LATVIJAS UNIVERSITĀTES

ZINĀTNISKIE RAKSTI

ACTA UNIVERSITATIS LATVIENSIS

554

Прикладные задачи
математической физики
Математическое моделирование

Министерство народного образования Латвийской Республики
ЛАТВИЙСКИЙ УНИВЕРСИТЕТ
Институт математики и информатики

ПРИКЛАДНЫЕ ЗАДАЧИ МАТЕМАТИЧЕСКОЙ ФИЗИКИ

МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ

Научные труды
Том 554

Латвийский университет
Рига 1990

Математическое моделирование/ Отв.ред.Н.А.Авдонин //Прикладные задачи математической физики/ Гл.ред. А.А.Буйкис.Т.554. Рига: ЛУ, 1990. 198 с.

Настоящий сборник из серии "Прикладные задачи математической физики" содержит работы по математическому моделированию различных физических и технологических процессов. Анализируются процессы тепло- и массопереноса в расплавах и жидкостях, задачи термоупругости и упругопластического деформирования в кристаллах.

Сборник предназначен для научных работников, специалистов по математическому моделированию технологических процессов, аспирантов и студентов механико-математических и физико-математических специальностей.

М $\frac{1502000000-138у}{М812(11)-90}$ 31.90

ISBN 5-7970-0031-8

СОДЕРЖАНИЕ

ВВЕДЕНИЕ

В настоящий сборник включены статьи, отражающие основные научные направления работ, проводимых в Институте математики и информатики Латвийского университета, на кафедре дифференциальных уравнений физико-математического факультета Латвийского университета, в других организациях, с которыми поддерживаются и развиваются научные связи.

В работах сборника большое внимание уделяется вопросам гидродинамики, конвективной диффузии, устойчивости течений в высокотемпературных расплавах и жидкостях.

Так, разнообразные гидродинамические течения неоднородно нагретых расплавов изучаются в работах Е.Д.Люмкиса, Ю.В.Апановича и Л.А.Пакул, А.В.Бояревича, Х.Э.Калиса.

В работе Ю.В.Апановича и Г.Д.Люмкиса исследуется положение и форма границы раздела фаз при выращивании кристаллов методом направленной кристаллизации.

Расчет температуры и термоупругих напряжений в растущих монокристаллах, их влияние на плотность дислокаций исследуется в работах И.В.Беловой и С.С.Вахрамеева, Н.В.Козельской, В.И.Биберина, В.Б.Освенского.

Другим актуальным проблемам технологии и экологии посвящены работы М.Я.Антимирова и В.Р.Лиепини, В.Н.Варапаева и И.В.Королева, Л.И.Демченко, Г.Е.Мистецкого и Е.С.Вакал, З.Ю.Титушкиной.

Работы сборника могут быть полезны широкому кругу специалистов, занимающихся математическим моделированием технологических процессов и разработкой программного обеспечения на ЭВМ.

МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ
ПРИКЛАДНЫЕ ЗАДАЧИ МАТЕМАТИЧЕСКОЙ ФИЗИКИ, вып.1
Рига: Латвийский университет, 1990

УДК 517.956.223

И.Л.РУБИНШТЕЙН
Ben-Gurion University of the Negev,

Л.И.РУБИНШТЕЙН
The Hebrew University of Jerusalem,

Израиль

О НЕСОСТОЯТЕЛЬНОСТИ ДИФФУЗИОННОЙ МОДЕЛИ ОСМОСА

Настоящая статья является авторизованным переводом первой главы неопубликованной работы "On Dynamic Theory of Osmosis". Главы 2-4 этой работы посвящены построению и анализу следующей иерархии капиллярно-диффузионных моделей переноса воды через полупроницаемые мембраны: 1) Ненабухающий осмометр открытый через манометрическую трубку и ограниченый жесткой пористой мембраной; 2) Набухающий осмометр, ограниченый пористой мембраной постоянной толщины; 3) Двухфазная система, состоящая из набухающего осмометра и набухающей мембраны, в которой происходит осмотически индуцированный переток воды в основное тело мембраны, пронизанной заполненным водой капилляром; 4) Система, состоящая из конечного числа последовательно соединенных набухающих осмометров, разделенных бесконечно тонкими жесткими пористыми стенками. Во всех случаях доказаны глобальные теоремы существования - единственности и асимптотическое при $t\uparrow\infty$, стремление к состоянию механического и химического равновесия. (Краткое изложение см./1/).

1. Постановка задачи

В течение текущего столетия неоднократно отмечалось, что природа осмоса остается непонятной /2/,/3/,/4/,/6/.

В биологической литературе бытуют чисто диффузионная и капилярная модели нестационарного, осмотически индуцированного, переноса воды через полупроницаемые мембраны /5/,/3/,/6/: При этом ограничивались рассмотрением системы, состоящей из осмометра, открытого в атмосферу через манометрическую трубку, недеформируемой полупроницаемой мембраны и неограниченного водного бассейна. Было отмечено, что убедительные доказательства преимущества той или другой модели не были предложены /6/. Легко доказывается, что обе (чисто диффузионная и капиллярная модели) осмоса приводят к тождественным результатам, если рассматривается "стандартная" система открытый осмометр-жесткая мембрана /I/.

Едиственная известная нам работа, посвященная динамике осмотического массопереноса через деформируемые, способные набухать мембраны /8/ содержит формулировку соотношений между термодинамическими параметрами системы. Эти соотношения выведены, исходя из общих закономерностей термодинамики необратимых процессов с использованием однофазной чисто диффузионной модели мембраны. Никакая краевая задача в этой работе не была сформулирована и, соответственно, никакой анализ процесса не был проведен. Однако существование такой публикации, принадлежащей перу видного знатока термодинамики необратимых процессов, потребовало проведения анализа однофазной диффузионной модели осмоса.

Ниже мы рассматриваем простейшую одномерную модель осмотической системы, представленную на рис.I

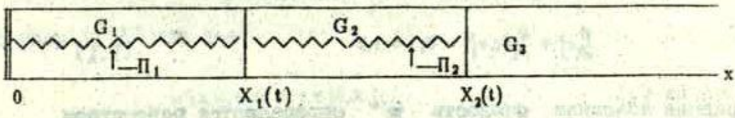


Рис. I.

Здесь G_1 имитирует осмометр, G_2 - полупроницаемую мембрану и G_3 - омывающий водный бассейн. Пружины Π_1 и Π_2, с концами, жестко закрепленными на границах осмометра и мембраны введены для описания упругих свойств осмометра и мембраны. Предполагаем, что осмометр G_1 заполнен идеальным раствором непроникающего жидкого неэлектролита A_0 в воде A_1. Мембрану трактуем, как пористую среду, образованную матрицей A_2 и порами, заполненными водой A_1. Пользуясь методом гомогенизации (т.е. замены реальной гетерогенной среды фиктивной гомогенной) /8/ трактуем мембрану, как идеальный раствор A_1 в A_2. Плотности всех компонентов системы считаем постоянными, равными плотности воды ($\rho = 1$). Предполагаем, что как в осмометре G_1, так и в мембране G_2 имеет место аддитивность объемов. Стенка $x = 0$ считается твердой, непроницаемой как для A_0 так и для воды A_1. Границы $x = X_1(t)$ и $x = X_2(t)$ считаем проницаемыми только для воды.

Введем обозначения: v_j^i - скорость A_j в $G_i = 1,2$ в лабораторной системе координат, w^i - средняя объемная скорость, c_j^i - молярная концентрация A_j в G_i, Ω_j - парциальный мольный объем ($\Omega_j = const$), p^i - давление и φ^i смещение точек пружины Π_i в G_i. Процесс считаем изотермичным.

А. Уравнения массопереноса и условия сопряжения на границах $x = X_i(t)$, $i = 1,2$

Напомним основные определения /9/.

Уравнение неразрывности компонента A_j

$$\frac{\partial}{\partial t}c_j^i + \frac{\partial}{\partial x}(c_j v_j^i) = 0, \; i = 1,2 \tag{I.1}$$

Средняя объемная скорость w^i определяется равенством

$$w^1 = \sum_{j=0}^{1} \Omega_j c_j^1 v_j^1, \quad w^2 = \sum_{j=1}^{2} \Omega_j c_j^2 v_j^2 \tag{I.2}$$

причем в силу аддитивности объемов

$$\sum_{j=1}^{1}\Omega_j c_j^1 = 1, \ \sum_{j=1}^{2}\Omega_j c_j^2 = 1 \qquad (I.3)$$

Из равенств (I.I–I.3) и $\Omega_j = const$ следует

$$\frac{\partial}{\partial x} w^i = 0, \ i = 1,2 \qquad (I.4)$$

Диффузионные потоки в системе средней объемной скорости определяются равенствами:

$$J_j^i = c_j^i(v_j^i - w^i), \ i = 1,2 \qquad (I.5)$$

Согласно закону Фика

$$J_k^i = -D^i\frac{\partial}{\partial x}c_k^i, \ k = 0,1 \text{ при } i = 1, \ k = 1,2 \text{ при } i = 2 \qquad (I.6.1)$$

Таким образом выполняются обычные уравнения конвективной диффузии:

$$\frac{\partial}{\partial t}c_k^i + \frac{\partial}{\partial x}(c_k^i w^i) = D^i\frac{\partial^2}{\partial x^2}c_k^i \qquad (I.6.2)$$

Так как граница $x = 0$ является жесткой твердой стенкой, непроницаемой ни для воды, ни для непроникающего компонента, ни для раствора в целом,

$$w^1(0,t) = 0, \ \forall t \geq 0 \qquad (I.7.1)$$

В силу (I.4) это дает

$$w^1(x,t) = 0, \ \forall \ x \in [0, X_1(t)] \qquad (I.7.2)$$

Границы $x = X_i(t)$, $i = 1,2$, являются поверхностями сильного разрыва. Однако нормальная составляющая средней объемной скорости изменяется при переходе через такие границы непрерывно (в силу (I.5)). Таким образом (I.4) и (I.7.I) дают

$$w^i \equiv 0, \ i = 1,2,3 \qquad (I.7.3)$$

На свободной границе $x = X_1(t)$ должны выполняться:
3 условия Стефана на диффузионные потоки

$$(c_1^1 - c_1^2)\dot{X}_1 = \frac{\partial}{\partial x}c_1^2 - D\frac{\partial}{\partial x}c_1^1,\ c_0^1\dot{X} = -D\frac{\partial}{\partial x}c_0^1,\ c_2^2\dot{X}_1 = -\frac{\partial}{\partial x}c_1^2 \qquad (I.8.1\text{-}3)$$

2 уравнения состояния

$$\Omega_0^1 c_0^1 = 1 - \Omega_1^1 c_1^1,\ \Omega_1^2 c_1^2 + \Omega_2^2 c_2^2 = 1 \qquad (I.8.4)$$

и 2 условия линейной зависимости диффузионных потоков

$$\Omega_0^1 J_{0n}^1 + \Omega_1^1 J_{1n}^1 = 0,\ \Omega_1^2 J_{1n}^2 + \Omega_1^2 J_{1n}^2 = 0 \qquad (I.8.5)$$

Исключая из условий Стефана (I.8.I) концентрации и потоки непроникающих компонентов получим

$$(1 - \Omega_1 c_1^1)\dot{X}_1(t) = \Omega_1\frac{\partial}{\partial x}c_1^1,\ (1 - \Omega_1 c_1^2)\dot{X}_1(t) = \Omega_1\frac{\partial}{\partial x}c_1^2 \text{ at } x = X_1(t), \qquad (I.9)$$

так что первое из условий Стефана (I.8.I) есть следствие (разность) условий (I.8.2-3).
Аналогично

$$(1 - \Omega_1 c_1^2)\frac{d}{dt}X_2(t) = \Omega_1\frac{\partial}{\partial x}c_1^2 \text{ at } x = X_2(t),\ \forall\, t > 0 \qquad (I.10)$$

Б. Уравнения движения и условия локального механического и химического равновесия на свободных границах.

Для определения концентрации воды на свободных границах используются:

а) квазистационарные уравнения движения с пренебрежением трения:

$$\frac{\partial}{\partial x}p^i = 0,\ \frac{\partial^2}{\partial x^2}\varphi^i = 0,\ i = 1,2 \qquad (I.11.1\text{-}2)$$

б) непрерывность напряжений на границах $x = X_i(t)$:

$$E_1\frac{\partial}{\partial x}\varphi^1 - p^1 = E_2\frac{\partial}{\partial x}\varphi^2 - p^2,\ x = X_1(t),\ t > 0;\ E_2\frac{\partial}{\partial x}\varphi^2 - p^2 = 0,\ x = X_2(t),\ t > 0 \qquad (I.11.3)$$

c) непрерывность химического потенциала воды на границах $x = X_i(t)$:

$$\Omega_1 p^1 + RT\mathrm{Ln}\left[\frac{c_1^1}{c_1^1 + c_0^1}\right] = \Omega_1 p^2 + RT\mathrm{Ln}\left[\frac{c_1^2}{c_1^2 + c_2^2}\right], x = X_1(t),\ t > 0 \quad (\mathrm{I.II.4})$$

$$\Omega_1 p^2 + RT\mathrm{Ln}\left[\frac{c_1^2}{c_1^2 + c_2^2}\right], x = X_2(t),\ t > 0 \quad (\mathrm{I.II.5})$$

д) краевые условия

$$\varphi^1(0,t) = 0,\ \varphi^1[X_1(t),t] = X_1(t) - X_1(0),\ \varphi^2[X_2(t),t] = X_2(t) - X_2(0) \quad (\mathrm{I.II.6})$$

Интеграция уравнений (I.II.I) с учетом условий (I.II.2,6) дает

$$p^1(t) = E_1[1 - X_1(t)/X_1(0)],\ p^2(t) = E_2[1 - L(t)/L(0)],\ (L = X_2 - X_1) \quad (\mathrm{I.I2})$$

$$u_2(t) \stackrel{def}{=} c_2^2(X_2(t),t) = \frac{1}{\Omega_2 \exp[\Omega_1 p^2/RT]} \quad (\mathrm{I.I3})$$

Аналогично вычисляется $q_1 t = c_1^2(X_1(t),t)$

Заметим, что из (I.I3) следует

$$u_2(+0) = 1/\Omega_1 \quad (\mathrm{I.I4.I})$$

$$\lim_{t\downarrow 0} \frac{d}{dt}u_2(t) \Big/ \frac{d}{dt}p^2 = \Omega_1\Omega_2/[(\Omega_2 - 1)RT] \quad (\mathrm{I.I4.2})$$

2. Несуществование решения задачи

Допустим, что решение задачи I существует, причем

$$\left| t^{1/2}\frac{d}{dt}X_i(t)\right| < \infty \quad . \tag{2.I}$$

Пусть

$$E(x-\xi, t-\tau) = \frac{\exp\left[-\frac{(x-\xi)^2}{4(t-\tau)}\right]}{2\pi^{1/2}(t-\tau)^{1/2}} \tag{2.2.I}$$

$$v_1(t) = \frac{\partial}{\partial x}c_1^1[X_1(t),t],\ v_2(t) = \frac{\partial}{\partial x}c_1^2[X_2(t),t],\ U_i(t) = \frac{d}{dt}u_i(t),\ i = 1,2 \tag{2.2.2}$$

$$w_i(t) = t^{1/2}v_i(t),\ \bar{U}_i(t) = t^{1/2}U_i(t),\ Z_i(t) = t^{1/2}\frac{d}{dt}X_i(t),\ i = 1,2 \quad . \tag{2.2.3}$$

Так как давления p^i, а вместе с ними и концентрации воды на границах мембраны, явно выражены через положение последних, задача определения концентрации воды в осмометре и мембране сводится к обобщенной двухфазной задаче Стефана. Пользуясь стандартной техникой тепловых потенциалов /I0/ можно показать, что (считая $D^2 = 1$)

$$c_1^2(x,t) = c_{10}^2\int_{X_1^0}^{X_2^0} E(x-\xi,t)d\xi + \int_0^t u(\tau)\left[\frac{\partial}{\partial x} + Z(\tau)\tau^{-1/2}\right]E(x-X_2(\tau),t-\tau)d\tau -$$

$$\int_0^t w(\tau)\tau^{-1/2}E(x-X_2(\tau),t-\tau) + \Phi(x,t\,|\,X_1) \quad . \tag{2.3.I}$$

где $\Phi(x,t\,|\,X_1)$ является суммой интегралов, взятых вдоль границы $x = X_1(t)$, т.е. таких, что

$$\lim_{t\downarrow 0}\frac{d^k}{dt^k}\Phi(X_2(t),t\,|\,X_1) = 0,\ \forall\ k \geq 0, \tag{2.3.2}$$

$$u(t) = c_1^2[X_2(t),t],\ w(t) = t^{1/2}\frac{\partial}{\partial x}c_1^2[X_2(t),t],$$

$$\tilde{U}(t) = t^{1/2}\frac{d}{dt}u(t),\ Z(t) = t^{1/2}\frac{d}{dt}X_2(t),\ \tilde{L}(t) = t^{1/2}\frac{d}{dt}L(t)\ . \qquad (2.3.3)$$

Заметим, что

$$\lim_{t\downarrow 0} u(t) = 1/\Omega_1 \qquad (2.4.I)$$

и, в силу (I.I2), (I.II.4–5) и (2.3.3),

$$\frac{d}{dt}u(t)/\frac{d}{dt}p^2 = -\frac{\Omega_2}{\Omega_1 RT} \Rightarrow \lim_{t\downarrow 0}\frac{\tilde{U}(t)}{\tilde{L}(t)} = -\alpha \overset{def}{=} -\frac{\Omega_2}{\Omega_1 RT} \qquad (2.4.2)$$

Заметим, далее, что в силу (2.3.I) и определений (2.3.3)

$$\frac{\partial}{\partial x}c_1^2(x,t) = [u_1(t) - c_{10}^2]E(x - X_2(0),t) + \int_0^t \tau^{-1/2}\tilde{U}(\tau)E(x - X_2(\tau),t-\tau)d\tau +$$

$$\int_0^t w(\tau)\tau^{-1/2}\frac{\partial}{\partial x}E(x-X_2(\tau),t-\tau)d\tau + \frac{\partial}{\partial x}\Phi(x,t\,|\,X_1)\ . \qquad (2.5.I)$$

Следовательно, в силу теоремы о разрывах теплового потенциала двойного слоя,

$$w = 2t^{1/2}(c_{10} - c_1^0)E(X_2(t)-X_2(0),t) + 2\int_0^t \tilde{U}_1(\tau)(t/\tau)^{1/2}\quad E(X_2(t),X_1(\tau),t-\tau)d\tau +$$

$$2\int_0^t w(\tau((t/\tau)^{1/2}\frac{\partial}{\partial x}E(X_2(t) - X_2(\tau),t-\tau)d\tau + 2t^{1/2}\frac{\partial}{\partial x}\Phi(X_2(t),t\,|\,X_1)\ . \qquad (2.6.I)$$

Отсюда следует, что

$$\lim_{t\downarrow 0} w_1(t) = \pi^{-1/2}(c_{10} - c_1^0)\exp\left[-\lim_{t\downarrow 0}\frac{[X_1(t) - X_1(0)]^2}{4t}\right] \neq 0\ . \qquad (2.6.2)$$

С другой стороны в силу (I.I4.2), (I.I0)

$$\lim_{t\downarrow 0} w_i(t) = 0 . \qquad (2.6.3)$$

Полученное противоречие доказывает несуществование решения, а значит и несостоятельность однофазной диффузионной модели осмоса.

3. Обсуждение полученного результата

Естественно возникает сомнение в справедливости утверждения о несостоятельности однофазной диффузионной модели осмоса, рассмотренной в /I,2/. Нужно убедиться в том, что этот вывод не является артефактом, вызванным пренебрежением инерционными членами в уравнениях движения пружин Π_1 и Π_2. Действительно, растворы, заполняющие осмометр D_1 и мембрану D_2 являются вязкими жидкостями, так что трение пружин о них должно было бы быть учтено даже тогда, когда растворы остаются неподвижными. Мы покажем, что и при учете трения заключение о несостоятельности чисто диффузионной модели осмоса остается в силе.

В силу закона Дарси уравнения (I.II.I-2) должны быть заменены уравнениями

$$\frac{\partial}{\partial t}\varphi^i = -\eta_i\frac{\partial}{\partial x}p^i\,(\eta_i = \mathrm{const}),\ i = 1,2 \qquad (3.I.I)$$

$$E_i\frac{\partial^2}{\partial x^2}\varphi^i + \eta_i\frac{\partial}{\partial x}p^i = 0\ ,\ i = 1,2\ , \qquad (3.I.2)$$

откуда следует, что

$$a_i^2\frac{\partial^2}{\partial x^2}\varphi^i = \frac{\partial}{\partial t}\varphi^i,\ (a_i^2 = E_i/\eta_i)\ i = 1,2\ . \qquad (3.I.3)$$

Нужно добавить начальные условия

$$\varphi^i(x,0) \equiv 0\ ,\ i = 1,2\ , \qquad (3.I.4)$$

оставив неизмененными граничные условия (I.II.3-6).

Мы не можем теперь сразу свести задачу определения концентраций и свободных границ к обобщенной двухфазной задаче Стефана, но должны добавить интегральные представления смещений φ^t к интегральным представлениям граничных концентраций и потоков воды. Опуская несколько громоздкий вывод и анализ этих интегральных представлений, укажем только его окончательный результат: Как и в / 2/

$$\exp\left(-\lim_{t\downarrow 0}\frac{[X_2(t)-X_2(0)]^2}{4t}\right)>0 \qquad (3.2.I)$$

Следовательно, снова имеем одновременно

$$w(0)=(1-\Omega_1 u_1(0))Z_1(0)=0 \qquad (3.2.2)$$

($Z_1(t)$ определено согласно (2.2.3)) и, в силу условия Стефана,

$$w(0)>0\ , \qquad (3.2.3)$$

что и доказывает наше утверждение.

Этот результат получен в предположении, что

$$\frac{d}{dt}X_i(t)=t^{-1/2}Z_i(t)\,,\ i=1,2\ , \qquad (3.3)$$

где $Z_i(t)$ ограничены в окрестности $t=0$. Очевидно, что это предположение может быть опущено. Действительно допустим для простоты, что существуют μ_K, $K=1,2$, такие, что

$$\frac{1}{2}<\mu_1<\mu_2<1,\ \frac{d}{dt}X_i(t)=t^{-1/2}Z_i(t), \qquad (3.4)$$

где $Z_i(t)$ ограничены в окрестности $t=0$. В этом случае

$$\frac{d}{dt}u(t)=U(t)t^{\mu},\ U(0)\neq 0,\ \mu=\max(\mu_1,\mu_2)\ , \qquad (3.5.I)$$

так что

$$1-\Omega_1 u(t) = O(1)t^{1-\mu} \tag{3.5.2}$$

Из равенства (3.5.2) и условия Стефана (I.IO) следует, что

$$\frac{\partial}{\partial x}c_1^2(X_2(t),t) = O(1)t^{1-\mu-\nu_2} = O(1)t^{-\nu},\ \nu<1\ . \tag{3.5.3}$$

Это значит, что

$$\lim_{t\downarrow 0}\int_0^t \frac{\partial}{\partial x}c_1^2[X_2(\tau),\tau]E(x-X_2(t),t-\tau)d\tau = 0\ \forall\, x\in[X_1(t),X_2(t)]\, . \tag{3.6.I}$$

Интегральное представление $c_1^2(x,t)$(см.(2.3.I)) может быть переписано в виде

$$c_1^2(x,t) = c_{10}^2\int_{X_1^0}^{X_2^0} E(x-\xi,t)d\xi + \int_0^t u(\tau)\left[\frac{\partial}{\partial x} + Z(\tau)\tau^{-1/2}\right]E(x-X_2(\tau),t-\tau)d\tau -$$

$$\int_0^t c_1^2[X_2(\tau),\tau)E(x-X_2(\tau),t-\tau) + \Phi(x,t\,|\,X_1)\ , \tag{3.6.2}$$

откуда следует, что

$$c_1^2[X_2(t),t) = 2c_{10}^2\int_{X_1^0}^{X_2^0} E[X_2(t)-\xi,t)d\xi + \int_0^t u(\tau)\left[\frac{\partial}{\partial x} + Z(\tau)\tau^{-1/2}\right]E(X_2(t)-X_2(\tau),t-\tau)d\tau -$$

$$\int_0^t c_1^2[X_2(\tau),\tau)E(X_2(t)-X_2(\tau),t-\tau) + \Phi(X_2(t),t\,|\,X_1)\ . \tag{3.6.3}$$

Следовательно,

$$\lim_{t\downarrow 0} c_1^2[X_2(t),t) = c_{10}^2 < 1/\Omega_1\ , \tag{3.6.4}$$

что противоречит (I.I4.I). Таким образом,заключение о несостоятельности чисто диффузионной модели осмоса остается в силе и при отказе от (естественного) предположения (3.3).

