначив $C_{i_\nu}^p = \tilde{C}_\nu^p$, определим итерационный процесс по рекуррентной формуле

$$\tilde{C}_{\nu+1}^p = \tilde{C}_\nu^p - H_{k-1}(W_{p_0}(r)W_p(r))(W_{p_0}(r)W_p(r)\tilde{C}_\nu^p - W_{p_0}(r)Y_p) \quad (3.34)$$

Итерационный процесс (3.34) будет сходиться с вероятностью 1 на отрезке $[r_1, r_2]$. Поэтому следующий итерационный процесс будет сходящимся:

$$M[\tilde{C}_{\nu+1}^p(r)] = M[\tilde{C}_\nu^p(r)] - M[H_{k-1}(W_{p_0}(r)W_p(r))W_{p_0}(r)W_p(r)\tilde{C}_\nu^p(r)] + M[H_{k-1}(W_{p_0}(r)W_p(r))W_{p_0}(r)Y_p].$$

В частном случае при $k = 1$ имеем:

$$H_0(W_{p_0}(r)W_p(r)) = \frac{2}{(\hat{M} + \hat{m})} E.$$

Этот случай был рассмотрен в предыдущем разделе, где начальное приближение

$$M[\tilde{C}_0^p] = M[\exp(-r^2/\mu)H_0W_0Y_p],$$

при этом ν -е приближение $M[\tilde{C}_\nu^p]$ будет являться отрезком сходящегося ряда (3.24).

Найдем ν -е приближение математического ожидания распределения ННЗ по глубине:

$${}_\nu m_{\Delta p_m^+}(z) = (\varphi^m(z))^T M[\tilde{C}_\nu^{p^+}], \quad z \in [0, \infty).$$

В силу сходимости итерационного процесса (3.34) также будет сходиться с вероятностью 1 на отрезке $[r_1, r_2]$ итерационный процесс:

$$\tilde{C}_\nu^p(\tilde{C}_\nu^p)^T = \left(\tilde{C}_{\nu-1}^p - H_{k-1}(W_{p_0}(r)W_p(r))(W_{p_0}(r)W_p(r)\tilde{C}_{\nu-1}^p - W_{p_0}(r)Y_p) \right) \times \\ \times \left(\tilde{C}_{\nu-1}^p - H_{k-1}(W_{p_0}(r)W_p(r))(W_{p_0}(r)W_p(r)\tilde{C}_{\nu-1}^p - W_{p_0}(r)Y_p) \right)^T, \quad \nu = 1, 2, \dots$$

Тогда можем построить сходящийся итерационный процесс для проекционной характеристики второго начального момента:

$$C_v^{\Theta_p^m}(r) = M \left[\tilde{C}_v^p \left(\tilde{C}_v^p \right)^T \right] = M \left[\left(\tilde{C}_{v-1}^p - H_{k-1} \left(W_{p_0} W_p \right) \left(W_{p_0} W_p \tilde{C}_{v-1}^p - W_{p_0} Y_p \right) \right) \times \right. \\ \left. \times \left(\left(\tilde{C}_{v-1}^p - H_{k-1} \left(W_{p_0} W_p \right) \left(W_{p_0} W_p \tilde{C}_{v-1}^p - W_{p_0} Y_p \right) \right) \right)^T \right], \quad v = 1, 2, \dots$$

и автокорреляционной функции распределения ННЗ по глубине:

$$C_v^{R_p^m}(r) = M \left[\tilde{C}_v^{p^0} \left(\tilde{C}_v^{p^0} \right)^T \right] = M \left[\left(\tilde{C}_{v-1}^p - H_{k-1} \left(W_{p_0} W_p \right) \left(W_{p_0} W_p \tilde{C}_{v-1}^p - W_{p_0} Y_p \right) \right) \times \right. \\ \left. \times \left(\left(\tilde{C}_{v-1}^p - H_{k-1} \left(W_{p_0} W_p \right) \left(W_{p_0} W_p \tilde{C}_{v-1}^p - W_{p_0} Y_p \right) \right) \right)^T \right] - \\ - \left(M \left[\tilde{C}_{v-1}^p(r) \right] - M \left[H_{k-1} \left(W_{p_0} W_p \right) W_{p_0} W_p \tilde{C}_{v-1}^p \right] + M \left[H_{k-1} \left(W_{p_0} W_p \right) W_{p_0} Y_p \right] \right) \times \\ \times \left(M \left[\tilde{C}_{v-1}^p(r) \right] - M \left[H_{k-1} \left(W_{p_0} W_p \right) W_{p_0} W_p \tilde{C}_{v-1}^p \right] + M \left[H_{k-1} \left(W_{p_0} W_p \right) W_{p_0} Y_p \right] \right)^T, \\ v = 1, 2, \dots$$

v -е приближение второго начального момента распределения ННЗ по глубине:

$${}_v \Theta_p^m(z_1, z_2) = \left(\varphi^m(z_1) \right)^T \cdot C_v^{\Theta_p^m} \cdot \varphi^m(z_2);$$

v -е приближение автокорреляционной функции распределения ННЗ по глубине:

$${}_v R_p^m(z_1, z_2) = \left(\varphi^m(z_1) \right)^T \cdot C_v^{\Theta_p^m} \cdot \varphi^m(z_2) - \\ - \left(\varphi^m(z_1) \right)^T \left(M \left[C_v^{p_m^+} \right] \right) \left(M \left[C_v^{p_m^+} \right] \right)^T \cdot \varphi^m(z_2).$$

Известно [136], что коэффициенты многочленов $H_{k-1} \left(W_{p_0} W_p \right)$ быстро растут с k ; вследствие этого при больших k алгоритм вычисления проекционной характеристики математического ожидания решения уравнения (1.21), (1.22), использующий информацию о значениях этих коэффициентов, сильно чувствителен к вычислительной погрешности. Также пример показывает, что алгоритм является трудоемким и от него следует отказаться из-за соображений экономии памяти ЭВМ. Поэтому для нахождения приближенного решения прибегают к построению следующего итерационного процесса Чебышева [136].

Пусть C_0^p - начальное приближение, и каждое следующее приближение C_i^p построено по формуле [136]:

$$C_i^p = C_{i-1}^p - h_i^k \left(W_{p_0}(r) W_p(r) C_{i-1}^p - W_{p_0}(r) Y_p \right), \quad i=1, \dots, k.$$

где

$$h_i^k = \frac{2}{\hat{M} + \hat{m} + (\hat{M} - \hat{m}) \cos \frac{\pi(2i-1)}{2k}}, \quad i=1, \dots, k. \quad (3.35)$$

Построенный, таким образом, итерационный процесс:

$$C_i^p = C_{i-1}^p - h_i^k \left(W_{p_0}(r) W_p(r) C_{i-1}^p - W_{p_0}(r) Y_p \right), \quad i=1, 2, \dots \quad (3.36)$$

будет сходиться с вероятностью 1 на отрезке $[r_1, r_2]$ [36]. Поэтому следующий итерационный процесс будет сходящимся:

$$C_i^{m_p} = M \left[C_i^p(r) \right] = M \left[C_{i-1}^p(r) \right] - h_i^k M \left[W_{p_0}(r) W_p(r) C_{i-1}^p(r) \right] + h_i^k M \left[W_{p_0}(r) Y_p \right], \quad i=1, 2, \dots, \quad (3.37)$$

где h_0^k

$$h_0^k = \frac{2}{(\hat{M} + \hat{m})}.$$

Например,

нулевое приближение:

$$M \left[C_0^p(r) \right] = h_0^k M \left[\exp(-r^2/\mu) W_0 Y_p \right],$$

первое приближение:

$$\begin{aligned} M \left[C_1^p(r) \right] &= M \left[C_0^p(r) \right] - h_1^k M \left[W_{p_0}(r) W_p(r) C_0^p(r) \right] + h_1^k M \left[W_{p_0}(r) Y_p \right] = \\ &= h_0^k M \left[\exp(-r^2/\mu) W_0 Y_p \right] - h_1^k h_0^k M \left[\exp(-2r^2/\mu) (\tau^2(r) W_0 W_1 + \right. \\ &+ \left. \tau(r) W_0 W_2 + W_0 W_3) \cdot W_0 Y_p \right] + h_1^k M \left[\exp(-r^2/\mu) W_0 Y_p \right] = \\ &= h_0^k M \left[\exp(-r^2/\mu) W_0 Y_p \right] - h_1^k h_0^k M \left[\tau^2(r) \exp(-2r^2/\mu) W_0 W_1 W_0 Y_p \right] - \\ &- h_1^k h_0^k M \left[\tau(r) \exp(-2r^2/\mu) W_0 W_2 W_0 Y_p \right] - h_1^k h_0^k M \left[\exp(-2r^2/\mu) W_0 W_3 W_0 Y_p \right] + \\ &+ h_1^k M \left[\exp(-r^2/\mu) W_0 Y_p \right]. \end{aligned}$$

ν -е приближение:

$$M \left[C_v^p(r) \right] = M \left[C_{v-1}^p(r) \right] - h_v^k M \left[W_{p_0}(r) W_p(r) C_{v-1}^p(r) \right] + h_v^k M \left[W_{p_0}(r) Y_p \right].$$

Найдем v -е приближение математического ожидания распределения ННЗ по глубине:

$${}_v m_{\Delta p_m^+}(z) = \left(\varphi^m(z) \right)^T M \left[C_v^{p^+} \right], \quad z \in [0, \infty).$$

При больших k алгоритм вычисления по формулам (3.36), (3.37) также устойчив к округлениям.

При реальных вычислениях для обеспечения устойчивости алгоритма к округлениям осуществляют «перемешивание» чисел h_i^k .

В работах [139-141] указаны различные целесообразные способы нумерации параметров и освещена история вопроса.

Следующий итерационный процесс также будет сходиться на отрезке $[r_1, r_2]$:

$$C_i^p \left(C_i^p \right)^T = \left(C_{i-1}^p - h_i^k \left(W_{p_0}(r) W_p(r) C_{i-1}^p - W_{p_0}(r) Y_p \right) \right) \times \left(C_{i-1}^p - h_i^k \left(W_{p_0}(r) W_p(r) C_{i-1}^p - W_{p_0}(r) Y_p \right) \right)^T, \quad i = 1, 2, \dots$$

Тогда можем построить сходящийся итерационный процесс для проекционной характеристики второго начального момента:

$$C_i^{\Theta p}(r) = M \left[C_i^p \left(C_i^p \right)^T \right] = M \left[\left(C_{i-1}^p - h_i^k \left(W_{p_0}(r) W_p(r) C_{i-1}^p - W_{p_0}(r) Y_p \right) \right) \times \left(C_{i-1}^p - h_i^k \left(W_{p_0}(r) W_p(r) C_{i-1}^p - W_{p_0}(r) Y_p \right) \right)^T \right], \quad i = 1, 2, \dots \quad (3.38)$$

и автокорреляционной функции распределения ННЗ по глубине:

$$\begin{aligned}
C_i^{R_p}(r) &= M \left[C_i^{p_0} \left(C_i^{p_0} \right)^T \right] = M \left[\left(C_{i-1}^p - h_i^k \left(W_{p_0}(r) W_p(r) C_{i-1}^p - W_{p_0}(r) Y_p \right) \right) \times \right. \\
&\times \left. \left(C_{i-1}^p - h_i^k \left(W_{p_0}(r) W_p(r) C_{i-1}^p - W_{p_0}(r) Y_p \right) \right)^T \right] - \\
&- \left(M \left[C_{i-1}^p(r) \right] - h_i^k M \left[W_{p_0}(r) W_p(r) C_{i-1}^p(r) \right] + h_i^k M \left[W_{p_0}(r) Y_p \right] \right) \times \\
&\times \left(M \left[C_{i-1}^p(r) \right] - h_i^k M \left[W_{p_0}(r) W_p(r) C_{i-1}^p(r) \right] + h_i^k M \left[W_{p_0}(r) Y_p \right] \right)^T, \quad i=1,2,\dots
\end{aligned}$$

Аналогично (см. доказательство теоремы 8) можно получить следующие оценки быстроты сходимости итерационных процессов последовательных приближений в терминах нормы для проекционных характеристик математического ожидания и автокорреляционной функции:

$$\begin{aligned}
\|C^{m_p} - C_{ik}^{m_p}\| &\leq C_1 \int_{r_1}^{r_2} \frac{\|\tilde{W}_p^k(r)\|^i \exp(-(\mu+2)r^2/2\mu)}{1 - \|\tilde{W}_p^k(r)\|} dr + \\
&+ C_2 \int_{r_1}^{r_2} \|\tilde{W}_p^k(r)\|^i \exp(-(\mu+2)r^2/2\mu) dr, \\
\|C^{R_p} - C_{ik}^{R_p}\| &\leq C_3(k) \int_{r_1}^{r_2} \frac{\|\tilde{W}_p^k(r)\|^i \exp(-(\mu+4)r^2/2\mu)}{(1 - \|\tilde{W}_p^k(r)\|)^2} dr + \\
&+ C_4(k) \int_{r_1}^{r_2} \|\tilde{W}_p^k(r)\|^i \exp(-(\mu+4)r^2/2\mu) dr.
\end{aligned}$$

Здесь $\|\tilde{W}_p^k(r)\| = \frac{1}{T_k((M(r)+m_1(r))/(M(r)-m_1(r)))} \leq \left(\frac{M(r)-m_1(r)}{M(r)+m_1(r)} \right)^k < 1$ почти

для всех r [128], а $m_1(r)$ и $M(r)$ такие функции, что выполняется неравенство:

$$m_1(r) \leq \lambda_j(\hat{W}_p(r)) \leq M(r) \quad \forall j = \overline{1, m};$$

$C_1, C_2, C_3(k)$ и $C_4(k)$ - положительные постоянные, которые не зависят от i , причем $C_3(k)$ и $C_4(k)$ с ростом k убывают.

ν -е приближение второго начального момента распределения ННЗ по глубине:

$${}_v\Theta_p^m(z_1, z_2) = (\varphi^m(z_1))^T \cdot C_v^{\Theta_p^m} \cdot \varphi^m(z_2);$$

ν -е приближение автокорреляционной функции распределения ННЗ по глубине:

$$\begin{aligned} {}_vR_p^m(z_1, z_2) &= (\varphi^m(z_1))^T \cdot C_v^{\Theta_p^m} \cdot \varphi^m(z_2) - \\ &- (\varphi^m(z_1))^T \left(M \left[C_v^{P_m^+} \right] \right) \left(M \left[C_v^{P_m^+} \right] \right)^T \cdot \varphi^m(z_2). \end{aligned}$$

Для данной матрицы $\hat{W}_p(r)$ осуществить подготовку к виду, позволяющему использовать описанный процесс, не просто. Поэтому слишком грубый выбор оценок \hat{M} и \hat{m} может сильно замедлить быстроту сходимости процесса. Отметим еще и то, что во всем изложенном важную роль играет знание числа \hat{M} . Ошибка оценки этого числа в сторону уменьшения имеет некоторую опасность. Ошибка же в сторону увеличения может лишь несколько увеличить объем работы [127, 128].

3.4. Использование модели независимых источников для нахождения математического ожидания и автокорреляционной функции распределения неосновных носителей заряда по глубине

Найдем аналитическое выражение для распределения избыточных ННЗ, генерируемых электронным и световым пучком в полупроводниковом материале с использованием модели независимых источников. Для этого воспользуемся выражением (1.25), которое проинтегрируем по z_0 . Для электронного пучка было получено следующее аналитическое выражение для функции $\Delta p(z)$:

$$\begin{aligned}
\Delta p(z) &= \int_0^{\infty} \Delta p(z, z_0) dz_0 = \int_0^z \Delta p_2(z, z_0) dz_0 + \int_z^{\infty} \Delta p_1(z, z_0) dz_0 = \\
&= \sqrt{\frac{\tau}{D}} \cdot \frac{1}{2} \cdot \left[c_1 \operatorname{erfc}\left(\frac{z}{z_{ms}} - 1 + \frac{z_{ms}}{2L}\right) + c_2 \operatorname{erfc}\left(\frac{z}{z_{ss}} - 1 + \frac{z_{ss}}{2L}\right) \right] \cdot \exp\left(\frac{z}{L}\right) + \\
&+ \sqrt{\frac{\tau}{D}} \cdot \frac{1}{2} \cdot \frac{1-S}{1+S} \cdot \left[c_1 \operatorname{erfc}\left(-1 + \frac{z_{ms}}{2L}\right) + c_2 \operatorname{erfc}\left(-1 + \frac{z_{ss}}{2L}\right) \right] \cdot \exp\left(-\frac{z}{L}\right) + \\
&+ \sqrt{\frac{\tau}{D}} \cdot \frac{1}{2} \cdot \left[c_3 \left[\operatorname{erf}\left(\frac{z}{z_{ms}} - 1 - \frac{z_{ms}}{2L}\right) - \operatorname{erf}\left(-1 - \frac{z_{ms}}{2L}\right) \right] + \right. \\
&\left. + c_4 \left[\operatorname{erf}\left(\frac{z}{z_{ss}} - 1 - \frac{z_{ss}}{2L}\right) - \operatorname{erf}\left(-1 - \frac{z_{ss}}{2L}\right) \right] \right] \cdot \exp\left(-\frac{z}{L}\right), \tag{3.39}
\end{aligned}$$

где

$$\begin{aligned}
c_1 &= G_0 \frac{\sqrt{\pi}}{2} z_{ms} e^{-\frac{z_{ms} + \frac{z_{ms}^2}{4L^2}}{L}}, \quad c_2 = G_1 \frac{\sqrt{\pi}}{2} z_{ss} e^{-\frac{z_{ss} + \frac{z_{ss}^2}{4L^2}}{L}}, \quad c_3 = G_0 \frac{\sqrt{\pi}}{2} z_{ms} e^{-\frac{z_{ms} + \frac{z_{ms}^2}{4L^2}}{L}}, \\
c_4 &= G_1 \frac{\sqrt{\pi}}{2} z_{ss} e^{-\frac{z_{ss} + \frac{z_{ss}^2}{4L^2}}{L}}, \quad G_0 = \frac{1,085(1-\eta)P_0}{\sqrt{\pi}(1-\eta + \eta z_{ss}/z_{ms})}, \quad G_1 = \frac{\eta}{1-\eta} G_0.
\end{aligned}$$

Здесь $\operatorname{erfc}(z) = 1 - \operatorname{erf}(z)$ - остаточная функция ошибок.

Для пучка света функция $\Delta p(z)$ примет вид:

$$\begin{aligned}
\Delta p(z) &= \sqrt{\frac{\tau}{D}} \cdot I_0 \alpha_1 \beta \frac{1}{2} \cdot \left[\frac{2L}{1 - I_0^2 \alpha_1^2 \beta^2 L^2} \exp(-\alpha_1 z) - \frac{L}{1 - I_0 \alpha_1 \beta L} \exp\left(-\frac{z}{L}\right) + \right. \\
&\left. + \frac{1-S}{1+S} \cdot \frac{L}{1 + I_0 \alpha_1 \beta L} \exp\left(-\frac{z}{L}\right) \right].
\end{aligned}$$

Полученное выше выражение (3.39) включает случайный параметр τ , поэтому решение $\Delta p(z)$ будет случайной функцией.

Найдем математическое ожидание случайной функции $\Delta p(z)$, то есть:

$$m_{\Delta p}(z) = \int_{\tau_1}^{\tau_2} \Delta p(z, \tau) f(\tau) d\tau. \tag{3.40}$$

Поскольку подынтегральная функция является аналитической по τ в промежутке $\tau \in [\tau_1, \tau_2]$, для нахождения интеграла (3.40) разложим ее в степенной ряд:

$$\Delta p(z, \tau(r)) f(\tau(r)) = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{1}{k!} \frac{\partial^k (\Delta p(z, \tau(r)) f(\tau(r)))}{\partial r^k} \Bigg|_{r=0} r^k,$$

и проинтегрируем по r в промежутке $[r_1, r_2]$. Окончательно получим:

$$\begin{aligned} m_{\Delta p}(z) &= \int_{r_1}^{r_2} \sum_{k=0}^{\infty} \frac{1}{k!} \frac{\partial^k (\Delta p(z, \tau(r)) f(\tau(r)))}{\partial r^k} \Bigg|_{r=0} r^k dr = \\ &= \sum_{k=0}^{\infty} \int_{r_1}^{r_2} \frac{1}{k!} \frac{\partial^k (\Delta p(z, \tau(r)) f(\tau(r)))}{\partial r^k} \Bigg|_{r=0} r^k dr. \end{aligned} \quad (3.41)$$

Начальный момент второго порядка случайной функции $\Delta p(z)$ определяется следующим образом:

$$\Theta_{\Delta p}(z_1, z_2) = \int_{\tau_1}^{\tau_2} \Delta p(z_1, \tau) \Delta p(z_2, \tau) f(\tau) d\tau. \quad (3.42)$$

Для нахождения интеграла (3.42) подынтегральную функцию также разложим в степенной ряд:

$$\Delta p(z_1, \tau(r)) \Delta p(z_2, \tau(r)) f(\tau(r)) = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{1}{k!} \frac{\partial^k (\Delta p(z_1, \tau(r)) \Delta p(z_2, \tau(r)) f(\tau(r)))}{\partial r^k} \Bigg|_{r=0} r^k$$

и проинтегрируем в промежутке $[r_1, r_2]$.