В заключение подчеркнем, что несостоятельность чисто диффузионной динамической модели осмоса было возможно обнаружить только благодаря рассмотрению задачи, в которой начальные и краевые условия не были согласованы по непрерывности. Следствием этого явилась рассогласованность в начальный момент условия Стефана и условия непрерывности химического потенциала воды. Можно было бы предположить, что дело только в неудачно выбранном начальном условии, а не в существе вопроса. Однако капиллярно-диффузионная модель осмоса позволяет рассматривать задачу с выходными данными не согласованными по непрерывности (см. сноску №2) и именно это дает основание говорить о несостоятельности чисто диффузионного описания осмоса.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. I.Rubinstein and L.Rubinstein. On dynamic theory of osmosis//Free Boundary Problems: Theory & Applications, International colloquim June 13-June 22, 1990 CMR, Montreal, Canada (to appear).
2. Хвольсон О.Д. Курс физики. I892-I9I5. - Т. 2.
3. Dainty J. Water relations of plant Cells//Advances Bot. Res., 1963. - V. 1. - P. 279-324.
4. Suourivajan S. Reverse osmosis. Lagos. London, 1970.
5. Вилли К. Биология. - М.: Мир, I966.
6. Thain J.F. Principles of osmotic Phenomena//The Royal Institute of Chemisty, 1967.
7. Spilberg A. Transport though deformable matrices//Biorheology, 1989. - V. 26. - P. 291-313.
8. Рубинштейн Л.И. Температурные поля в нефтяных пластах.- М.: Недра, I972.
9. L.Rubinstein. Passive transfer of low-molecular nonelectrolytes across deformable membranes. I.Equations of convective-diffusion transfer of non-electrolytes across deformable membranes of a large curvature//Bull. Math.Biol., 1974. - V. 36. - N 4. - P. 365-377.
10. Рубинштейн Л.И. Проблема Стефана. - Рига: Звайгзне, I968.

МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ
ПРИКЛАДНЫЕ ЗАДАЧИ МАТЕМАТИЧЕСКОЙ ФИЗИКИ, вып.I
Рига: Латвийский университет, 1990

УДК 536.421.I+536.74

Н.А.АВДОНИН, М.Л.ГУЛБЕ
ИМИ ЛУ, Рига

МЕТОД ЛОКАЛЬНОГО ОСРЕДНЕНИЯ ПРИ ЧИСЛЕННОМ РЕШЕНИИ ЗАДАЧИ РОСТА КРИСТАЛЛА ИЗ БИНАРНОГО РАСПЛАВА

В работе /I/ разработан метод решения задачи кристаллизации бинарного расплава в обобщенной постановке, не допускающей переохлаждения. Было доказано существование устойчивого решения термодиффузионной задачи во всем диапазоне параметров. Это решение определяло двухфазную зону в случае возникновения дендритного роста. Однако в классической постановке задачи, если допустить существование гладкого фронта кристаллизации (поверхности фазового перехода), возможно возникновение переохлаждения в жидкой фазе и подход, использованный в /I/, введения обобщенного решения не пригоден.

Для численного решения задачи кристаллизации в классической постановке применим метод локального осреднения.

I. Задачу кристаллизации бинарного расплава описывают уравнение теплопереноса

$$\mathcal{L}\frac{\partial u}{\partial t} = div(\lambda\, grad\, u) + f\,, \qquad (I)$$

уравнение диффузии примеси

$$\frac{\partial C}{\partial t} = div(\mathcal{D}\, grad\, C) \qquad (2)$$

и условия на границе раздела фаз :

$$[\lambda\, grad\, u\cdot\vec{n}]_s = \gamma v_n(t)[\eta]_n\,, \qquad (3)$$

$$[\mathcal{D}\, grad\, C\cdot\vec{n}]_s = (1-m)C\, v_n(t)[\eta]_n\,, \qquad (4)$$

$$\Delta u = u_e - u = -u - \alpha C = 0 \tag{5}$$

Здесь $\mathcal{L}$ - удельная теплоемкость, γ - удельная скрытая теплота плавления, λ - коэффициент теплопроводности, $\mathcal{D}$ - коэффициент диффузии соответствующей фазы; $[\Phi]_s$ - скачок величины Φ при переходе через поверхность S ; $\vec{n}$ - вектор нормали, направленный в сторону жидкой фазы, v_n - скорость движения границы раздела фаз в направлении нормали $\vec{n}$, Δu - переохлаждение, определяемое согласно диаграмме фазового состояния бинарной системы.

Запишем уравнения (I),(2) и условия (3),(4) в обобщенном виде в смысле теории распределений, /2/:

$$\mathcal{L}\frac{\partial u}{\partial t} = div(\lambda(s)\, grad\, u + \gamma v_n(t)\eta(s)\cdot\vec{n}) + f \tag{6}$$

$$(1-(1-m)\eta(s))\frac{\partial C}{\partial t} = div(\mathcal{D}(s)\, grad\, C +$$
$$+(1-m)v_n(t) C\, \eta(s)\cdot\vec{n}), \tag{7}$$

здесь $\eta(s)$ - единичная функция, имеющая скачок на линии S.

$$\lambda(s) = \lambda_1\eta + \lambda_2(1-\eta); \quad \mathcal{D}(s) = \mathcal{D}_1 m\eta + \mathcal{D}_2(1-\eta) \tag{7'}$$

Проведем осреднение основных соотношений (6),(7) по локальным объемам V_ρ . Применяя операцию осреднения к уравнениям (6),(7) и учитывая, что функции u и C непрерывны на S , получим:

$$\mathcal{L}\frac{\partial u^\rho}{\partial t} = div(\vec{Q}_1^\rho) + \tilde{f}^\rho \tag{8}$$

$$(1-(1-m)\eta^\rho)\frac{\partial C^\rho}{\partial t} = div(\vec{Q}_2^\rho). \tag{9}$$

Здесь введены обозначения потоков тепла $\vec{Q}_1$ и массы $\vec{Q}_2$:

$$\vec{Q}_1 = \lambda(s)\,\mathrm{grad}\,u + \gamma v_n(t)\eta(s)\cdot\vec{n} \qquad (10)$$

$$\vec{Q}_2 = \mathcal{D}(s)\,\mathrm{grad}\,C + (1-m)v_n(t)C(s)\eta(s)\cdot\vec{n} \qquad (11)$$

Индекс ρ означает среднюю величину по объему V_ρ. Остается найти $\vec{Q}_1^\rho$, $\vec{Q}_2^\rho$. Прежде чем осреднить уравнения (10),(11), перейдем к локальной системе координат (n, τ), оси которой направлены по нормали и по касательной к гиперповерхности S. Записав соотношение (10),(11) в этой системе координат, увидим, что компоненты Q_{1n}, Q_{2n} векторов $\vec{Q}_1$, $\vec{Q}_2$ непрерывны согласно условиям (3),(4), а в направлении τ непрерывны $\mathrm{grad}_\tau u$ и $\mathrm{grad}_\tau C$, так как на линии S непрерывны сами функции u и C. Тогда записав соотношения (10),(11) по компонентам в виде:

$$\frac{1}{\lambda(s)}Q_{1n} = \mathrm{grad}_n u + \gamma v_n(t)\eta(s)\frac{1}{\lambda(s)} \qquad (12)$$

$$\frac{1}{\mathcal{D}(s)}Q_{2n} = \mathrm{grad}_n C + (1-m)v_n(t)C(s)\eta(s)\frac{1}{\mathcal{D}(s)} \qquad (13)$$

$$Q_{1\tau} = \lambda(s)\,\mathrm{grad}_\tau u \qquad (14)$$

$$Q_{2\tau} = \mathcal{D}(s)\,\mathrm{grad}_\tau C, \qquad (15)$$

можем непосредственно применить операцию осреднения к соотношениям (12)-(15). Учитывая выражения (7′) для $\lambda(s)$, $\mathcal{D}(s)$, получим:

$$(\lambda^{-1})^\rho Q_{1n}^\rho = \mathrm{grad}_n u^\rho + \gamma v_n(t)\frac{\eta^\rho}{\lambda_1} \qquad (16)$$

$$(\mathcal{D}^{-1})^\rho Q_{2n}^\rho = \mathrm{grad}_n C^\rho + (1-m)C^\rho v_n(t)\frac{\eta^\rho}{\mathcal{D}_1 m} \qquad (17)$$

$$Q_{1\tau}^\rho = \lambda^\rho\,\mathrm{grad}_\tau u^\rho \qquad (18)$$

$$Q_{2\tau}^\rho = \mathcal{D}^\rho\,\mathrm{grad}_\tau C^\rho \qquad (19)$$

причем

$$(\lambda^{-1})^{\rho} = \frac{\eta^{\rho}}{\lambda_1} + \frac{1-\eta^{\rho}}{\lambda_2} \ ; \ (\mathcal{D}^{-1})^{\rho} = \frac{\eta^{\rho}}{\mathcal{D}_1 m} + \frac{1-\eta^{\rho}}{\mathcal{D}_2}$$
$$\lambda^{\rho} = \lambda_1 \eta^{\rho} + \lambda_2 (1-\eta^{\rho}); \ \mathcal{D}^{\rho} = \mathcal{D}_1 m \eta^{\rho} + \mathcal{D}_2 (1-\eta^{\rho}) \tag{20}$$

Подставляя в уравнения (8),(9) найденные из (16)-(19) значения потоков и возвращаясь к исходной системе координат, получим осредненные уравнения:

$$\mathcal{L} \frac{\partial u^{\rho}}{\partial t} = div(\hat{\lambda}^{\rho} grad\, u^{\rho}) + f^{\rho} + \gamma v_n(t) \delta^{\rho}(s) \tag{21}$$

$$(1-(1-m)\eta^{\rho}) \frac{\partial C^{\rho}}{\partial t} = div(\hat{\mathcal{D}}^{\rho} grad\, C^{\rho}) + (1-m) C^{\rho} v_n(t) \delta^{\rho}(s), \tag{22}$$

где $\hat{\lambda}^{\rho}$, $\hat{\mathcal{D}}^{\rho}$ - матрицы осредненных коэффициентов с элементами, определяемыми по формулам преобразования тензоров:

$$\lambda^{\rho}_{ij} = \alpha_{in} \alpha_{jm} \tilde{\lambda}_{nm} \ ; \ \mathcal{D}^{\rho}_{ij} = \alpha_{in} \alpha_{jm} \tilde{\mathcal{D}}_{nm} \tag{23}$$

$\alpha_{in} = \cos(x_i, x'_n)$, x_i - исходная система координат; x'_n - преобразованная система координат; $\tilde{\lambda}_{nm}, \tilde{\mathcal{D}}_{nm}$ - коэффициенты теплопроводности и диффузии в преобразованной системе координат:

$$\begin{pmatrix} \tilde{\lambda}_{11} & \tilde{\lambda}_{12} \\ \tilde{\lambda}_{21} & \tilde{\lambda}_{22} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{1}{(\lambda^{-1})^{\rho}} & 0 \\ 0 & \lambda^{\rho} \end{pmatrix}; \begin{pmatrix} \tilde{\mathcal{D}}_{11} & \tilde{\mathcal{D}}_{12} \\ \tilde{\mathcal{D}}_{21} & \tilde{\mathcal{D}}_{22} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{1}{(\mathcal{D}^{-1})^{\rho}} & 0 \\ 0 & \mathcal{D}^{\rho} \end{pmatrix} \tag{24}$$

Для определения скорости $v_n(t)$ запишем известное кинетическое условие для нормального закона скорости роста /3/:

$$v_n(t) = \mathcal{K} \Delta u^{\rho} \tag{25}$$

Преобразуем последние слагаемые в правой части уравнений (21),(22).

$$\delta^{\rho}(s) = \frac{1}{v_{\rho}} \int_{v_{\rho}} \delta(s) dv = \frac{mes\, S_{\rho}}{v_{\rho}} \tag{26}$$

$mes\, S_\rho$ - мера части поверхности S , содержащейся в объеме v_ρ . Учитывая выражение (25) для $v_n(t)$, запишем

$$v_n(t)\delta^\rho(s) = \mathcal{K}\frac{mes\, S_\rho}{v_\rho}\Delta u^\rho = \beta\Delta u^\rho\,\theta(\rho - |x - x^*|), \qquad (27)$$

$\theta(\xi)$ - единичная функция, x^* - точка на границе раздела фаз S .

С другой стороны

$$v_n(t)\delta^\rho(s) = \frac{1}{v_\rho}\int\limits_{v_\rho} v_n(t)\delta(s)\,dv = \frac{1}{v_\rho}\int\limits_{S_\rho} v_n(t)\,ds = \frac{\partial\eta^\rho}{\partial t} \qquad (28)$$

Таким образом уравнения (2I),(22) можем записать в виде:

$$\mathcal{L}\frac{\partial u^\rho}{\partial t} = div(\hat{\lambda}^\rho grad\, u^\rho) + f^\rho + \gamma\frac{\partial\eta^\rho}{\partial t} \qquad (29)$$

$$(1-(1-m)\eta^\rho)\frac{\partial C^\rho}{\partial t} = div(\hat{\partial}^\rho grad\, C^\rho) + (1-m)C^\rho\frac{\partial\eta^\rho}{\partial t} \qquad (30)$$

причем

$$\frac{\partial\eta^\rho}{\partial t} = \beta\Delta u^\rho\,\theta(\rho - |x - x^*|)\,\theta(\Delta u^\rho). \qquad (3I)$$

уравнения (29)-(3I) представляют собой замкнутую задачу, удобную для численного решения. Можно применять разностные методы со сквозным счетом без выделения границы раздела фаз.

Покажем, что решение задачи (29)-(3I) сходится к решению исходной задачи (6),(7),(5) при $\beta\to\infty$, $\rho\to 0$. Для этого получим соответствующие априорные оценки. Уравнение (29),(30) умножим на u^ρ , C^ρ соответственно и проинтегрируем по исходной области Q_T , приняв на границе области Γ однородные граничные условия первого рода. Используя неравенства Коши и Гронуола /4/, получим неравенство:

$$\int\limits_{Q_T}\left(\mathcal{L}(u^\rho)^2+(1-(1-m)\eta^\rho)(C^\rho)^2\right)dxdt+\int\limits_{Q_T}\left(\varkappa^\rho_{ij}\frac{\partial u^\rho}{\partial x_i}\frac{\partial u^\rho}{\partial x_j}+\right.$$

$$\left.+\mathcal{D}^\rho_{ij}\frac{\partial C^\rho}{\partial x_i}\frac{\partial C^\rho}{\partial x_j}\right)dxdt-\beta\int\limits_{Q_{T,\rho}}\Delta u^\rho(\gamma u^\rho+(1-m)(C^\rho)^2)dxdt\leq 0{,}5\mathcal{L}\int\limits_{\Omega}(u^\rho)^2\Big|_{t=0}dx+$$

$$+0{,}5\int\limits_{\Omega}(C^\rho)^2\Big|_{t=0}dx+\mathcal{K}_1\int\limits_{Q_T}(f^\rho)^2dxdt \tag{32}$$

Здесь $Q_{T,\rho}$ - часть области Q_T, занятая ρ - окрестностью границы раздела фаз S, в которой $\Delta u^\rho>0$. В области, где $\Delta u^\rho>0$, $u^\rho<-\alpha C^\rho$ и последнее слагаемое в левой части (32) можно оценить следующим образом:

$$\mathcal{J}=-\beta\int\limits_{Q_{T,\rho}}\Delta u^\rho(\gamma u^\rho+(1-m)(C^\rho)^2)dxdt>\beta\int\limits_{Q_{T,\rho}}\Delta u^\rho(\gamma\alpha-$$

$$-(1-m)C^\rho)C^\rho dxdt\geqslant\beta\int\limits_{Q_{T,\rho}}\Delta u^\rho\gamma\alpha C^\rho dxdt>0$$

Таким образом, в (32) получена оценка функций u^ρ, C^ρ и их производных по x_i в норме $\mathcal{L}_2(Q_T)$ равномерная по β и ρ. Указанная оценка позволяет перейти к пределу в интегральных тождествах, соответствующих уравнениям (29),(30) при $\beta\to\infty$, $\rho\to 0$:

$$\int\limits_{Q_T}\left(-\mathcal{L}u^\rho\frac{\partial\psi}{\partial t}+\varkappa^\rho_{ij}\frac{\partial u^\rho}{\partial x_i}\frac{\partial\psi}{\partial x_j}+\right.$$

$$\left.+\gamma\eta^\rho\theta(\eta^\rho)\theta(\Delta u^\rho)\frac{\partial\psi}{\partial t}-f^\rho\psi\right)dxdt=0 \tag{33}$$

$$\int\limits_{Q_T}\left(-(1-(1-m)\eta^\rho)C^\rho\frac{\partial\psi}{\partial t}+\mathcal{D}^\rho_{ij}\frac{\partial C^\rho}{\partial x_i}\frac{\partial\psi}{\partial x_j}+\right.$$

$$\left.+(1-m)C^\rho\eta^\rho\frac{\partial\psi}{\partial t}\right)dxdt=0 \tag{34}$$

Действительно, функции $\frac{\partial u^\rho}{\partial x_i}$, $\frac{\partial C^\rho}{\partial x_i}$ сходятся слабо в $\mathcal{L}_2$, а осредненные функции η^ρ, $\varkappa^\rho_{ij}$, $\mathcal{D}^\rho_{ij}$ сильно. В пределе получаем тождества, соответствующие уравнениям (6),(7), при этом $\Delta u^\rho\to 0$ на S. Таким образом, получили решение исходной задачи (6),(7),(5).

2. Приведем пример численного решения поставленной задачи на следующей модели. Рассмотрим модель процесса кристаллизации бинарного сплава для цилиндрического образца прямоугольной формы. В этом случае осредненные уравнения (29),(30) запишем в виде (индекс осреднения ρ опускаем):

$$\mathcal{L}\frac{\partial u}{\partial t}=\frac{\partial}{\partial x}\left(\tilde{\lambda}_{11}\frac{\partial u}{\partial x}\right)+\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}\left(r\tilde{\lambda}_{22}\frac{\partial u}{\partial r}\right)-$$

$$-\alpha_0(u-u_0)+\gamma\frac{\partial\eta}{\partial t} \tag{35}$$

$$(1-(1-m)\eta)\frac{\partial C}{\partial t}=\frac{\partial}{\partial x}\left(\tilde{D}_{11}\frac{\partial C}{\partial x}\right)+\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}\left(r\tilde{D}_{22}\frac{\partial C}{\partial r}\right)+$$

$$+(1-m)C\frac{\partial\eta}{\partial t} \tag{36}$$

На торцах слитка и боковой поверхности потребуем выполнения условий:

$$\tilde{\lambda}_{11}\frac{\partial u}{\partial x}\bigg|_{x=0}=\alpha_1(u-u_1);\ \tilde{\lambda}_{11}\frac{\partial u}{\partial x}\bigg|_{x=\ell}=-\alpha_2(u-u_2) \tag{37}$$

$$\tilde{\lambda}_{22}\frac{\partial u}{\partial r}\bigg|_{r=R}=-\alpha_3\varepsilon\sigma_0(u^4-u_b^4(x));\ \ \frac{\partial u}{\partial r}\bigg|_{r=0}=0 \tag{38}$$

$$\frac{\partial C}{\partial r}\bigg|_{r=0}=\frac{\partial C}{\partial r}\bigg|_{r=R}=0;\ \frac{\partial C}{\partial x}\bigg|_{x=0}=\frac{\partial C}{\partial x}\bigg|_{x=\ell}=0 \tag{39}$$

$$u(x,r,0)=u_H(x,r);\ C(x,r,0)=C_H \tag{40}$$

Уравнения (35),(36) аппроксимировались обычной консервативной разностной схемой на неравномерной сетке. Так как мы рассматриваем задачу в классической постановке, то скрытая теплота выделяется только на границе раздела фаз, а точнее в ρ - окрестности этой границы. Тогда разностную аппроксимацию членов, содержащих $\frac{\partial\eta}{\partial t}$ в уравнениях (35),(36) следует записать в таком виде:

$$\left(\frac{\partial\eta}{\partial t}\right)_{ij}^{k+\sigma} = \beta\Delta u_{ij}^{k+\sigma}\Big(\theta(\Delta u_{ij}^{k+\sigma-1/2})\theta(1-\eta_{ij}^{k})\theta_1(\eta_{i\pm1j\pm1}^{k}-1)+$$
$$+\theta(-\Delta u_{ij}^{k+\sigma-1/2})\theta(\eta_{ij}^{k})\Big), \tag{41}$$

где $\sigma = 1/2$ для уравнения (35) и $\sigma = 1$ для уравнения (36).

$$\Delta u_{ij}^{k+1/2} = u_n - u_{ij}^{k+1} - \alpha C_{ij}^{k}, \quad \Delta u_{ij}^{k+1} = u_n - u_{ij}^{k+1} - \alpha C_{ij}^{k+1}.$$

Сама функция η определяется согласно уравнению (31) в следующей аппроксимации:

$$\eta_{ij}^{k+1} - \eta_{ij}^{k} = \tau\beta\Delta u_{ij}^{k+1}\Big(\theta(\Delta u_{ij}^{k+1})\theta(1-\eta_{ij}^{k})\theta_1(\eta_{i\pm1j\pm1}^{k}-1)+$$
$$+\theta(-\Delta u_{ij}^{k+1})\theta(\eta_{ij}^{k})\Big) \tag{42}$$

При расчетах применяется эффективный итерационный метод неполного LU-разложения сопряженных градиентов /5/.

3. Численно решалась задача о кристаллизации слитка, охлаждаемого с поверхности и имеющего внутренние объемные источники, т.е. $\alpha_3 = 1$ и $\alpha_0 \neq 0$. Результаты показали, что в этом случае происходит устойчивый рост кристалла с гладкой границей раздела фаз. Также проводились расчеты и случаев, когда на границе раздела фаз или объеме расплава задаются конечные начальные возмущения. В этих случаях предполагалось $\alpha_0 = \alpha_3 = 0$. На рис.1 показана динамика роста от подложки, т.е. случай, когда начальные конечные возмущения задаются на границе раздела фаз. На рис.2 отражена динамика роста кристалла от затравки, т.е. случая, когда начальное конечное возмущение задается в объеме расплава. Видим, что во всех случаях происходит устойчивый рост кристалла. Задача численно

решалась при следующих значениях физических констант: $\lambda_1 = 0{,}173$ вм/(см град), $\lambda_2 = 0{,}412$ вт/(см град), $\mathcal{L} =$ $= 0{,}34$ вт с/(см град), $u_n = 1210^{\circ}$К, $\varepsilon_1 = 0{,}6$, $\varepsilon_2 = 0{,}18$, $\sigma_0 = 5{,}67\ 10^{-12}$ вт/(см^2 град), $u_0 = 1100^{\circ}$К, $\mathcal{D}_1 = 2\ 10^{-11}$ см^2/с, $\mathcal{D}_2 = 10^{-5}$ см^2/с, $\gamma = 430$ дж/г, $\ell = 2$ см, $R = 1$ см.

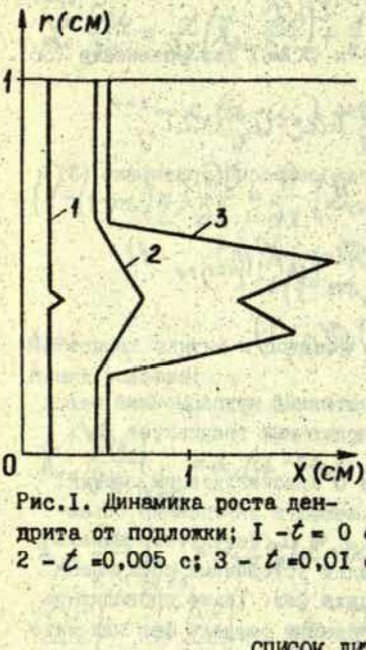


Рис.I. Динамика роста дендрита от подложки; I - t = 0 с; 2 - t =0,005 с; 3 - t =0,0I с

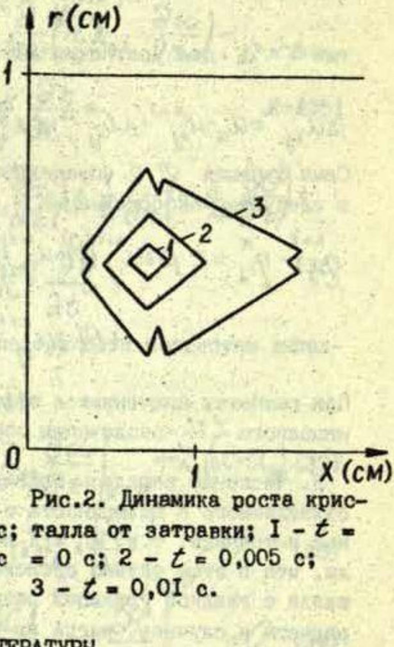


Рис.2. Динамика роста кристалла от затравки; I - t = = 0 с; 2 - t = 0,005 с; 3 - t = 0,0I с.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

I. Авдонин Н.А. Математическое описание процессов кристаллизации. - Рига: Зинатне, I980. - I75 с.
2. Владимиров В.С. Уравнения математической физики. - М.: Наука, I97I. - 5I2 с.
3. Борисов В.Т., Матвеев Ю.Е. Кристаллизация тонких слоев переохлажденного галлия// Кристаллография. - I969. - Т. I5. - Вып. 5. - С. 895-899.