В результате, начальный момент второго порядка распределения ННЗ по глубине при случайном изменении времени жизни ННЗ имеет вид:

$$\Theta_{\Delta p}(z_1, z_2) = \sum_{k=0}^{\infty} \int_{r_1}^{r_2} \frac{1}{k!} \frac{\partial^k (\Delta p(z_1, \tau(r)) \Delta p(z_2, \tau(r)) f(\tau(r)))}{\partial r^k} \Bigg|_{r=0} r^k dr. \quad (3.43)$$

Таким образом, автокорреляционная функция распределения ННЗ по глубине при случайном изменении времени жизни ННЗ имеет вид:

$$\begin{aligned} R_{\Delta p}(z_1, z_2) &= \sum_{k=0}^{\infty} \int_{r_1}^{r_2} \frac{1}{k!} \frac{\partial^k (\Delta p(z_1, \tau(r)) \Delta p(z_2, \tau(r)) f(\tau(r)))}{\partial r^k} \Bigg|_{r=0} r^k dr - \\ &- m_{\Delta p}(z_1) m_{\Delta p}(z_2) \end{aligned} \quad (4.44)$$

Для остальных случайных коэффициентов D и v_s рассмотрение проводится аналогично, поэтому приводятся только результаты такого анализа.

3.5. Выводы

1) Разработан универсальный подход к решению задачи статистического анализа модели коллективного движения ННЗ со случайными электрофизическими параметрами (временем жизни, коэффициентом диффузии и скоростью поверхностной рекомбинации ННЗ по глубине) с использованием проекционного метода. Рассмотренный подход имеет преимущества перед другими методами, область применения которых ограничена, очевидно, малыми флуктуациями. Он также не требует предположений о медленных вариациях или о белом шуме, кроме того, предложенный метод можно считать достаточно универсальным, поскольку его применение не ограничивается гипотезой о нормальности закона распределения указанных параметров; данный метод также можно распространить на любую корректную краевую задачу для любого линейного дифференциального уравнения в частных производных.

2) Построены сходящиеся матричные ряды и рассмотрена оптимизация скорости сходимости итерационных процессов, аппроксимирующих проекционные характеристики математического ожидания и автокорреляционной функции распределения ННЗ, которая укладывается в общую схему итерационных процессов с нарушением стационарности, даны оценки быстроты сходимости этих итерационных процессов в терминах нормы.

3) Характерной особенностью разработанных алгоритмов (3.24), (3.31) и (3.37), (3.38) является то, что быстрота сходимости данных рядов не зависит от порядка матриц, а определяется лишь их обусловленностью в промежутке, в котором осуществлена подготовка.

4) При практических расчетах число членов этих рядов может достигать нескольких тысяч, причем многие из членов могут быть вычислены независимо друг от друга. Возможно объединение независимо вычисляемых членов в группы и параллельное вычисление этих групп на отдельных процессорах. Выбор Grid-систем в качестве вычислительной среды накладывает известные ограничения на характер распараллеливания алгоритмов, но алгоритмы анализа, рассмотренные в данной работе, отличаются тем, что в них могут распараллеливаться не элементарные матричные операции, а относительно крупные части алгоритма, что позволяет, с одной стороны хорошо загрузить процессоры сетевых компьютеров, а с другой – избежать перегрузки сети частыми передачами больших объемов данных.

5) Получены аналитические выражения для моментных функций распределения ННЗ с использованием модели независимых источников.

**ГЛАВА 4. ИССЛЕДОВАНИЕ ВЛИЯНИЯ СЛУЧАЙНЫХ
СОСТАВЛЯЮЩИХ В ЭЛЕКТРОФИЗИЧЕСКИХ ПАРАМЕТРАХ НА
РАСПРЕДЕЛЕНИЕ НЕОСНОВНЫХ НОСИТЕЛЕЙ ЗАРЯДА.
РЕЗУЛЬТАТЫ РАСЧЁТОВ ДЛЯ ПАРАМЕТРОВ, ХАРАКТЕРНЫХ ДЛЯ
КЛАССИЧЕСКИХ ПОЛУПРОВОДНИКОВЫХ МАТЕРИАЛОВ**

4.1. Исследование влияния случайных составляющих в электрофизических параметрах на распределение носителей заряда по глубине полупроводника при использовании модели коллективного движения

Ниже представлены результаты расчетов с помощью математического пакета Matlab (MathWorks, Inc.) для параметров мишеней, характерных для монокристаллического кремния (Si), арсенида галлия (GaAs) и теллурида кадмия (CdTe). Рассмотрены два случая генерации ННЗ в полупроводниках: облучаемых широким электронным пучком и электромагнитным излучением.

Точность аппроксимации модели коллективного движения существенно зависит от точности расчета коэффициентов Фурье и приближения функции $\rho(z)$, поэтому задача построения приближенного решения сводится к приближенному представлению этой функций с заданной точностью. Приемлемое для проведения практических расчетов приближение функции $\rho(z)$ было получено уже для 13 членов ряда Фурье по модифицированным функциям Лагерра с параметрами γ и α , ускоряющими сходимость ряда. Найдена оценка относительной погрешности приближения по норме пространства $L_2[0, \infty)$ [77] (среднее квадратическое от-

клонение) функции $\rho(z)$ для электронного пучка с энергией $E_0 = 10, 20$ и 30 кэВ и для светового пучка с коэффициентом поглощения в кремнии $\alpha_1 = 10^{-5}, 10^{-3}$ и 10^{-1} мкм $^{-1}$ [142]:

$$\Delta(\rho, \rho^{13}) = \frac{\|\rho(z) - \rho^{13}(z)\|_{L_2[0,\infty)}}{\|\rho(z)\|_{L_2[0,\infty)}} \cdot 100\% < 1,4302\%$$

Результаты этих расчетов приведены на рис 1 – рис. 5. Кривые точных и приближенных (формула (2.3)) представления функции $\rho(z)$ при использовании в разложении 13 членов ряда по базису из модифицированных функций Лагерра в выбранном масштабе практически совпадают.

Для оценки относительной погрешности между 12 и 13 приближением решения дифференциального уравнения (1.21), (1.22) для функции $\rho(z)$ электронного и светового пучка получено:

$$\Delta(\delta p^{12}, \delta p^{13}) < 0,55\%.$$

Из этого выражения видно, что проекционный метод позволяет получить приближенное решение для параметров мишеней, характерных для различных полупроводниковых материалов с использованием небольшого числа членов разложения ($m = 13$) по базису из модифицированных функций Лагерра для достижения приемлемой точности.

Далее приведем оценки относительных погрешностей между 3 и 4 приближениями математического ожидания и моментной функции второго порядка $\Delta p(z)$ для электронного пучка при условии, что скорость поверхностной рекомбинации ν_s является случайной величиной, которая распределена по нормальному усеченному закону, с математическим ожиданием $m_{\nu_s} = 10^{10}$ мкм/с и средним квадратическим отклонением $\sigma_{\nu_s} = 10^{10}$ мкм/с, ее возможные значения принадлежат промежутку [96]: $\nu_s \in [10^9 \text{ мкм/с}, 10^{11} \text{ мкм/с}]$ и для светового пучка:

$m_{v_s} = 10^6$ мкм/с, $\sigma_{v_s} = 10^6$ мкм/с и $v_s \in [10^5 \text{ мкм/с}, 10^7 \text{ мкм/с}]$. Для функции $\rho(z)$ электронного и светового пучка были получены следующие результаты:

$$\Delta\left({}_4 m_{p_{13}}, {}_3 m_{p_{13}}\right) < 0,12\%,$$

$$\Delta\left({}_4 \Theta_{p_{13}}, {}_3 \Theta_{p_{13}}\right) < 1,1\%.$$

Здесь использовались следующие параметры итерационных процессов: $\mu = 30$, $k = 1$.

Приведем оценки относительных погрешностей между 3 и 4 приближениями математического ожидания и моментной функции второго порядка $\Delta p(z)$ при условии, что коэффициент диффузии D является случайной величиной, которая распределена по нормальному усеченному закону с математическим ожиданием $m_D = 2 \cdot 10^7$ мкм²/с и средним квадратическим отклонением $\sigma_D = 10^8$ мкм²/с, ее возможные значения принадлежат промежутку [90]: $D \in [10^7 \text{ мкм}^2/\text{с}, 10^9 \text{ мкм}^2/\text{с}]$.

Для функции $\rho(z)$ электронного и светового пучка были получены следующие результаты:

$$\Delta\left({}_4 m_{p_{13}}, {}_3 m_{p_{13}}\right) < 0,5\%,$$

$$\Delta\left({}_4 \Theta_{p_{13}}, {}_3 \Theta_{p_{13}}\right) < 2\%.$$

Здесь использовались следующие параметры итерационных процессов: $\mu = 20$, $k = 1$.

Приведем оценки относительных погрешностей между 3 и 4 приближениями математического ожидания и моментной функции второго порядка $\Delta p(z)$ при условии, что время жизни τ является случайной величиной, которая распределена по нормальному усеченному закону с математическим ожиданием $m_\tau = 10^{-8}$ с и средним квадратическим отклонением $\sigma_\tau = 2 \cdot 10^{-9}$ с, ее возможные значения принадлежат промежутку [96]: $\tau \in [10^{-9} \text{ с}, 10^{-7} \text{ с}]$. Для функции $\rho(z)$ электронного и светового пучка были получены следующие результаты:

$$\Delta\left({}_4m_{p_{13}}, {}_3m_{p_{13}}\right) < 0,48\%,$$

$$\Delta\left({}_4\Theta_{p_{13}}, {}_3\Theta_{p_{13}}\right) < 2,1\%.$$

Здесь использовались следующие параметры итерационных процессов: $\mu = 10$, $k = 1$.

Для функции $\rho(z)$ электронного и светового пучка также были найдены следующие оценки относительных погрешностей, которые показывают влияние на распределение ННЗ по глубине дисперсии случайного коэффициента ν_s :

$$\Delta\left({}_4m_{p_{13}}, \Delta p_{13}\right) < 1,76\%,$$

$$\tilde{\Delta}\left(\sqrt{{}_4D_{p_{13}}(z)}, {}_4m_{p_{13}}(z)\right) = \frac{\left\|\sqrt{{}_4D_{p_{13}}(z)}\right\|_{L_2[0,\infty)}}{\left\|{}_4m_{p_{13}}(z)\right\|_{L_2[0,\infty)}} \cdot 100\% < 1,98\%, \quad (4.1)$$

случайного коэффициента D :

$$\Delta\left({}_4m_{p_{13}}, \Delta p_{13}\right) < 3,42\%,$$

$$\tilde{\Delta}\left(\sqrt{{}_4D_{p_{13}}}, {}_4m_{p_{13}}\right) < 6,7\%, \quad (4.2)$$

случайного коэффициента τ :

$$\Delta\left({}_4m_{p_{13}}, \Delta p_{13}\right) < 5\%,$$

$$\tilde{\Delta}\left(\sqrt{{}_4D_{p_{13}}}, {}_4m_{p_{13}}\right) < 14,95\%. \quad (4.3)$$

Из соотношений (4.1)-(4.3) видно, что оценки относительных погрешностей между 13-ым приближением усредненной случайной функции распределения ННЗ по глубине (ее математическим ожиданием) и 13 приближением функции распределения ННЗ по глубине (см. (2.5)), генерируемых широким электронным пучком с энергией $E_0 = 10, 20$ и 30 кэВ и инфракрасным излучением с коэффициентом поглощения $\alpha_1 = 10^{-5}, 10^{-3}$ и 10^{-1} мкм⁻¹ не превышают пяти процентов, а статистический разброс (среднее квадратическое отклонение) распределения ННЗ по глубине относительно его усредненного значения (математического ожидания)

не превышает пятнадцати процентов. Это означает, что данным дисперсиям коэффициентов D , τ и ν_s исходной модели соответствует сравнительно небольшой разброс (дисперсия) распределения ННЗ по глубине относительно его усредненного значения, а усредненное значение распределения ННЗ по глубине будет незначительно отличаться от неслучайной функции $\Delta p(z)$.

Результаты статистического анализа модели коллективного движения ННЗ, генерируемых широким электронным пучком с энергией $E_0 = 20$ кэВ в кремнии, арсениде галлия и теллуриде кадмия и инфракрасным излучением при 3-х коэффициентах поглощения $\alpha = 3 \cdot 10^{-5}$, $5 \cdot 10^{-5}$ и 10^{-4} мкм⁻¹ в кремнии представлены на рис. 4.1-рис. 4.8. На рис. 4.1 (а) изображены кривые приближения функции распределения плотности потерь энергии широким электронным пучком с энергией $E = 20$ кэВ в кремнии (кривая 1), арсениде галлия (2) и теллуриде кадмия (3). Используются 13 модифицированных функций Лагерра. Значения модифицирующих параметров равны: $\gamma = 5$, $\alpha = 0$ (кривая 1); $\gamma = 10$, $\alpha = 0$ (2); $\gamma = 10$, $\alpha = 0$ (3). В выбранном масштабе кривые $\rho(z)$, построенные по аналитическому выражению, совпадают с кривыми приближений. На рис. 4.1 (б) изображены усредненные значения (математические ожидания) распределения ННЗ после их диффузии в кремнии (кривая 1), арсениде галлия (2) и теллуриде кадмия (3), вычисленные в 13-м приближении при случайном изменении τ , а на рис. 4.2 семейство реализаций случайного распределения ННЗ по глубине при случайном изменении коэффициентов τ , D , и ν_s соответственно для полупроводникового материала кремния. На рис. 4.3 показана дисперсия и автокорреляционная функция распределения ННЗ по глубине при случайном изменении параметров τ , D и ν_s соответственно. На рис. 4.4 (а) изображены кривые приближения скорости генерации световым пучком электронно-дырочных пар в кремнии при $\alpha_1 = 3 \cdot 10^{-5}$ мкм⁻¹ (кривая 1), при $\alpha_1 = 5 \cdot 10^{-5}$ мкм⁻¹ (кривая 2) и при $\alpha_1 = 10^{-4}$ мкм⁻¹ (кривая 3) мкм⁻¹. Используются 13 модифицированных функций Лагерра. Значения модифицирующих параметров равны: $\gamma = 6 \cdot 10^{-5}$, $\alpha = 0$ (кривая 1); $\gamma = 10^{-4}$, $\alpha = 0$ (2);

$\gamma = 2 \cdot 10^{-4}$, $\alpha = 0$ (3). Кривые $\rho(z)$, построенные по аналитическому выражению, совпадают с кривыми приближений. На рис. 4.4 (б) изображены усредненные значения (математические ожидания) распределения ННЗ после их диффузии для кремния при $\alpha_1 = 3 \cdot 10^{-5}$ (кривая 1), $\alpha_1 = 5 \cdot 10^{-5}$ (2) и $\alpha_1 = 10^{-4}$ (3) мкм⁻¹ соответственно, вычисленные в 13-м приближении при случайном изменении τ . На рис. 4.5 (а) изображены дисперсии распределения ННЗ по глубине для кремния при $\alpha_1 = 3 \cdot 10^{-5}$ (кривая 1), $\alpha_1 = 5 \cdot 10^{-5}$ (2) и $\alpha_1 = 10^{-4}$ (3) соответственно и корреляционная функция (б) при $\alpha_1 = 10^{-4}$ мкм⁻¹, вычисленные в 13-м приближении при случайном изменении τ . Для остальных случайных коэффициентов (D и ν_s) графические изображения статистических характеристик распределения ННЗ по глубине имеют такой же вид, как и для случайного коэффициента τ . На рис. 4.6 изображено семейство реализаций случайного распределения ННЗ по глубине при случайном изменении коэффициентов τ , D , и ν_s соответственно для полупроводникового материала кремния.

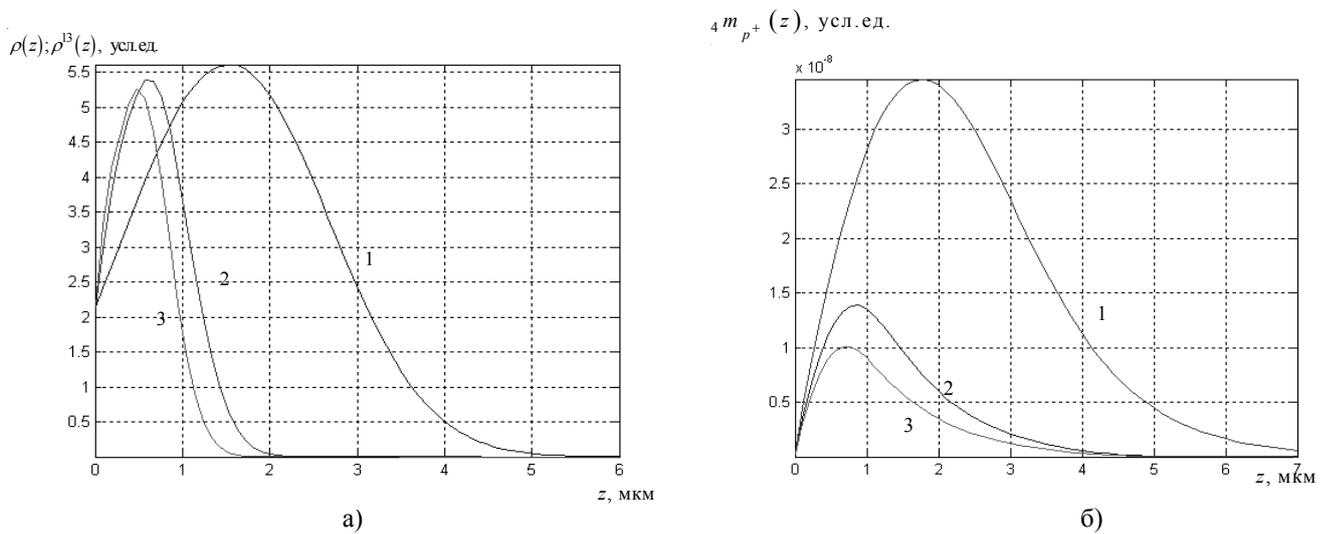
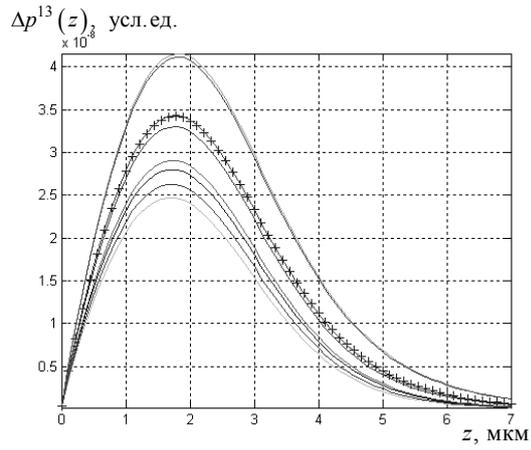
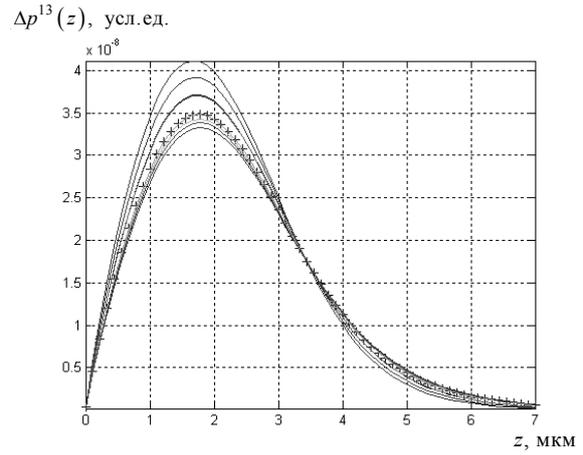


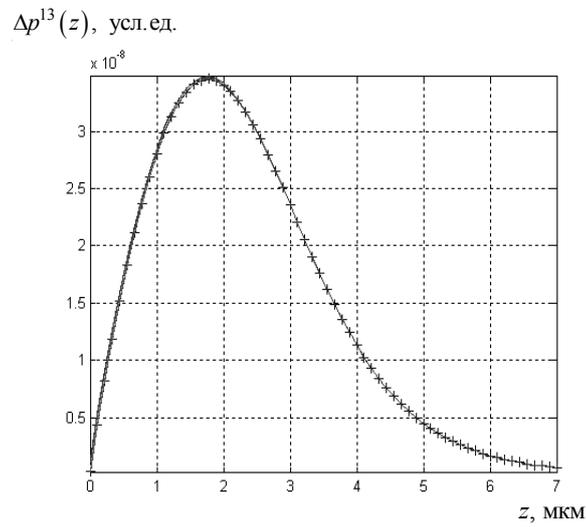
Рис. 4.1. Распределения плотности потерь энергии электронным пучком и математические ожидания распределения ННЗ по глубине, вычисленные в 13-м приближении при случайном изменении τ в кремнии (а), (б) (кривая 1), арсениде галлия (а), (б) (2) и теллуриде кадмия (а), (б) (3).