4. Ладыженская О.А., Солонников В.А., Уральцева Н.Н. Линейные и квазилинейные уравнения параболического типа. - М.: Наука, 1967. - 736 с.
5. David S.Kersaw. The incomplete Cholesky-conjugate gradient method for the iterative solution of system of linear equations// J. of Comput. Phys. - 1978. - V. 26. - P. 43-65.

МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ
ПРИКЛАДНЫЕ ЗАДАЧИ МАТЕМАТИЧЕСКОЙ ФИЗИКИ, вып.I
Рига: Латвийский университет, 1990

УДК 519.6+536.42

Ю.В.АПАНОВИЧ, Е.Д.ЛЮМКИС
ИМИ ЛУ, Рига

ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ТЕПЛО-МАССООБМЕНА ПРИ ВЫРАЩИВАНИИ БИНАРНЫХ СИСТЕМ МЕТОДОМ ДВИЖУЩЕГОСЯ НАГРЕВАТЕЛЯ

I. ВВЕДЕНИЕ

Метод зонной плавки /I/ и его модификации - широко применяемый на практике метод выращивания объемных кристаллов, используемый для выращивания как однокомпонентных материалов, так и многокомпонентных систем. Одной из модификаций зонной плавки, применяемой для выращивания многокомпонентных материалов, и, в частности, $Cd_x Hg_{(1-x)} Te$ (КРТ) /2/, является метод движущегося нагревателя.

Поскольку процессы выращивания кристаллов проводятся при высоких температурах, часто под давлением, а материал бывает непрозрачный, экспериментальное изучение процесса весьма затруднительно. Использование математического моделирования позволяет изучить влияние отдельных эффектов, что невозможно в эксперименте, а также прогнозировать процесс в целом. Целью настоящей статьи является моделирование тепломассообмена при выращивании двухкомпонентного материала методом движущегося нагревателя.

Моделирование проводится для КРТ, для которого предполагается выполненной псевдобинарная $CdTe - HgTe$ фазовая диаграмма /3/. В работе изучается влияние диффузии, теплопереноса и тепловой и концентрационной конвекции на длину жидкой зоны, форму фронтов растворения и роста, радиальную неоднородность распределения состава.

Первоначально, начиная с работы /4/, численное изучение гидродинамических потоков проводилось для модели зон -

ной плавки с фиксированными плоскими фронтами. Изучалось влияние гравитационной и капиллярной тепловой конвекции и вынужденной конвекции, вызванной вращиванием кристалла, на структуру потоков в расплаве /5-8/. В рамках такой модели удалось, в частности, объяснить экспериментально наблюдаемую неоднородность распределения легирующей примеси при выращивании молибдена методом бестигельной зонной плавки /8/.

Дальнейшее усложнение математической модели связано с поиском неизвестной неплоской границы раздела фаз (задача Стефана) с учетом гидродинамических потоков в искомой области расплава. Как правило, здесь рассматривались одно - компонентные системы или системы, температура фазовых переходов которых слабо зависела от концентрации примеси. Среди работ такого рода отметим работы Брауна и соавторов /9, 10/, основанных на использовании метода конечных элементов и метода Ньютона решения системы нелинейных урав - нений.

Многокомпонентные системы характерны тем, что темпе - ратура фазового перехода зависит от состава раствора пе - ред фронтом, т.е. уравнение конвективной диффузии оказы - вается связанным с уравнением теплопереноса через условие на границе раздела фаз. Даже в одномерной постановке и без учета конвекции такая задача не является тривиальной /11-13/, особые трудности возникают при решении двумерных задач, которые в тех или иных приближениях рассматривались в работах /14, 15/.

Таким образом, математическое моделирование процесса выращивания бинарных систем связано с вычислительными трудностями - поиском неизвестных фронтов фазового пере - хода, которые, вообще говоря, не являются изотермическими; решением уравнений гидродинамики в областях сложной переменной формы. Специфическими трудностями, характерными для выращивания КРТ и ряда других полупроводниковых материалов, являются: разномасштабность процессов - характерное время теплопереноса в системе гораздо меньше харак - терного времени диффузии (отношение числа Шмидта Sc

к числу Прандтля Pr равно 10^3); длительный переходный процесс выхода решения на стационарный режим; сильная зависимость плотности расплава от состава.

Для решения такой задачи был разработан разностный метод на специальных согласованных с границей подвижных треугольных сетках /16, 17/. Алгоритм расстановки точек и триангуляции позволяет рассчитывать задачи с фронтами сложной конфигурации, при этом, в отличие, от /14, 15/, разностная схема в каждой точке сетки связана разностными отношениями только с ближайшими соседями этой точки. Скорости роста и растворения полагались пропорциональными пересыщению в расплаве /14, 15/. Такое выражение для скорости соответствует нормальному закону роста, близкие подходы использовались в работах /11, 18/. Так как плотность раствора КРТ сильно меняется при изменении концентрации, необходимо учитывать гравитационную концентрационную конвекцию в плавающей зоне. Вычислительные трудности, возникающие при учете концентрационной конвекции, оказалось возможным преодолеть, решая совместно уравнение гидродинамики и конвективной диффузии с использованием ньютоновских итераций.

Описание математической модели приведено в разделе 2. Дифференциальные уравнения сформулированы для произвольной двухкомпонентной системы, особенности процесса и материала характеризуются геометрией модели и значениями констант. Последние по возможности брались для КРТ из литературы. В частности, использовались экспериментальные результаты для зависимости плотности расплава от температуры и концентрации /19/.

Уравнения в модели записывались для нестационарной задачи. Разработанная методика позволяет рассчитывать переходный процесс, однако в данной работе такая цель не ставится и анализируются только квазистационарные решения. Метод численного решения кратко описан в разделе 3.

В разделе 4 приведены численные результаты моделирования в различных условиях: для неподвижного и движущегося нагревателя, в условиях невесомости и с учетом грави -

тационной конвекции. В разделе 4.5 приводятся некоторые результаты моделирования термокапиллярной конвекции в невесомости.

2. МАТЕМАТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ

Схема процесса ампульной зонной плавки изображена на рис. 1. Процесс проводится в прозрачной вертикально расположенной цилиндрической ампуле. Полагается, что боковая поверхность расплава Γ_1 - цилиндрическая и плотно контактирует с поверхностью ампулы. Возможно также, что такой контакт отсутствует; этот случай анализируется в разделе 4.5, при этом боковая поверхность по-прежнему считается цилиндрической. Расплав занимает область Ω_L, которая граничит с исходным переплавляемым материалом состава c_x (область Ω_F) и выросшим кристаллом (область Ω_C). Форма и положение фронтов растворения Γ_{LF} и кристаллизации Γ_{LC} заранее неизвестны и находятся в процессе решения. Считается, что расплав кристаллизуется в соответствии с равновесной диаграммой (рис. 2), заимствованной из работы /3/. В настоящей работе под c понимается мольная концентрация x в растворе $Cd_x Hg_{(1-x)} Te$, т.е. c и x в этом случае совпадают. В дальнейшем удобнее вместо уравнений линий ликвидуса $T=\theta_L(c)$ и солидуса $T=\theta_S(c)$ использовать однозначно определяемые обратные зависимости $c=\theta_L^{-1}(T)$, $c=\theta_S^{-1}(T)$.

Нагрев ампулы происходит в результате теплообмена излучением с нагревателем и экранами. Температура на нагревателе и экранах $\tilde{T}_h(z)$ задается. Она считается постоянной и равной $\tilde{T}_H$ на нагревателе, и линейной по z - на экранах. Расчеты проводятся для двух видов зависимости $\tilde{T}_h(z)$ (нагреватель A и нагреватель B), изображенных на рис. 3. Поверхности кристалла, расплава, нагревателя и экранов полагаются диффузно-серыми, степени черноты поверхностей взяты равными единице.

Нагреватель движется относительно ампулы вверх со скоростью $\tilde{v}_H$. Предполагается, что длина ампулы достаточно боль-

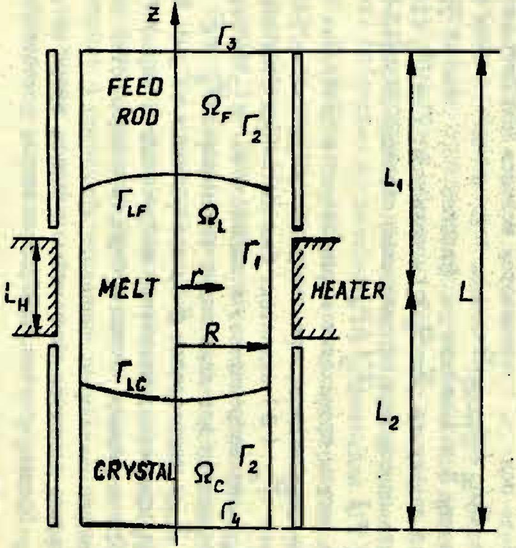


Рис. I. Схема МДН и геометрия системы

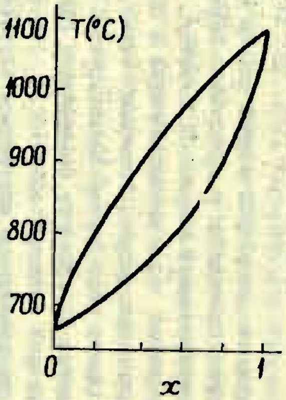


Рис. 2. Квазибинарная фазовая диаграмма $CdTe-HgTe$ /3/.

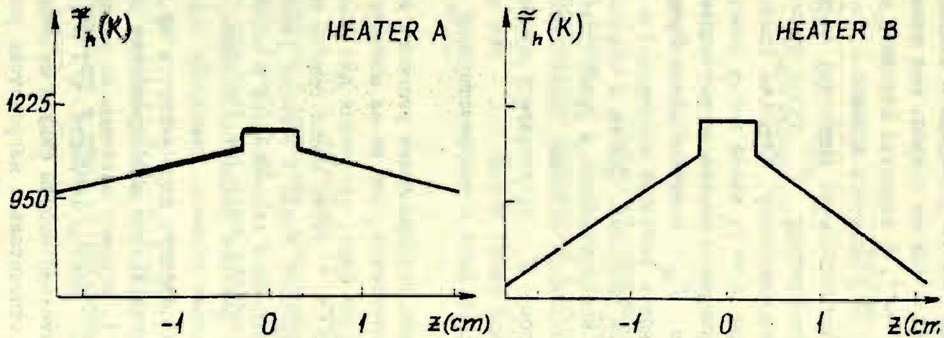


Рис. 3. Распределение температуры на нагревателе и на экранах

шая и можно пренебречь деталями теплообмена на торцах ампулы. Тогда при изучении теплопереноса в системе можно ограничиться рассмотрением части ампулы, поставив на границах Γ_3, Γ_4 приближенные краевые условия.

Будем записывать уравнения в безразмерных переменных. В тех случаях, когда размерные и безразмерные величины обозначены одной и той же буквой, над размерной величиной ставится знак "$\sim$". В качестве масштаба длины выбирается радиус ампулы $\tilde{R}$, масштаба времени – $\tilde{t}=\tilde{R}^2/\nu$, где ν – коэффициент кинематической вязкости, масштаба скорости – $\tilde{v}= \nu/R$. Температуру $\tilde{T}$ будем относить к величине $\tilde{T}_M= 1360^0$K (максимальному значению температуры на фазовой диаграмме при $x=1$); такой выбор масштабирования не имеет особого физического смысла (в частности, определенное пропорционально $\tilde{T}_M$ тепловое число Грасгофа не характеризует интенсивность тепловой конвекции) и обусловлено только соображениями удобства. Список и определение безразмерных параметров, использованных в уравнениях, приводится в таблице I, а численные значения физических констант – в таблице 2. Индексом S обозначаются параметры в твердой фазе, L – в жидкой фазе, индекс SL – отношение значений константы в твердой фазе к соответствующей константе в жидкой фазе.

Уравнения гидродинамики решаются в области расплава Ω_L. Предполагается, что из-за малости коэффициента диффузии в твердой фазе, уравнения для концентрации C компонента $CdTe$ также можно решать только в Ω_L, а уравнения переноса тепла – в обеих фазах, т.е. в Ω_C, Ω_L и Ω_F. Уравнения записываются в нестационарной форме, стационарное решение находится методом установления. Выбирается система отсчета, связанная с движущимся нагревателем, начало отсчета располагается на оси в середине нагревателя. Используется цилиндрическая система координат (r, φ, z), искомые величины не зависят от угловой координаты φ. Вектор скорости $\vec{v}(u, 0, v)$ движения среды относительно ампулы связан со скоростью $\vec{v}^*$ движения среды относительно нагревателя равенством $\vec{v}^* =$

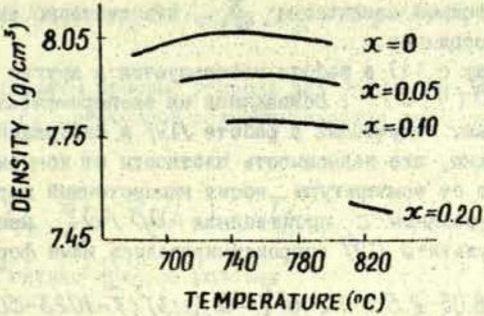


Рис. 4. Зависимость плотности от температуры для расплавов КРТ /19/.

$\vec{v} - \vec{v}_H$, $\vec{v}_H = (0, 0, v_H)$. Уравнения гидродинамики записываются в переменных вихрь $\vec{\omega} = (0, \omega, 0)$ и функция тока $\vec{\psi} = (0, \psi, 0)$ в приближении Буссинеска в области Ω_L :

$$\partial\vec{\omega}/\partial t + \nabla\times[\vec{\omega}\times\vec{v}^*] = -\nabla\times\nabla\times\vec{\omega} + \vec{f}, \qquad (I)$$

$$\nabla\times\nabla\times\vec{\psi} = \vec{\omega}, \qquad (2)$$

$$\vec{v} = \nabla\times\vec{\psi}\ . \qquad (3)$$

Член $\vec{f} = (0, f, 0)$ в уравнении (I) отвечает за гравитационную конвекцию в расплаве, возникающую из-за зависимости плотности расплава от T и c . Традиционно $\rho(T,c)$ считается линейной при малых отклонениях T и c от фиксированных T_o, c_o :

$$\tilde{\rho}(\tilde{T},c) = \tilde{\rho}(\tilde{T}_o,c)(1 - \tilde{\alpha}(c-c_o) - \tilde{\beta}(\tilde{T}-\tilde{T}_o)). \qquad (4)$$

Такая зависимость приводит к обычному выражению для f :

$$f = e(-Gr_T\,\partial T/\partial r - Gr_c\,\partial c/\partial r), \qquad (5)$$

где $e=1$, если вектор $\vec{g}$ ускорения свободного падения направлен вертикально вниз, и $e=-1$ – при противоположной ориентации $\vec{g}$ относительно выбранной системы координат.

Наряду с (4) в работе используется и другая зависимость $\tilde{\rho}(\tilde{T},c)$, основанная на экспериментальных результатах, полученных в работе /19/ и изображенных на рис.4. Видно, что зависимость плотности от концентрации и особенно от температуры носит немонотонный характер. При фиксированном c производная $\partial\tilde{\rho}/\partial\tilde{T}$ меняет знак. Результаты /19/ аппроксимировались нами формулой:

$$\tilde{\rho}(\tilde{T},x)=8.05-2.5x-1.2\cdot 10^{-5}(1-x/0.13)^2(\tilde{T}-1023-50x)^2, \quad (6)$$

где $\tilde{\rho}$ измеряется в г/см^3 , а $\tilde{T}$ – в градусах Кельвина. При расчетах с использованием нелинейной зависимости (6) выражение для f записывается в виде

$$f=G\frac{\partial}{\partial r}(\tilde{\rho}(\tilde{T},c)/\tilde{\rho}(\tilde{T}_0,c_0)), \quad (7)$$

$$c_0=0,\ \tilde{T}_0=1023\,°K,\ \tilde{\rho}(\tilde{T}_0,c_0)=8.05\ г/см^3.$$

Уравнение для c формулируется только в области расплава Ω_L и имеет вид:

$$\partial c/\partial t+\nabla(\vec{v}^*c)=Sc^{-1}\nabla(\nabla c). \quad (8)$$

Уравнение переноса тепла в области расплава имеет вид:

$$\partial T/\partial t+\nabla(\vec{v}^*T)=Pr^{-1}\nabla(\nabla T). \quad (9)$$

Поскольку скорость в областях, занятых исходным переплавляемым материалом и кристаллом, в системе отсчета, связанной с нагревателем, равна $(-v_H)$, температурное поле в Ω_F и Ω_C определяется уравнением:

$$\partial T/\partial t - v_H \partial T/\partial z = (a_{SL}/Pr)\nabla(\nabla T). \qquad (10)$$

Сформулируем краевые условия для уравнений. На границах Γ_3, Γ_4 расчетной области ставятся либо условия I-го рода

$$T\big|_{z=L_1} = T_h(L_1), \quad T\big|_{z=-L_2} = T_h(-L_2) \qquad (11а)$$

либо "мягкие" краевые условия

$$\partial T/\partial z\big|_{z=L_1} = \partial T_h/\partial z\big|_{z=L_1}, \quad \partial T/\partial z\big|_{z=-L_2} = \partial T_h/\partial z\big|_{z=-L_2} \qquad (11в)$$

Расчеты показывают, что ввиду большой величины $L \sim 7R$ замена условий (11а) на (11в) очень слабо влияет на температурное поле в зоне и вблизи фронтов.

На оси задаются условия симметрии

$$\partial T/\partial r = \partial c/\partial r = \psi = \omega = 0. \qquad (12)$$

Условие для ψ на фронте растворения Γ_{LF} и фронте кристаллизации Γ_{LC} имеет вид:

$$\psi = 0, \quad \partial\psi/\partial n = 0, \qquad (13)$$

где $\partial/\partial n$ - производная по внутренней для области Ω_L нормали к границе. Температура меняется непрерывно на межфазных границах, а условия баланса потоков тепла записываются с учетом выделения тепла фазового перехода:

$$\lambda_{SL}(\partial T/\partial n)_s - (\partial T/\partial n)_\ell = St\, v_m \quad \text{на } \Gamma_{LF}, \qquad (14)$$

$$\lambda_{SL}(\partial T/\partial n)_s - (\partial T/\partial n)_\ell = St\, v_\kappa \quad \text{на } \Gamma_{LC}. \qquad (15)$$

Здесь v_m и v_κ - нормальные по отношению к фронтам скорости растворения и роста, индексы при нормальных производных обозначают, что производная вычисляется в твердой фазе (s) или в расплаве (ℓ).

На фронте растворения Γ_{LF} условия баланса массы компонента имеет вид:

$$-Sc^{-1}(\partial c/\partial n)_\ell - v_m c = -v_m c_x \,. \quad (16)$$

Аналогичное условие баланса на Γ_{LC} имеет вид

$$-Sc^{-1}(\partial c/\partial n)_c - v_\kappa c = -v_\kappa c_{sol} \quad (17)$$

Концентрация $c_{sol} = \theta_s^{-1}(T)$ - концентрация $CdTe$ в закристаллизовавшемся материале, которая находится из линии солидуса равновесной фазовой диаграммы по значению температуры T в каждой точке фронта.

Для замыкания задачи необходимо определить скорости v_κ и v_m и тем самым связать концентрацию компонента на межфазных границах с температурой на фронтах. В рассматриваемой здесь постановке вводится предположение о нормальном законе роста /20/ на Γ_{LC} .

$$v_\kappa = \mu(c - c_{liq}), \quad c_{liq} = \theta_L^{-1}(T), \quad (18)$$

где μ - кинетический коэффициент. Обычно рост происходит в равновесных условиях, поэтому в ряде работ /13/, /15/ вместо (18) используется условие $c = c_{liq}$ На наш взгляд, условие (18) предпочтительнее, так как позволяет в явном виде определить скорость кристаллизации. По данным /20/ $\tilde{\mu} \approx 10^5$ см/с моль ; $\mu \sim 10^7$. Реально в расчетах использовалось $\mu \sim 5-15$, при этом из-за малой скорости роста c отличалось от

c_{liq} не более, чем на 2%. Такого рода выражение для скорости можно рассматривать и как вычислительный прием: уменьшение μ по сравнению с его физическим значением понижает точность выполнения равенства $c = c_{liq}$, однако позволяет существенно увеличить шаг по времени τ.

На фронте растворения Γ_{LF} задается такое же условие, что и на фронте кристаллизации

$$v_m = \mu (c - c_{liq}), \quad c_{liq} = \theta_L^{-1}(T). \qquad (19)$$

Таким образом, поскольку для двухкомпонентной системы температура фазового перехода не постоянна и зависит от концентрации, положение и форма межфазной границы в нашей модели определяется не только условиями (I4), (I5), как для однокомпонентной системы, но и условиями (I6)-(I9).

В квазистационарном случае в системе отсчета, связанной с нагревателем, фронты неподвижны, т.е. в неподвижной системе координат фронты передвигаются параллельно самим себе в аксиальном направлении, и скорость их смещения должна совпадать с v_H.

Краевые условия на боковой поверхности Γ_1 имеют вид

$$\psi = 0, \quad \partial(r\psi)/\partial r = 0, \quad \partial c/\partial r = 0, \qquad (20)$$

$$-\partial T/\partial r = Rd\,(T^4 - T_n^4(z)); \qquad (21)$$

условие для температуры на твердой части Γ боковой поверхности имеет вид:

$$-\lambda_{SL}\,\partial T/\partial r = Rd\,(T^4 - T_h^4(z)) \qquad (22)$$

Если нет контакта боковой поверхности расплава с ампулой и учитывается конвекция Марангони, то вместо условия на производную от ψ (условия прилипания) ставится условие

$$\omega = -Mn_T/Pr \cdot \partial T/\partial z. \qquad (23)$$

3. ЧИСЛЕННЫЙ МЕТОД

Приведем здесь основные особенности численного метода решения сформулированной выше дифференциальной задачи, подробно описанного в /I7/. Для аппроксимации уравнений (I)-(3), (8) в области Ω_L вводится согласованная с текущим положением фронтов специальная треугольная сетка - триангуляция Делоне. Методика построения сетки связана с формированием около расставленных в Ω_L точек так называемых ячеек Дирихле /2I/, которые являются контрольным объемом при построении разностной схемы. Консервативные разностные схемы строятся с помощью метода баланса /I6, I7/.

При переходе на новый временной слой фронты Γ_{LC} и Γ_{LF} сдвигаются с учетом текущей величины v_m, v_K, определенных равенствами (I8), (I9). На вновь построенную сетку интерполируются значения функций ψ, C с предыдущего временного слоя, используемая интерполяция не нарушает баланс массы в области. В разностные уравнения с конвективными членами вводится математическая вязкость, получаемые схемы являются аналогами схем с направленными разностями. В расчетах в Ω_L расставлялось 500-I000 точек, средний шаг по пространству $h \sim 1/15$.

Поскольку число Прандтля в задаче мало, допустимо использование более грубой сетки в Ω_L, Ω_F, Ω_C при решении уравнения теплопроводности, поэтому здесь уравнения (9), (I0) аппроксимируются на прямоугольной равномерной сетке с шагами $h_r = 1/15$, $h_z = 7/76$. Выделение тепла фазового перехода учитывается с использованием энтальпийного метода /22/.

На каждом шаге по времени неявные по соответствующей переменной уравнения решаются поочередно, методика позволяет вести счет с относительно крупным шагом по времени $\tau \leq$ 0.5-4. Это ограничение вызвано тем, чтобы за один шаг по времени фронт сдвигался на расстояние, меньшее шага h по пространству. Дополнительные очень жесткие ограничения на τ возникают при учете концентрационной конвекции из-за больших значений $Sc = 88$ и $Gr_c \sim 10^7$.