а)

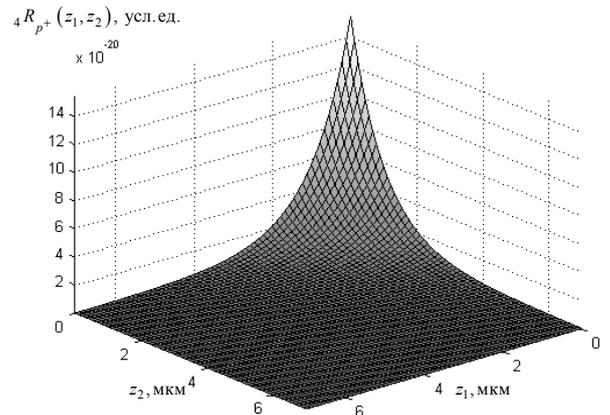
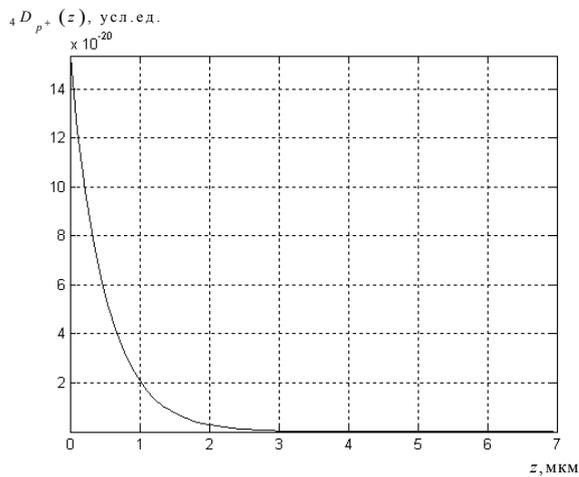
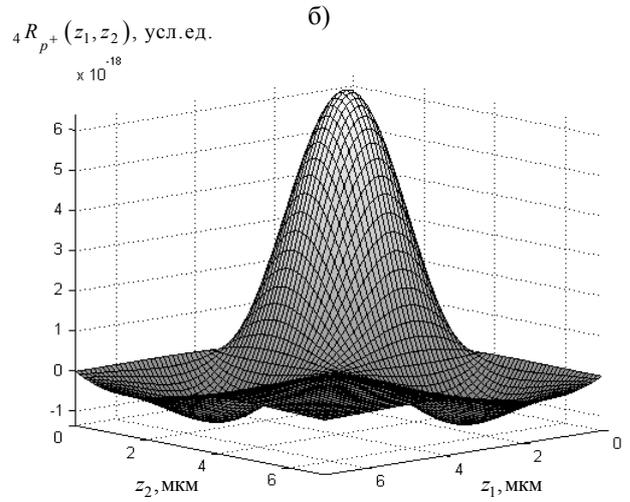
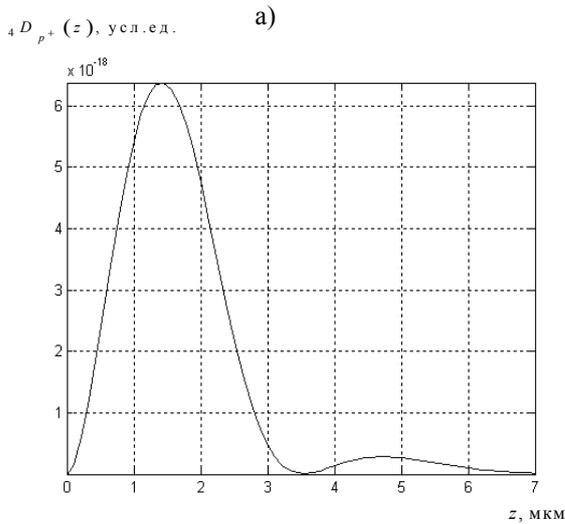
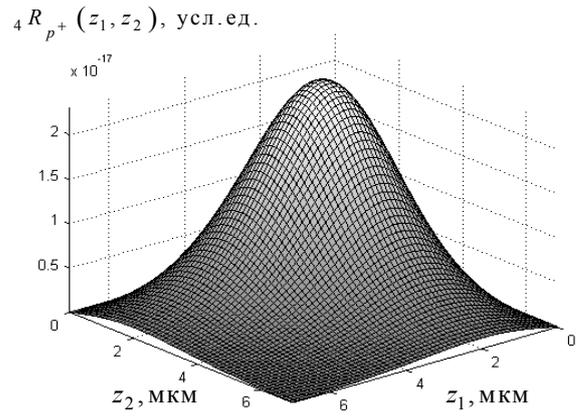
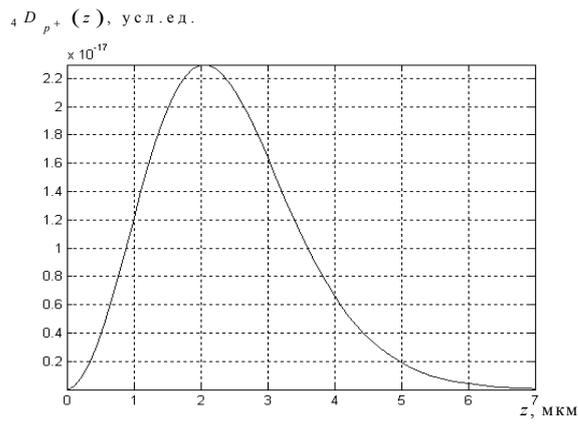


б)



в)

Рис. 4.2. Семейство реализаций случайного распределения ННЗ по глубине, вычисленное в 13-м приближении в кремнии: при случайном изменении τ (а), при случайном изменении D (б), при случайном изменении V_S (в) соответственно.



д)

е)

Рис. 4.3. Дисперсии и автокорреляционные функции распределения ННЗ по глубине, вычисленные в 13-м приближении в полупроводнике из кремния: при случайном изменении τ (а), (б), при случайном изменении D (в), (г), при случайном изменении V_S (д), (е) соответственно.

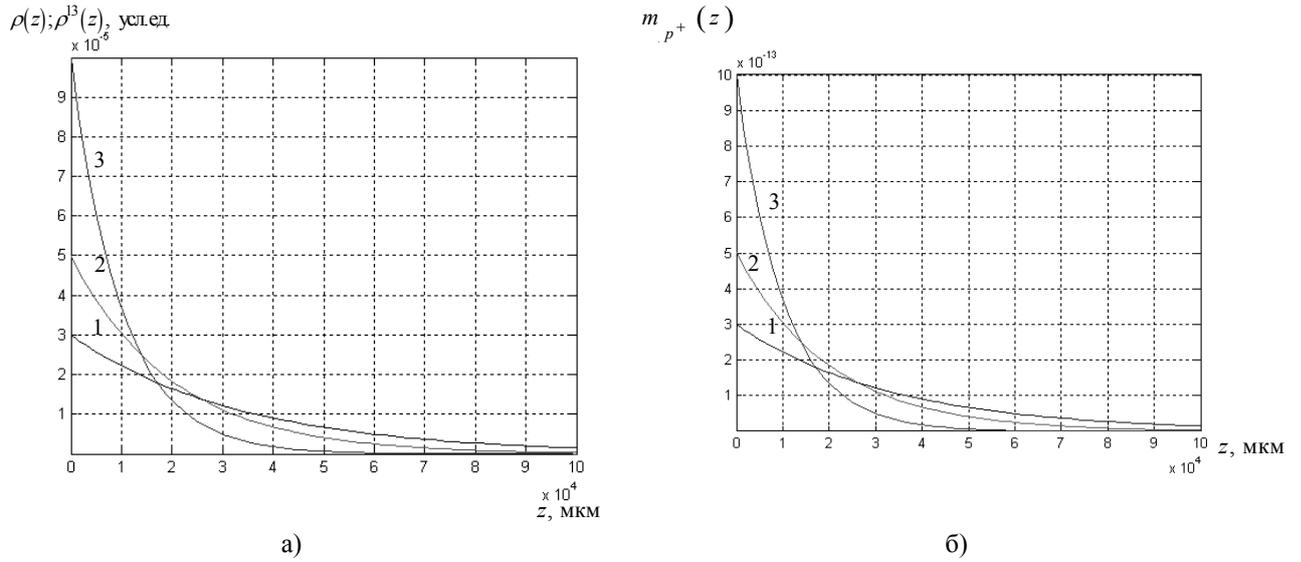


Рис. 4.4 Кривые приближения скорости генерации световым пучком электронно-дырочных пар в кремнии (а) и усредненные значения (математические ожидания) распределения ННЗ после их диффузии (б) при $\alpha_1 = 3 \cdot 10^{-5}$ (кривая 1), $\alpha_1 = 5 \cdot 10^{-5}$ (2) и $\alpha_1 = 10^{-4}$ (3) $\mu\text{м}^{-1}$ соответственно, вычисленные в 13-м приближении при случайном изменении τ .

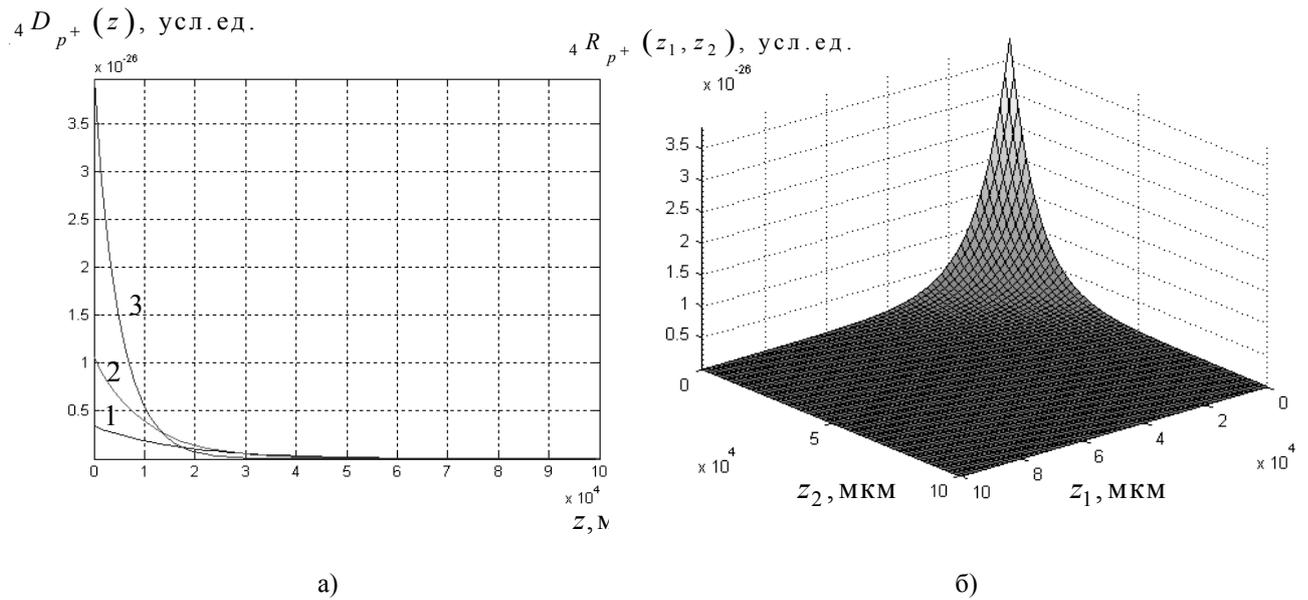
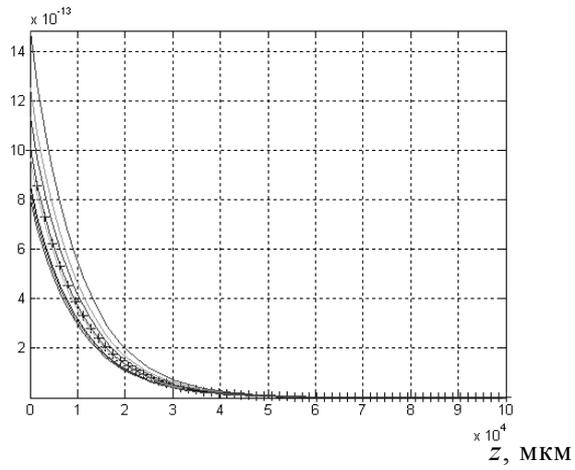
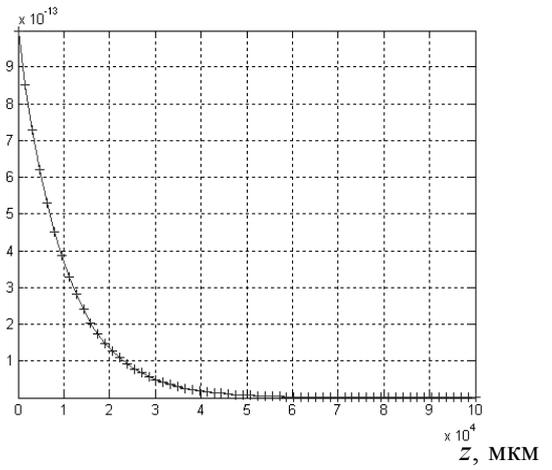


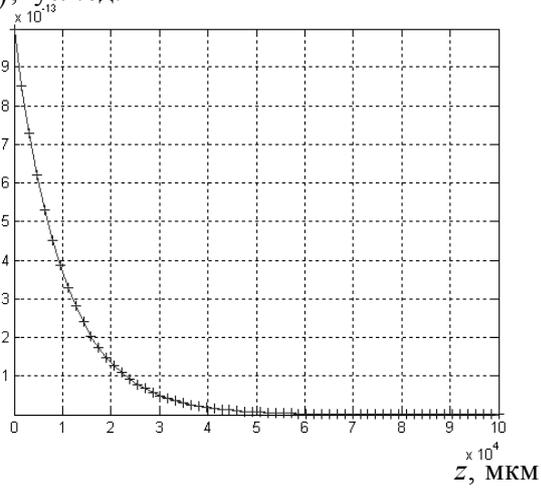
Рис. 4.5. Дисперсии (а) при $\alpha_1 = 3 \cdot 10^{-5}$ (кривая 1), $\alpha_1 = 5 \cdot 10^{-5}$ (2) и $\alpha_1 = 10^{-4}$ (3) $\mu\text{м}^{-1}$ для кремния соответственно и корреляционная функция распределения ННЗ по глубине (б) при $\alpha_1 = 10^{-4}$ $\mu\text{м}^{-1}$, вычисленные в 13-м приближении при случайном изменении τ .

$\Delta p^{13}(z)$, усл.ед.


а)

 $\Delta p^{13}(z)$, усл.ед.


б)

 $\Delta p^{13}(z)$, усл.ед.


в)

Рис. 4.6. Семейство реализаций случайного распределения ННЗ по глубине, вычисленное в 13-м приближении в кремнии: при случайном изменении τ (а), при случайном изменении D (б), при случайном изменении V_S (в) соответственно.

4.2. Сравнительный анализ использования модели коллективного движения носителей заряда и модели независимых источников

Приведены оценки относительных погрешностей, которые показывают сравнение результатов, полученных использованием двух моделей – модели коллективного движения и модели независимых источников:

Для оценки относительной погрешности между 13 приближением по модифицированным функциям Лагерра решения дифференциального уравнения (1.21), (1.22) и аналитическим выражением для распределения избыточных ННЗ, генерируемых электронным пучком (3.39) в кремнии, арсениде галлия и теллуриде кадмия и световым пучком в кремнии получено:

$$\Delta(\delta p^{13}, \delta p) < 2\%.$$

Далее приведем оценки относительных погрешностей между 13 приближением математического ожидания и моментной функции второго порядка для $\Delta p(z)$ по модифицированным функциям Лагерра и их аналитическими выражениями с использованием 5 членов ряда (3.41) и (3.43) для следующих параметров:

$$m_{v_s} = 10^{10} \text{ мкм/с}, \quad \sigma_{v_s} = \sqrt{D_{v_s}} = 10^{10} \text{ мкм/с} \quad \text{и} \quad m_{v_s} = 10^6 \text{ мкм/с},$$

$$\sigma_{v_s} = \sqrt{D_{v_s}} = 10^6 \text{ мкм/с}; \quad m_D = 10^8 \text{ мкм}^2/\text{с}, \quad \sigma_D = \sqrt{D_D} = 2 \cdot 10^7 \text{ мкм}^2/\text{с}; \quad m_\tau = 10^{-8} \text{ с и}$$

$$\sigma_\tau = \sqrt{D_\tau} = 2 \cdot 10^{-9} \text{ с};$$

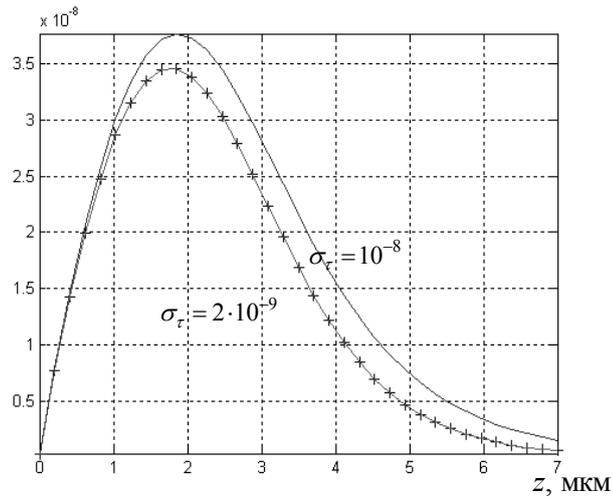
$$\Delta\left({}_4 m_{\Delta p_{13}}, m_{\Delta p}\right) < 3,80\%,$$

$$\Delta\left({}_4 \Theta_{\Delta p_{13}}, \Theta_{\Delta p}\right) < 4,99\%.$$

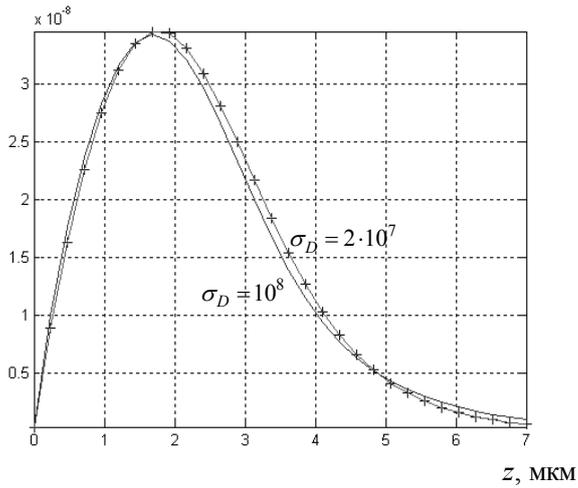
Сравнительный анализ использования двух моделей распределения ННЗ (модели коллективного движения и модели независимых источников) показал, что оценка относительной погрешности приближения по норме пространства $L_2[0, \infty)$ (среднее квадратическое отклонение) между 13-ым приближением по модифицированным функциям Лагерра и аналитическими выражениями с использованием 5 членов степенного ряда для моментных функций распределения ННЗ, генерируемых электронным пучком в кремнии, арсениде галлия и теллуриде кадмия и световым пучком в кремнии не превышает 5 процентов.

На рис. 4.7 изображены распределение ННЗ по глубине, генерируемых электронным пучком (график отмечен крестиками) и его средние значения (математические ожидания), вычисленные в 13-м приближении по модифицированным функциям Лагерра при случайном изменении коэффициентов τ , D и ν_s в случаях, когда а) $m_\tau = 10^{-8}$ с, $\sigma_\tau = 2 \cdot 10^{-9}$ с и $\sigma_\tau = 10^{-8}$ с; б) $m_D = 10^8$ мкм²/с, $\sigma_D = 2 \cdot 10^7$ мкм²/с и $\sigma_D = 10^8$ мкм²/с; в) $m_{\nu_s} = 10^{10}$ мкм/с, $\sigma_{\nu_s} = 10^{10}$ мкм/с. На рис. 4.8 изображены распределение ННЗ по глубине, генерируемых световым пучком (график отмечен крестиками) и его средние значения (математические ожидания), вычисленные в 13-м приближении по модифицированным функциям Лагерра при случайном изменении коэффициентов τ , D и ν_s в случаях, когда а) $m_\tau = 10^{-8}$ с, $\sigma_\tau = 2 \cdot 10^{-9}$ с и $\sigma_\tau = 10^{-8}$ с; б) $m_D = 10^8$ мкм²/с, $\sigma_D = 2 \cdot 10^7$ мкм²/с и $\sigma_D = 10^8$ мкм²/с; в) $m_{\nu_s} = 10^6$ мкм/с, $\sigma_{\nu_s} = 10^6$ мкм/с.

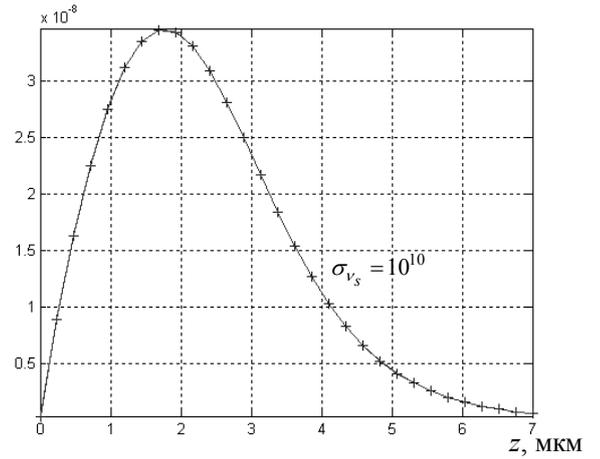
Из графиков видно, что наибольшее влияние на распределение ННЗ по глубине оказывает случайное изменение коэффициента τ , а наименьшее ν_s . Для остальных полупроводниковых материалов имеется такая же закономерность, как и для кремния.

$4m_{p_{13}}(z); \Delta p(z), \text{ усл. ед.}$


а)

 $4m_{p_{13}}(z); \Delta p(z), \text{ усл. ед.}$


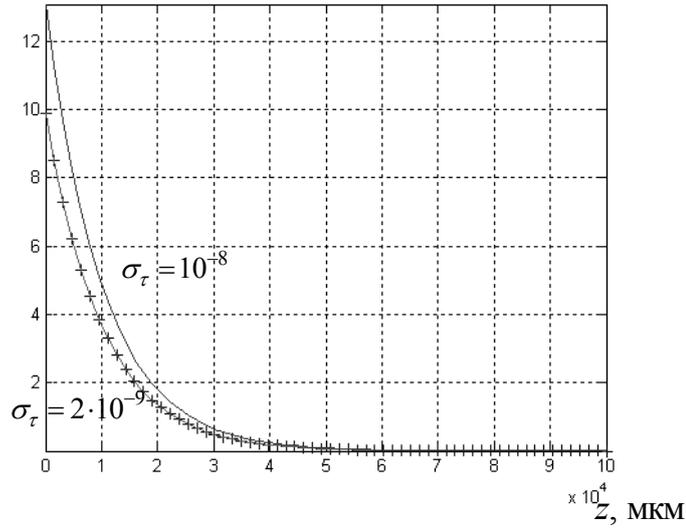
б)

 $4m_{p_{13}}(z); \Delta p(z), \text{ усл. ед.}$


в)

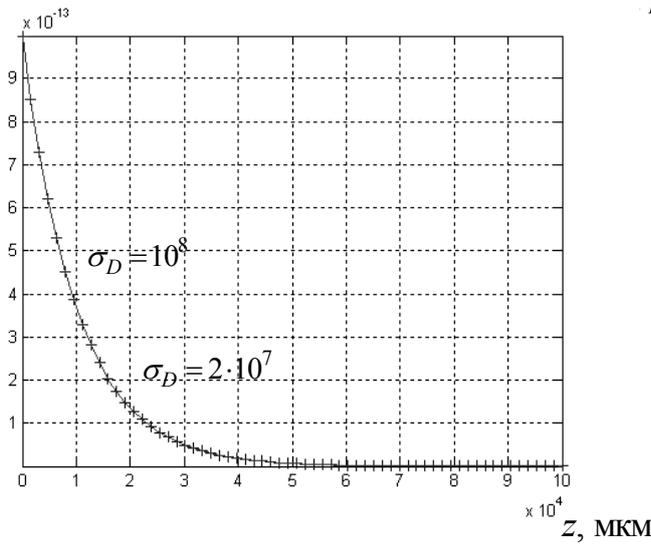
Рис. 4.7. Функция распределения ННЗ, генерированных электронным пучком после их диффузии в кремнии (график отмечен крестиками) и ее усредненные значения (математические ожидания - графики непрерывной линией), вычисленные в 13-м приближении модифицированными функциями Лагерра при случайном изменении следующих параметров полупроводника: τ (а), D (б) и V_s (в)

$4^m_{P_{13}}(z); \Delta p(z), \text{ усл. ед.}$



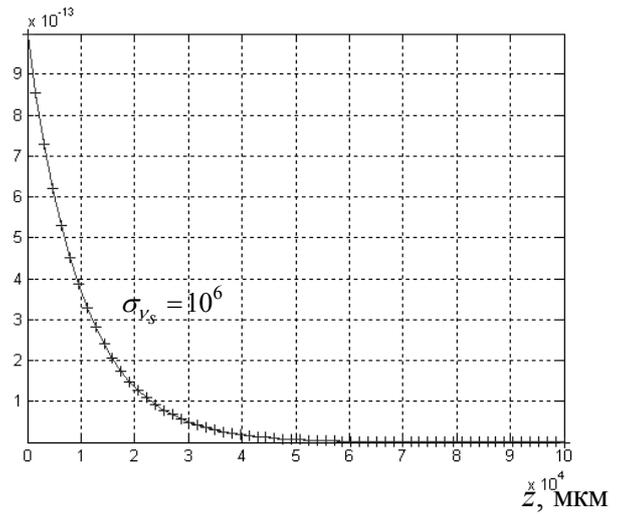
а)

$4^m_{P_{13}}(z); \Delta p(z), \text{ усл. ед.}$



б)

$4^m_{P_{13}}(z); \Delta p(z), \text{ усл. ед.}$



в)

Рис. 4.8. Функция распределения ННЗ, генерированных световым пучком после их диффузии в кремнии (график отмечен крестиками) и ее усредненные значения (математические ожидания - графики непрерывной линией), вычисленные в 13-м приближении модифицированными функциями Лагерра при случайном изменении следующих параметров полупроводника: τ (а), D (б) и V_s (в)

4.3. Сравнительный анализ результатов моделирования распределения носителей заряда, генерированных световым и электронным пучком с экспериментальной кривой электрического тока по глубине полупроводника

В работе проведен сравнительный анализ результатов моделирования распределения ННЗ, генерированных световым пучком в германии-кремнии ($\text{Ge}_{0,3}\text{Si}_{0,7}$) и электронным пучком в кремнии при использовании модели коллективного движения с экспериментальной кривой электрического тока.

Результаты моделирования распределения неосновных носителей заряда (ННЗ), генерированных световым пучком в германии-кремнии ($\text{Ge}_{0,3}\text{Si}_{0,7}$) представлены на рис. 4.9. Приемлемое для проведения практических расчетов приближение функции $\rho(z)$ для светового пучка с коэффициентами поглощения $\alpha_1 = 0,1 \text{ нм}^{-1}$ было получено уже для 13 членов ряда Фурье по модифицированным функциям Лагерра:

$$\Delta(\rho, \rho^{13}) = 0,164\%.$$

Оценка относительной погрешности между 12-м и 13-м приближением решения дифференциального уравнения (1.21), (1.22) следующая:

$$\Delta(\delta p^{12}, \delta p^{13}) = 0,0628\%.$$

Значения модифицирующих параметров равны: $\gamma = 0,2$, $\alpha = 0$. На рис. 4.9 (а) изображена скорость генерации световым пучком электронно-дырочных пар в германии-кремнии ($\text{Ge}_{0,3}\text{Si}_{0,7}$) (график отмечен крестиками) и результат ее аппроксимации для этой мишени с использованием 13 функций Лагерра. Видно, что кривые $\rho(z)$, построенные по аналитическому выражению, в выбранном масшта-

бе практически совпадают с кривыми приближений. На рис. 4.9 (б) изображены распределения ННЗ по глубине, генерированных световым пучком в германии-кремнии ($\text{Ge}_{0,3}\text{Si}_{0,7}$), вычисленные в 13-м приближении по модифицированным функциям Лагерра (тонкая непрерывная кривая), а также сигнал фототока $I(z)$, измеренный методом сканирующей ближнепольной оптической микроскопии (СБОМ) по глубине полупроводника при комнатной температуре [143] (экспериментальные точки). С помощью математического моделирования были установлены электрофизические параметры τ , D и ν_s : $\tau = 1,1 \cdot 10^{-9}$ с, $D = 10^{12}$ нм²/с и $\nu_s = 2 \cdot 10^7$ нм/с, которые обеспечивают приемлемую точность совпадения экспериментальных данных с расчетными.

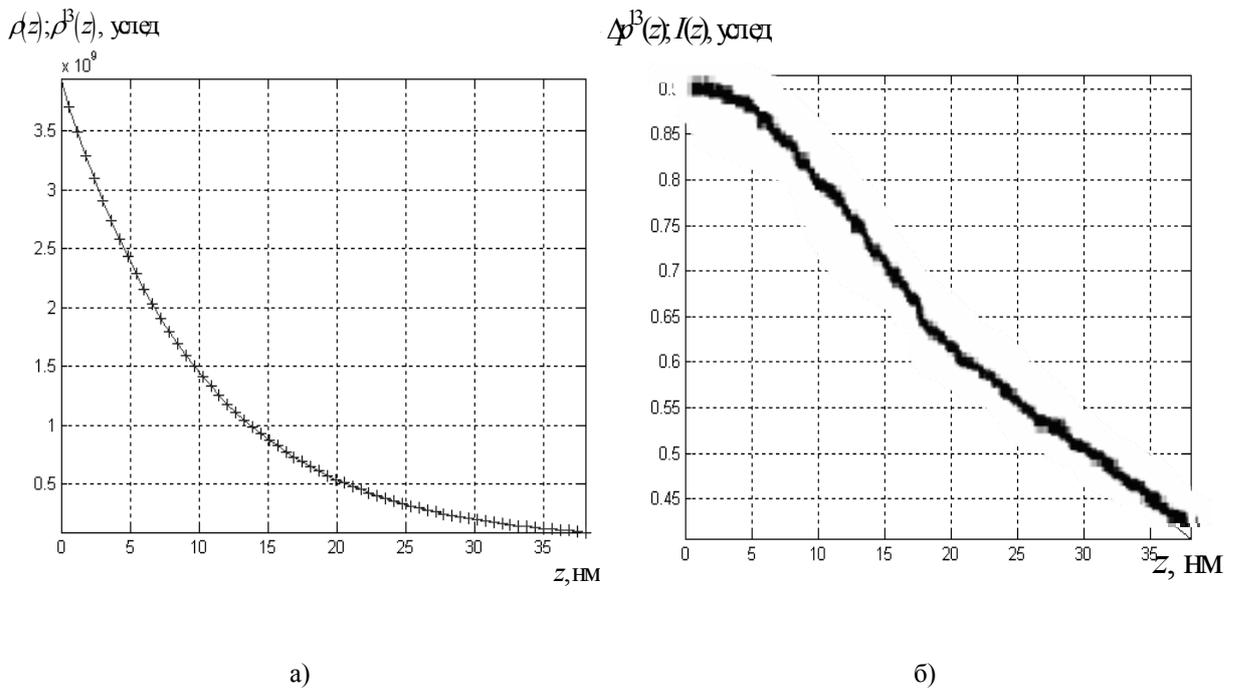


Рис. 4.9. Скорость генерации световым пучком электронно-дырочных пар в германии-кремнии ($\text{Ge}_{0,3}\text{Si}_{0,7}$) (а) (график отмечен крестиками) и результат ее аппроксимации 13-м приближением модифицированными функциями Лагерра (непрерывная линия); функция распределения ННЗ, генерированных световым пучком в германии-кремнии ($\text{Ge}_{0,3}\text{Si}_{0,7}$), вычисленная в 13-м приближении (б) (тонкая непрерывная линия) и сигнал фототока, измеренный методом СБОМ в германии-кремнии ($\text{Ge}_{0,3}\text{Si}_{0,7}$) [143] (экспериментальные точки).

Далее приведем оценки относительных погрешностей между 4-м и 5-м приближениями математического ожидания и моментной функции второго порядка

$\Delta p(z)$, для следующих параметров: $m_{v_s} = 2 \cdot 10^7$ нм/с, $\sigma_{v_s} = 2 \cdot 10^7$ нм/с; $m_D = 10^{12}$ нм²/с, $\sigma_D = 2 \cdot 10^{11}$ нм²/с; $m_\tau = 1,1 \cdot 10^{-9}$ с и $\sigma_\tau = 2,2 \cdot 10^{-10}$ с:

$$\Delta\left({}_5m_{p_{13}}, {}_4m_{p_{13}}\right) < 0,63\%,$$

$$\Delta\left({}_5\Theta_{p_{13}}, {}_4\Theta_{p_{13}}\right) < 3,04\%.$$

Следующие оценки относительных погрешностей показывают влияние на распределение ННЗ по глубине значения СКО случайного коэффициента v_s , составляющего $\sigma_{v_s} = 2 \cdot 10^7$ нм/с:

$$\Delta\left({}_5m_{p_{13}}, \Delta p^{13}\right) = 0,66\%,$$

$$\tilde{\Delta}\left(\sqrt{{}_5D_{p_{13}}}(z), {}_5m_{p_{13}}(z)\right) = 1,9\%. \quad (4.4)$$

Аналогичные оценки имеют место для СКО $\sigma_D = 2 \cdot 10^{11}$ нм²/с случайного коэффициента D :

$$\Delta\left({}_5m_{p_{13}}, \Delta p^{13}\right) = 0,73\%,$$

$$\tilde{\Delta}\left(\sqrt{{}_5D_{p_{13}}}, {}_5m_{p_{13}}\right) = 6,19\% \quad (4.5)$$

и для СКО $\sigma_\tau = 2,2 \cdot 10^{-10}$ с случайного коэффициента τ :

$$\Delta\left({}_5m_{p_{13}}, \Delta p^{13}\right) = 0,96\%,$$

$$\tilde{\Delta}\left(\sqrt{{}_5D_{p_{13}}}, {}_5m_{p_{13}}\right) = 13,51\%. \quad (4.6)$$

Из соотношений (4.4)-(4.6) видно, что оценки относительных погрешностей между 13-м приближением усредненной случайной функции распределения ННЗ по глубине (ее математическим ожиданием) и 13-м приближением функции распределения ННЗ по глубине не превышают 1%, а статистический разброс (СКО) распределения ННЗ по глубине относительно его усредненного значения (математического ожидания) не превышает 15%. Это означает, что данным дисперсиям коэффициентов D , τ и v_s исходной модели соответствует сравнительно небольшой разброс (дисперсия) распределения ННЗ по глубине относительно его усред-

ненного значения, а усредненное значение распределения ННЗ по глубине будет незначительно отличаться от неслучайной функции $\Delta p(z)$, а значит и кривой фототока $I(z)$.

Результаты моделирования явления диффузии неосновных носителей заряда (ННЗ), генерированных электронным пучком в полупроводниковом материале из кремния представлены на рис. 4.10.

Приемлемое для проведения практических расчетов приближение функции $\rho(z)$ для электронного пучка с энергией $E_0 = 8$ кэВ было получено для 15 членов ряда Фурье по модифицированным функциям Лагерра:

$$\Delta(\rho, \rho^{15}) = 2,12\%.$$

Результаты выполненных расчетов приведены на рис 4.10.

Оценка относительной погрешности между 14-м и 15-м приближением решения дифференциального уравнения (1.21), (1.22) следующая:

$$\Delta(\delta p^{14}, \delta p^{15}) = 2,628\%.$$

Значения модифицирующих параметров равны: $\gamma = 3$, $\alpha = 0$. На рис. 4.10 (а) изображено распределение плотности потерь энергии электронным в кремнии (график отмечен крестиками) и результат его аппроксимации для этих мишеней с использованием 15 функций Лагерра. На рис. 4.10 (б) изображено распределение ННЗ по глубине, генерированных электронным пучком в кремнии, вычисленное в 15-м приближении по модифицированным функциям Лагерра (тонкая непрерывная кривая), а также сигнал электрического тока $I(z)$, измеренный методом наведенного электронным пучком тока при комнатной температуре [144]. С помощью математического моделирования были установлены электрофизические параметры τ , D и v_s : $\tau = 5 \cdot 10^{-8}$ с, $D = 10^9$ мкм²/с и $v_s = 10^{11}$ мкм/с, которые обеспечивают приемлемую точность совпадения экспериментальных данных с расчетными.

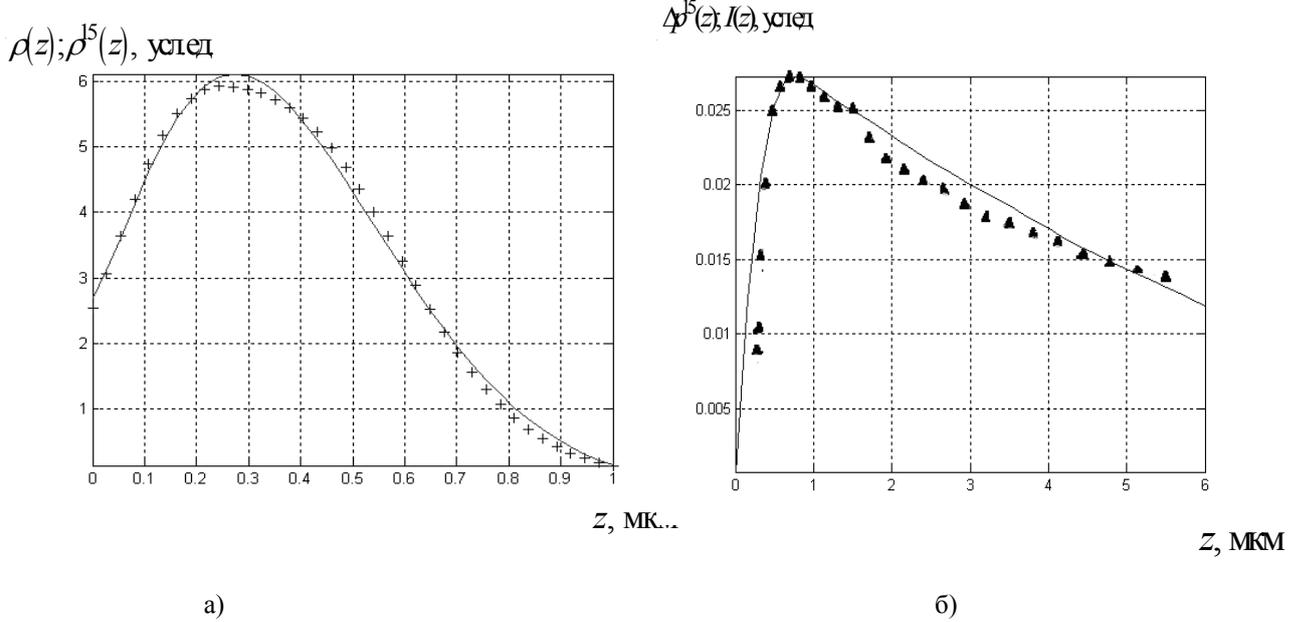


Рис. 4.10. Функция распределения плотности потерь энергии электронным пучком в кремнии (а) (график отмечен крестиками) и результат ее аппроксимации 15-м приближением модифицированными функциями Лагерра (непрерывная линия); функция распределения ННЗ, генерированных электронным пучком в кремнии, вычисленная в 15-м приближении (б) (тонкая непрерывная линия) и сигнал электрического тока, измеренный методом наведенного электронным пучком тока [144] в кремнии (экспериментальные точки).