Чтобы избавиться от этого ограничения, уравнения гидродинамики сводятся к уравнению четвертого порядка относительно ψ и интегрируются совместно с уравнением для C с использованием ньютоновских итераций по нелинейности.

Контроль выхода решения на квазистационарный режим проводится по установлению полей скорости, температуры и концентрации, по совпадению скоростей перемещения фронтов со скоростью движения нагревателя, и по равенству входящего с фронта растворения и выходящего с фронта роста потоков компонента. Наиболее быстро устанавливались значения температуры и концентрации, несколько медленнее скорости роста и растворения и наиболее медленно устанавливались суммарные по фронтам потоки в жидкую зону и из нее. Вычисления заканчивались, когда значение потока $CdTe$, входящего через фронт растворения, и значение потока $CdTe$ выходящего из жидкой фазы через фронт кристаллизации отличались менее, чем на ±10%. Значения скоростей движения фронтов отличались при этом от скорости движения нагревателя не более, чем на 3%. Такое решение в данной статье называется квазистационарным. Опыт вычислений показал, что дальнейшее уточнение решения уже на качественное решение практически не влияет.

4. ЧИСЛЕННЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ

Расчеты проводятся для двух описанных в разделе 2 видов зависимости $T_h(z)$ (нагреватели типа А и типа В) с последовательным усложнением модели - включением в модель тепловой конвекции, движения нагревателя, концентрационной конвекции. В качестве начального приближения при усложнении модели берутся поля ψ, C, T, полученные на предыдущем этапе расчетов. Все результаты, кроме описанных в разделе 4.5, получены в предположении плотного контакта расплава с ампулой.

На всех рисунках данного раздела полностью изображается плавающая зона, частично-прилегающие к ней затравка и исходный материал. Штриховкой показан кристалл (часть области Ω_c), находящийся всегда в нижней части рисунка, и исходный материал (часть области Ω_F) - в верхней части рисунка. Левая граница всех рисунков является осью симметрии, справа - поверхность, граничащая с ампулой.

Заштрихованная справа полоска обозначает нагреватель с постоянной температурой T_H, движущийся вверх со скоростью $v_H \geq 0$. Вектор $\vec{g}$ ускорения силы тяжести может быть направлен вверх или вниз.

Изотермы проводятся в жидкой и твердой фазах, линии тока и линии $c = const$ - только в жидкой фазе. Изотермы и линии равной концентрации на всех рисунках проведены эквидистантно.

Радиальную неоднородность концентрации компонента $CdTe$ в кристалле в стационарном режиме характеризуется величиной $\Delta_c = (c_{max} - c_{min})/c_x$, где c_{max} и c_{min} - максимальные и минимальные по радиусу значения концентрации $CdTe$ в кристалле, c_x - исходная концентрация $CdTe$ переплавляемого материала. Расчеты выполнены либо для покоящегося, либо для движущегося с $v_H = 0.5$ мм/час нагревателя.

4.1. Покоящийся нагреватель

Процесс начального проплава в работе не рассматривается. Предполагается, что в начальный момент область расплава существует и представляет собой тонкую цилиндрическую шайбу из $HgTe$ толщиной $2L_0$ (фронты Γ_{LF} и Γ_{LC} - плоские), находящуюся напротив середины нагревателя; температура в твердой и жидкой части полагается независящей от r и совпадающей с температурой нагревателя. Именно, при $t = 0$:

$$T(r,z) = T_h(z) \quad 0 \leq r \leq 1 \quad -L_2 \leq z \leq L_1$$

$$c(r,z) = c_x \quad 0 \leq r \leq 1 \quad |z| > L_0 \tag{24}$$

$$c(r,z) = 0 \quad 0 \leq r \leq 1 \quad |z| < L_0 .$$

Рассчитывается последующий процесс проплавления и тепломассопереноса в случае покоящегося нагревателя ($v_H = 0$)

и отсутствия конвективного течения ($f = 0$). На нестационарной стадии происходит растворение исходного состава и затравки и в итоге формируется плавающая зона, форма зоны и изотермы изображены на рис. 5. Поскольку при $v_H = 0$ в стационарном состоянии на всех границах Ω_L выполняется, как следует из (I6), (I7), условие $\partial c / \partial n = 0$, концентрация в зоне постоянна, и, следовательно, межфазные границы изотермические. Расчет при $L_o = 0.05$ привел к выпуклой в твердую фазу форме зоны с температурой фронтов $\tilde{T} = 1065^oK$ и концентрацией в жидкой зоне $c(r, z) = \bar{C} = 0.207$.

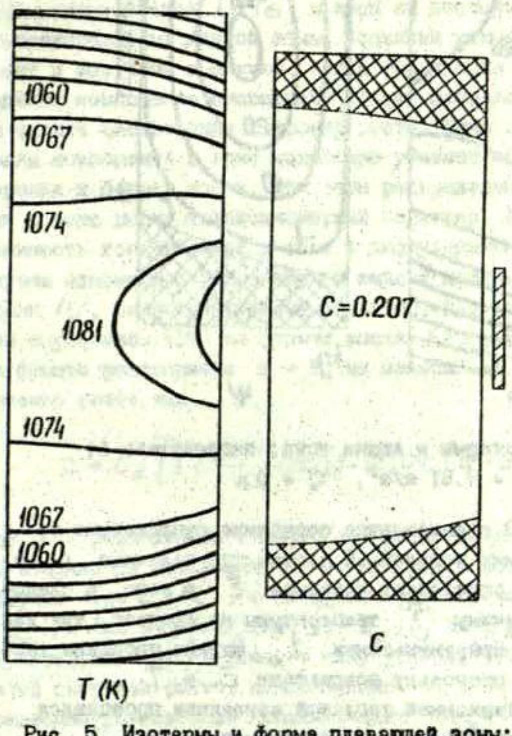


Рис. 5. Изотермы и форма плавающей зоны; нагреватель А; $g = 0$, $v_H = 0$

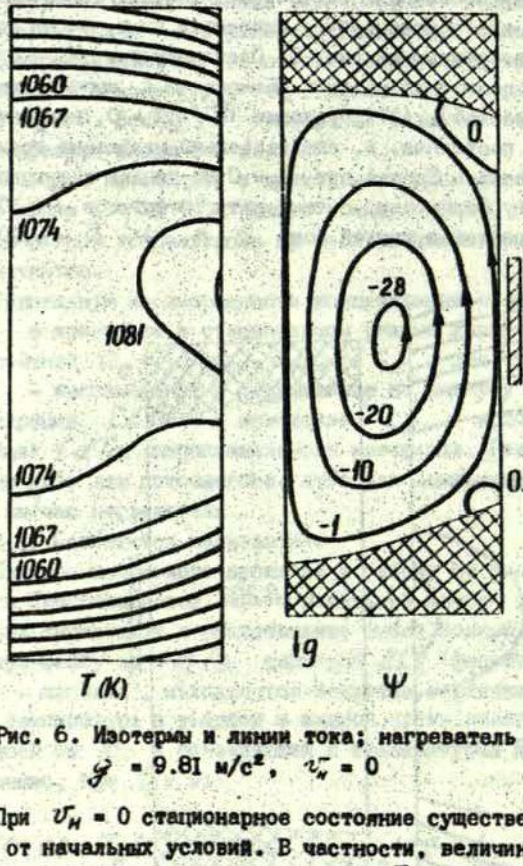


Рис. 6. Изотермы и линии тока; нагреватель А;
g = 9.8I м/с², $v_н$ = 0

При $v_н$ = 0 стационарное состояние существенно зависит от начальных условий. В частности, величина L_0 в (24) фактически определяет конечное $\bar{C}$ в зоне, а следовательно, и величину $\bar{\bar{T}}$ температуры на фронтах, так как $\bar{\bar{T}} = \theta_L(\bar{C})$. При уменьшении L_0 ширина проплава также уменьшается, поскольку возрастают $\bar{C}$ и $\bar{\bar{T}}$.

Учет гравитационной тепловой конвекции проводился от начального приближения, изображенного на рис. 5. Подъемно-опускное течение, возникающее при $Gr_T = 5{\cdot}5{\cdot}10^6$

(g = 9.8 м/сек^2), слабо влияет на поле температуры и приводит лишь к небольшому изменению формы межфазных границ, что показано на рис. 6. Значение $\bar{C}$ при этом практически не меняется. Максимальная скорость течения в расплаве составляет 0.3 см/сек.

4.2. Движущийся нагреватель

Движение нагревателя приводит к возникновению потоков массы через межфазные поверхности. Через фронт растворения в жидкую зону поступает компонент, а через фронт роста происходит отбор в соответствии с равновесной фазовой диаграммой. В отличие от случая покоящегося нагревателя, концентрация $CdTe$ в зоне не постоянна. На рис.7 изображена форма жидкой зоны, изолинии концентрации $CdTe$ в ней и изотермы в случае, когда гравитация отсутствует и перенос компонента происходит только посредством диффузии от фронта растворения к фронту роста. Видно, что концентрация компонента в зоне монотонно убывает от фронта растворения к фронту роста, при этом распределение концентрации в зоне носит квазиодномерный характер. Аксиальная зависимость концентрации в зоне в диффузионном режиме в случае одномерной стационарной задачи носит, как показал Пфанн /I/, экспоненциальный характер, т.е. если уравнение (8) с условием (I6) на фронте роста $z = z_0$ и условием (I7) на фронте растворения $z = z_1$ не зависит от r, то его решение имеет вид

$$c = c_x\left[1 - \frac{K-1}{K}\, exp\left(-v_H Sc\,(z - z_0)\right)\right], \qquad (25)$$

где K - равновесный коэффициент распределения. Как видно из фазовой диаграммы, $K \sim 4$. На фронте роста из (25) получим $c_0 = c_x/K$, а на фронте растворения - $c_1 = c_x\left[1 - \frac{K-1}{K}\, exp\left(-v_H Sc\,(z_1 - z_0)\right)\right] > c_0$. Для двухкомпонентной системы, в силу условий (I8), (I9) и малой скорости роста, концентрации c_0, c_1 близки к локальным равновесным концентрациям $c_{liq}(T)$ на фронтах. Поскольку $c_0 \neq c_1$, различны и значения температуры фазового перехода на фронтах роста и растворения, что приводит к асимметрии положения плавающей зоны относительно нагревателя. Другими словами, середина плавающей зоны смещена относительно нагревателя в сторону против его движения. Значение температуры фазового перехода на фронте роста для одномерной задачи легко определяется из фазовой диаграммы, поскольку концентрация на фронте c_x/K известна априори. На фронте растворения значение концентрации c_1 должно с точностью до 0 (μ^{-1}) совпасть с равновесным значением, определяемым фазовой диаграммой и искомым полем температуры в зоне.

Анализ одномерной задачи применим и для объяснения качественных особенностей решения двумерной задачи. Поскольку $Sc\, v_н$ мало, концентрация, в соответствии с (25) меняется почти линейно по длине зоны (рис. 7). Ярко выражена асимметрия расположения зоны относительно нагревателя. Фронт растворения почти совпадает с линией равной концентрации, поэтому его форма близка к соответствующей изотерме. Фронт роста вогнутый в кристалл приблизительно на 0.8 радиуса, температура кристаллизации меняется на 27 К при переходе от оси к боковой поверхности из-за изменения концентрации $CdTe$ на фронте.

Конвективное течение, по тем или иным причинам возникающее в плавающей зоне, вносит существенный вклад в перенос массы от фронта растворения к фронту роста. Распределение концентрации внутри жидкой зоны, обусловленное и конвективным перемешиванием, и диффузией, может носить весьма сложный характер. В жидкой зоне образуются области полного перемешивания, внутренние пограничные слои, пограничные слои около фронтов фазового перехода. Вычислительный опыт расчетов по модели, описанной в разделе 2, показывает, что конвекция существенно влияет на форму фронтов фазового перехода, положение зоны относительно нагревателя и распределение $CdTe$ в твердой фазе.

В качестве примера рассмотрим относительно слабое конвективное течение, возникающее из-за тепловой гравитационной конвекции при ускорении $0.1\,g$ в случае дви-

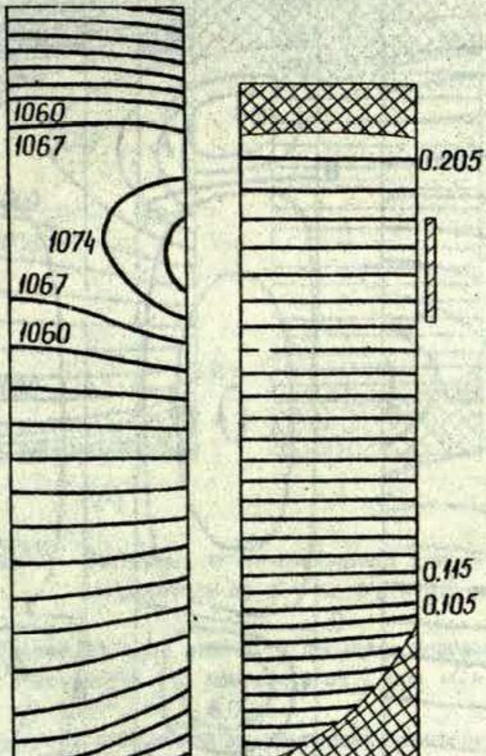


Рис. 7. Изотермы, изолинии концентрации;
нагреватель A; $g = 0$; $\tilde{v}_{H} = 0.5$ мм/час

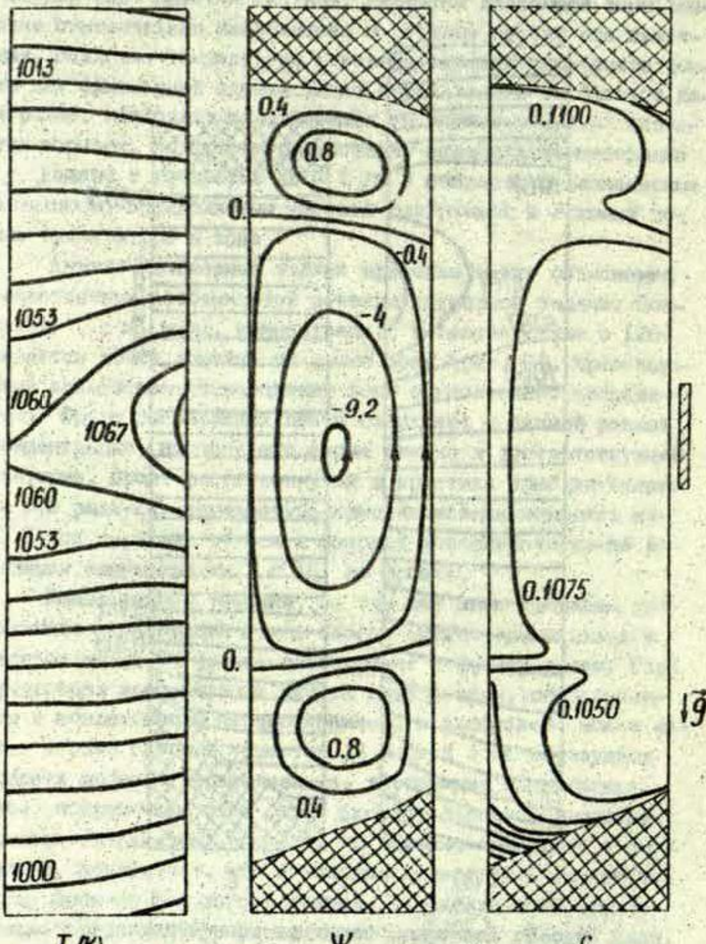


Рис. 8. Изотермы, линии тока, изолинии концентрации; нагреватель А; $g = 0.98$ м/с^2, $\vec{v}_н = 0.5$ мм/ч; антипараллельная ориентация $\vec{g}$ и $\vec{v}_н$.

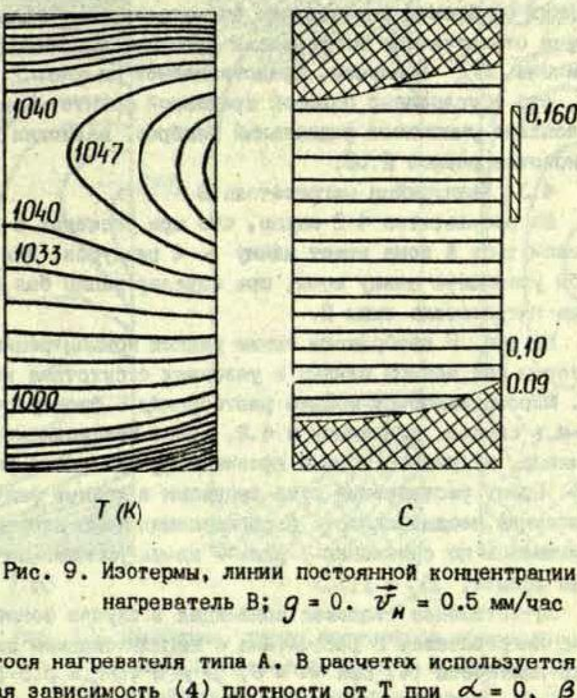


Рис. 9. Изотермы, линии постоянной концентрации; нагреватель B; $g = 0$. $\vec{v}_н = 0.5$ мм/час

жущегося нагревателя типа А. В расчетах используется линейная зависимость (4) плотности от Т при $\alpha = 0$, $\beta \neq 0$ ($Gr_T = 5.5 \cdot 10^5$, $Gr_C = 0$).

Изолинии постоянной концентрации, изотермы и линии тока показаны на рис. 8. В зоне образовались три вихря, интенсивный вихрь - напротив нагревателя, где максимальная скорость течения 0.1 см/сек, и вихри на порядок меньшей интенсивности - вблизи фронтов. Такое трехвихревое течение возникает потому, что нагреватель типа А формирует относительно длинную плавающую зону, в которой радиальный градиент температуры положительный в середине зоны и отрицательный около фронтов. В результате в середине зоны оказывается хорошо перемешанная область, где градиент концентрации мал, а около фронтов – области, где диффузионный массоперенос сравним по интенсивности с конвективным. Из рисунка видно, что, по сравнению с рис.7, общая длина зоны заметно возросла за счет увеличения расстояния от фронта растворения до нагревателя, зона расположена относительно нагревателя практически симметрично. Величина Δ_C в случае, представленном на рис. 7, равна 40%, что обусловлено большой кривизной фронта. Конвекция в расплаве уменьшает радиальный разброс, величина Δ_C становится равной 2.5%.

4.3. Движущийся нагреватель В

Из результатов 4.2 видно, что при расчетах с нагревателем типа А зона имеет длину ~ 4 радиусов. Для того, чтобы уменьшить длину зоны, при моделировании был использован нагреватель типа В.

На рис. 9 изображены линии равной концентрации и изотермы для зонной плавки в условиях отсутствия конвекции. Массоперенос от фронта растворения к фронту роста, как и в случае, описанном в 4.2, носит квазиодномерный характер, но размер зоны и кривизна фронта роста уменьшились. Фронт растворения стал выпуклым в жидкую фазу. Радиальная неоднородность распределения концентрации уменьшилась по сравнению с рис. 7 из-за уменьшения кривизны фронта, $\Delta_C = 11\%$.

Естественная тепловая конвекция в случае зонной плавки с нагревателем В рассчитана с использованием зависимости плотности (4) при $\alpha = 0$, $\beta \neq 0$ ($Gr_T = 5.5 \cdot 10^6$, $Gr_C = 0$), что соответствует земным условиям. На рис. 10 показаны изолинии концентрации, линии тока и изотермы в случае, когда вектора $\vec{g}$ и $\vec{v}_н$ антипараллельны. И при наличии конвективного течения зона остается относительно короткой, в ней формируется интенсивное подъемно-опускное одновихревое течение. Основной объем расплава полностью перемешан, а около фронтов фазового перехода существуют узкие концентрационные пограничные слои, толщина которых менее 0.07 см. Максимальная скорость конвективного течения 0.55 см/сек. По сравнению со случаем, когда кон-

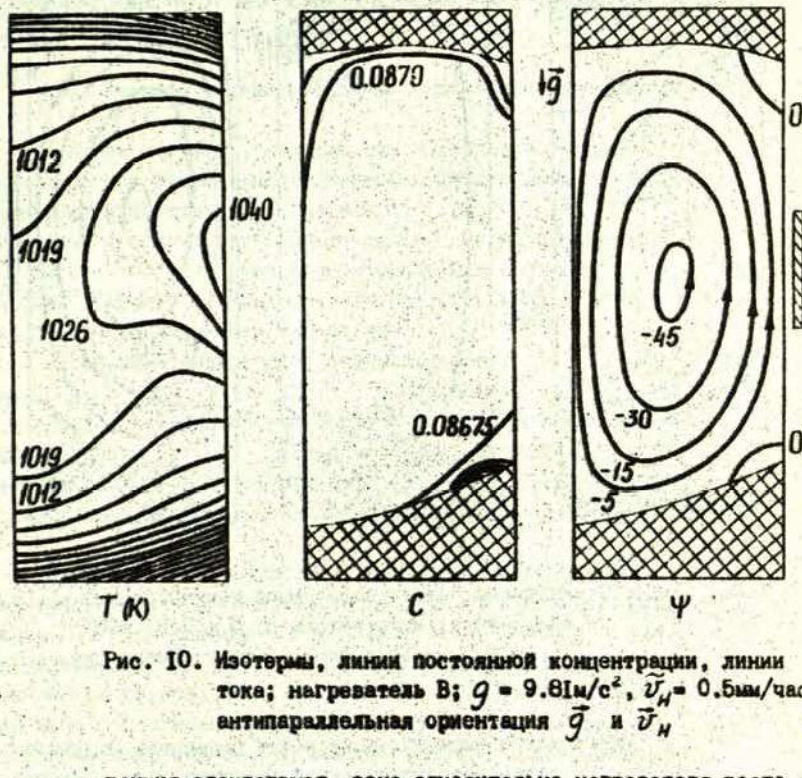


Рис. I0. Изотермы, линии постоянной концентрации, линии тока; нагреватель В; g = 9.8Iм/с^2, $\tilde{v}_н$= 0.5мм/час; антипараллельная ориентация $\vec{g}$ и $\vec{v}_н$

векция отсутствует, зона относительно нагревателя располагается симметрично, длина зоны увеличилась приблизительно в I.5 раза.

Если вектора $\vec{g}$ и $\vec{v}_н$ параллельны, направление течения в вихре изменяется на противоположное, что в итоге приводит к образованию зоны, изображенной на рис. II. Характерные скорость течения и толщина концентрационного слоя такие же, как и в случае на рис. I0. Фронт роста стал более плоским, а фронт растворения - выпуклым в расплав.

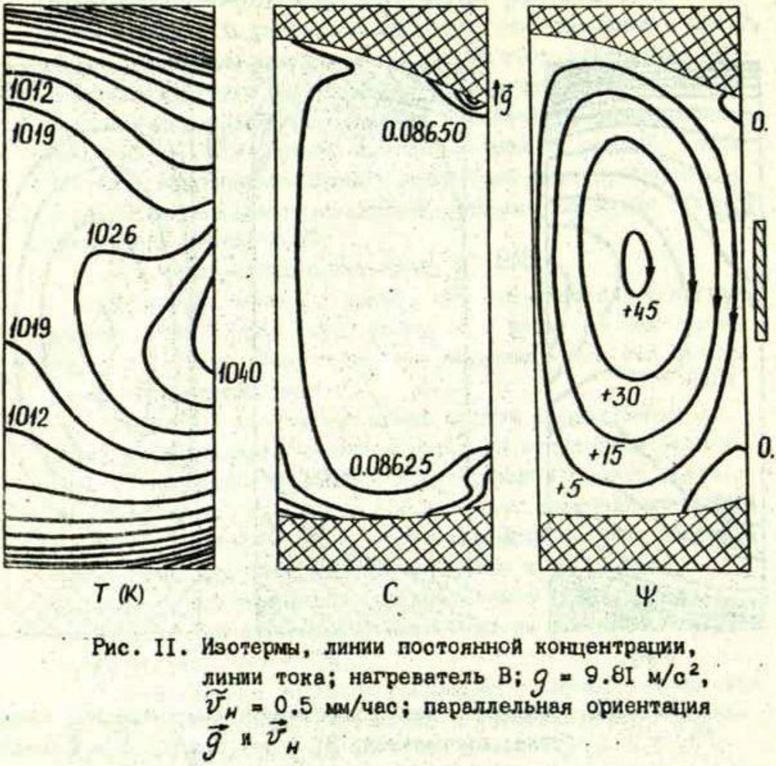


Рис. II. Изотермы, линии постоянной концентрации, линии тока; нагреватель B; g = 9.8I м/с^2, $\tilde{v}_н$ = 0.5 мм/час; параллельная ориентация $\vec{g}$ и $\vec{v}_н$

Интенсивное перемешивание может позволить получить кристалл с очень малой радиальной неоднородностью распределения компонента. Для того, чтобы улучшить однородность распределения компонента в кристаллах КРТ, выращиваемых по методу Бриджмена, в работе /23/предпринимались специальные усилия для контролируемого увеличения перемешивания в расплаве. В наших расчетах величина Δ_C для вариантов, изображенных на рис. IO, II, составляет ~1%.