Далее приведем оценки относительных погрешностей между 4-м и 5-м приближениями математического ожидания и моментной функции второго порядка $\Delta p(z)$, для следующих параметров: $m_{v_s} = 10^{11}$ мкм/с, $\sigma_{v_s} = 10^{11}$ мкм/с; $m_D = 10^9$ мкм²/с, $\sigma_D = 2 \cdot 10^8$ мкм²/с; $m_\tau = 5 \cdot 10^{-8}$ с и $\sigma_\tau = 10^{-8}$ с:

$$\Delta \left({}_5 m_{p_{15}}, {}_4 m_{p_{15}} \right) < 0,71\%,$$

$$\Delta \left({}_5 \Theta_{p_{15}}, {}_4 \Theta_{p_{15}} \right) < 3,4\%.$$

Следующие оценки относительных погрешностей показывают влияние на распределение ННЗ по глубине значения СКО случайного коэффициента v_s , составляющего $\sigma_{v_s} = 10^{11}$ мкм/с:

$$\begin{aligned} \Delta \left({}_5 m_{p_{15}}, \Delta p^{15} \right) &= 0,51\%, \\ \tilde{\Delta} \left(\sqrt{{}_5 D_{p_{15}}(z)}, {}_5 m_{p_{15}}(z) \right) &= 1,29\%. \end{aligned} \quad (4.7)$$

Аналогичные оценки имеют место для СКО $\sigma_D = 2 \cdot 10^8$ мкм²/с случайного коэффициента D :

$$\begin{aligned}\Delta\left({}_4m_{p_{15}}, \Delta p^{15}\right) &= 0,83\%, \\ \tilde{\Delta}\left(\sqrt{{}_4D_{p_{15}}}, {}_4m_{p_{15}}\right) &= 6,79\%\end{aligned}\tag{4.8}$$

и для СКО $\sigma_\tau = 10^{-8}$ с случайного коэффициента τ :

$$\begin{aligned}\Delta\left({}_4m_{p_{15}}, \Delta p^{15}\right) &= 0,77\%, \\ \tilde{\Delta}\left(\sqrt{{}_4D_{p_{15}}}, {}_4m_{p_{15}}\right) &= 14,19\%.\end{aligned}\tag{4.9}$$

Из соотношений (4.7)-(4.9) видно, что оценки относительных погрешностей между 15-м приближением усредненной случайной функции распределения ННЗ по глубине (ее математическим ожиданием) и 15-м приближением функции распределения ННЗ по глубине не превышают 1%, а статистический разброс (СКО) распределения ННЗ по глубине относительно его усредненного значения (математического ожидания) не превышает 15%. Это означает, что данным дисперсиям коэффициентов D , τ и ν_s исходной модели соответствует сравнительно небольшой разброс (дисперсия) распределения ННЗ по глубине относительно его усредненного значения, а усредненное значение распределения ННЗ по глубине будет незначительно отличаться от неслучайной функции $\Delta p(z)$, а значит и кривой электрического тока $I(z)$.

Таким образом, предложенный проекционный метод решения задачи диффузии ННЗ, генерированных в полупроводниковом материале электронным и световым пучком, позволяет проводить практические расчеты информативных сигналов, обусловленных диффузией ННЗ в полупроводниках.

4.4. ВЫВОДЫ

1) В результате использования проекционного метода получены статистические характеристики решения исходной задачи (математическое ожидание и автокорреляционную функцию) при условии, что параметры, рассматриваемого явления диффузии ННЗ по глубине, являются случайными величинами и имеют усеченный нормальный закон распределения. При этом статистический разброс (среднее квадратическое отклонение относительно усредненного значения, выраженное в процентах) значений коэффициента диффузии D и времени жизни τ составлял 20, а скорости поверхностной рекомбинации ν_s 100, который не привел к значительному статистическому разбросу распределения ННЗ по глубине (более 15 процентов) относительно его среднего значения.

2) Проведен сравнительный анализ использования двух моделей распределения ННЗ (модели коллективного движения и модели независимых источников). Результат такого анализа показал, что использование 13 членов в разложении функции $\Delta p(z)$ по базису из модифицированных функций Лагерра оказалось достаточным для получения приближенного решения с достаточно хорошей точностью.

3) Проведен сравнительный анализ результатов моделирования распределения ННЗ, генерированных электронным и световым пучком в полупроводниковых материалах с некоторыми экспериментальными данными.

4) Полученные результаты носят общий характер и могут быть использованы для исследования диффузии ННЗ, генерированных различными внешними энергетическими воздействиями, например, облучением полупроводника, как светом, так и электронным пучком.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Для случая возбуждения электронным и световым пучком процесса диффузии в полупроводниковых материалах проведено математическое моделирование, учитывающее случайный характер изменения электрофизических параметров мишени.

Получены следующие результаты:

- 1) построена стохастическая модель диффузии ННЗ в полупроводниках;
- 2) предложена схема проекционной аппроксимации, основанная на использовании матричного оператора дифференцирования, и применении метода наименьших квадратов для дифференциального уравнения диффузии со случайными электрофизическими параметрами (временем жизни, коэффициентом диффузии и скоростью поверхностной рекомбинации ННЗ по глубине), позволяющая эффективно решать различные задачи анализа и параметрической идентификации; дана порядковая оценка погрешности и получено условие вычислительной устойчивости для этой проекционной схемы в виде предельного соотношения;
- 3) решена задача статистического анализа диффузии со случайной составляющей в электрофизических параметрах (времени жизни, коэффициенте диффузии и скорости поверхностной рекомбинации ННЗ по глубине) с использованием проекционного метода; построены сходящиеся матричные ряды и рассмотрена оптимизация скорости сходимости итерационных процессов, аппроксимирующих проекционные характеристики математического ожидания и автокорреляционной функции распределения ННЗ, которая укладывается в общую схему итерационных процессов с нарушением стационарности; даны оценки быстроты сходимости этих итерационных процессов в терминах нормы;

4) проведен сравнительный анализ использования двух моделей распределения ННЗ (модели коллективного движения и модели независимых источников); на примере разных полупроводников показано, что если закон распределения электрофизических параметров будет близок к нормальному усеченному, то статистический разброс (среднее квадратическое отклонение) до 20 процентов времени жизни и коэффициента диффузии, а скорости поверхностной рекомбинации ННЗ до 100 процентов не приведет к значительному (более 15 процентов) статистическому разбросу распределения ННЗ по глубине относительно его среднего значения;

5) разработано программное обеспечение для эффективного компьютерного моделирования стохастического явления диффузии в полупроводниках с учетом возможности параллельных вычислений.

СПИСОК СОКРАЩЕНИЙ

ННЗ – неосновные носители заряда.

МНК – метод наименьших квадратов.

СКО – среднее квадратическое отклонение.

СБОМ - сканирующая ближнепольная оптическая микроскопия.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

- 1 Серегина Е. В., Макаренков А. М. Проекционные методы решения некоторых задач идентификации и синтеза распределенных стохастических систем // Научно-технические ведомости Санкт-Петербургского государственного политехнического университета. – 2007. – № 4. – С 133-137.
- 2 Серегина Е. В., Макаренков А. М. Повышение точности моделирования стохастических систем // Научно-технические ведомости Санкт-Петербургского государственного политехнического университета. – 2008. – № 4. – С. 120-123.
- 3 Серегина Е. В., Макаренков А. М., Степович М. А. Использование проекционного метода для определения статистических характеристик решения дифференциального уравнения диффузии неосновных носителей заряда, генерированных в полупроводниковом материале широким электронным пучком // Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования. -2009. - № 6. – С. 80-95.
- 4 Серегина Е. В., Макаренков А. М., Степович М. А. О возможности реализации стохастической модели распределения неравновесных неосновных носителей заряда в полупроводниковом материале // Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования. - 2009. - № 10. – С. 75-86.
- 5 Серегина Е. В., Макаренков А. М., Степович М. А. Проекционная аппроксимация стохастической модели коллективного движения неосновных носителей заряда, генерированных широким электронным пучком в полупроводниковом материале // Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования. - 2011. - № 8. – С. 41-49.

6 Серегина Е. В., Макаренков А. М., Степович М. А. Статистический анализ модели коллективного движения неосновных носителей заряда с использованием проекционного метода // Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования. - 2012. - № 4. – С. 47- 55.

7 Серегина Е. В., Степович М. А., Макаренков А. М. Об одной возможности статистического анализа распределения неосновных носителей заряда, генерированных электромагнитным излучением в полупроводниковом материале // Прикладная физика. 2012. – № 3. – С. 24-31.

8 Серегина Е. В., Степович М. А., Макаренков А. М. О модифицированной проекционной схеме метода наименьших квадратов для моделирования распределения неосновных носителей заряда, генерированных электронным пучком в однородном полупроводниковом материале // Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования. - 2013. - № 11. – С. 65-69.

9 Серегина Е.В., Степович М.А., Макаренков А.М. Модифицированная проекционная схема метода наименьших квадратов для моделирования концентрации неосновных носителей заряда в полупроводниковых материалах // Успехи прикладной физики. 2013. – Т. 1. – № 3. – С. 354-358.

10 Seregina E.V., Makarenkov A.M., Stepovich M.A. Use of the Projective Method for Determining Statistical Characteristics of the Solution to the Differential Diffusion Equation of Minority Carriers Generated in a Semiconductor Material by a Wide Electron Beam // Surface Investigation. X-ray, Synchrotron and Neutron Techniques. -2009. –Vol. 3. – No. 3. - P. 468-482.

11 Seregina E.V., Makarenkov A.M., Stepovich M.A. On the Possibilities of Implementing a Stochastic Model for the Distribution of Nonequilibrium Minority Charge Carriers in a Semiconductor Material. // Surface Investigation. X-ray, Synchrotron and Neutron Techniques. - 2009. –Vol. 3. – No. 5. - P. 809-819.

12 Seregina E.V., Makarenkov A.M., Stepovich M.A. Projective Approximation of the Stochastic Model of Collective Motion of Minority Charge Carriers Generated by a Broad Electron Beam in Semiconducting Material. // Surface Investigation. X-ray, Synchrotron and Neutron Techniques. -2011. –Vol. 5. – No. 4. - P. 746-753.

13 Seregina E.V., Makarenkov A.M., Stepovich M.A. Statistical Analysis of a Model of Collective Motion of Minority Charge Carriers Using the Projection Method. // Surface Investigation. X-ray, Synchrotron and Neutron Techniques. -2012. –Vol. 6. – No. 2. - P. 330-337.

14 Seregina E.V., Stepovich M.A., Makarenkov A.M. On a Modified Projection Scheme of the Least-Squares Method for the Modeling of the Distribution of Minority Charge Carriers Generated by an Electron Beam in a Homogeneous Semiconductor Material. // Surface Investigation. X-ray, Synchrotron and Neutron Techniques. -2013. – Vol. 7 – No. 6. - P. 1077-1080.

15 Серегина Е. В., Макаренков А. М., Степович М. А. Применение проекционного метода для моделирования процесса диффузии в полупроводнике под воздействием электронного пучка // Математическое моделирование, обратные задачи, информационно-вычислительные технологии: Материалы VI международной научно-технической конференции. – Пенза, 2007. – С. 118–121.

16 Серегина Е.В., Макаренков А.М. Решение некоторых задач идентификации и синтеза распределенных стохастических систем с использованием проекционных аппроксимаций // Труды Московского государственного технического университета им. Н. Э. Баумана. – 2007.– № 594. – С. 219–228.

17 Серегина Е.В. Разработка проекционных методов синтеза оптимального программного управления распределенными стохастическими системами // Научно-технические технологии в приборостроении и развитии инновационной деятельности в вузе: Материалы региональной научно-технической конференции. – М.: Московский государственный технический университет им. Н. Э. Баумана, 2007. – Т. 1. – С. 28–32.

18 Серегина Е. В. Разработка методов параметрической идентификации распределенных случайных параметров // Научно-технические технологии в приборостроении и развитии инновационной деятельности в вузе: Материалы региональной научно-технической конференции. – М.: Московский государственный технический университет им. Н. Э. Баумана, 2007. – Т. 1. – С. 33–38.

19 Серегина Е. В., Макаренков А. М., Степович М. А. Исследование стохастического уравнения тепломассопереноса проекционным методом // Научные труды Калужского государственного педагогического университета им. К.Э. Циолковского. Естественные науки. – Калуга, КГПУ им. К.Э. Циолковского, 2008. – С. 26-30.

20 Серегина Е. В., Макаренков А. М., Степович М. А. О применении проекционного метода к решению задачи статистического анализа диффузии неосновных носителей заряда в полупроводниковых солнечных элементах // Научные труды Калужского государственного педагогического университета им. К.Э. Циолковского. Естественные науки. – Калуга, КГПУ им. К.Э. Циолковского, 2009. – С. 59-63.

21 Серегина Е. В. Анализ модели коллективного движения неосновных носителей заряда при случайных электрофизических параметрах // Научные труды в приборо- и машиностроении и развитие инновационной деятельности в вузе: Материалы Всероссийской научно-технической конференции. – М.: Московский государственный технический университет им. Н. Э. Баумана, 2010. – Т. 1. – С. 128.

22 Серегина Е. В., Степович М. А. О некоторых возможностях использования проекционного метода в задачах математического моделирования явлений тепломассопереноса // Прикладные задачи математики и механики: Материалы XIX международной научно-технической конференции. – Севастополь: Севастопольский национальный технический университет, 2011. – С. 105-109.

23 Серегина Е. В., Макаренков А. М., Степович М. А. О сходимости некоторой проекционной схемы дифференциального уравнения тепломассопереноса // Прикладные задачи математики: Материалы XXI международной научно-технической конференции. – Севастополь: Севастопольский национальный технический университет, 2013. – С. 122-126.

24 Серегина Е. В., Степович М. А. О вычислительной устойчивости проекционной аппроксимации, основанной на применении модифицированного метода наименьших квадратов, для математической модели коллективного движения не-

равновесных неосновных носителей заряда в однородном полупроводнике // Научные труды Калужского государственного университета им. К.Э. Циолковского. Естественные науки. – Калуга, КГУ им. К.Э. Циолковского, 2013. – С. 60-65.

25 Евланов Л.Г., Константинов В.М. Системы со случайными параметрами. – М.: Наука, 1976. – 588 с.

26 Батков А.М., Александров О.М. и др. Методы оптимизации в статистических задачах управления. – М.: Машиностроение, 1974. – 240 с.

27 Adomian G., Malakian K., Closure approximation error in the mean solution of stochastic differential equations by the hierarchy method, J. Statist. Phys. - 1979. - Vol. 21. - No. 2. – P. 181-189.

28 Elrod M., Numerical methods for the solution of stochastic differential equations, Ph. D. Dissertation, Univ. of Georgia. 1973.

29 Adomian G., Random operator equations in mathematical physics, Part II, J. Math Phys. - 1971. - Vol. 12. - No. 9. - P. 1944-1948.

30 Adomian G., Random operator equations in mathematical physics, Part III, J. Math Phys. - 1971. - Vol. 12. - No. 9. - P. 1948-1955.

31 И.Л. Сотскова. Применение аппарата обобщенной характеристической функции к анализу стохастических систем управления ЛА // Задачи стохастического управления: Тем. сб. науч. тр. – М.: МАИ, 1986. – С. 71-78.

32 V.V. Semenov, I.L. Sotskova. The spectral method for solving Fokker Planck Kolmogorov equation for stochastic control system analysis // Preprints of the Second IFAC Symposium on Stochastic Control. Vilnius. USSR. Part 1. 1986. – P. 131-136.

33 Статистические методы в проектировании нелинейных систем автоматического управления. / Под ред. Б.Г. Доступова. – М.: Машиностроение, 1970. – 408 с.

34 Keller J. B., Stochastic equations and wave propagation in random media, in “Stochastic processes in mathematical physics and engineering”, Proc. Symposium Appl. Math., New-York. - 1964. - P. 145-170.

- 35 Adomian G., The closure approximation in the hierarchy equations, J. Statist. Phys. – 1971. - Vol. 3 - No. 2. - P. 127-133.
- 36 Вентцель А.Д., Фрейдлин М.И. Флуктуации в динамических системах под действием малых случайных возмущений. – М.: Наука, 1979. – 424 с.
- 37 Фурсиков А. В. Проблема замыкания цепочек моментных уравнений, соответствующих трехмерной системе уравнений Навье-Стокса в случае больших чисел Рейнольдса // ДАН СССР. 1991. - Т. 319. - № 1. - С. 83-87.
- 38 Фурсиков А. В. Моментная теория для уравнений Навье-Стокса со случайной правой частью. // Изв. РАН. Сер. матем. 1992. - Т. 56. - № 6. - С. 1273-1315.
- 39 Шапиро В.Е., Логинов В.М. Динамические системы при случайных воздействиях. – Новосибирск: Наука, 1983. - 161 с.
- 40 Адомиан Дж. Стохастические системы. – М.: Мир, 1987. – 376 с.
- 41 Тихонов В. И. Воздействия флуктуаций на простейшие параметрические системы. // Автоматика и телемеханика. 1958. - т. 19. - № 8. - С. 717-723.
- 42 Adomian G., Linear stochastic operators, Ph. D. (Physics) Dissertation, University of California, Los Angeles (University Microfilms 64-2269, Ann Arbor, Michigan), 1961.
- 43 Adomian G., Stochastic Green's function. In "Stochastic processes in mathematical physics and engineering", Amer. Math. Soc., Providence, Rhode Island. - 1964. - Vol. XVI - P. 1-39.
- 44 Adomian G., Theory of random systems, Invited Paper, Prague Conf. Inform. Theory, statist. decision functions, random processes. - 1965 - 4th - P. 205-222.
- 45 Монин А. С., Яглом А. М. Статистическая гидромеханика. М.: Наука, 1967. - Ч. 2. - с. 720.
- 46 Задорожний В. Г. Дифференциальные уравнения с вариационными производными. // Воронеж. Вор ГУ. 2002. - т. 66. - № 4. - С. 119-136.
- 47 Кляцкин В. И. Стохастические уравнения и волны в случайно-неоднородных средах. М.: Наука, 1983. - с. 337.

48 Задорожний В.Г., Строева Л.Н. О моментных функциях решения начальной задачи линейного дифференциального уравнения первого порядка со случайными коэффициентами. // Дифференц. уравнен. 2000. - Т. 36. - № 3. - С. 377-385.

49 Задорожний В.Г. Дифференциальное уравнение в банаховом пространстве, содержащее вариационную производную. // СМЖ. 1992. - Т. 33. - № 2. - С. 80-93.

50 Задорожний В.Г. Моментные функции решения задачи Коши стохастического уравнения теплопроводности. // Докл. РАН. 1999. - т. 364. - № 6. - С. 735-737.

51 Бусленко Н.П., Шрейдер Ю.А. Метод статистических испытаний – М.: Физматгиз, 1961. - 226 с.

52 Пугачев В.С., Казаков И.Е., Евланов Л.Г. Основы статистической теории автоматических систем. – М.: Машиностроение, 1974. – 400 с.

53 Соболев И.М. Численные методы Монте Карло. – М.: Наука, 1973. – 311 с.

54 Трофимов А.И., Егупов Н.Д., Дмитриев А.Н. Методы теории автоматического управления. – М.: Энергоатомиздат, 1997. – 653 с.

55 Автоматизированное проектирование систем автоматического управления / Под ред. В.В. Солодовникова. – М.: Машиностроение, 1990. – 332 с.

56 Автоматизированное проектирование систем управления / Под ред. М. Джамшиди и Ч.Дж. Хергета. – М.: Машиностроение, 1989. – 344 с.

57 Макаренков А.М., Трофимов А.И., Егупов Н.Д. Математическое описание и статистический анализ электрогидравлических стендов для вибрационных испытаний приборов // Измерительная техника, 1993. – № 10. - С. 23-29.

58 Егупов Н.Д., Макаренков А.М., Широкова З.Г. Описание и анализ систем со случайными параметрами с использованием понятия стохастического матричного оператора // Труды МГТУ. 1999. – № 575. – С. 13-14.

59 Лапин С.В. Синтез приближенных оптимальных управлений системами с полиномиальными нелинейностями с помощью разложений по блочно-импульсным функциям // Математическое моделирование. 1991. – Т. 3. – № 2. – С. 92-107.

60 А.Н. Дмитриев, Н.Д. Егупов, А.М. Шестопалов и др. Машинные методы расчета и проектирования систем электросвязи и управления. М.: Радио и связь, 1990. – 272 с.

61 В.В. Солодовников, В.В. Семенов. Спектральная теория нестационарных систем управления. – М.: Наука, 1974. – 335 с.

62 Ахиезер Н.И., Глазман И.М. Теория линейных операторов в гильбертовом пространстве. – М.: Наука, 1966. – 543 с.

63 Chen C.F., Hsiao C.H. Time domain synthesis via Walsh functions // Proc. IEE. - 1975. - V. 122. - No. 5. - P. 565.

64 Солодовников В.В., Семенов В.В. Спектральный метод расчета нестационарных систем управления летательными аппаратами. – М.: Машиностроение, 1975. – 272 с.

65 Солодовников В.В., Дмитриев А.Н., Егупов Н.Д. Спектральные методы расчета и проектирования систем управления. – М.: Машиностроение, 1986. – 440 с.

66 В.К. Дзядык. Аппроксимационные методы решения дифференциальных и интегральных уравнений. – Киев: Наука. Думка, 1988. – 304 с.

67 А.Н. Дмитриев, Н.Д. Егупов, Ж.Ш. Шаршеналиев. Спектральные методы анализа, синтеза и идентификации систем управления. Фрунзе: Илим, 1986. – 234 с.

68 B.Y. Ting, Y.L. Luke. Conversion of polynomials between different polynomial bases // IMA J. of Numerical Analysis. 1981. – V. 1. – P. 229-234.

69 Лапин С.В. Оптимизация по емкости проекционных методов аппроксимации систем. – М.: МГТУ им. Н.Э.Баумана, 1995. – 224 с.

70 R.-Y. Chang, S.-Y. Yang, M.-L. Wang. Solutions of linear dynamic systems by generalised orthogonal polynomials // Int. J. Syst. Sci. 1986. – V. 17. – No. 12. – P. 1727-1740.

71 C. Hwang, M.Y. Chen. Analysis and optimal control of time varying linear systems via shifted Legendre polynomials // Int. J. Control. 1985. – V. 41. – No. 5. – P. 1317-1330.

- 72 P.N. Paraskevopoulos. Chebyshev series approach to system identification. analysis and optimal control // J. Franklin Inst. 1983. – V. 316. – P. 135-157.
- 73 M. Razzaghi, A. Arabshahi. Analysis of linear time varying systems via Fourier series // Int. J. Control. 1989. – V. 50. – No. 3. – P. 889-898.
- 74 P.N. Paraskevopoulos. System analysis and synthesis via orthogonal polynomial series and Fourier series // Math. and Comput. in Simul. 1985. – V. 27. – No. 5-6. – P. 453-469.
- 75 P.D. Sparis, S.G. Mouroutsos. A comparative study of the operational matrices of integration and differentiation for orthogonal polynomial series // Int. J. Control. 1985. – V. 42. – No. 3. – P. 621-638.
- 76 Лапин С.В. О применении матричных операторов в спектральных методах исследования линейных систем // Труды МГТУ, 1993. – № 564. – С. 3-15.
- 77 Колмогоров А.Н., Фомин С.В. Элементы теории функций и функционального анализа. М.: Физматлит, 2004. - 572 с.
- 78 Лапин С.В., Егупов Н.Д. Теория матричных операторов и ее приложение к задачам автоматического управления. – М.: МГТУ им. Н.Э.Баумана, 1997. – 496 с.
- 79 Треногин В.А. Функциональный анализ. – М.: Физматлит, 2002. - 488 с.
- 80 Даугавет И.К. Введение в теорию приближения функций. Л.: ЛГУ, 1977. – 184 с.
- 81 Бахрах Л.Д., Кременецкий С.Д. Синтез излучающих систем (теория и методы расчета). – М.: Сов. Радио, 1974. – 232 с.
- 82 Зелкин Е.Г., Соколов В.Г. Методы синтеза антенн (фазированные антенные решетки и антенны с непрерывным раскрытием). – М.: Сов. Радио, 1980. – 296 с.
- 83 Минкович Б.М., Яковлев В.П. Теория синтеза антенн. – М.: Сов. Радио, 1969. – 296 с.
- 84 Суетин П.К. Классические ортогональные многочлены. – М.: Физматлит, 2007.- 480 с.
- 85 Левин Б.Р. Теоретические основы статистической радиотехники. – М.: Радио и связь, 1989. – 652 с.

86 Абилов В.А., Абилов М.В., Керимов М.К. Некоторые вопросы сходимости двойных рядов Фурье-Лагерра-Эрмита. // Ж. вычисл. матем. и матем. физ. 2004. - Т. 44. - №. 2 - С. 213-230.

87 Колмогоров А.Н. Избранные труды. Математика и механика. – М.: Наука, 1985. – 470 с.

88 Абилов В.А. Приближение функций суммами Фурье-Лагерра. // Матем. зам. 1995. - Т. 57. - вып. 32 - С. 163-170.

89 Ржавинская Е.В. О Приближении функций в среднем суммами Фурье-Лагерра. // Изв. вузов. Математика. 1979. - № 11. - С. 87-93.

90 Сеге Г. Ортогональные многочлены. – М.: Физматгиз, 1962. – 500 с.

91 Watson G.N. Another note in Laguerre polynomials // J. London Math. Soc. 1939. – V. 14. – P. 19-22.

92 Лашенов В.К. Приближение дифференцируемых функций частными суммами ряда Фурье-Лагерра. // Изв. вузов. Математика. 1981. - № 1(224). - С. 44 -57.

93 Петров В.И., Самохвалов А.А., Степович М.А. и др. Матричный метод решения задачи коллективного движения неосновных носителей заряда, генерированных в полупроводниковом материале электронным пучком // Изв. РАН. Сер. Физ. 2002. – Т. 66. – № 9. – С. 1310-1316.

94 Л.Е. Воробьев, С.Н. Данилов, Г.Г. Зегря и др. Фотоэлектрические явления в полупроводниках и размерно-квантовых структурах. – Санкт-Петербург: Наука, 2001. – 248 с.

95 С.М. Рывкин. Фотоэлектрические явления в полупроводниках. – М.: Физматлит, 1963. – 494 с.

96 Степович М.А. Количественная катодолюминесцентная микроскопия прямозонных материалов полупроводниковой оптоэлектроники. // Диссертация на соискание ученой степени доктора физико-математических наук. – Москва. 2003. – 345 с.

97 Белов А.А., Петров В.И., Степович М.А. Использование модели независимых источников для расчёта распределения неосновных носителей заряда, гене-

рированных в полупроводниковом материале электронным пучком // Изв. РАН. Сер. Физ. 2002. – Т. 66. – № 9. – С. 1317-1322.

98 Михеев Н.Н., Дорогова Ю.Г. Измерение диффузионной длины неосновных носителей заряда и скорости поверхностной рекомбинации в арсениде галлия катодолюминесцентным методом // Электронная техника. Материалы. 1988. – Вып. 4. – С. 44-48.

99 Kyser D.F., Wittry D.B. Spatial distribution of excess carriers in electron-beam excited semiconductors // Proc. IEEE. 1967. – V. 55. – № 3. – P. 733.

100 Снопова М.Г., Бурылова И.В., Петров В.И. и др. Анализ модели распределений неосновных носителей заряда, генерированных в трехслойной полупроводниковой структуре широким электронным пучком // Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования. 2007. – № 7. – С. 1-6.

101 W. H. Hackett, Jr. Electron-beam excited minority-carrier diffusion profiles in semiconductors. // J. Appl. Phys. 1972. – Vol. 43 – No. 4. – P. 1649-1654.

102 Степович М.А., Снопова М.Г., Хохлов А.Г. Использование модели независимых источников для расчёта распределения неосновных носителей заряда, генерированных в двухслойном полупроводнике электронным пучком // Прикладная физика. 2004. – № 3.- С. 61-65.

103 Burylova I.V., Petrov V.I., Snopova M.G. и др. Mathematical simulation of distribution of minority charge carriers, generated in multy-layer semiconducting structure by a wide electron beam // Физика и техника полупроводников. 2007. – Т. 41. – вып. 4. – С. 458-461.

104 Михеев Н.Н., Степович М.А. Распределение энергетических потерь при взаимодействии электронного зонда с веществом. // Заводская лаборатория. 1996. – Т. 62. – № 4. – С. 20-25.

105 Kanaya K., Okayama S. Penetration and energy-loss theory of electrons in solid targets // J. Phys. D. 1972. – V. 5. – № 1. – P. 43-58.

106 Михеев Н.Н., Петров В.И., Степович М.А. Количественный анализ материалов полупроводниковой оптоэлектроники методами растровой электронной микроскопии // Изв. АН СССР. Сер. Физ. 1991. – Т. 55. – № 8. – С. 1474-1482.

107 Van Roosbroeck W. Injected current carrier transport in a semi-infinite semiconductor and determination of lifetimes and surface recombination velocities. // J. Appl. Phys. 1955. – Vol. 26 – No. 1. – P. 380-387.

108 M. Godlewski, E. Łusakowska, E.M. Goldys и др. Diffusion length of carriers and excitons in GaN – influence of epilayer microstructure. // Appl. Surface Sci. 2004. – No. 223. – P. 294–302.

109 Воеводин В.В., Кузнецов Ю.Д. Матрицы и вычисления. – М.: Наука, 1984. – 320 с.

110 Ефимов А.В. Приближение функций с заданным модулем непрерывности суммами Фурье. // Изв. Ак. наук СССР, серия матем. 1959. - No. 23. - С. 115 -134.

111 Тимман А.Ф. Теория приближения функций действительного переменного. – М.: Физматлит, 1960. – 624 с.

112 Флетчер К. Численные методы на основе метода Галеркина. Пер. с англ. – М.: Мир, 1988. – 352 с.

113 Иванов В.К., Васин В.В., Танана В.П. Теория линейных некорректных задач и приложения. – М.: Наука, 1978. – 208 с.

114 Морозов В.А. Методы регуляризации неустойчивых задач. – М.: МГУ, 1987. – 216 с.

115 Тихонов А.Н., Арсенин В.Я. Методы решения некорректных задач. – М.: Наука, 1986. – 288 с.

116 Васильев Ф.П. Методы решения экстремальных задач. – М.: Наука, 1981. – 400 с.

117 Р. Варга Функциональный анализ и теория аппроксимации в численном анализе. М.: Мир, 1974. - с. 126.

118 Вентцель Е.С. Теория вероятностей. – М.: Академия, 2005. – 576 с.

119 Хартман Ф. Обыкновенные дифференциальные уравнения. Пер. с англ. – М.: Мир, 1970. – 720 с.

120 Куликов Е.И. Прикладной статистический анализ. М.: Горячая линия – Телеком, 2008. - 464 с.

- 121 Пупков К.А., Егупов Н.Д., Макаренков А.М. и др. Теория и компьютерные методы исследования стохастических систем. – М.: Физматлит, 2003. – 400 с.
- 122 Фихтенгольц Г.М. Курс дифференциального и интегрального исчисления. – М.: Наука, 1969. – т. I–III.
- 123 Евграфов М.А. Асимптотические оценки и целые функции. – М.: Физматгиз, 1962. – 448 с.
- 124 Лаврентьев М.А., Шабат Б.В. Методы теории функций комплексного переменного. – М.: Наука, 1973. – 736 с.
- 125 Маслов В.П. Операторные методы. – М.: Наука, 1973. – 543 с.
- 126 Голубев В.В. Лекции по аналитической теории дифференциальных уравнений. Изд. 2 е. Гостехиздат. М.-Л., 1950. – 436 с.
- 127 Фадеев Д.К., Фадеева В.Н. Вычислительные методы линейной алгебры. – М.: Физматлит, 1960. – 656 с.
- 128 Лебедев В.И. Функциональный анализ и вычислительная математика. – М.: Физматлит, 2005. – 296 с.
- 129 Смирнов В.И. Курс высшей математики. – М.: Наука, 1967. – т. III. – ч. 1. – 323 с.
- 130 Гирко В.Л. Спектральная теория случайных матриц. – М.: Наука, 1988. – 376 с.
- 131 Корн Г., Корн Т. Справочник по математике. – М.: Наука, 1984. – 832 с.
- 132 Фридман В.М. О сходимости методов типа наискорейшего спуска. УМН 17. 3 (1962).С. 201-204.
- 133 В.В. Дикусар, Г.А. Зеленков, И.Н. Зубов О новой методике решения вырожденной СЛАУ // Математические идеи П.Л. Чебышева их приложение к современным проблемам естествознания / Тезисы докладов. Обнинск, 2008. – 93 С.
- 134 Эдвардс Р. Функциональный анализ. – М.: Мир, 1969. – 1071 с.
- 135 Гельфанд И.М., Шилов Г.Е. Обобщенные функции. ч. 1. Обобщенные функции и действия над ними. – М.: Физматгиз, 1958. 486 с.
- 136 Бахвалов Н.С. Численные методы. – М.: Наука, 1975. – 631 с.

- 137 Гончаров В.Л. Теория интерполирования и приближения функций. Изд. 2 е. Гостехиздат. М.-Л., 1954.- 327 с.
- 138 Канторович Л.В., Акилов Г.П. Функциональный анализ. – М.: Наука, 1977. – 741 с.
- 139 В.И. Лебедева и С.А. Финогенова. ЖВМ и МФ 11. – 1971. - № 2. – С. 11.
- 140 Годунов С.К., Рябенский В.С. Разностные схемы. – М.: Наука, 1977. – 439 с.
- 141 Самарский А.А. Теория разностных схем. – М.: Наука, 1977. – 572 с.
- 142 Уханов Ю.И. Оптические свойства полупроводников. М.: Наука. Физматлит, 1977. - 368 с.
- 143 J.W.P. Hsu Near-field scanning optical microscopy studies of electronic and photonic materials and devices // Materials Science and Engineering. 2001. – No. 33. – P. 1-50.
- 144 Fitzgerald E.A., Gossman H.J., Untewald F.C. и др. Electron-beam induced current determination of shallow junction depth //J. Vac. Sci. Technol. 1994. В. 12. No.1. P. 357.

**ПРИЛОЖЕНИЕ. ТЕКСТ ПРОГРАММЫ, РЕАЛИЗУЮЩЕЙ
ПРОЕКЦИОННЫЙ МЕТОД СТАТИСТИЧЕСКОГО АНАЛИЗА
ДИФФУЗИИ НЕОСНОВНЫХ НОСИТЕЛЕЙ ЗАРЯДА В КЛАССИЧЕСКИХ
ПОЛУПРОВОДНИКОВЫХ МАТЕРИАЛАХ**

**П 1. Библиотека общих функций проекционного метода, основанного на
теории матричных операторов для базиса из модифицированных функций
Лагерра**

Библиотека включает 8 основных функций (**lager_upt**, **Pager_upt**, **Pager_upt_2**, **Diflg_upt**, **LGlager_upt**, **fun_p**, **fun2**, **h_ch**). Ниже приводятся описания этих функций и их исходные тексты на языке системы MATLAB.

Функция lager_upt. Возвращает многочлены Лагерра по переменной t на интервале $[0, \infty]$, FS - число базисных функций:

```
function Lg = lager_upt(t,FS,alfa,lambda)
Lg=sym(zeros(FS,1));
Lg(1,1)=1;
Lg(2,1)=(alfa+1)-t*lambda;
for i=2:FS-1
    Lg(i+1,1)=-((t*lambda-2*(i-1)-1-alfa)*Lg(i,1)-(alfa+i-1)*Lg(i-1,1))/(i);
end
```

Функция Pager_upt. Восстанавливает столбец из коэффициентов разложения функции по базису из модифицированных функций Лагерра:

```
function func = lIager_upt(Cfunc,t,FS,alfa,lambda)
Lg1 = lager_upt(t,FS,alfa,lambda);
func=exp(-lambda*t/2)*expand(Lg1'*Cfunc);
```

Функция Pager_upt_2. Восстанавливает матрицу из коэффициентов разложения функции от двух переменных по базису из модифицированных функций Лагерра:

```
function func = lIager_upt_2(Cfunc,t,x,FS,alfa,lambda)
Lg1 = lager_upt(t,FS,alfa,lambda);
```

```
Lg2 = lager_upt(x,FS,alfa,lambda);
func=exp(-lambda*t/2)*exp(-lambda*x/2)*expand(Lg1'*Cfunc*Lg2);
```

Функция Diflg_upt. Возвращает матрицу дифференцирования в базисе из модифицированных функций Лагерра:

```
function func = Diflg_upt(t,FS,alfa,lambda)
Lg = lager_upt(t,FS,alfa,lambda);
B8=sym(zeros(FS,1));
D1=(zeros(FS,FS));
for i=1:FS
    B8(i,1)=diff(exp(-lambda*t/2)*Lg(i,1));
end
for j=1:FS
    for i=1:FS
        D1(i,j)=double(((factorial(j-1)*lambda*int((lambda*t)^(alfa)*exp(-
lambda*t)*B8(i,1)*exp((lambda*t)/2)*Lg(j,1),0,inf))/gamma(j+alfa)));
    end
end
func =D1';
```

Функция LGlager_upt. Возвращает столбец из коэффициентов разложения функции по базису из модифицированных функций Лагерра:

```
function Cfunc = LGlager_upt(func,t,FS,alfa,lambda)
Lg = lager_upt(t,FS,alfa,lambda);
for i=1:FS
    Cfunc(i,1)=(0);
end
for j=1:FS
    Cfunc(j,1)=double((((factorial(j-1)*lambda*int((lambda*t)^(alfa)*exp(-
lambda*t)*func*exp((lambda*t)/2)*Lg(j,0,inf))/gamma(j+alfa)))));
end
```

Функция fun_p. Построение графика функции.

```
function fun_p(Y1,FSIZE,T)
X = zeros(FSIZE,1);
DEL = T/(FSIZE-1);
for I=1:FSIZE
    X(I) = (I-1)*DEL;
end
```

```

plot(X,Y1)
grid
MINY = min([min(Y1)]); MAXY = max([max(Y1)]);
if MINY ~= MAXY
    axis([min(X) max(X) MINY MAXY])
end
Pause

```

Функция fun2. Построение трехмерного графика функции.

```

function fun2(Z,S,T)
X = zeros(S,1);
DEL = T/(S-1);
for I=1:S
    X(I) = (I-1)*DEL;
end
Y = X;
surf(X,Y,Z)
view(140,30)
MINZ = min(min(Z)); MAXZ = max(max(Z));
if MINZ ~= MAXZ
    axis([min(X) max(X) min(Y) max(Y) MINZ MAXZ])
end
xlabel('t1'), ylabel('t2'), zlabel('f(t1,t2)')
pause

```

Функция h_ch. Возвращает параметр h матричных рядов, определяющих проекционные характеристики моментных функций распределения неосновных носителей заряда по глубине:

```

function func = h_ch(k,FS,alfa,lambda,p,D1,Nus,Mtau,Dtau,tau1,tau2)
t=sym('t','real');
D = Diflg_upt(t,FS,alfa,lambda);
I=eye(FS,FS);
E=eye(FS,FS);
Z=zeros(FS,FS);
Z1=zeros(1,FS);
t0=0;
Lg = lager_upt(t,FS,alfa,lambda);
S1=subs(exp(-lambda*t/2)*Lg,t,t0);

```

```

S2=zeros(FS,1);
W1=D1^2*(D^2)*D^2;
W2=-D1*(D^2)'-D1*D^2;
W3=E+D'*S1*S1'*D-Nus*D1^(-1)*D'*S1*S1'- Nus*D1^(-1)*S1*S1'*D+ Nus^2*D1^(-
2)*S1*S1'+S2*S2';
Wz0=(Mtau).^2*W1+(Mtau)*W2+W3;
Y=inv(Wz0);
i=1;
r2=(tau2-Mtau)/sqrt(Dtau);
r1=(tau1-Mtau)/sqrt(Dtau);
for r=r1:k:r2
    Wz1=(Mtau+r*sqrt(Dtau)).^2*exp(-r.^2/p)*W1+(Mtau+r*sqrt(Dtau))*exp(-
r.^2/p)*W2+exp(-r.^2/p)*W3;
    Y1=Y*Wz1;
    M(i)=max(eig(double(Y1)));
    m(i)=min(eig(double(Y1)));
    i=i+1;
end
h=2/max(M+m);
func =h;

```

II. 2. Программа нахождения математического ожидания и автокорреляционной функции распределения носителей заряда по глубине при случайном изменении времени жизни

Данная программа использует функции библиотеки, описанной в п.1.

```

echo off
clear
format
clc

```

```

t=sym('t','real');

FS=13; % число членов разложения по ортогональному базису из функций Лагерра;
p=10; % параметр, ускоряющий сходимость матричного ряда;
alfa=0; % параметр функций Лагерра;
t0=0;
lambda=5; % параметр модификации функций Лагерра;
Dtau=4*10^(-18);% дисперсия времени жизни ННЗ;
Mtau=10.^(-8); % мат. ожидание времени жизни ННЗ;
tau1=10^(-9); % нижняя граница интервала изменения времени жизни ННЗ;
tau2=10^(-7); % верхняя граница интервала изменения времени жизни ННЗ;
r2=(tau2-Mtau)/sqrt(Dtau);
r1=(tau1-Mtau)/sqrt(Dtau);
c1=int(exp(-t^2/2),t,-inf,r1)/sqrt(2*pi);
c2=int(exp(-t^2/2),t,-inf,r2)/sqrt(2*pi);
c=1/(c2-c1);
D1=10^8; % коэффициент диффузии ННЗ;
Nus=10^10; % скорость поверхностной рекомбинации ННЗ;
FSIZE=64; % количество отсчётов моментных функций;
T=7; % интервал построения графиков моментных функций [мкм];
D = Diflgr_upt(t,FS,alfa,lambda); % матричный оператор дифференцирования в базисе
функций Лагерра;

E=eye(FS,FS); % единичная матрица
Z=zeros(FS,FS); % нулевая матрица
Z1=zeros(1,FS); % нулевая строка
Lg = lager_upt(t,FS,alfa,lambda);
roz=5.5747*(exp(-((t-1.57)/1.57)^2)+0.2364*exp(-((t-0.6514)/0.6514)^2));
MCY = LGlager_upt(roz,t,FS,alfa,lambda); %вектор размером FS, содержащий стол-
бец из
%      коэффициентов разложения функции roz по базису из
%      модифицированных функций Лагерра, стоящей в правой части
%      дифференциального уравнения диффузии ННЗ
I=eye(FS,FS);

S1=subs(exp(-lambda*t/2)*Lg,t,t0);
S2=zeros(FS,1);