Однородность распределния компонента ухудшается, если вблизи фронта роста имеются два вихря противоположной циркуляции (ср./8/). Для варианта, изображенного на рис.II, это имеет место при $r \gtrsim 0.75$.

4.4. Расчеты с использованием нелинейной зависимости $\rho(c,T)$

Следует отметить, что расчеты в разделах 4.2-4.3 выполнены без учета гравитационной концентрационной конвекции в расплаве. Для растворов $Cd_x Hg_{(1-x)} Te$ известно, что плотность сильно зависит от концентрации $CdTe$, поэтому учет концентрационной конвекции необходим. Расчеты показывают, что при этом качественно меняется массоперенос в жидкой зоне.

Экспериментальные результаты измерений $\tilde{\rho}(\tilde{T},x)$ для $Cd_x Hg_{(1-x)} Te$, полученные в /19/ (см.рис.4), показывают, что наряду с сильной зависимостью плотности от c имеет место немонотонная зависимость плотности от температуры. В данном разделе использовалась аппроксимация (6) этой нелинейной зависимости.

Характерной особенностью нелинейной зависимости является то, что до некоторого значения температуры расплава T^* плотность ρ при $c = const$ увеличивается, а при $T > T^*$ - уменьшается, как у обычных расплавов. Если концентрация $CdTe$ в плавающей зоне постоянна, что, например, имеет место при неподвижном нагревателе, то зависимость (6) может привести к изменению вихревой структуры естественной тепловой конвекции. Модельные расчеты показывают, что вместо одновихревого течения, подобного изображенному на рис.6, может возникнуть двухвихревая структура, когда расплав опускается вдоль стенки ампулы и около оси зоны.

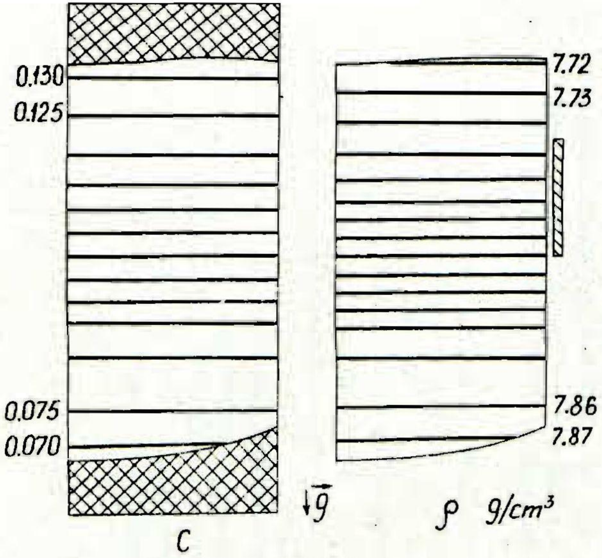


Рис.I2. Линии постоянной концентрации и постоянной плотности; нагреватель B;
g =9,8I м/с^2 ; $\tilde{v}_н$ =0.5 мм/час
$\vec{g}$ и $\vec{v}_н$ антипараллельны.

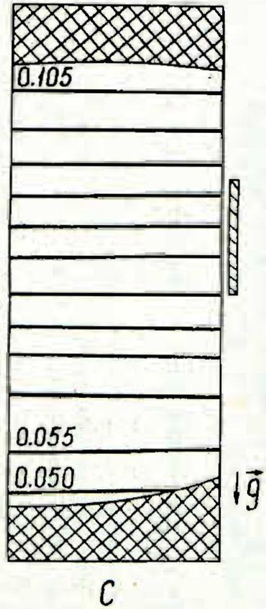


Рис.I3. Линии постоянной концентрации; нагреватель B;
g =9,8I м/с^2 ; $\tilde{v}_н$ =0.5 мм/час
$\vec{g}$ и $\vec{v}_н$ антипараллельны; x =0.2 .

Концентрационная конвекция начинает существенно сказываться при движении нагревателя, когда возникает градиент концентрации в плавающей зоне. Рассмотрим далее результаты моделирования процесса зонной плавки с использованием зависимости (6) в случае, когда вектора $\vec{g}$ и $\vec{v}_н$ антипараллельны. Изолинии концентрации и линии равной плотности раствора для этого варианта приводятся на рис.12. Так же, как и в случае, описанном в разделе 4.2., концентрация $CdTe$ у фронта роста меньше, чем у фронта растворения, поэтому, как видно из (6), если пренебречь зависимостью ρ от T, плотность раствора около фронта роста больше, чем у фронта растворения. При антипараллельной ориентации $\vec{g}$ и $\vec{v}_н$ плавающая зона оказывается устойчиво стратифицированной, т.е. более тяжелые слои располагаются у фронта роста, а легкие слои, обогащенные $CdTe$, находятся вверху - у фронта растворения. На рисунке хорошо видно слоистое распределение плотности. Похожая ситуация для метода Бриджмена-Стокбаргера обсуждалась в работе /24/.

При небольших радиальных градиентах температуры в расплаве, создаваемых в зоне нагревателем В, конвективное течение в жидкой зоне не развивается (максимальная скорость менее 0.001 см/сек) и зонная плавка происходит в отсутствии перемешивания практически в диффузионном квазиодномерном режиме, подобном изображенному на рис. 7 и 9, Δ_c в этом расчете составляет 6%. Расчеты показывают, что для веществ с более слабой зависимостью ρ от C, чем (6), возможен процесс зонной плавки такой, что стратификация расплава имеет место не во всем объеме зоны. При этом конвективное течение локализовано в области около нагревателя и не проникает в области с меньшим радиальным градиентом около фронтов растворения и роста. Тем самым может быть ускорен перенос вещества через плавающую зону с образованием около фронта роста области с чисто диффузионным переносом.

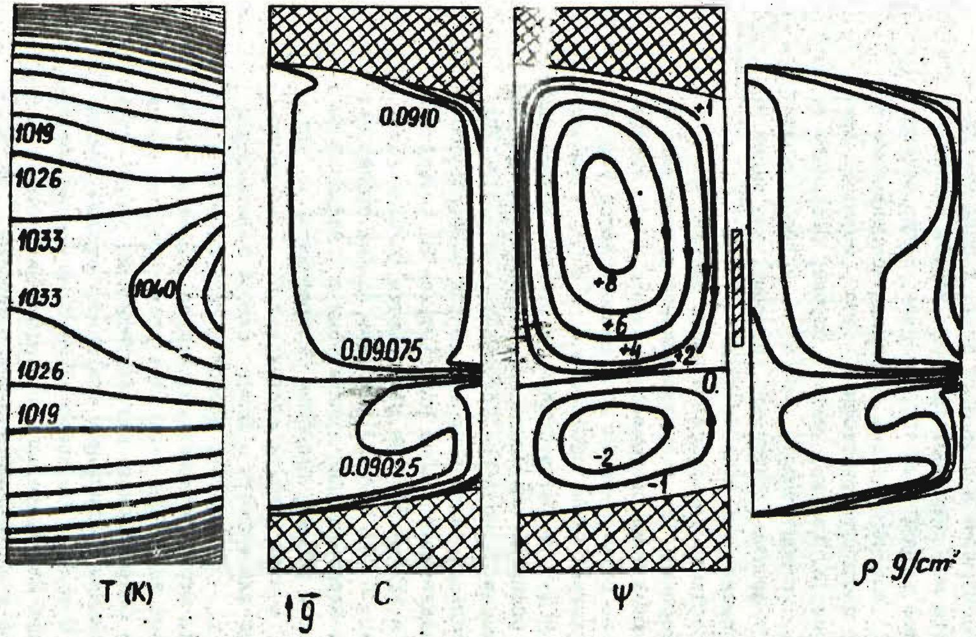


Рис.14. Изотермы, линии постоянной концентрации, линии тока и изолинии плотности; нагреватель B; g =9,8I м/с^2 ; $\tilde{v}_H$ =0.5 мм/час, $\vec{g}$ и $\vec{v}_H$ параллельны.

Все вышеописанные результаты получены для зонной плавки $Cd_x Hg_{(1-x)} Te$ с исходной концентрацией x =0.3 . Результаты расчетов процесса зонной плавки для x =0.2 представлены на рис.13 и качественно не отличаются от изображенных на рис.12. Заметно только у увеличение длины зоны, Δ_C =7,5%.

Нетрудно видеть, что в случае параллельной ориентации векторов $\vec{g}$ и $\vec{v}_H$ в расплавленной зоне будет неустойчивый градиент концентрации, что приведет к развитию конвекции. Для упрощенной модели зоны с плоскими заранее известными фронтами похожая ситуация рассматривалась в работе /25/. Возьмем в качестве начального приближения решение, изображенное на рис.12, и изменим направление $\vec{g}$ на противоположное. Полученное в результате квазистационарное решение приведено на рис.14. Видно, что более тяжелые слои, обогащенные $HgTe$ у фронта роста, стремятся по направлению вектора $\vec{g}$ (опуститься "вниз") к фронту растворения. Они двигаются вдоль фронта роста к стенке ампулы и вдоль стенки ампулы до тех пор, пока не встречаются с сильнымподъемно-опускным течением в середине зоны, появившимся из-за радиального градиента температуры. Таким образом, внутри зоны образуется сложная двухвихревая структура, обусловленная совместным действием тепловой и концентрационной конвекций. Это течение приводит к сложному распределению концентрации внутри зоны с образованием около фронтов и внутри зоны концентрационных пограничных слоев. Из-за конвективного перемешивания Δ_C меньше, чем в случае устойчивого распределения плотности, и составляет 2%.

4.5. Конвекция Марангони

Если между поверхностью расплава и ампулой отсутствует плотный контакт, то в плавающей зоне может возникнуть термокапиллярная конвекция. В математической модели это сводится к замене условия прилипания на боковой поверхности условием (23). Для КРТ число Марангони

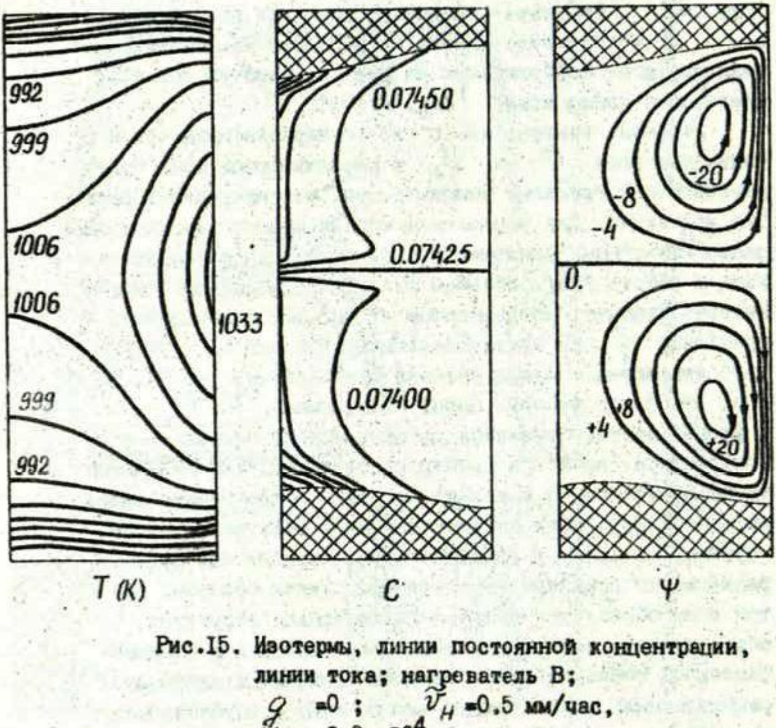


Рис.15. Изотермы, линии постоянной концентрации, линии тока; нагреватель B; $g=0$; $\tilde{v}_H=0.5$ мм/час, $Mn_T=2.0\cdot10^4$.

$Mn_T=2.4\cdot10^5$. В данном разделе описываются предварительные расчеты конвекции Марангони, проведенные для движущегося нагревателя B при числах $Mn_T=2.0\cdot10^4$, $Gr_T=Gr_C=0$. Расчеты при $Mn_T=2.4\cdot10^5$ требовали больших вычислительных затрат; кроме того, не учитывалась концентрационно-капиллярная конвекция, так как авторам неизвесты данные о значениях $\partial\gamma/\partial c$ для КРТ. Поэтому результаты при $Mn_T=2.0\cdot10^4$, представленные на рис.15

носят иллюстративный характер. Из сравнения с результатами на рис.9 видно, что сильная термокапиллярная конвекция приводит к изменению поля температуры в зоне и к появлению выпуклого в жидкую фазу фронта роста. Зона располагается симметрично по отношению к нагревателю. Около межфазных границ и в середине зоны образуются концентрационные пограничные слои, $\Delta_C = 3{,}6\%$.

Из-за того, что течение локализовано около свободной поверхности и не проникает к оси кристалла, там образуется широкий пограничный слой. Это может привести к росту кристалла с относительно большой радиальной неоднородностью около оси.

5. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Как следует из результатов, изложенных в разделе 4, при росте двухкомпонентных систем методом МДН положение фронтов и форма плавающей зоны определяются как условиями фазового равновесия на фронтах, так и конвективными процессами внутри зоны. Очевидно, что расчеты с использованием однокомпонентной модели не могут дать адекватное описание процесса ни в случае покоящегося, ни в случае движущегося нагревателя. Действительно, в случае покоящегося нагревателя концентрация внутри зоны постоянна и заранее не известна. Температура межфазных границ, которая также не известна, находится из фазовой диаграммы и, в итоге, определяется начальными условиями. Если же нагреватель движется, то фронты не являются изотермичными и, кроме того, в случае слабого перемешивания их средние температуры сильно отличаются. Поэтому правильное определение положения и формы зоны, а значит и конвективных процессов в ней с помощью однокомпонентной модели является проблематичным.

Таким образом, для адекватного описания процессов роста двухкомпонентных систем методом МДН следует учитывать тепломассообмен в плавающей зоне и условия фазового равновесия на фронтах роста и растворения.

Описанный в разделе 4 эффект смещения середины зоны относительно нагревателя (см. рис.7 и рис.9) имеет место в отсутствии перемешивания, в невесомости при плотном контакте жидкой фазы с ампулой. В земных условиях он может наблюдаться в устойчиво стритифицированных по плотности плавающих зонах (см. рис.I2 антипараллельные $\vec{g}$ и $\vec{v}_H$) при плотном контакте с ампулой. Смещение зоны возрастает с увеличением скорости движения нагревателя. При больших скоростях зона может сильно отстать от нагревателя и, возможно, произойдет срыв процесса. Конвекция симметризует зону и повышает, таким образом, ее устойчивость по отношению к увеличению скорости движения нагревателя, т.е. появляется возможность повысить скорость выращивания. В невесомости смещение зоны уменьшается из-за действия капиллярной конвекции (см. рис.I5), а условиях земного тяготения - из-за гравитационной тепловой (рис.I0 и рис.II)или гравитационно-концентрационной (рис.I4) конвекции.

Результаты, приведенные в разделе 4, позволяют оценить степень влияния тепловой и концентрационной гравитационной конвекции на тепломассообмен в МДН. Очевидно, что основным фактором, влияющим на характер и интенсивность гравитационной конвекции, является соотношение теплового и концентрационного чисел Грасгофа.

Понятно, что при $\beta = 0$ и $\alpha \neq 0$ (чисто концентрационная конвекция) решения задачи при антипараллельной ориентации $\vec{g}$ и $\vec{v}_H$ будут иметь вид, изображенный на рис.I2, I3. В случае же $\beta \neq 0$ и $\alpha = 0$ получаются решения с сильным конвективным перемешиванием (см. рис. I0). Промежуточные случаи с $\alpha \neq 0$, и $\beta \neq 0$ требуют более углубленного анализа. Модельные расчеты показали, что устойчиво стратифицированная зона сохраняется и при использовании зависимости (4) при $\beta = 6.5 \cdot 10^{-4}$ К$^{-I}$ и $\alpha =$ $= 0{,}34$ моль$^{-I}$, если в качестве начального приближения брать устойчивое распределение концентрации. Это распределение сохраняется при значениях $\alpha \geqslant 0{,}15$ моль$^{-I}$

Если же в качестве начального приближения берется сильно перемешанный режим, показанный на рис.10, то конвекция при $\beta = 6.5 \cdot 10^{-4} К^{-1}$ и $\alpha = 0,34$ моль$^{-1}$ не затухает и картина процесса даже при наличии такой сильной зависимости плотности от концентрации не меняется по сравнению с рис.10. Это объясняется тем, что из-за сильного перемешивания концентрация в объеме плавающей зоны постоянна и поэтому концентрационная зависимость плотности не оказывает влияния на течение. Таким образом, при расчетах по линейной зависимости (4), взяв в качестве начальных условий два различных режима, можно придти к двум качественно различным решениям (см.рис.10 и рис.12). Предварительный анализ показывает, что взаимное изменение величин α и β позволяет переходить от одного решения к другому и обратно.

Таким образом, вопрос о том, какой из режимов конвекции в жидкой зоне реализуется для конкретного материала, необходимо решать с использованием вычислительных экспериментов.

Результаты расчетов только тепловой гравитационной конвекции для случая движущегося нагревателя, приведенные в 4.2–4.3, по отношению к системе КРТ носят иллюстративный характер, поскольку для этой системы, как показало моделирование с учетом (6), основное значение имеет конвекция. Нелинейная зависимость (6) интересна тем, что величина $\partial\rho/\partial T$ является знакопеременной и, как видно из оценок, процесс роста КРТ проводится в таком интервале температур, где $\beta = -(\rho) \, \partial\rho/\partial T$ является относительно малой величиной. Именно поэтому при расчетах по зависимости (6) основную роль играла коцентрационная часть зависимости плотности, что в итоге привело к появлению устойчиво стратифицированной плавающей зоны в случае антипараллельных $\vec{g}$ и $\vec{v}_H$. В силу всего сказанного, при выращивании КРТ МДН вероятнее всего, что при антипараллельной ориентации $\vec{g}$ и $\vec{v}_H$ реализуется режим с устойчивой стратификацией плотности.

Как отмечалось выше, режим выращивания в отсутствии конвекции для КРТ можно обеспечить либо в невесомости при плотном контакте со стенками ампулы, что трудно поддается контролю, либо в земных условиях при антипараллельной ориентации $\vec{g}$ и $\vec{v}_H$ и плотном контакте. Распределение концентрации носит тогда квазиодномерный характер и радиальное распределение по составу определяется кривизной фронта. Если конструкция нагревателя обеспечивает создание плоского фронта, то тогда проблема получения кристалла с однородным составом может быть решена. Однако , процесс выращивания придется вести с малой скоростью.

Режим роста с сильным перемешиванием возникает при больших радиальных градиентах температуры в зоне, а также всегда при параллельной ориентации $\vec{g}$ и $\vec{v}_H$. В таком режиме малая радиальная неоднородность кристалла получается и при искривленном фронте роста, если структура потоков такова, что вблизи фронта роста образуется один интенсивный вихрь. Зона симметрична относительно нагревателя, что позволяет вести процесс с большей скоростью. При этом,однако,в выращенном кристалле могут иметь место несовершенства, связанные с колебаниями скорости течения расплава около фронта роста (полосчатость).

Перспективным для выращивания КРТ может оказаться режим, при котором в середине зоны создана область перемешивания, а около фронтов - устойчивые градиенты концентрации (этот режим упомянут в 4.4). Тогда, вероятно, можно повысить скорость выращивания и при этом сохранить диффузионный режим роста вблизи фронта.

Безразмерные параметры.

Наименование	Определение	Величина
Отношение коэффициентов теплопроводности	$\lambda_{SL} = \lambda_S / \lambda_L$	0.14
Отношение плотностей	$\rho_{SL} = \rho_S / \rho_L$	I
Отношение теплоемкостей	$C_{SL} = C_S / C_L$	0.8
Отношение температуропроводностей	$a_{SL} = a_S / a_L$	0.175
Число Прандтля	$Pr = \rho_L C_L \nu / \lambda_L$	0.08
Число Шмидта	$Sc = \nu / D$	88
Число Грасгофа тепловое	$Gr_T = \beta g R^3 \tilde{T}_M / \nu^2$	$0 - 5.5 \cdot 10^6$
Число Грасгофа концентрационное	$Gr_C = \alpha g R^3 / \nu^2$	$0 - 2 \cdot 10^7$
Безразмерное ускорение силы тяжести	$G = R^3 g / \nu^2$	$0 - 6.4 \cdot 10^7$
Скорость движения нагревателя	$v_H = \tilde{v}_H R / \nu$	$3.5 \cdot 10^{-3}$
Число Стефана	$St = \rho_L \varkappa \partial / \tilde{T}_M \lambda_L$	0.1
Безразмерная характеристика радиационного теплообмена	$Rd = \sigma \tilde{T}_M^3 R / \lambda_L$	0.25
Число Марангони	$Mn_T = R\tilde{T}_M (\partial\gamma/\partial T) / \rho \nu a_L$	$2 \cdot 10^4$
Относительная радиальная неоднородность концентрации в кристалле	$\Delta_c = \dfrac{c_{max} - c_{min}}{c_{\varkappa}}$	

Таблица 2

Свойства материала и геометрия системы

Наименование	Величина
Радиус ампулы R	I см
Положение нагревателя L_2	4.5 см
Длина нагревателя L_H	0.6 см
Масштаб скорости $\tilde{v}$	4 10^{-3} см/сек
Скорость движения нагревателя $\tilde{v}_H$	0.5 мм/час
Температура на нагревателе A: $\tilde{T}_H$	II56 К
B: $\tilde{T}_H$	II96 К
Градиент температуры на экране A: $\partial\tilde{T}_H/\partial z$	62К/см
B: $\partial\tilde{T}_H/\partial z$	I97 К/см
Плотность расплава ρ_L	7.6 г/см^3
Теплоемкость расплава c_L	0.I6I дж/г К
Теплопроводность расплава λ_L	0.056 вт/см К
Кинематическая вязкость расплава ν	4 10^{-3}см^2/с
Коэффициент диффузии в расплаве D	4.5 10^{-5} см^2/с
Коэффициент теплового объемного расширения $\beta = -(\rho)^{-1}\partial\rho/\partial T$	6,5 10^{-5} К$^{-1}$
Коэффициент концентрационного объемного расширения $\alpha = -\rho^{-1}\partial\rho/\partial c$	0.34 моль$^{-1}$
Производная коэффициента поверхностного натяжения по температуре $\partial\gamma/\partial T$	-0.28 дин/см К
Удельная теплота плавания $\varkappa$	252 дж/г
Постоянная Стефана-Больцмана σ	5.67 10^{-12}Вт см$^{-2}$ К$^{-4}$

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

I. Пфанн В. Зонная плавка. - М.:Мир, I970. - 336с.
2. Triboulet R., Nguen Duy T., Durand A. THM, a Breakthrough in $Hg_{(1-x)}Cd_xTe$ Metallurgy//J.Vac.Sci. Thechnol. - 1985. - V.A3(1). - P.95-99.
3. Brice J.C., Capper P., Jones C.L. The Phase Diagram of the Pseudo-Binary System $Hg_{(1-x)}Cd_xTe$ and the Segregation of $CdTe$ //J.Cryst.Growth. - 1986. - V.75. - P.395-399.
4. Chang C.E., Wicox W.R. Analysis of Surface Tension Driven Flow in Floating Zone Melting //Int.J.Heat and Mass Transfer. - .976. - V.19. - P.355-366.
5. Люмкис Е.Д., Мартузан Б.Я., Мартузане Э.Н. Взаимодействие потоков, вызванных термокапиллярной конвекцией и вращением при зонной плавке, и их влияние на распространение примеси // Технологические эксперименты в невесомости.-Свердловск,I983. - С.I63-I78.
6. N.Kobayashi. Computer Simulation of the Steady Flow in a Cylindrical Floating Zone under Low Gravity// J.Crystal Grawth. - 1984. - V.66.- P.63-72.
7. Murthy J.Y. A Numerical Simulation of Flow, Heat and Mass Transfer in a Floating Zone at High Rotational Reynolds Numbers//J.Cryst.Growyh. - 1987. - V.83. - P.23-34.
8. Jurisch M., Loser W., Lyumkis E., Martuzane E., Martuzans B. Connection of the Thermocapillary Flow Characteristics and the Impurity Distribution Pattern in Floating Zone Molten Molybdenum Single Cryrtals// Cryst. Research and Technol. - 1982. - V.17, N°8. - P.963-971.
9. Chang C.J., Brown R.A. Radial Segregation Induced by Natural Convection and Melt/Solid Interface Shape in Vertical Bridgman Growth//J.Cryst.Growth. - 1983. - V.63. - P.343-364.

I0. Duranceau J.L., Brown R.A. Thermal-Capillary Analysis of Small-Scale Floating Zones: Steady State Calculations//J.Crystal.Growth. - 1986. - V.75. - P.367-389.

II. Авдонин Н.А. Математическое описание процессов кристаллизации. - Рига:Зинатне, I980. - I80с.

I2. Meyer G.H. A Numerical Method for the Solidification of a Binary Alloy//Int.J.Heat Mass Transfer. - 1981. - V.24, N°4. - P.778-781.

I3. Бакирова О.И. Численное моделирование процессов зонной плавки на основе решения задачи о фазовом переходе в бинарной системе//Математическое моделирование. Получение монокристаллов и полупроводниковых структур. - М.:Наука, I986. - С.I42-I58.

I4. Апанович Ю.В. О расчете процессов тепломассопереноса при выращивании кристаллов методом зонной плавки // Журн.прикл.мех. и тех.физ. - I984. - № 3. - С.II6-I20.

I5. Забелина М.П., Фрязинов И.В. Сеточный метод решения задачи Стефана для бинарной системы//Дифференц. уравн. - I987. - Т.23, № 7. - С.II88-II97.

I6. Апанович Ю.В., Люмкис Е.Д. Разностные схемы для уравнений Навье-Стокса на сетке из ячеек Дирихле// Журн.вычисл.мат. и мат.физ. - I988. - Т.28, № 3. - С.390-399.

I7. Апанович Ю.В., Люмкис Е.Д. Применение разностных схем на ячейках Дирихле для решения задач тепломассообмена с фазовыми переходами//Дифференц.уравн. - I988. - Т.24, № 7. - С.III3-II2I.

I8. Sullivan J.M., Lynch D.R., O'Neil K. Finite Element Simulation of Planar Instabilities During Solidffication of an Undercooled Mel //J.Comput.Phys. - 1987. - V.69, N°1. - P.81-111.

I9. Chandra D., Holland L.R.Density of Liquid $Hg_{(1-x)}Cd_x Te$ //J.Vac.Sci.Techno.. - 1983. - V.A3 (3). - P.1620-1624.

20. Современная кристаллография. Т.3, Рост кристаллов/ Под ред. А.А.Чернова. - М.:Наука, 1980. - 407с.
21. Green P.J., Sibson R. Computing Dirichlet Tesselation in the Plane.-Comput.J.-1978.-V.21.-P.168-173.
22. Моисеенко Б.Д., Самарский А.А. Экономическая схема сквозного счета для многомерной задачи Стефана// Журн.вычисл.мат. и мат.физ. - 1965. - Т.5, № 5. - С.816-827.
23. Capper P., Coates W.G., Jones C.L., Gosney J.J., Ard C.K., Kemworthy I. Quenching studies in $Cd_x Hg_{(1-x)} Te$ crystals grown using ACRT.//J.Cryst. Growth. - 1987. - V.83. - P.69-76.
24. Dakhoul Y.M., Farmer R., Lehoczky S.L., Szofran F.R. Numerical Simulation of Heat Transfer During the Crystal Growth of HgCdTe Alloys//J.Cryst. Growth. - 1988. - V.86. - P.49, N° 1. - P.49-55.
25. Murthy J.Y., Lee P. Thermosolutal Convection in a Floating Zone: The Case of Unstable Solute Gradient//Int.J.Heat Mass Trans. - 1988. - V.31, N° 9. - P.1923-1932.

МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ
ПРИКЛАДНЫЕ ЗАДАЧИ МАТЕМАТИЧЕСКОЙ ФИЗИКИ, вып.I
Рига: Латвийский университет, 1990

УДК 519.6+532.77

Ю.В.Апанович, Е.Д.Люмкис,
Л.А.Пакул
ИМИ ЛУ, Рига

ЧИСЛЕННОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ВЛИЯНИЯ ГИДРОДИНАМИКИ И РАДИАЦИОННОГО ТЕПЛООБМЕНА В ПРОЦЕССЕ ГОРИЗОНТАЛЬНОЙ НАПРАВЛЕННОЙ КРИСТАЛЛИЗАЦИИ НА ПОЛОЖЕНИЕ И ФОРМУ МЕЖФАЗНОЙ ГРАНИЦЫ

Качество монокристаллов арсенида галлия, выращенных методом горизонтальной направленной кристаллизации, в значительной степени определяется плотностью дислокаций, образующихся в растущем кристалле, которые связаны, в свою очередь, с термоупругими напряжениями в кристалле. Важной качественной характеристикой, позволяющей судить о распределении температуры в кристалле, является степень искривленности фронта кристаллизации. Математические модели, позволяющие определять температурное поле в расплаве и кристалле, должны учитывать кондуктивный теплоперенос с учетом выделения скрытой теплоты плавления на границе раздела фаз /I/. Проведенный в настоящей работе в рамках подобной модели расчет, в том числе с учетом радиационного теплообмена между поверхностями расплава-кристалла и муфеля, показал, что форма фронта существенно отличается от экспериментально наблюдаемой в процессе роста арсенида галлия в реальном технологическом процессе /2/. В связи с этим возникла необходимость существенно усложнить модель и учесть другие физические эффекты, которые могут влиять на форму фронта кристаллизации. Одним из таких эффектов является теплоперенос в полупрозрачных кварцевых лодочке и ампуле. Для учета полупрозрачности использовалась приближенная модель, предложенная в/3/.

Другим важным фактором, влияющим на форму фронта, может стать конвекция в расплаве. Работ, посвященных моделированию процесса направленной кристаллизации с учетом конвекции в расплаве и нахождению фронта кристаллизации, сравнительно немного, отметим среди них работу /4/, в которой расчеты проводятся для модельных краевых условий на границах.

Целью настоящей работы является сопоставление результатов расчетов, выполненных в тех или иных приближениях, между собой и с экспериментальными данными о прогибе фронта работы /2/.

I. Постановка задачи

Слиток арсенида галлия кристаллизуется в горизонтальной лодочке, перемещающейся с постоянной скоростью $v_п$ в заданном температурном поле цилиндрического муфеля. На рис.I схематично изображено центральное сечение установки и приведены обозначения расчетных областей. В модели предполагается, что скорость течения и температура вблизи центрального сечения не зависят от поперечной координаты z, поэтому расчеты проводятся в двумерном приближении. Предполагается, что за характерное время установления поля температуры $\tau_т$ смещение лодочки $v_п \cdot \tau_т$ мало. Тогда можно считать, что краевые условия для температуры не зависят от времени, и рассматривать задачу в квазистационарном приближении. Математическая модель включает в себя уравнение теплопроводности в расплаве и кристалле и уравнения естественной конвекции в приближении Буссинеска в расплаве. Уравнения записываются в безразмерных переменных. Размерные величины, где возможно неоднозначное толкование, обозначаются буквой со знаком тильда. В качестве масштаба длины берется радиус лодочки $\tilde{R}$, масштаба температуры - $\tilde{T}^* = 1000^\circ$, масштаба времени $\tilde{t} = \tilde{R}^2/\tilde{\nu}$, масштаба скорости $\tilde{v} = \tilde{\nu}/\tilde{R}$, где

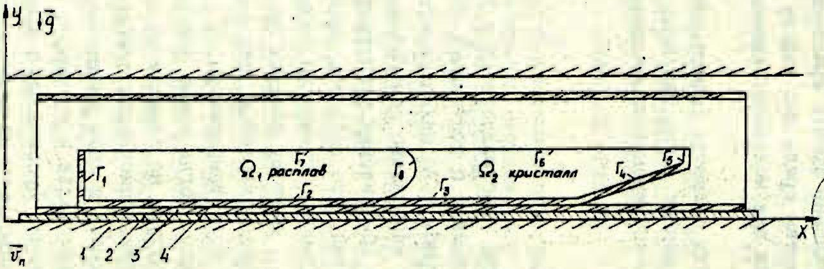


Рис. I. Схема установки и расчетной области; I - муфель, 2 - подставка, 3 - ампула, 4 - лодочка

$\tilde{\nu}$ - коэффициент кинематической вязкости. В системе отсчета, связанной с муфелем, система уравнений имеет вид:

$$\rho_\kappa c_\kappa (\partial T/\partial t + (\vec{v}\nabla)T) = Pr^{-1}\nabla\cdot(\lambda_\kappa \nabla T) \quad (1)$$

$$\partial\vec{\omega}/\partial t + rot[\vec{\omega}\times\vec{v}] = -rot\,rot\,\vec{\omega} + Gr[\vec{g}\times grad\,T] \quad (2)$$

$$rot\,rot\,\vec{\psi} = \vec{\omega} \quad (3)$$

$$\vec{v}^* = rot\,\vec{\psi}\ , \quad (4)$$

где T - температура; $\lambda_\kappa = \tilde{\lambda}_\kappa/\tilde{\lambda}_\ell$, $\rho_\kappa = \tilde{\rho}_\kappa/\tilde{\rho}_\ell$, $c_\kappa = \tilde{c}_\kappa/\tilde{c}_\ell$, $\tilde{\lambda}_\kappa, \tilde{\rho}_\kappa, \tilde{c}_\kappa$ - коэффициент теплопроводности, плотность и теплоемкость в жидкой $(\kappa=\ell)$ и твердой $(\kappa=s)$ фазах соответственно; $\vec{v} = (v+v_n\ , u\ , 0\ )$ - скорость движения среды относительно муфеля; $\vec{v}^* = (v, u, 0)$ - скорость движения среды относительно лодочки; $Pr = \tilde{\nu}\tilde{\rho}_\ell\tilde{c}_\ell/\tilde{\lambda}_\ell$ - число Прандтля; $Gr = \tilde{\beta}\tilde{g}_0\tilde{R}^3\tilde{T}^*/\tilde{\nu}^2$ - число Грасгофа; $\tilde{\beta} = -(\partial\tilde{\rho}/\partial\tilde{T})/\tilde{\rho}$; $\tilde{g}_0 = 9.8\,м/с^2$; $\vec{g} = (0, -1, 0)$.

На твердых участках границы $\Gamma_1, \Gamma_2, \Gamma_8$ задаются условия непротекания и прилипания

$$\psi = 0\ , \quad \partial\psi/\partial n = 0 \quad (5)$$

На свободной поверхности Γ_7 учитывается термокапиллярный эффект и краевые условия имеют вид:

$$\psi = 0, \quad \omega = -M\cdot\partial T/\partial x\ , \quad (6)$$

где $M = Mn/Pr$; $Mn = \tilde{R}\cdot\tilde{T}^*\cdot\tilde{\lambda}_\ell\cdot|\partial\tilde{\gamma}/\partial\tilde{T}|/\tilde{\nu}\cdot\tilde{c}_\ell\cdot\tilde{\rho}_\ell^2$ - число Марангони; $\partial\tilde{\gamma}/\partial\tilde{T}$ - производная коэффициента поверхностного натяжения $\tilde{\gamma}$ от температуры.

На торцах лодочки Γ_1, Γ_5 градиент температуры полагается совпадающим с градиентом температуры на стенке муфеля

$$\partial T / \partial n = \partial T_M / \partial x \, , \tag{7}$$

здесь $T_M(x)$ - распределение температуры на муфеле.

На границе раздела фаз Γ_8 ставится условие Стефана

$$\lambda_s \, \partial T / \partial n - \partial T / \partial n = St \cdot v_\kappa \, , \tag{8}$$

где v_κ - нормальная скорость кристаллизации; $St = \tilde{\rho}_\ell \tilde{\varkappa} \tilde{v} / \tilde{T}^* \cdot \tilde{\lambda}_\ell$; $\tilde{\varkappa}$ - удельная теплота плавления. Скорость v_κ находится из нормального закона роста $v_\kappa = \mu \cdot (T_{пл} - T)$ на Γ_8, где $T_{пл}$ - температура плавления; μ - кинетический коэффициент.

В краевом условии для температуры на верхней поверхности расплав-кристалл теплообмен излучением со стенкой цилиндрического муфеля учитывается с использованием метода сальдо /5/. Поверхность муфеля разбивается на элементарные площадки - кольца шириной $d\ell_j$, а верхняя плоская поверхность расплава-кристалла - на элементарные полосы шириной $d\ell_i$. Степень черноты муфеля полагалась равной 1 . В этом случае система уравнений, определяющих плотность эффективного потока излучения q_j^o , выходящего с элементарной площадки j поверхности муфеля и плотность эффективного потока излучения q_i^o , выходящего с элементарной площадки i поверхности расплав-кристалл, значительно упрощается и принимает вид:

$$\begin{cases} q_i^o = \varepsilon_i^\kappa \sigma T_i^4 + (1 - \varepsilon_i^\kappa) \sum\limits_j \int\limits_{A_j} q_j^o \, dF_{di-dj} \\ q_j^o = \varepsilon_j \sigma T_j^4 \, . \end{cases} \tag{9}$$

где ε_i^κ - степень черноты кристалла $(\kappa = s)$ или расплава $(\kappa = \ell)$; dF_{di-dj} - угловые коэффиценты между элементарными площадками i и j ; A_j - площадь соответствующей элементарной площадки. Угловые коэффициенты вычислялись по методике, изложенной в /6/. Поток результирующего излучения i-ой элементарной площадки поверхности расплав-кристалл может быть записан в виде:

$$-\lambda_{,} \, \partial T/\partial n = Q_\kappa = \varepsilon_i^\kappa \sigma (T_i^4 - \sum_j T_j^4 F_{ij}). \quad (10)$$

Для того, чтобы оценить влияние радиационных потоков в стенках ампулы и лодочки на форму фронта кристаллизации, рассматриваются две различные тепловые модели на нижней границе расплав-кристалл.

В первой модели предполагается, что через стенки лодочки и ампулы и через подставку происходит теплообмен посредством только молекулярной теплопроводности, причем температура на стенках и подставке распределена линейно по толщине. Из непрерывности теплового потока получаем следующее приближенное краевое условие на нижней границе расплав-кристалл:

$$-\lambda_\kappa \, \partial T/\partial n = \frac{T - T_M}{\frac{h_\Lambda + h_a}{\lambda_{\kappa B}} + \frac{h_n}{\lambda_n}} , \quad (11)$$

где h_Λ, h_a, h_n - толщина стенок лодочки, стенок ампулы и подставки, соответственно; $\lambda_{\kappa B}$, λ_n - коэффициенты теплопроводности кварца и подставки.

На поверхности конического сужения лодочки задается теплообмен излучением с учетом теплового сопротивления подставки

$$-\lambda \, \partial T/\partial n = \varepsilon_1 \sigma (T^4 - T_M^4) , \quad (12)$$

где
$$\varepsilon_1 = \varepsilon_\kappa / (1 + 4 \cdot \varepsilon_\kappa \cdot \sigma \cdot (h_n/\lambda_n) \cdot T_M^3).$$

Во второй модели предполагается, что осуществляется радиационный теплообмен между расплавом-кристаллом и подставкой с учетом полупрозрачности кварцевых стенок лодочки и ампулы, а также теплообмен вдоль стенок за счет кондуктивного лучистого переноса. Нижней границей расчетной области здесь является не поверхность расплав-кристалл, а стенка муфеля с заданной температурой, и поле температуры определяется не только в расплаве и кристалле, но и в стенке лодочки, стенке ампулы и в подставке. Уравнение, описывающее теплоперенос внутри подставки, имеет вид:

$$\rho_n c_n (\partial T/\partial t + v_n \partial T/\partial x) = \lambda_n \Delta T, \qquad (13)$$

где ρ_n, c_n, λ_n - плотность, теплоемкость и коэффициент теплопроводности материала, из которого изготовлена подставка. Приближенная модель теплорепеноса с учетом полупрозрачности аналогична описанной в работе /3/, но, в отличие от /3/, здесь рассматриваются не цилиндрические поверхности, а бесконечные полосы. Уравнение теплопроводности внутри стенки ампулы или лодочки имеет вид:

$$\rho_{\kappa в} c_{\kappa в} (\partial T/\partial t + v_n \partial T/\partial x) = \qquad (14)$$

$$= \partial(\lambda_{эф} \partial T/\partial x)/\partial x + \partial(\lambda_{\kappa в} \partial T/\partial y)/\partial y + f_i,$$
$$i = 1, 2,$$

где $\rho_{\kappa в}, c_{\kappa в}$ - плотность и теплоемкость кварцевого стекла; $\lambda_{\kappa в}$ - коэффициент молекулярной теплопроводности кварцевого стекла; $\lambda_{эф}$ - эффективный коэффициент теплопроводности кварцевого стекла в продольном направлении; f_i - объемная плотность энергии, поглощенная лодочкой $(i=1)$ или ампулой $(i=2)$ за единицу времени. Предполагая, что источники f_i

не зависят от y в стенках лодочки и ампулы, выражения для f_i можно получить в виде:

$$f_1 = \frac{Q_к - S}{d_1}, \quad f_2 = \frac{Q_п + S}{d_2},$$

где d_i, $i = 1,2$ - толщина стенки лодочки и ампулы; $Q_к$, $Q_п$ - суммарные плотности потоков излучения, направленные навстречу друг другу: выходящего из поверхности расплав-кристалл $(Q_к)$, и выходящего из подставки $(Q_п)$; S - поток, являющийся выходящим с нижней границы стенки лодочки и входящим в верхнюю границу стенки ампулы. Оптическая толщина стенки ампулы и стенки лодочки в продольном направлении много больше 1. В этом случае учесть перенос энергии излучением в продольном направлении можно, ограничившись приближением лучистой теплопроводности, т.е.

$$\lambda_{эф} = \lambda_{кв} + \lambda_{рад},$$

где $\lambda_{рад}$ - лучистая составляющая теплопроводности, $\lambda_{рад} \sim T^3$ (/5/).

В работе /7/ проведен анализ лучистой составляющей переноса коэффициента теплопроводности, и получены оценки $\lambda_{рад}$ при различных температурах.

В этой модели при постановке краевого условия на коническом сужении лодочки предполагается, что носик лодочки находится на бесконечно малом расстоянии от цилиндрической стенки ампулы. Теплообмен здесь рассчитывается подобно тому, как это делается в нижней стенке лодочки, ампулы и подставке, с учетом щели бесконечно малой ширины между лодочкой и ампулой.

2. Численная реализация

Межфазная граница в процессе кристаллизации может иметь довольно сложную форму. Использование треугольных нерегулярных сеток позволяет достаточно точно описать сложную границу. В настоящей работе используется триангуляция Делоне, которая может быть однозначно построена при произвольной расстановке точек сетки в области /8/. Из рис.I видно, что расчетная область сильно вытянута. Поскольку особый интерес представляет область вблизи границы фазового перехода, точки сетки расставляются неравномерно: по всей длине шаг сетки крупный, и только вблизи межфазной границы шаг сильно дробится.

Создание сетки Делоне связано с построением ячеек Дирихле, которые используются как контрольные объемы для аппроксимации дифференциальных уравнений. В данной работе для аппроксимации уравнений теплопроводности и естественной конвекции использовались консервативные монотонные разностные схемы, приведенные в работах /9, 10/.

Для учета переноса тепла вдоль лодочки и ампулы на стенках лодочки, ампулы и на подставке расставляются точки сетки подобно тому, как они расставлены на нижней границе расплав-кристалл; для них строятся ячейки Дирихле (см.рис.2) и записываются разностные соотношения, выражающие баланс тепловых потоков в продольном и поперечном направлении. Система уравнений, описывающая теплоперенос, решается для системы точек, включающих в себя точки в расплаве, кристалле, стенках лодочки и ампулы и подставке.

Для нахождения положения фронта кристаллизации используется закон движения фронта вида $v_к = \mu (T_{пл} - T)$. Равновесная фазовая диаграмма на фронте при конечных скоростях реализуется при $T \to T_{пл}$ и $\mu \to \infty$. Практические расчеты показывают, что при $\mu > \sim 2 \cdot 10^3$ решение меняется слабо, в то же время дальнейшее увеличение μ приводит к тому, что счет приходится вести с малым шагом по времени, поэтому в наших расчетах полагалось $\mu = 2 \cdot 10^3$.

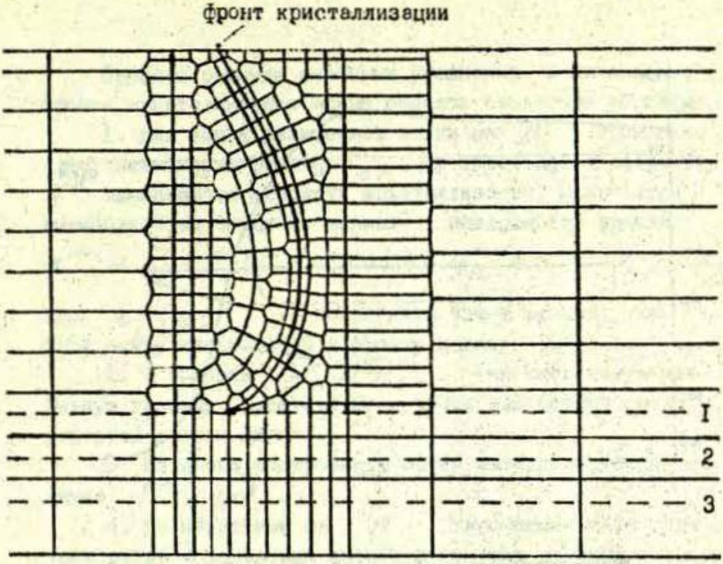


Рис. 2. Пример сетки из ячеек Дирихле в окрестности фронта кристаллизации; I - граница раздела расплав (кристалл)-лодочка, 2 - лодочка-ампула, 3 - ампула-подставка.

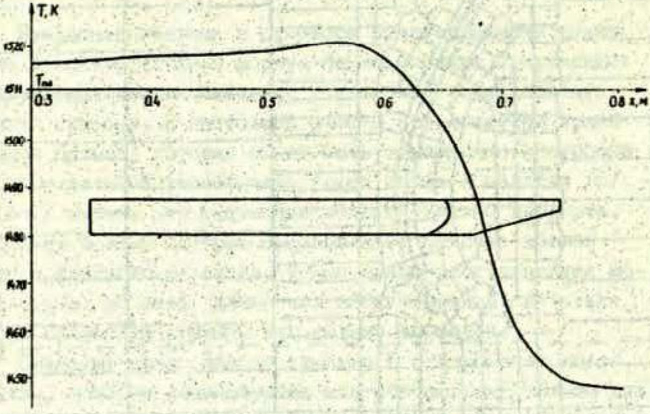


Рис. 3 Распределение температуры $T_м(x)$ на поверхности муфеля и схема расположения лодочки внутри муфеля.

Процесс решения сеточных уравнений и нахождение фронта кристаллизации можно описать следующим образом:

I. Для точек разностной сетки на n временном слое, лежащих на фронте Γ_B, по известной температуре T^n вычисляется скорость кристаллизации. Проводится смещение этих точек по нормали к поверхности фронта:

$$x_i^{n+1} = x_i^n + \tau\cdot(v_n - v_k\cos\alpha),\ y_i^{n+1} = y_i - \tau\cdot v_k\cdot\sin\alpha,$$

где x_i, y_i - координаты точек фронта, α - угол между касательной к фронту и осью Oy.

2. В области $\Omega_1 \cup \Omega_2$, имеющей новую межфазную границу, расставляются точки разностной сетки и строятся ячейки Дирихле.

3. На вновь построенную сетку интерполируются значения T^n, ψ^n.

4. По известным на n временном слое полю температур и уравнению фронта с помощью неявной разностной схемы находится температура на $n+1$ временном слое T^{n+1}. Для решения разностных уравнений используются итерационные методы типа *ORTHOMIN* /II/, реализованные для произвольной разреженной матрицы.

5. С использованием T^{n+1} и по известным ψ^n находятся ψ^{n+1} на $n+1$ временном слое.

Таким образом, после выполнения этапов I-5 находятся положения фронта кристаллизации, поля T^{n+1} и ψ^{n+1}. В расчетах шаг по времени выбирался из условия типа Куранта $\tau < \delta\cdot h/max|v_k|$; h - средний шаг сетки; $\delta \sim 0.2$, чтобы положение фронта менялось не больше, чем на половину ячейки.