```

```

W1=D1^2*(D^2)'*D^2;
W2=-D1*(D^2)'-D1*D^2;
W3=E+D'*S1*S1'*D-Nus*D1^(-1)*D'*S1*S1'-    Nus*D1^(-1)*S1*S1'*D+    Nus^2*D1^(-
2)*S1*S1'+S2*S2';
Wz0=(Mtau).^2*W1+(Mtau)*W2+W3;
Y=inv(Wz0);
npr =2;    % номер приближения
num = npr + 1; % фактически вычисляемое приближение
           % для оценки точности
    Z=0;
RAM = [0, 1];
n=2;
m=0;
k=0.001;% шаг дискретизации;
h=h_ch(k,FS,alfa,lambda,p,D1,Nus,Mtau,Dtau,tau1,tau2); % параметр матричных
% рядов, определяющих проекционные характеристики моментных функций
% распределения ННЗ по глубине
syms a1;
Ww2=-h*sqrt(Dtau)*Y*(2*Mtau*W1+W2);
Ww3=-h*Dtau*Y*W1;
disp( 'Анализ стохастической системы' )
disp( ['(', num2str(npr), '-е приближение,'] )
disp( ['удерживается ', num2str(FS), ' чл. разл-я по ОНБ'] )

% формирование клеточной вектор-строки S2, содержащей числовые
% матрицы и клеточной вектор-строки S2S, содержащей символьные
% представления коэфф-тов разложений;
sz3 = 1;
sz33 = 4; % кол-во элементов в матрицах S2 и S2S
S2 = cell(1, sz33); S2S = S2; S22 = cell(1, sz3); S222S = S22;S2_2 = cell(1, sz3); S22S =
S2_2;S22_2 = cell(1, sz3); S2222S = S22_2;
S22_21 = cell(1, sz3); S22221S = S22_21;
i1 = 1;
S22_21{i1} =double(E);
    S22221S{i1} = sym('1');
    i1 = i1 + 1;
i1=1;

i1 = 1;

```

```

i=1;
S22_2{i1} =double(-h*E);

    S2222S{i1} = exp(-a1^2/p);
    i1 = i1 + 1;
i1=1;
i=1;
    S22{i1} =(Ww2);
    S222S{i1} = exp(-a1^2/p)* [sym( ['a', num2str(i)] )];

    i1 = i1 + 1;
i1=1;
    for k=1

        S2_2{i1}=(Ww3);
        S22S{i1}=exp(-a1^2/p)*[sym(['a', num2str(k)])*sym(['a', num2str(k)])];
        i1 = i1 + 1;

end

for i=1
    S2{i}=S22_21{i};
    S2S{i}=S22221S{i};

end

for i=2
    S2{i}=S22_2{i-1};
    S2S{i}=S2222S{i-1};

end

for i=3
    S2{i}=S22{i-2};
    S2S{i}=S222S{i-2};

end

for i=4
    S2{i}=S2_2{i-3};

```

```

S2S{i}=S22S{i-3};

end

% вычисление слагаемых матричной суммы, составляющей
% стох. матричный оператор
szn5 = num + 1; % кол-во слагаемых в сумме по nu

NS6 = cell(1, num); NS6S = NS6;
i2 = 1;
for nu = 0 : num

    % возведение многочленов, слагаемые которых являются
    % элементами клеточных матриц (вектор-строк) S2 (числовая)
    % и S2S (символьная), в степень nu;
    % матрицы содержат по sz33 элементов
    if nu == 0
        S4 = { E }; S4S = { sym('1') };
    elseif nu == 1
        S4 = S2; S4S = S2S;

    else
        S3 = S2; S3S = S2S;
        sz = sz33;
        for j3 = 1 : nu-1
            S4 = cell(1, sz*sz33); S4S = cell(1, sz*sz33);
            i1 = 1;
            for j1 = 1 : sz33
                for j2 = 1 : sz
                    S4{i1} = S3{j2} * S2{j1};
                    S4S{i1} = S3S{j2} * S2S{j1};

                    i1 = i1 + 1;
                end
            end
        end
        S3 = S4; S3S = S4S;
        sz = sz * sz33;
    end
end

```

```

end
end
% результат возведения многочленов в степень - клеточные
% матрицы S4 (числовая) и S4S (символьная),
% содержащие по  $sz33^{\nu}$  элементов;
%
sz4 = size(S4, 2);
for i3 = 1 : sz4
    S4{i3} = S4{i3};
end
MS44 = cell(1, sz4); MS44S = MS44; % временные матрицы
for j = 1 : 1

    for i3 = 1 : sz4
        MS44{i3} = S4{i3};
        MS44S{i3} = S4S{i3};
    end

    S6 = MS44; S6S = MS44S;

end

sz6 = size(S6, 2);
NS6{i2} = S6; NS6S{i2} = S6S; % запомнили
                                %  $\nu$ -й член суммы
i2 = i2 + 1;

end
clear MS44 MS44S
% результат - матрицы NS6 (числовая) и NS6S (символьная);
% эти клеточные вектор-строки содержат слагаемые матричной
% суммы по  $\nu$ , составляющей стох. матричный оператор
disp('Вычисление мат. ож. решения')
% раскрытие стох. моментов в символьной форме
sfname = sprintf('NS_S61tauS_lgM_%02d%02d%02d_', n, m, num);
szRAM = size(RAM, 2); strRAM = zeros(1, szRAM);

```

```

for iRAM = 1:szRAM
    strRAM(iRAM) = num2str( RAM(iRAM) );
end
sfname = [sfname, strRAM, '.mat'];
if exist(sfname) == 2
    load(sfname); % загрузить NS6 из файла
else
    % ВЫЧИСЛИТЬ NS6 заново
    disp('pause -- начало вычисления матрицы NS61tauS_lg'); pause
    NS61tauS_lg = cell(1, szn5);
    for i2 = 1 : szn5
        S6S = NS6S{i2}; % очередное слагаемое по nu
        sz62 = size(S6S, 2); % кол-во членов в этом слагаемом
        i1 = 1;
        NS61tauS_lg{i2} = cell(0, 0);
        for i = 1 : sz62
            NS61tauS_lg{i2}{i1,1} = i; NS61tauS_lg{i2}{i1,2} =
eval(c*(int(((a1)^2*S6S{i}*exp(-a1^2/p)* exp( -(a1)^2/(2))), r1, r2)/(sqrt(2*pi)))));
            disp(['(nu=', num2str(i2), ') ', ...
                'Раскрыт ', num2str(i1), '-й момент: ', ...
                'i=', num2str(i), ', ', NS61tauS_lg{i2}{i1,2}]);
            i1 = i1 + 1;
        %end
    end
end
disp('pause -- сохранение матрицы NS61tauS_lg в файле'); pause
save(sfname, 'NS61tauS_lg'); % сохранить NS6 в файле
end

NSM1 = cell(1, szn5);
for i2 = 1 : szn5
    if ~isempty(NS61tauS_lg{i2})
        S62 = NS61tauS_lg{i2}; S6 = NS6{i2};
        sz62 = size(S62, 1); % кол-во членов в этом слагаемом
        % (кол-во строк в S6)
        S1 = Z;
        for i = 1 : sz62

```

```

    S1 = S1 + ( S62{i,2} ) * S6{ S62{i,1} };
end
NSM1 {i2} = S1; % nu-е слагаемое
else
    NSM1 {i2} = Z; % nu-е слагаемое - нулевая матрица
end
end

sz_npr = num; % кол-во членов ряда в приближении npr (num=npr+1)
S = 0;
A1=0;
for i2 = 1 : sz_npr
    S = S + NSM1 {i2};
end
A1 = S;

sfname = sprintf('NS_S62tauS_ lgM_%02d%02d%02d_', n, m, num);
szRAM = size(RAM, 2); strRAM = zeros(1, szRAM);
for iRAM = 1:szRAM
    strRAM(iRAM) = num2str( RAM(iRAM) );
end
sfname = [sfname, strRAM, '.mat'];
if exist(sfname) == 2
    load(sfname); % загрузить NS6 из файла
else
    % ВЫЧИСЛИТЬ NS6 заново
    disp('pause -- начало вычисления матрицы NS62tauS_lg'); pause
    NS62tauS_lg = cell(1, szn5);
    for i2 = 1 : szn5
        S6S = NS6S {i2}; % очередное слагаемое по nu
        sz62 = size(S6S, 2); % кол-во членов в этом слагаемом
        i1 = 1; % счётчик моментов в этом слагаемом
        NS62tauS_lg {i2} = cell(0, 0); % т.к. кол-во строк в NS6 {i2}, а значит
            % и её размер заранее неизвестны
        for i = 1 : sz62

```

```

NS62tauS_lg{i2}{i1,1} = i; NS62tauS_lg{i2}{i1,2} = eval(c*(int(((a1)*S6S{i}*exp(-
a1^2/p)* exp( -(a1)^2/(2))), r1, r2)/(sqrt(2*pi))));
disp(['(nu=', num2str(i2), ') ', ...
      'Раскрыт ', num2str(i1), '-й момент: ', ...
      'i=', num2str(i), ', ', NS62tauS_lg{i2}{i1,2}]);
i1 = i1 + 1;
end
end
disp('pause -- сохранение матрицы NS62tauS_lg в файле'); pause
save(sfname, 'NS62tauS_lg'); % сохранить NS6 в файле
end

NSM2 = cell(1, szn5);
for i2 = 1 : szn5
    if ~isempty(NS62tauS_lg{i2})
        S622 = NS62tauS_lg{i2}; S66 = NS6{i2};
        sz622 = size(S622, 1); % кол-во членов в этом слагаемом
        S1 = Z;
        for i = 1 : sz622
            S1 = S1 + ( S622{i,2} ) * S66{ S622{i,1} };
        end
        NSM2{i2} = S1; % nu-е слагаемое
    else
        NSM2{i2} = Z; % nu-е слагаемое - нулевая матрица
    end
end

sz_npr = num; % кол-во членов ряда в приближении npr (num=npr+1)
S = 0;
A2=0;
for i2 = 1 : sz_npr
    S = S + NSM2{i2};
end
A2 = S;

sfname = sprintf('NS_S63tauS_lgM_%02d%02d%02d_', n, m, num);
szRAM = size(RAM, 2); strRAM = zeros(1, szRAM);

```

```

for iRAM = 1:szRAM
    strRAM(iRAM) = num2str( RAM(iRAM) );
end
sfname = [sfname, strRAM, '.mat'];
if exist(sfname) == 2
    load(sfname);
else
    disp('pause -- начало вычисления матрицы NS63tauS_lg'); pause
    NS63tauS_lg = cell(1, szn5);
    for i2 = 1 : szn5
        S6S = NS6S{i2}; % очередное слагаемое по nu
        sz63 = size(S6S, 2); % кол-во членов в этом слагаемом
        i1 = 1;
        NS63tauS_lg{i2} = cell(0, 0); % т.к. кол-во строк в NS6{i2}, а значит
            % и её размер заранее неизвестны
        for i = 1 : sz63
            NS63tauS_lg{i2}{i1,1} = i; NS63tauS_lg{i2}{i1,2} = eval(c*(int((S6S{i}*exp(-
a1^2/p)* exp( -(a1)^2/(2))), r1, r2)/(sqrt(2*pi)))));
            disp(['(nu=', num2str(i2), ') ', ...
                'Раскрыт ', num2str(i1), '-й ненулевой момент: ', ...
                'i=', num2str(i), ', ', NS63tauS_lg{i2}{i1,2}]);
            i1 = i1 + 1;
        %end
    end
end
disp('pause -- сохранение матрицы NS63tauS_lg в файле'); pause
save(sfname, 'NS63tauS_lg');
end

NSM3 = cell(1, szn5);
for i2 = 1 : szn5
    if ~isempty(NS63tauS_lg{i2})
        S6222 = NS63tauS_lg{i2}; S668 = NS6{i2};
        sz6222 = size(S6222, 1); % кол-во ненулевых членов в этом слагаемом
        S1 = Z;
        for i = 1 : sz6222
            S1 = S1 + ( S6222{i,2} ) * S668{ S6222{i,1} };
        end
    end
end

```

```

end
NSM3{i2} = S1; % nu-e слагаемое
else
NSM3{i2} = Z; % nu-e слагаемое - нулевая матрица
end
end
sz_npr = num; % кол-во членов ряда в приближении npr (num=npr+1)
S = 0;
A3=0;
for i2 = 1 : sz_npr
S = S + NSM3{i2};
end
A3 = S;
V1=-Dtau*D1*(D^2)'*MCY;
V2=sqrt(Dtau)*(-2*Mtau*D1*(D^2)'+E)*MCY;
V3=(-Mtau^2*D1*(D^2)'+Mtau*E)*MCY;
% вычисление мат. ожидания распределения ННЗ по глубине полупроводника mz(t)
CP=h*(A1*Y*V1+A2*Y*V2+A3*Y*V3);
sz_num = num + 1; % кол-во членов ряда в приближении num
ECP = h*(NSM1{sz_num}*Y*V1+NSM2{sz_num}*Y*V2+NSM3{sz_num}*Y*V3);

CP_num = CP + ECP; % CX мат. ожидания в приближении num

mz=Ilager_upt(CP,t,FS,alfa,lambda);
mz_num=Ilager_upt(CP_num,t,FS,alfa,lambda);
mz_EP=mz_num-mz; % ошибка вычисления mz(t)

MP=zeros(FSIZE,1);
for i=1:FSIZE
t=(i-1)*T/(FSIZE-1);

MP(i,1)=eval(mz);
end
fun_p_(MP,FSIZE,T)
MP_num=zeros(FSIZE,1);
for i=1:FSIZE
t=(i-1)*T/(FSIZE-1);

```

```

MP_num(i,1)=eval(mz_num);
end
fun_p_(MP_num,FSIZE,T)
EMP=zeros(FSIZE,1);
for i=1:FSIZE
    t=(i-1)*T/(FSIZE-1);

EMP(i,1)=eval(mz_EP);
end
mEP=max(max(abs(EMP)));

disp( ['Абсолютная ошибка вычисления Mp(z) не хуже ', num2str(mEP)] )
perMP = mEP * 100 / max(max(abs(MP_num)));
disp( ['Погрешность вычисления Mp(z) не больше ', num2str(perMP), '%'] )

disp( 'Вычисление автокорр. ф-ции решения ' )

% вычисление стох. моментов произведений коэф-тов
% стох. матричного оператора (клеточная вектор-строка NS77)
    % упорядоченном по Коши
szn5_2 = szn5* (szn5); % кол-во групп слагаемых в ряде-произведении,
    % упорядоченном по Коши
sfname5 = sprintf('NS_S77M_%02d%02d%02d_', n, m, num);
sfname5 = [sfname5, strRAM, '.mat'];
if exist(sfname5) == 2
    load(sfname5); % загрузить NS77 из файла
else
    % вычислить NS77 заново
    disp('pause -- начало вычисления матрицы S77'); pause

%
% ---- иниц-я переменных для блока счётчика %% выполнения ----
sz5 = 0;
for i2 = 1 : szn5
    sz5 = sz5 + size(NS6S{i2}, 2);

```

```

end
sz5_2 = sz5*sz5; % кол-во моментов произведений коэф-тов,
    % которорые надо раскрыть
pro_prn = 1.; % шаг печати процентов выполнения
ic = 0; p5 = (sz5_2/100.)*pro_prn; % параметры счётчика
i = 0; % счётчик вычисленных моментов (для печати %)
% ----- конец инициализации переменных счётчика %% -----
%
NS77 = cell(1, szn5_2); % выделить место для NS77
for i3 = 1 : szn5_2
    NS77{i3} = cell(0, 0); % инициализировать элементы NS77
end

%
I1 = ones(1, szn5_2); % массив счётчиков моментов в каждом
    i3=0;          % члене ряда-произведения, упорядоченного по Коши
%
% начало блока перемножения членов рядов по nu
% (в первом члене-сомножителе sz51 элементов, во втором - sz52)
for i1 = 1 : szn5
    S5S1 = NS6S{i1}; % первый ряд-сомножитель
    sz51 = size(S5S1, 2); % кол-во членов в этом ряду
    for i2 = 1 : szn5
        S5S2 = NS6S{i2}; % второй ряд-сомножитель
        sz52 = size(S5S2, 2); % кол-во членов в этом ряду
        i3 = i3 + 1; % индекс члена ряда-произведения
        % начало блока перемножения элементов членов рядов по nu
        % и осреднения результатов
        for j1 = 1 : sz51
            for j2 = 1 : sz52
                NS77{i3}{I1(i3),1} = i1; NS77{i3}{I1(i3),2} = i2;
                NS77{i3}{I1(i3),3} = j1; NS77{i3}{I1(i3),4} = j2;
                NS77{i3}{I1(i3),5} =eval(c*(int(((a1)^4 * S5S1{j1} * S5S2{j2} * exp(-2*a1^2/p) *
exp( -(a1)^2/(2))), r1, r2)/(sqrt(2*pi)))));
                disp(['i3=', num2str(i3), ...
                    ' Раскрыт ', num2str(I1(i3)),'-й момент: ', ...

```

```

'j1=', num2str(j1), ' j2=', num2str(j2), ...
', NS77{i3} {I1(i3),5})]
I1(i3) = I1(i3) + 1; % т.к. возможно, напр., что i3=2
    % как при i1=1,i2=2
    % так и при i1=2,i2=1 ,
    % поэтому приходится использовать массив I1,
    % а не переменную i1
    %end

%
% ----- начало блока счётчика %% выполнения -----
i = i + 1;
ic = ic + 1;
if ic >= p5
    disp([num2str( fix( i * 100.0/sz5_2 ) ), ...
        '% из ', num2str(sz5_2), ...
        ', т.е. ', num2str(i), ' моментов'])
    ic = 0;
end
% ----- конец блока счётчика %% выполнения -----
%
end
end
% конец блока перемножения элементов членов рядов по пи
% и осреднения результатов
%
end
end
disp('pause -- сохранение матрицы NS77 в файле'); pause
save(sfname5, 'NS77'); % сохранить NS77 в файле
end

sfname1 = sprintf('NS_S8M_%02d%02d%02d_', n, m, num);
sfname1 = [sfname1, strRAM, '.mat'];
if exist(sfname1) == 2
    load(sfname1); % загрузить NS8 из файла
else
    % вычислить NS8 заново

```

```

disp('pause -- начало вычисления матрицы S8'); pause

sz5 = 0;
for i2 = 1 : szn5
    sz5 = sz5 + size(NS6S{i2}, 2);
end
sz5_2 = sz5*sz5; % кол-во моментов произведений коэф-тов,
                % которые надо раскрыть
pro_prn = 1.; % шаг печати процентов выполнения
ic = 0; p5 = (sz5_2/100.)*pro_prn; % параметры счётчика
i = 0; % счётчик вычисленных моментов (для печати %)
% ----- конец инициализации переменных счётчика %% -----
NS8 = cell(1, szn5_2); % выделить место для NS8
for i3 = 1 : szn5_2
    NS8{i3} = cell(0, 0); % инициализировать элементы NS8
end
I2 = ones(1, szn5_2);
i3=0;
for i1 = 1 : szn5
    S5S1 = NS6S{i1}; % первый ряд-сомножитель
    sz51 = size(S5S1, 2); % кол-во членов в этом ряду
    for i2 = 1 : szn5
        S5S3 = NS6S{i2}; % второй ряд-сомножитель
        sz53 = size(S5S3, 2); % кол-во членов в этом ряду
        i3 = i3+ 1; % индекс члена ряда-произведения
        %
        % начало блока перемножения элементов членов рядов по nu
        % и осреднения результатов
        for j1 = 1 : sz51
            for j2 = 1 : sz53

                NS8{i3}{I2(i3),1} = i1; NS8{i3}{I2(i3),2} = i2;
                NS8{i3}{I2(i3),3} = j1; NS8{i3}{I2(i3),4} = j2;
                NS8{i3}{I2(i3),5} = eval(c*(int(((a1)^3 * S5S1{j1} * S5S3{j2} * exp(-2*a1^2/p) *
exp( -(a1)^2/(2))), r1, r2)/(sqrt(2*pi))));
                disp(['i3=', num2str(i3), ...
                    ' Раскрыт ', num2str(I2(i3)),'-й момент: ', ...