3. Результаты расчетов

Расчеты проводились при следующих значениях характерных чисел: $Pr = 0.068$, $St = 0.114$, $\lambda_S/\lambda_\ell = 0.4$,

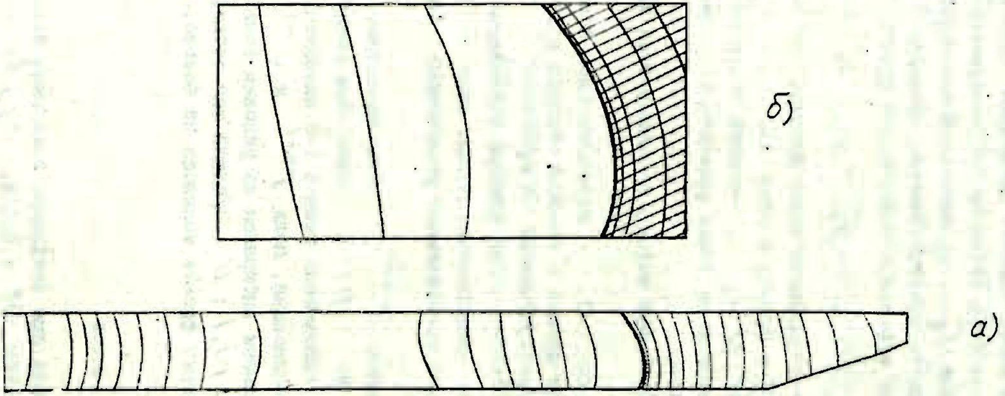


Рис.4 Результаты расчетов, полученные без учета радиационного теплообмена.
а) изотермы в расплаве и кристалле
б) увеличенный фрагмент рисунка в области около фронта

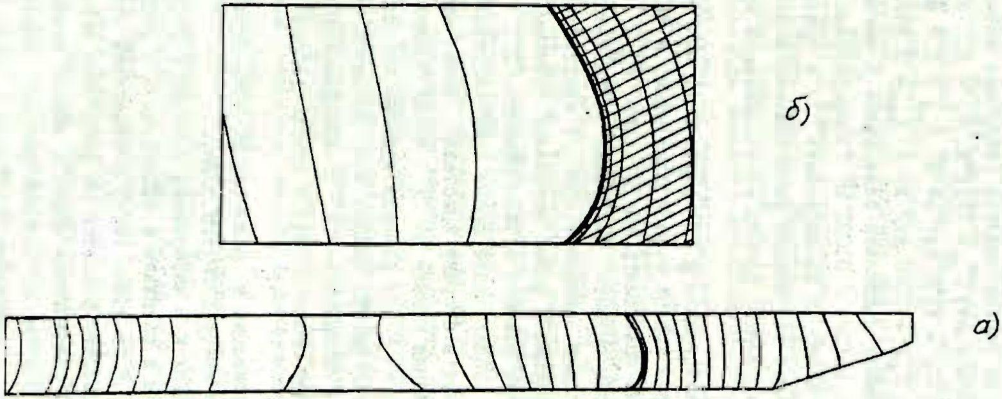


Рис. 5 Результаты расчетов, полученные с учетом радиационного теплообмена, $\lambda_{рад}=3$ вт/м к

а) изотермы в расплаве и кристалле

б) увеличенный фрагмент рисунка в области около фронта

$c_s / c_\ell = 0.96$, $\rho_s / \rho_\ell = 0.9$, $Gr = 2.5 \cdot 10^6$, $M = 1.8 \cdot 10^7$. Если определить число Грасгофа по перепаду температуры на муфеле над областью расплава, то $Gr^* = 4 \cdot 10^6$. В расчетах использовались следующие значения теплофизических констант: $T_{пл} = 1511°К$, $\lambda_п = 2.5$ вт/м·к, $\rho_п = 2800$ кг/м^3, $c_п = 1130$ дж/ кг·к, $\lambda_{кв} = 1.7$ вт/м·к, $\rho_{кв} = 2250$ кг/м^3, $c_{кв} = 1305$ дж/ кг·к. $\lambda_{рад} = 3$ вт/м·к. Скорость протягивания подставки задавалась 6 мм/час. Длина лодочки 0.4 м, высота - 0.032 м. Распределение температуры на муфеле взято из эксперимента /2/ и приведено на рис. 3, где также изображено расположение лодочки. В области предполагаемого фронта кристаллизации муфель имеет "окно".

При расчете интегралов в (9) считалось, что температура на элементаром кольце муфеля постоянна, и только в области "окна" она полагалась на $15°$ ниже $T_м$.

Для того, чтобы оценить, насколько точно каждая из рассмотренных моделей описывает процесс кристаллизации, сравнивалось положение и форма межфазной границы, полученных в результате расчета и эксперимента /2/.

Полученный в эксперименте фронт кристаллизации в сечении xOy вогнут в сторону кристалла, имеет несимметричную форму. Крайняя правая по x точка фронта находится на расстоянии $\sim 1/3$ радиуса лодочки от свободной поверхности. Прогиб фронта снизу, т.е. разность между крайней правой x-координатой и x-координатой на дне лодочки, составляет около 20 мм, а прогиб сверху - около 6 мм.

Фронт кристаллизации в расчетах по всем используемым моделям также имеет вогнутую форму.

На всех рисунках 4-9 изображены лодочка с распределением температуры в расплаве и кристалле и с распределением линий тока в расплаве (если учитывалась конвекция), полученные в результате расчетов по различным моделям. Отдельно показана увеличенная область вблизи межфазной границы. Слева в лодочке расположен расплав, справа - кристалл. Изотермы в кристалле построены с шагом $4 \cdot 10^{-3}$, в расплаве - $1 \cdot 10^{-3}$. Линии тока приведены с шагом 100.

Рисунки 4-6 соответствуют результатам, полученным без учета тепловой конвекции.

На рис. 4 представлены результаты, полученные по первой модели, предполагающей кондуктивный теплоперенос по стенкам лодочки и ампулы. Видно, что кристалл у дна лодочки подплавляется существенно больше, чем у свободной поверхности. Стрела прогиба фронта сверху составляет 8,4 мм, снизу - 2.1 мм.

Несколько ближе к эксперименту результаты, полученные по второй модели, предполагающей кондуктивный и радиационный теплоперенос по стенкам лодочки и ампулы. Варьировалось значение лучистой составляющей в коэффициенте эффективной теплопроводности, которая полагалась $\lambda_{рад}$ = 3 вт/м·к и $\lambda_{рад}$ = 6 вт/м·к (см. рис. 5 и рис.6, соответственно). Учет радиационного теплообмена немно́го уменьшил прогиб сверху (соответственно, 7.1 мм и 6.6 мм) и увеличил прогиб снизу (4.9 мм и 5.7 мм).

Тем не менее, достигнуть совпадения с экспериментом /2/ в рамках тепловой модели не удается, расчеты без учета конвекции дают заниженные значения стрелы прогиба фронта, а также несколько другую по характеру форму фронта. Результаты заметно меняются при учете гидродинамики в расплаве (рис. 7-9). Течение жидкости образует два противоположно направленных вихря, что обусловлено характером нагрева муфеля (максимальная температура задана над областью, находящейся примерно в середине жидкой фазы). Имеется сильное подплавление кристалла у свободной поверхности.

Форма фронта кристаллизации, полученного с учетом гравитационной конвекции (рис. 7), качественно совпадает с экспериментом, однако прогиб все еще занижен (стрела прогиба сверху составляет 4 мм, снизу - 8 мм).

В этой задаче свободная поверхность занимает бо́льшую площадь. Перепад температуры на ней составляет 3-4 градуса, причем самая горячая точка находится примерно на середине свободной поверхности расплава. Поскольку глубина

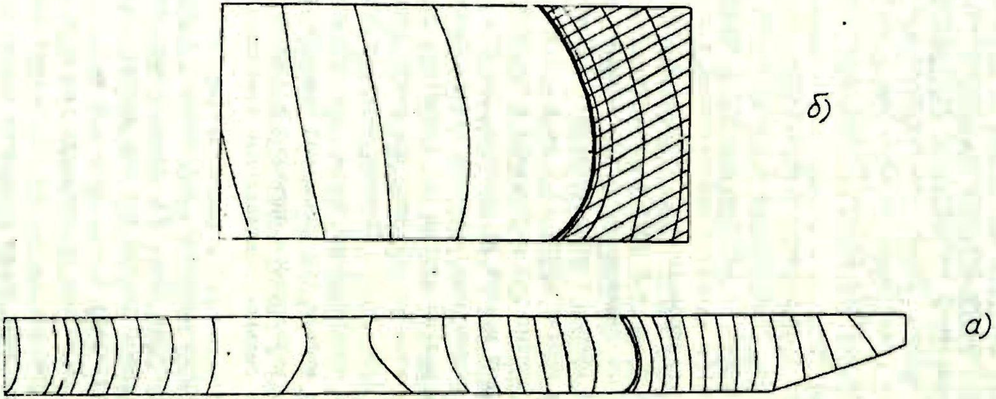


Рис. 6 Результаты расчетов, полученные с учетом радиационного теплообмена, λ рад=6 вт/м к
а) изотермы в расплаве и кристалле
б) увеличенный фрагмент рисунка в области около фронта

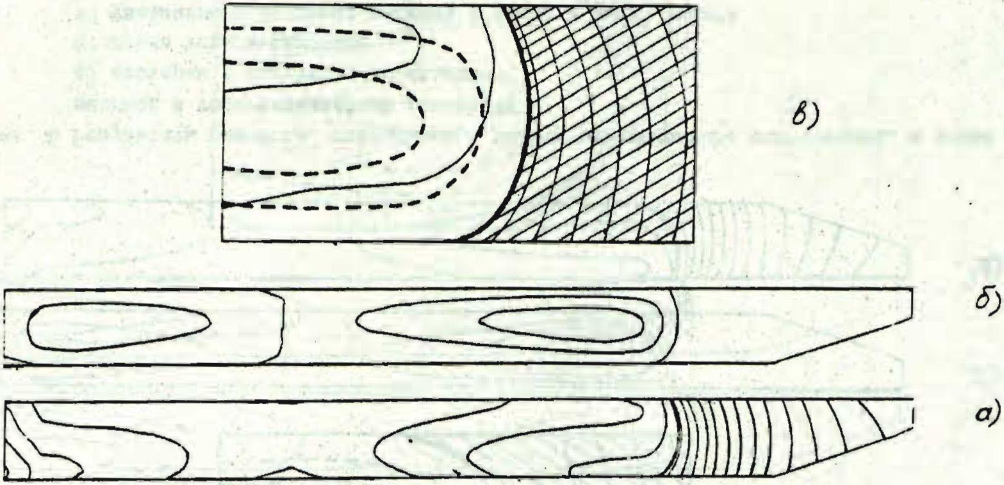


Рис.7 Результаты расчетов, полученные с учетом радиационного теплообмена и гравитационной конвекции

а) изотермы в кристалле и расплаве

б) линии тока в расплаве

в) увеличенный фрагмент рисунка в области около фронта

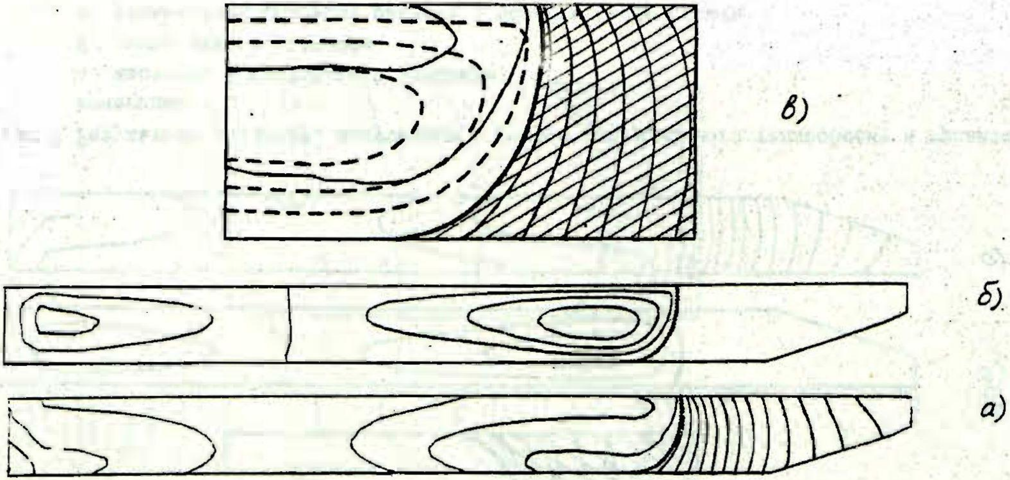


Рис. 8 Результаты расчетов, полученные с учетом радиационного теплообмена, а также гравитационной и термокапиллярной конвекции

а) изотермы в кристалле и расплаве

б) линии тока в расплаве

в) увеличенный фрагмент рисунка в области около фронта

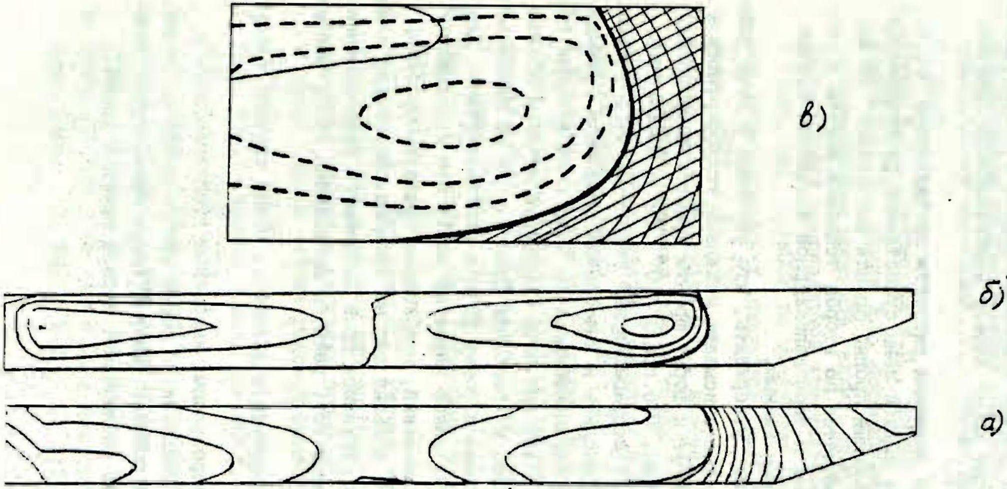


Рис. 9 Результаты расчетов, полученные с учетом радиационного теплообмена, а также гравитационной и теромокапиллярной конвекции при скорости протягивания $v_п$ =12 мм/ч

а) изотермы в кристалле и расплаве

б) линии тока в расплаве

в) увеличенный фрагмент рисунка в области около фронта

слоя жидкости относительно мала, вихрь, вызванный термокапиллярной конвекцией, проникает до дна лодочки и оказывает влияние на распределение температуры по всей глубине. Найденный с учетом термокапиллярной и гравитационной конвекций фронт имеет стрелу максимального прогиба $\sim$ 18 мм (рис. 8).

При удвоенном значении скорости протягивания v_n = = 12 мм/час длина жидкой зоны существенно увеличивается (рис. 9). Максимальный прогиб фронта составляет 30 мм.

Результаты расчетов по второй тепловой модели с учетом гравитационной и термокапиллярной конвекции близки к экспериментальным данным.

Нельзя, однако, утверждать, что учтенные в этой работе эффекты полностью описывают механизм теплопереноса и влияния на положение и форму фронта кристаллизации. В работе /4/ показано, что при $Gr > 10^4$, Pr = 0.015, течение жидкости имеет нестационарный характер, что, в свою очередь, может приводить к колебаниям межфазной границы. В наших расчетах также наблюдались колебания функции тока с амплитудой $\sim$3%, при этом структура потоков вблизи фронта не менялась, и колебания практически не оказывали влияния на положение и форму фронта кристаллизации. Для установления того, какой характер имеют эти колебания, численный или физический, необходимы существенно более подробная сетка и меньший шаг по времени. Поскольку в настоящей работе не ставилась цель детального исследования колебательных процессов, расчеты проводились на сравнительно грубых сетках.

Анализируя результаты расчетов, можно сделать следующие выводы:

1. Учет полупрозрачных кварцевых стенок лодочки и ампулы изменяет положение и форму фронта кристаллизации.

2. Конвекция создает сильные гидродинамические течения и существенно увеличивает стрелу прогиба фронта.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Авдонин Н.А., Мартузан Б.Я., Пыленкова Э.Н., Фридман Т.С. Решение тепловой задачи, связанной с процессом направленной кристаллизации слитков// Латвийский математический ежегодник, 7. - Рига: Зинатне, 1970. - С. 3-16.
2. Раков Б.В., Степанцова И.В., Морено Л.Н., Шаронов Б.Н., Колобова Г.А., Юрова Е.С. Исследование однородности монокристаллов арсенида галлия, полученных методом горизонтальной направленной кристаллизации:. Тез.докл. I Респ.конф. ЛатвССР по численным методам моделирования технологических процессов (ноябрь, 1989г.)/ Рига: ЛГУ, 1989. - С. 132.
3. Люмкис Е.Д., Мартузан Б.Я., Мартузане Э.Н., Сенченков А.С. Математическая модель теплопереноса при зонной плавке в полупрозрачной ампуле// Прикладные задачи математической физики. - Рига: ЛГУ, 1989. - С. 106-115.
4. P.Wouters, J.J.Van Schaftingen, M.J.Crochet, F.T.Geyling. Numerical simulation of the horizontal Bridgman growth. Part III: Calculation of the interface// Int. j. numer. methods fluids. - 1987. - V. 7. - P.131-153.
5. Зигель Р., Хауэлл Дж. Теплообмен излучением. - М.: Мир, 1975. - 934 с.
6. Люмкис Е.Д., Мартузан Б.Я. Расчет температуры в растущем кристалле с учетом радиационного теплообмена с окружающей средой в условиях процесса Чохральского//Прикладные задачи математической физики. - Рига: ЛГУ, 1978. - С. 70-86.
7. Мень А.Н., Сергеев О.А.// ДАН СССР, 1972. - Т. 203, № 6. - С. 1272-1274.
8. S.W.Sloan. A fast algorithm for constructing Delaunay triangulations in the plane// Adv. eng. software, - 1987. - V. 9, N 1. - P. 35-55.
9. Апанович Ю.В., Люмкис Е.Д.// Дифференциальные уравнения, 1988. - Т. 24, № 7. - С. 1113-1121.

10. Апанович Ю.В., Люмкис Е.Д.// Журн. вычисл. мат. и мат. физ., 1988. - Т. 28, № 3. - С. 390-399.
11. Хейгеман Л., Янг Д. Прикладные итерационные методы. - М.: Мир, 1986. - 446 с.

МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ
ПРИКЛАДНЫЕ ЗАДАЧИ МАТЕМАТИЧЕСКОЙ ФИЗИКИ, вып.I
Рига: Латвийский университет, 1990

УДК 620.179.4

М.Я.Антимиров, В.Р.Лиепиня
РТУ, Рига

ПРИМЕНЕНИЕ МЕТОДА МАЛОГО ПАРАМЕТРА ДЛЯ РЕШЕНИЯ ЗАДАЧИ О ВЗАИМОДЕЙСТВИИ ИЗЛУЧАТЕЛЯ С НЕОДНОРОДНЫМ ПРОВОДЯЩИМ ПОЛУПРОСТРАНСТВОМ

Точное решение задачи о возникновении вихревых токов в однородном проводящем полупространстве $-\infty < z < 0$, $-\infty < x, y < +\infty$ при условии, что на границе полупространства $z = 0$ расположен круговой виток с током, приведено в монографии /I/. В работе /2/ данная задача обобщена на случай, когда виток с током, меняющимся по гармоническому закону, находится в воздухе в плоскости $z = h > 0$. В /2/ найдено влияние проводящего полупространства на виток с током (так называемое внесенное комплексное сопротивление $Z_в$) и проведены расчеты $\mathrm{Re}\, Z_в$ и $\mathrm{Im}\, Z_в$ при разных частотах излучателя, позволяющие судить о глубине проникновения излучения в среду. В работе /3/ сделано обобщение работы /2/ на случай, когда в проводящей среде имеется неоднородное включение в виде конечного цилиндра, соосного с излучающим круговым витком. Точное решение такой задачи получить не удается. В /3/ приведено приближенное решение, полученное путем разложение решения в ряд по малому параметру $\varepsilon = \sigma_2/\sigma_1 - 1$, где σ_1 - проводимость среды, σ_2 - проводимость включения. Для оценки погрешности приближения в /3/ проведено сравнение точного и приближенного решения задачи для случая, когда среда с проводимостью σ_2 занимает полосу $-\infty < x, y < +\infty$, $-s-\ell \le z \le -s$. Оказалось, что вплоть до ε =0,I в очень широком диапазоне изменения других параметров погрешность для внесенного сопротивления не превышает 5%.