```

```

'j1=', num2str(j1), ' j2=', num2str(j2), ...
', NS8{i3} {I2(i3),5}]
I2(i3) = I2(i3) + 1; % т.к. возможно, напр., что i3=2
    % как при i1=1,i2=2
    % так и при i1=2,i2=1 ,
    % поэтому приходится использовать массив П,
    % а не переменную i1
    % end

%
% ----- начало блока счётчика %% выполнения -----
i = i + 1;

ic = ic + 1;
if ic >= p5
    disp([num2str( fix( i * 100.0/sz5_2 ) ), ...
        '% из ', num2str(sz5_2), ...
        ', т.е. ', num2str(i), ' моментов'])
    ic = 0;
end
% ----- конец блока счётчика %% выполнения -----
%
end
end
% конец блока перемножения элементов членов рядов по nu
% и осреднения результатов
%
end
end
% конец блока перемножения членов рядов по nu
%
disp('pause -- сохранение матрицы NS8 в файле'); pause
save(sfname1, 'NS8'); % сохранить NS8 в файле
end

sfname2 = sprintf('NS_S9M_%02d%02d%02d_', n, m, num);
sfname2 = [sfname2, strRAM, '.mat'];
if exist(sfname2) == 2

```

```

load(sfname2); % загрузить NS9 из файла
else
% вычислить NS9 заново
disp('pause -- начало вычисления матрицы S9'); pause

sz5 = 0;
for i2 = 1 : szn5
    sz5 = sz5 + size(NS6S{i2}, 2);
end
sz5_2 = sz5*sz5; % кол-во моментов произведений коэф-тов,
                % которорые надо раскрыть
pro_prn = 1.; % шаг печати процентов выполнения
ic = 0; p5 = (sz5_2/100.)*pro_prn; % параметры счётчика
i = 0; % счётчик вычисленных моментов (для печати %)
NS9 = cell(1, szn5_2); % выделить место для NS9
for i3 = 1 : szn5_2
    NS9{i3} = cell(0, 0); % инициализировать элементы NS9
end
I3 = ones(1, szn5_2);
i3=0;
for i1 = 1 : szn5
    S5S3 = NS6S{i1}; % первый ряд-сомножитель
    sz53 = size(S5S3, 2); % кол-во членов в этом ряду
    for i2 = 1 : szn5
        S5S4 = NS6S{i2}; % второй ряд-сомножитель
        sz54 = size(S5S4, 2); % кол-во членов в этом ряду
        i3 = i3+ 1; % индекс члена ряда-произведения
        %
        % начало блока перемножения элементов членов рядов по пи
        % и осреднения результатов
        for j1 = 1 : sz53
            for j2 = 1 : sz54

                NS9{i3} {I3(i3),1} = i1; NS9{i3} {I3(i3),2} = i2;
                NS9{i3} {I3(i3),3} = j1; NS9{i3} {I3(i3),4} = j2;
                NS9{i3} {I3(i3),5} = eval(c*(int(((a1)^2 * S5S3{j1} * S5S4{j2} * exp(-2*a1^2/p) *
exp( -(a1)^2/(2))), r1, r2)/(sqrt(2*pi))));

```

```

disp(['i3=', num2str(i3), ...
      ' Раскрыт ', num2str(I3(i3)),'-й момент: ', ...
      'j1=', num2str(j1), ' j2=', num2str(j2), ...
      ', NS9{i3} {I3(i3),5}])
I3(i3) = I3(i3) + 1; % т.к. возможно, напр., что i3=2
      % как при i1=1,i2=2
      % так и при i1=2,i2=1 ,
      % поэтому приходится использовать массив I1,
      % а не переменную i1
      % end

%
% ----- начало блока счётчика %% выполнения -----
i = i + 1;

ic = ic + 1;
if ic >= p5
    disp([num2str( fix( i * 100.0/sz5_2 ) ), ...
          '% из ', num2str(sz5_2), ...
          ', т.е. ', num2str(i), ' моментов'])
    ic = 0;
end
% ----- конец блока счётчика %% выполнения -----
%
end
end
% конец блока перемножения элементов членов рядов по nu
% и осреднения результатов
%
end
end
% конец блока перемножения членов рядов по nu
%
disp('pause -- сохранение матрицы NS9 в файле'); pause
save(sfname2, 'NS9'); % сохранить NS9 в файле
end

sfname3 = sprintf('NS_S10M_%02d%02d%02d_', n, m, num);

```

```

sfname3 = [sfname3, strRAM, '.mat'];
if exist(sfname3) == 2
    load(sfname3); % загрузить NS10 из файла
else
    % вычислить NS10 заново
    disp('pause -- начало вычисления матрицы S10'); pause

sz5 = 0;
for i2 = 1 : szn5
    sz5 = sz5 + size(NS6S{i2}, 2);
end
sz5_2 = sz5*sz5; % кол-во моментов произведений коэф-тов,
                % которые надо раскрыть
pro_prn = 1.; % шаг печати процентов выполнения
ic = 0; p5 = (sz5_2/100.)*pro_prn; % параметры счётчика
i = 0; % счётчик вычисленных моментов (для печати %)
NS10 = cell(1, szn5_2); % выделить место для NS10
for i3 = 1 : szn5_2
    NS10{i3} = cell(0, 0); % инициализировать элементы NS10
end
I3 = ones(1, szn5_2);
i3=0;
for i1 = 1 : szn5
    S5S3 = NS6S{i1}; % первый ряд-сомножитель
    sz53 = size(S5S3, 2); % кол-во членов в этом ряду
    for i2 = 1 : szn5
        S5S4 = NS6S{i2}; % второй ряд-сомножитель
        sz54 = size(S5S4, 2); % кол-во членов в этом ряду
        i3 = i3+ 1; % индекс члена ряда-произведения
        %
        % начало блока перемножения элементов членов рядов по пи
        % и осреднения результатов
        for j1 = 1 : sz53
            for j2 = 1 : sz54

                NS10{i3} {I3(i3),1} = i1; NS10{i3} {I3(i3),2} = i2;
                NS10{i3} {I3(i3),3} = j1; NS10{i3} {I3(i3),4} = j2;
            
```

```

NS10{i3} {I3(i3),5} = eval(c*(int(((a1) * S5S3{j1} * S5S4{j2} * exp(-2*a1^2/p) *
exp( -(a1)^2/(2))), r1, r2)/(sqrt(2*pi))));
disp(['i3=', num2str(i3), ...
      ' Раскрыт ', num2str(I3(i3)),'-й момент: ', ...
      'j1=', num2str(j1), ' j2=', num2str(j2), ...
      ', NS10{i3} {I3(i3),5}]')
I3(i3) = I3(i3) + 1; % т.к. возможно, напр., что i3=2
      % как при i1=1,i2=2
      % так и при i1=2,i2=1 ,
      % поэтому приходится использовать массив I1,
      % а не переменную i1
      % end

%
% ----- начало блока счётчика %% выполнения -----
i = i + 1;

ic = ic + 1;
if ic >= p5
    disp([num2str( fix( i * 100.0/sz5_2 ) ), ...
          '% из ', num2str(sz5_2), ...
          ', т.е. ', num2str(i), ' моментов'])
    ic = 0;
end
% ----- конец блока счётчика %% выполнения -----
%
end
end
% конец блока перемножения элементов членов рядов по nu
% и осреднения результатов
%
end
end
% конец блока перемножения членов рядов по nu
%
disp('pause -- сохранение матрицы NS10 в файле'); pause
save(sfname3, 'NS10'); % сохранить NS10 в файле
end

```

```

sfname4 = sprintf('NS_S11M_%02d%02d%02d_', n, m, num);
sfname4 = [sfname4, strRAM, '.mat'];
if exist(sfname4) == 2
    load(sfname4); % загрузить NS11 из файла
else
    % ВЫЧИСЛИТЬ NS11
    disp('pause -- начало вычисления матрицы S11'); pause

sz5 = 0;
for i2 = 1 : szn5
    sz5 = sz5 + size(NS6S{i2}, 2);
end
sz5_2 = sz5*sz5; % кол-во моментов произведений коэф-тов,
                % которые надо раскрыть
pro_prn = 1.; % шаг печати процентов выполнения
ic = 0; p5 = (sz5_2/100.)*pro_prn; % параметры счётчика
i = 0; % счётчик вычисленных моментов (для печати %)
NS11 = cell(1, szn5_2); % выделить место для NS11
for i3 = 1 : szn5_2
    NS11{i3} = cell(0, 0); % инициализировать элементы NS11
end
%
I3 = ones(1, szn5_2);
i3=0;
for i1 = 1 : szn5
    S5S3 = NS6S{i1}; % первый ряд-сомножитель
    sz53 = size(S5S3, 2); % кол-во членов в этом ряду
    for i2 = 1 : szn5
        S5S4 = NS6S{i2}; % второй ряд-сомножитель
        sz54 = size(S5S4, 2); % кол-во членов в этом ряду
        i3 = i3+ 1; % индекс члена ряда-произведения
        %
        % начало блока перемножения элементов членов рядов по nu
        % и осреднения результатов
        for j1 = 1 : sz53
            for j2 = 1 : sz54

```

```

NS11{i3}{I3(i3),1} = i1; NS11{i3}{I3(i3),2} = i2;
NS11{i3}{I3(i3),3} = j1; NS11{i3}{I3(i3),4} = j2;
NS11{i3}{I3(i3),5} = eval(c*(int((S5S3{j1} * S5S4{j2} * exp(-2*a1^2/p) * exp( -
(a1)^2/(2))), r1, r2)/(sqrt(2*pi))));
disp(['i3=', num2str(i3), ...
      ' Раскрыт ', num2str(I3(i3)),'-й момент: ', ...
      'j1=', num2str(j1), 'j2=', num2str(j2), ...
      ', NS11{i3}{I3(i3),5}]')
I3(i3) = I3(i3) + 1; % т.к. возможно, напр., что i3=2
      % как при i1=1,i2=2
      % так и при i1=2,i2=1 ,
      % поэтому приходится использовать массив I1,
      % а не переменную i1
      % end

%
% ----- начало блока счётчика %% выполнения -----
i = i + 1;

ic = ic + 1;
if ic >= p5
    disp([num2str( fix( i * 100.0/sz5_2 ) ), ...
          '% из ', num2str(sz5_2), ...
          ', т.е. ', num2str(i), ' моментов'])
    ic = 0;
end
% ----- конец блока счётчика %% выполнения -----
%
end
end
% конец блока перемножения элементов членов рядов по nu
% и осреднения результатов
%
end
end
% конец блока перемножения членов рядов по nu
%
```

```

disp('pause -- сохранение матрицы NS11 в файле'); pause
save(sfname4, 'NS11'); % сохранить NS11 в файле
end

NSR_num1 = cell(1, szn5_2); % матрица для хранения слагаемых
    % num-го приближения
NSR_npr1 = cell(1, szn5_2); % матрица для хранения слагаемых
    % npr-го приближения
for i3 = 1 : szn5_2
    if ~isempty(NS77{i3})
        S77 = NS77{i3};

        sz7 = size(S77, 1); % кол-во слагаемых в этом
            % члене (кол-во строк в S77)
        S1 = Z; S2 = Z;
        for i = 1 : sz7
            V12 = ( S77{i,5} ) * NS6{ S77{i,1} } { S77{i,3} } * Y * V1 * V1' * Y' * ...
                NS6{ S77{i,2} } { S77{i,4} };
            S1 = S1 + V12;
            % if ( S77{i,1} | S77{i,2} ) <= sz_npr
                if ( (S77{i,1} <= sz_npr) & (S77{i,2} <= sz_npr) )
                    S2 = S2 + V12;
                end
            end
        end
        NSR_num1{i3} = S1; % очередной член ряда-произведения
        NSR_npr1{i3} = S2; % очередной член ряда-произведения
    else
        NSR_num1{i3} = Z; % нулевая матрица
        NSR_npr1{i3} = Z; % нулевая матрица
    end
end
end

NSR_num2 = cell(1, szn5_2); % матрица для хранения слагаемых
    % num-го приближения
NSR_npr2 = cell(1, szn5_2); % матрица для хранения слагаемых

```

```

                                % npr-го приближения
for i3 = 1 : szn5_2
    if ~isempty(NS8{i3})
        S8 = NS8{i3};

        sz8 = size(S8, 1); % кол-во слагаемых в этом
                                % члене (кол-во строк в S8)
        S1 = Z; S2 = Z;
        for i = 1 : sz8
            V22 = ( S8{i,5} ) * NS6{ S8{i,1} }{ S8{i,3} } * (Y * V1 * V2' * Y'+ Y * V2 * V1'* Y')
*...
                                NS6{ S8{i,2} }{ S8{i,4} }';
            S1 = S1 + V22;
            %if ( S8{i,1} | S8{i,2} ) <= sz_npr
                if ( (S8{i,1} <= sz_npr) & (S8{i,2} <= sz_npr) )
                    S2 = S2 + V22;
                end
            end
        end
        NSR_num2{i3} = S1; % очередной член ряда-произведения
        NSR_npr2{i3} = S2; % очередной член ряда-произведения
    else
        NSR_num2{i3} = Z; % нулевая матрица
        NSR_npr2{i3} = Z; % нулевая матрица
    end
end

NSR_num3 = cell(1, szn5_2); % матрица для хранения слагаемых
                                % num-го приближения
NSR_npr3 = cell(1, szn5_2); % матрица для хранения слагаемых
                                % npr-го приближения
for i3 = 1 : szn5_2
    if ~isempty(NS9{i3})
        S9 = NS9{i3};

        sz9 = size(S9, 1); % кол-во слагаемых в этом
                                % члене (кол-во строк в S9)
        S1 = Z; S2 = Z;

```

```

for i = 1 : sz9
    V33 = ( S9{i,5} ) * NS6{ S9{i,1} }{ S9{i,3} } * (Y * V1 * V3' * Y'+ Y * V2 * V2'* Y'+
Y * V3 * V1'* Y') *...
        NS6{ S9{i,2} }{ S9{i,4} }';
    S1 = S1 + V33;
    %if ( S9{i,1} | S9{i,2} ) <= sz_npr
        if ( (S9{i,1} <= sz_npr) & (S9{i,2} <= sz_npr) )
            S2 = S2 + V33;
        end
    end
    NSR_num3{i3} = S1; % очередной член ряда-произведения
    NSR_npr3{i3} = S2; % очередной член ряда-произведения
else
    NSR_num3{i3} = Z; % нулевая матрица
    NSR_npr3{i3} = Z; % нулевая матрица
end
end

NSR_num4 = cell(1, szn5_2); % матрица для хранения слагаемых
    % num-го приближения
NSR_npr4 = cell(1, szn5_2); % матрица для хранения слагаемых
    % npr-го приближения
for i3 = 1 : szn5_2
    if ~isempty(NS10{i3})
        S10 = NS10{i3};
        sz10 = size(S10, 1); % кол-во слагаемых в этом
            % члене (кол-во строк в S10)
        S1 = Z; S2 = Z;
        V33=0;
        for i = 1 : sz10
            V33 = ( S10{i,5} ) * NS6{ S10{i,1} }{ S10{i,3} } * (Y * V2 * V3' * Y'+ Y * V3 * V2'*
Y') *...
                NS6{ S10{i,2} }{ S10{i,4} }';
            S1 = S1 + V33;
            %if ( S9{i,1} | S9{i,2} ) <= sz_npr
                if ( (S10{i,1} <= sz_npr) & (S10{i,2} <= sz_npr) )
                    S2 = S2 + V33;
                end
            end
        end
    end
end

```

```

    end
end
NSR_num4{i3} = S1; % очередной член ряда-произведения
NSR_npr4{i3} = S2; % очередной член ряда-произведения
else
    NSR_num4{i3} = Z; % нулевая матрица
    NSR_npr4{i3} = Z; % нулевая матрица
end
end
end

NSR_num5 = cell(1, szn5_2); % матрица для хранения слагаемых
    % num-го приближения
NSR_npr5 = cell(1, szn5_2); % матрица для хранения слагаемых
    % npr-го приближения
for i3 = 1 : szn5_2
    if ~isempty(NS11{i3})
        S11 = NS11{i3};
        sz11 = size(S11, 1); % кол-во слагаемых в этом
            % члене (кол-во строк в S11)
        S1 = Z; S2 = Z;
        V33=0;
        for i = 1 : sz11
            V33 = ( S11{i,5} ) * NS6{ S11{i,1} } { S11{i,3} } * ( Y * V3 * V3'* Y' ) * ...
                NS6{ S11{i,2} } { S11{i,4} }';
            S1 = S1 + V33;
            %if ( S9{i,1} | S9{i,2} ) <= sz_npr
                if ( (S11{i,1} <= sz_npr) & (S11{i,2} <= sz_npr) )
                    S2 = S2 + V33;
                end
            end
        end
        NSR_num5{i3} = S1; % очередной член ряда-произведения
        NSR_npr5{i3} = S2; % очередной член ряда-произведения
    else
        NSR_num5{i3} = Z; % нулевая матрица
        NSR_npr5{i3} = Z; % нулевая матрица
    end
end
end

S_num1 = Z; S_npr1 = Z;
for i3 = 1 : szn5_2

```

```

S_num1 = S_num1 + NSR_num1 {i3};
S_npr1 = S_npr1 + NSR_npr1 {i3};
end
S_num2 = Z; S_npr2 = Z;
for i3 = 1 : szn5_2
    S_num2 = S_num2 + NSR_num2 {i3};
    S_npr2 = S_npr2 + NSR_npr2 {i3};
end
S_num3 = Z; S_npr3 = Z;
for i3 = 1 : szn5_2
    S_num3 = S_num3 + NSR_num3 {i3};
    S_npr3 = S_npr3 + NSR_npr3 {i3};
end
S_num4 = Z; S_npr4 = Z;
for i3 = 1 : szn5_2
    S_num4 = S_num4 + NSR_num4 {i3};
    S_npr4 = S_npr4 + NSR_npr4 {i3};
end

S_num5 = Z; S_npr5 = Z;
for i3 = 1 : szn5_2
    S_num5 = S_num5 + NSR_num5 {i3};
    S_npr5 = S_npr5 + NSR_npr5 {i3};
end

% Спектральная характеристика второго начального момента распределения ННЗ
S_npr=S_npr1+S_npr2+S_npr3+S_npr4+S_npr5;
CTXX = double(S_npr); % в приближении npr
S_num=S_num1+S_num2+S_num3+S_num4+S_num5;

CTXX_num=double(S_num);
% вычисление автокорр. ф-ции RXX
CRXX_num=CTXX_num-CP_num*CP_num';

CRXX = CTXX-CP*CP';
t1=sym('t1','real');
t2=sym('t2','real');
RXX=Ilager_upt_2(CRXX,t1,t2,FS,alfa,lambda);
TXX=Ilager_upt_2(CTXX,t1,t2,FS,alfa,lambda);

```

```

TXX_num=Ilager_upt_2(CTXX_num,t1,t2,FS,alfa,lambda);
RXX_num=Ilager_upt_2(CRXX_num,t1,t2,FS,alfa,lambda);
TX_EP= TXX_num-TXX;
TPP_n=zeros(FSIZE,FSIZE);
for i=1:FSIZE for j=1:FSIZE
    t1=(i-1)*T/(FSIZE-1);
    t2=(j-1)*T/(FSIZE-1);
    TPP_n(i,j)=eval(TXX_num);
end
end

RPP=zeros(FSIZE,FSIZE);
for i=1:FSIZE for j=1:FSIZE
    t1=(i-1)*T/(FSIZE-1);
    t2=(j-1)*T/(FSIZE-1);
    RPP(i,j)=eval(RXX);
end
end
fun2(RPP,FSIZE,T)
RPP_n=zeros(FSIZE,FSIZE);
for i=1:FSIZE for j=1:FSIZE
    t1=(i-1)*T/(FSIZE-1);
    t2=(j-1)*T/(FSIZE-1);
    RPP_n(i,j)=eval(RXX_num);
end
end
fun2(RPP_n,FSIZE,T)
ETP=zeros(FSIZE,FSIZE);
for i=1:FSIZE for j=1:FSIZE
    t1=(i-1)*T/(FSIZE-1);
    t2=(j-1)*T/(FSIZE-1);
    ETP(i,j)=eval(TX_EP);
end
end
mEP1=max(max(abs(ETP)));

disp( ['Абсолютная ошибка вычисления  $\text{Tr}(z)$  не хуже ', num2str(mEP1)] )
perrMT = mEP1*100/max(max(abs(TPP_n)));
disp( ['Погрешность вычисления  $\text{Tr}(z)$  не больше ', num2str(perrMT), '%'] )

```