В данной работе методом малого параметра решается задача о взаимодействии излучателя в виде двухпроводной линии с неоднородным проводящим полупространством. По двум бесконечным, расположенным в воздухе проводам, параллельным оси

y и имеющим координаты (x_0, h) и (x_1, h), в области $z>0$ (зона 0) течет ток, меняющийся соответственно по закону $\pm I\cos\omega t$. Проводящее полупространство расположено в области $-\infty<x,y<+\infty$, $z<0$ и имеет проводимость σ_1 всюду, за исключением области $\mathcal{D}\{-p\le x\le p$, $-\infty<y<+\infty, -s-r\le z\le$ $\le -s\}$, которая имеет проводимость σ_2. Предполагается, что величина $\varepsilon=\sigma_2/\sigma_1-1$ достаточно мала (малый параметр). Пусть $A_0(x,z)$, $A_1(x,z)$, $A_2(x,z)$ есть соответственно векторные потенциалы в зонах 0, I и П (зона I – проводящее полупространство без области $\mathcal{D}$, зона П – область $\mathcal{D}$). Тогда математическая постановка задачи для функций $A_0 - A_2$ имеет вид (см. /I/):

$$\Delta A_0 = -I\mu_0\delta(z-h)\left[\delta(x-x_0)-\delta(x-x_1)\right],\ -\infty<x<+\infty,\ 0<z<+\infty, \tag{I}$$

$$\Delta A_1 + k_1^2 A_1 = 0,\ \begin{matrix}-\infty<x<+\infty,\\ -\infty<z<0,\end{matrix}\ (x,z)\notin\mathcal{D},\ \Delta=\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{\partial^2}{\partial z^2}, \tag{2}$$

$$\Delta A_2 + k_1^2(1+\varepsilon)A_2 = 0,\ (x,z)\in\mathcal{D}\{-p<x<p,\ -s-r<z<-s\}, \tag{3}$$

где I – амплитуда силы тока, μ_0 – абсолютная магнитная проницаемость, $k_1^2=-i\omega\sigma_1\mu_0$, $i^2=-1$, $\delta(x)$ – дельта-функция. Граничные условия:

$$z=0:\quad A_0=A_1,\ \frac{\partial A_0}{\partial z}=\frac{\partial A_1}{\partial z}, \tag{4}$$

$$\text{на } L:\quad A_1=A_2,\ \frac{\partial A_1}{\partial n}=\frac{\partial A_2}{\partial n}, \tag{5}$$

где L – граница зоны П, $\vec{n}$ – внешняя нормаль к границе. Кроме того

$$A_0,\ A_2\to 0 \text{ при } \sqrt{x^2+z^2}\to\infty. \tag{6}$$

Ищем решение задачи (I)-(6) в виде:

$$A_0 = A_0^0 + \varepsilon A_0^1 + \dots, \tag{7}$$

$$A_1 = A_1^0 + \varepsilon A_1^1 + \cdots , \tag{8}$$

$$A_2 = A_2^0 + \varepsilon A_2^1 + \cdots \tag{9}$$

Поставляя (7)-(9) в (I)-(6), получим

$$\Delta(A_0^0 + \varepsilon A_0^1 + \cdots) = -I\mu_0 \delta(z-h)\left[\delta(x-x_0) - \delta(x-x_1)\right], \tag{I0}$$

$$\Delta(A_1^0 + \varepsilon A_1^1 + \cdots) + k_1^2(A_1^0 + \varepsilon A_1^1 + \cdots) = 0, \tag{II}$$

$$\Delta(A_2^0 + \varepsilon A_2^1 + \cdots) + (1+\varepsilon)k_1^2(A_2^0 + \varepsilon A_2^1 + \cdots) = 0. \tag{I2}$$

При

$$z=0 \quad A_0^0 + \varepsilon A_0^1 + \cdots = A_1^0 + \varepsilon A_1^1 + \cdots \tag{I3}$$

и

$$\frac{\partial}{\partial z}(A_0^0 + \varepsilon A_0^1 + \cdots) = \frac{\partial}{\partial z}(A_1^0 + \varepsilon A_1^1 + \cdots), \tag{I4}$$

на L :

$$A_1^0 + \varepsilon A_1^1 + \cdots = A_2^0 + \varepsilon A_2^1 + \cdots , \tag{I5}$$

$$\frac{\partial}{\partial n}(A_1^0 + \varepsilon A_1^1 + \cdots) = \frac{\partial}{\partial n}(A_2^0 + \varepsilon A_2^1 + \cdots). \tag{I6}$$

Приравнивая в (I0)-(I6) члены, не содержащие "ε", получим задачу для нулевого приближения в виде

$$\Delta A_0^0 = -I\mu_0 \delta(z-h)\left[\delta(x-x_0) - \delta(x-x_1)\right], \tag{I7}$$

$$\Delta A_1^0 + k_1^2 A_1^0 = 0, \tag{I8}$$

$$\Delta A_2^0 + k_1^2 A_2^0 = 0, \tag{I9}$$

при $z=0$:

$$A_0^0 = A_1^0, \quad \frac{\partial A_0^0}{\partial z} = \frac{\partial A_1^0}{\partial z} \tag{20}$$

Решая задачу (I7)-(20), получим

$$A_0^0(x,z) = -\frac{I\mu_0}{4\pi}\ln\frac{(z+h)^2+(x-x_1)^2}{(z+h)^2+(x-x_0)^2} +$$

$$+\frac{I\mu_0}{\pi}\int_0^\infty \frac{e^{-\lambda(z+h)}}{\lambda+\sqrt{\lambda^2-k_1^2}}\left[\cos\lambda(x-x_0)-\cos\lambda(x-x_1)\right]d\lambda, \quad (21)$$

$$A_1^0(x,z) = \frac{I\mu_0}{\pi}\int_0^\infty \frac{e^{-\xi h+z\sqrt{\xi^2-k_1^2}}}{\xi+\sqrt{\xi^2-k_1^2}}\left[\cos\xi(x-x_0)-\cos\xi(x-x_1)\right]d\xi, \quad (22)$$

$$A_2^0(x,z) = A_1^0(x,z).$$

Приравнивая в (I0)-(I6) коэффициенты при ε, получим задачу для первого приближения решения, т.е. для A_0^1, A_1^1, A_2^1 в виде

$$\Delta A_0^1 = 0, \quad z>0, \quad (23)$$

$$\Delta A_1^1 + k_1^2 A_1^1 = 0, \quad z<0, \quad z\notin\mathcal{D}, \quad (24)$$

$$\Delta A_2^1 + k_1^2 A_2^1 = -k_1^2 A_2^0 = -k_1^2 A_1^0, \quad z\in\mathcal{D} \quad (25)$$

Уравнения (24) и (25) можно объединить в одно уравнение

$$\Delta A_1^1 + k_1^2 A_1^1 = \begin{cases} 0, & z<0, \ z\notin\mathcal{D}, \\ -k_1^2 A_1^0, & z\in\mathcal{D}. \end{cases} \quad (26)$$

Граничные условия следующие:

при $z=0$:

$$A_0^1 = A_1^1, \quad \frac{\partial A_0^1}{\partial z} = \frac{\partial A_1^1}{\partial z}, \quad (27)$$

$$A_0^1, A_1^1 \to 0 \text{ при } \sqrt{x^2+z^2}\to\infty \quad (28)$$

Отметим, что граничные условия (I5) и (I6) не ставятся, т.к. они для уравнения (26) выполняются автоматически: если свободный член (первая часть уравнения (26)) терпит конечный скачок на линии L, то этот конечный скачок на L

претерпевает вторая производная по x и по z, а сама функция A_1' и ее нормальная производная $\frac{\partial A_1'}{\partial n}$ - непрерывны на L.

Для решения задачи (23)-(28), функцию $A_1^o(x,z)$, заданную формулой (22), удобно разбить на сумму четной и нечетной по x функций

$$A_1^o(x,z) = A_{1чет}^o + A_{1неч}^o, \tag{29}$$

где

$$A_{1чет}^o = \frac{I\mu_0}{\pi}\int_0^\infty \frac{e^{-\xi h + z\sqrt{\xi^2 - K_1^2}}}{\xi + \sqrt{\xi^2 - K_1^2}} \cos\xi x\left(\cos\xi x_0 - \cos\xi x_1\right) d\xi, \tag{30}$$

$$A_{1неч}^o = \frac{I\mu_0}{\pi}\int_0^\infty \frac{e^{-\xi h + z\sqrt{\xi^2 - K_1^2}}}{\xi + \sqrt{\xi^2 - K_1^2}} \sin\xi x\left(\sin\xi x_0 - \sin\xi x_1\right) d\xi. \tag{31}$$

Решим задачу (23)-(28) отдельно для четного и нечетного случаев. Решение в общем случае будет равно сумме четного и нечетного решений.

Сперва рассмотрим четный случай. Для этого в уравнение (26) вместо A_1 подставим $A_{1чет}^o$. Тогда получим задачу

$$\Delta A_0' = 0, \ z > 0, \tag{32}$$

$$\Delta A_1' + K_1^2 A_1' = \begin{cases} 0, \ z < 0, \ z \notin \mathcal{D}, \\ -K_1^2 A_{1чет}^o, \ z \in \mathcal{D}, \end{cases} \tag{33}$$

при

$$z = 0: \ A_0' = A_1', \ \frac{\partial A_0'}{\partial z} = \frac{\partial A_1'}{\partial z}, \tag{34}$$

$$x = 0: \ \frac{\partial A_0'}{\partial x} = 0, \ \frac{\partial A_1'}{\partial x} = 0,$$

$$A_0', A_1' \to 0 \text{ при } \sqrt{x^2 + z^2} \to \infty \tag{35}$$

Задачу (32)-(35) решаем косинус - преобразованием Фурье. Введем обозначения

$$A_i^{1c}(\lambda,z)=\sqrt{\frac{2}{\pi}}\int_0^\infty A_i^1(x,z)\cos\lambda x\,dx,\; i=0;1. \tag{36}$$

После применения косинус - преобразования Фурье к задаче (32)-(35) получим

$$\frac{d^2A_0^{1c}}{dz^2}-\lambda^2A_0^{1c}=0,\; z>0, \tag{37}$$

$$\frac{d^2A_1^{1c}}{dz^2}-(\lambda^2-K_1^2)A_1^{1c}=\begin{cases}0, & z\notin\mathcal{D},\\ -K_1^2\sqrt{\frac{2}{\pi}}\int_0^p A^0_{1чет}(x,z)\cos\lambda x\,dx, & z\in\mathcal{D},\end{cases} \tag{38}$$

при $z=0$: $A_0^{1c}=A_1^{1c},\; \frac{dA_0^{1c}}{dz}=\frac{dA_1^{1c}}{dz},$ (39)

$A_0^{1c}\to 0$, если $z\to\infty$, $A_1^{1c}\to 0$, если $z\to-\infty$. (40)

Решая эту задачу, найдем A_0^{1c} в виде

$$A_0^{1c}=\frac{e^{-\lambda z}}{\lambda+q}\int_0^\infty B(\xi,\lambda)(q_1-q)\left[e^{-(s+z)(q_1+q)}-e^{-s(q_1+q)}\right]d\xi, \tag{41}$$

где

$$q=\sqrt{\lambda^2-K_1^2},\quad q_1=\sqrt{\xi^2-K_1^2},$$

$$B(\xi,\lambda)=\frac{\sqrt{2}\,K_1^2}{\pi\sqrt{\pi}}\frac{e^{-\xi h}(\cos\xi x_0-\cos\xi x_1)}{(\xi+q_1)(\xi^2-\lambda^2)^2}\times$$
$$\times(\lambda\cos\xi p\cdot\sin\lambda p-\xi\sin\xi p\cdot\cos\lambda p). \tag{42}$$

Применяя обратное косинус-преобразование Фурье, получим

$$A^1_{0чт}(x,z)=\sqrt{\frac{2}{\pi}}\int_0^\infty A_0^{1c}\cos\lambda x\,d\lambda, \tag{43}$$

где A_0^{1c} определяется формулой (4I).

В нечетном случае также надо решить задачу (32)-(35), только в правой части уравнения (33) вместо $A^0_{1чет}$ ставится $A^{0}_{1нег}$ по формуле (38). Применяя к полученной задаче синус-преобразование Фурье, получим ее решение в виде:

$$A'_{0нег}(x,z)=\sqrt{\tfrac{2}{\pi}}\int_0^\infty A_0^{1s}\sin\lambda x\,d\lambda, \tag{44}$$

где

$$A_0^{1s}=\frac{e^{-\lambda z}}{\lambda+q}\int_0^\infty A(\xi,\lambda)(q_1-q)\left[e^{-(s+z)(q+q_1)}-e^{-s(q+q_1)}\right]d\xi,$$

$$A(\xi,\lambda)=\frac{\sqrt{2}\,K_1^2}{\pi\sqrt{\pi}}\frac{e^{-\xi h}(\sin\xi x_0-\sin\xi x_1)}{(\xi+q_1)(\xi^2-\lambda^2)^2}(\lambda\sin\xi p\cos\lambda p-\xi\cos\xi p\sin\lambda p).$$

Полный ответ для $A_0(x_0,h)$ следующий:

$$A_0(x_0,h)=-\frac{1}{4\pi}I\mu_0\ln\frac{4h^2+d^2}{4h^2}+\frac{I\mu_0}{\pi}\int_0^\infty\frac{e^{-2\lambda h}}{\lambda+q}\times$$

$$\times(1-\cos d\lambda)d\lambda+\Sigma\left[A'_{0чет}(x_0,h)+A'_{0нег}(x_0,h)\right], \tag{45}$$

где $d=x_1-x_0$,

$$A'_{0чет}(x_0,h)=-\frac{2K_1^2}{\pi^2}I\mu_0\int_0^\infty\frac{e^{-\lambda h}\cos\lambda x_0}{\lambda+q}d\lambda\int_0^\infty\frac{e^{-\xi h}(\cos\xi x_0-\cos\xi x_1)}{\xi+q_1}\times$$

$$\times\frac{e^{-(s+z)(q+q_1)}-e^{-s(q+q_1)}}{q+q_1}\cdot\frac{\xi\sin\xi p\cos\lambda p-\lambda\cos\xi p\cdot\sin\lambda p}{\xi^2-\lambda^2}d\xi, \tag{46}$$

$$A'_{0нег}(x_0,h)=-\frac{2K_1^2}{\pi^2}I\mu_0\int_0^\infty\frac{e^{-\lambda h}\sin\lambda x_0}{\lambda+q}d\lambda\int_0^\infty\frac{e^{-\xi h}(\sin\xi x_0-\sin\xi x_1)}{\xi+q_1}\times$$

$$\times\frac{e^{-(s+z)(q+q_1)}-e^{-s(q+q_1)}}{q+q_1}\cdot\frac{\lambda\sin\xi p\cos\lambda p-\xi\cos\xi p\cdot\sin\lambda p}{\xi^2-\lambda^2}d\xi. \tag{47}$$

Перейдем к безразмерным величинам, положив

$$\bar{x}_0=x_0/d,\ \bar{x}_1=x_1/d=\bar{x}_0+1,\ \beta=d\sqrt{\omega\sigma\mu_0},$$

$$\alpha=2h/d,\ \lambda=\beta y/d,\ \xi=\beta x/d,\ d=x_1-x_0.$$

Тогда формулы (45)-(47) примут вид (в дальнейшем черта над x_0 опущена):

$$A_0\left(x_0,\frac{\alpha}{2}\right)=-\frac{1}{4\pi}I\mu_0\ln\left(1+\frac{1}{\alpha^2}\right)+$$

$$+\frac{I\mu_0}{\pi}\int_0^\infty\frac{e^{-\alpha\beta y}(1-\cos\beta y)}{y+\sqrt{y^2+j}}dy+\varepsilon\left[A^1_{0\text{чт}}\left(x_0,\frac{\alpha}{2}\right)+A^1_{0\text{неч}}\left(x_0,\frac{\alpha}{2}\right)\right],\quad (48)$$

где

$$A^1_{0\text{чет}}\left(x_0,\frac{\alpha}{2}\right)=\frac{2I}{\pi^2}\mu_0 j\int_0^\infty\frac{e^{-\frac{\alpha\beta y}{2}}\cos\beta y x_0}{y+y_1}dy\int_0^\infty\frac{e^{-\frac{\alpha\beta x}{2}}}{x+x_1}\left[\cos\beta x_0 x-\right.$$

$$\left.-\cos\beta x(x_0+1)\right]\left[e^{-\beta(s+r)(x_1+y_1)}-e^{-\beta s(x_1+y_1)}\right]\times$$

$$\times\frac{x\sin(\beta xp)\cos(\beta yp)-y\cos(\beta xp)\sin(\beta yp)}{(x_1+y_1)(x^2-y^2)}dx,$$

$$A^1_{0\text{неч}}\left(x_0,\frac{\alpha}{2}\right)=\frac{2I}{\pi^2}\mu_0 j\int_0^\infty\frac{e^{-\frac{\alpha\beta y}{2}}\sin\beta y x_0}{y+y_1}dy\int_0^\infty\frac{e^{-\frac{\alpha\beta x}{2}}}{x+x_1}\left[\sin\beta x x_0-\right.$$

$$\left.-\sin\beta x(x_0+1)\right]\left[e^{-\beta(s+r)(x_1+y_1)}-e^{-\beta s(x_1+y_1)}\right]\times$$

$$\times\frac{y\sin(\beta xp)\cos(\beta yp)-x\cos(\beta xp)\sin(\beta yp)}{(x_1+y_1)(x^2-y^2)}dx;$$

$$x_1=\sqrt{x^2+j},\quad y_1=\sqrt{y^2+j}.$$

На ЭВМ вычисляется величина

$$|Z_l|=\frac{\pi^2}{2I\mu_0}\left|A^1_{0\text{чет}}\left(x_0,\frac{\alpha}{2}\right)+A^1_{0\text{неч}}\left(x_0,\frac{\alpha}{2}\right)\right|,$$

которая может быть определена экспериментально. Результаты вычисления при различных значениях параметров приведены на рис. I. Как видно из рисунка, наблюдается связь между максимумом величины $|Z_l|$ (который тем резче, чем меньше безразмерная величина зазора α) и полушириной p дефекта: во всех вариантах счета значение $x_{0\,max}$ на 0,6 меньше величи-

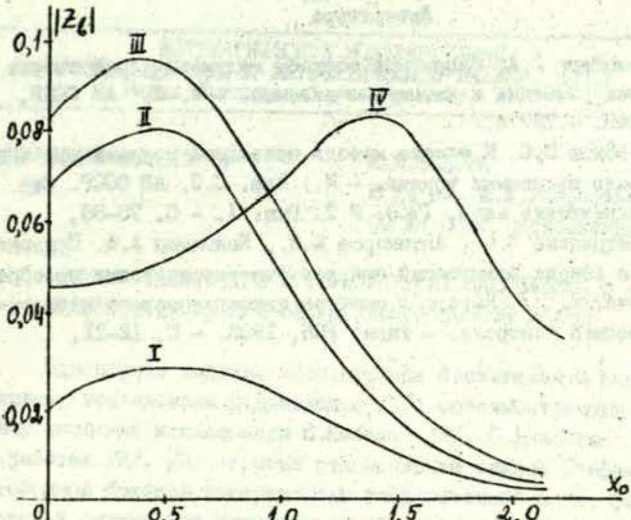


Рис. I. Зависимость модуля $|Z_b|$ от x_o при различных значениях параметров:

I α =0,5; β =I; s =0,55; τ =0,05; ρ =I,0
П α =0,I; β =I; s =0,55; τ =0,05; ρ =I,0
Ш α =0,I; β =2; s =0,55; τ =0,05; ρ =I,0
IУ α =0,I; β =I; s =0,55; τ =0,05; ρ =2,0

ны ρ . Последнее обстоятельство является важным для расшифровки сигналов в задачах дефектоскопии.

Литература

1. Гринберг Г.А. Избранные вопросы математической теории электрических и магнитных явлений. - М.-Л.: АН СССР, 1948. - 727 с.
2. Соболев В.С. К теории метода накладной катушки при контроле вихревыми токами. - М.: Изв. С.О. АН СССР. Сер. Технические науи, 1963. № 2. Вып. 1. - С. 78-88.
3. Фастрицкий В.С., Антимиров М.Я., Колышкин А.А. Применение метода возмущений при расчете вихретоковых преобразований. // Методы и приборы автоматического неразрушающего контроля. - Рига: РПИ, 1983. - С. 12-21.

МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ
ПРИКЛАДНЫЕ ЗАДАЧИ МАТЕМАТИЧЕСКОЙ ФИЗИКИ, вып.I
Рига: Латвийский университет, 1990

УДК 519.6:539.319

И.В.БЕЛОВА
ИГиЛ им. М.А.Лаврентьева
СО АН СССР, Новосибирск

РАСЧЕТ ТЕМПЕРАТУРЫ И ТЕРМОУПРУГИХ НАПРЯЖЕНИЙ В МОНОКРИСТАЛЛАХ ПРИ БЕСТИГЕЛЬНОЙ ЗОННОЙ ПЛАВКЕ

Одномерная задача, моделирующая бестигельную зонную плавку, исследована Д.Дональдом /I/; осесимметричную задачу численно исследовали Н.Кобаяши /2/, Б.Анисютин /3/. В работах /2/, /3/ изучена стационарная задача Стефана со свободной боковой поверхностью расплавленной зоны, форма которой отлична от цилиндрической, и получены зависимости размеров проплавленной зоны от мощности нагревателя. Установлено, что температурный режим и вид границы раздела фаз влияет на распределение напряжений в кристалле, которое, в свою очередь, существенно сказывается на формировании структуры монокристалла. Возникающие напряжения влияют на образование дислокаций и их размножение. Величина термоупругих напряжений служит основой для определения безопасного режима охлаждения, для анализа условий образования дислокаций и для оценки плотности дислокаций.

Для монокристалла кубической симметрии с осью z, ориентированной в кристаллографическом направлении [III], осредненное по угловой переменной среднеквадратичное сдвиговое напряжение в плоскостях скольжения можно рассчитать по формуле /4/:

$$\tau = \frac{1}{3\sqrt{3}}\sqrt{2(\sigma_r-\sigma_\varphi)^2+\frac{4}{3}(\sigma_r-\sigma_\varphi)(\sigma_z-\sigma_r)+\frac{29}{6}\sigma_{rz}^2}, \quad (I)$$

где σ_r, σ_φ, σ_z, σ_{rz} – термоупругое напряжение в кристалле.

Использование формул для осредненных напряжений позволяет рассматривать кристалл как изотропное тело. Если σ вычислено, то плотность дислокаций в областях, где выполнено условие

$$\tau \geq \tau_{кр}, \tag{2}$$

можно оценить по формулам, приведенным в работах /4/,/5/. Экспериментальные наблюдения для монокристалла кремния дают /6/:

$$\tau_{кр} \approx 130 \ г/мм^2,$$

а также значения коэффициента Пуассона $\nu = 0{,}285$; модуля Юнга $E = 11{,}05 \cdot 10^6 \ г/мм^2$; модуля вектора Бюргерса $b = 2{,}8 \cdot 10^{-7} мм$. В этом случае расчеты термоупругих полей для различных условий выращивания дают оценку возможности пластической деформации и позволяют оценить плотность дислокаций в кристалле.

Расчеты напряжений в кристалле проведены методом конечных элементов. Использовались 8-узловые изопараметрические элементы, что позволяет приближать границу области квадратичными функциям. Предварительно была рассчитана тепловая задача с разбиением всей области, занятой образцом на такие же элементы. Определялась граница раздела фаз и значение температуры в узлах элементов, что являлось входными данными для термоупругой задачи.

Постановка тепловой задачи. Требуется рассчитать поле температур $T(r,z)$ и форму поверхности жидкой зоны в осесимметричном образце длины L в условиях невесомости. Нагреватель расположен в центральной части образца и мощность теплового потока q считается равномерно распределенной по длине l.

В каждой из фаз (твердой, где температура T ниже температуры кристаллизации T_* и жидкой, где T выше T_*) выполнено уравнение Лапласа:

$$\Delta T = 0. \tag{3}$$

На оси симметрии $r = 0$ выполнено условие

$$\partial T / \partial r = 0. \qquad (4)$$

На боковой поверхности $r = g(z)$ выполняется условие баланса потоков тепла:

$$\varkappa \, \partial T / \partial n = -\varepsilon (\sigma_0 (T^4 - T_0^4) - q), \qquad (5)$$

где $\varkappa$, ε, σ_0 - коэффициентв теплопроводности, черноты и Больцмана соответственно, T_0 - температура внешней среды, q - тепловой поток от нагревателя, $\vec{n}$ - единичная внешняя нормаль к боковой поверхности.

На границе раздела фаз температура равна температуре кристаллизации

$$T(r, z) = T_* \qquad (6)$$

и выполнено условие Стефана, которое в стационарном случае принимает вид

$$[\varkappa \, \partial T / \partial \ell_1] = 0, \qquad (7)$$

где ℓ_1 - единичная нормаль к поверхности фазового перехода, а квадратичные скобки обозначают, что берется поток тепла при переходе через поверхность разрыва. Коэффициент теплопроводности $\varkappa$ предполагается кусочно-постоянной функцией температуры:

$$\varkappa(T) = \begin{cases} \varkappa_s, & T < T_* \\ \varkappa_\ell, & T > T_* \end{cases} \qquad (8)$$

Чтобы задать граничные условия на торцах рассмотрим, приведенное в /1/ решение для задачи в одномерной постановке. Для температуры $\bar{T}(z)$ получено следующее выражение (начало координат совмещено с межфазной границей):

$$\bar{T}(z) = T_* / (1 + z/\lambda_0)^{2/3},$$

где

$$\lambda_0 = \left(\frac{5 \varkappa R_0}{9 \varepsilon \sigma_0 T_*^3} \right)^{1/2}, \qquad (9)$$

R_0 - радиус заготовки. Из этого выражения можно вычислить значение температуры на достаточно удаленном от границы раздела фаз торце. Запишем полученные условия в следующем виде:

$$T(r, \pm L/2) = \bar{T}(L/2). \tag{10}$$

Чтобы численно решить задачу (3)-(7), (10), введем новую зависимую переменную

$$U(T) = \frac{1}{æ_s T_*} \int_{T_*}^{T} æ(T)\, dT \tag{11}$$

и сделаем замену независимых переменных $\bar{r} = \frac{r}{R_0}$; $\bar{z} = \frac{z}{R_0}$. В дальнейшем черточки опускаем. Тогда граница раздела фаз определяется из условия

$$U(r, z) = 0. \tag{12}$$

Условие Стефана в такой постановке эквивалентно требованию непрерывности первых производных функции U, что всегда выполнено для решения уравнения Лапласа.

Для U в нашем случае имеем выражение

$$U(T) = \frac{1}{\alpha_*(T)} \left(T/T_* - 1\right), \tag{13}$$

где

$$\alpha_*(T) = \begin{cases} æ_s / æ_\ell, & T > T_* \\ 1, & T < T_* \end{cases}.$$

Задачу (3)-(7), (10) перепишем в новых переменных

$$\Delta U = 0 \tag{14}$$

во всей области образца. Причем $r = 0$ имеем

$$\partial U / \partial r = 0. \tag{15}$$

При $r = g(z)/R_0$:

$$æ_s\, \partial U/\partial n = -\frac{\varepsilon R_0}{T_*} \left\{ \sigma_0 \left((T_* + \alpha_* T_*)^4 - T_0^4 \right) - q \right\}. \tag{16}$$

При $z = \pm L/2$ имеем:

$$U = \bar{T}(L/2)/T_* - 1. \tag{17}$$

Для расчетов перепишем условие (16) в следующем виде (T_0 можно положить равным нулю /3/):

$$æ_s \frac{\partial U}{\partial n} = -h(U)(1+U) + \frac{\varepsilon R_0}{T_*} q , \tag{18}$$

где

$$h(U) = \varepsilon \sigma_0 R_0 T_*^3 (1+\alpha_* U)^4 / (1+U) .$$

Форма боковой поверхности жидкой зоны определяется из решения обыкновенного дифференциального уравнения второго порядка

$$\frac{G''}{(1+G'^2)^{3/2}} - \frac{1}{G(1+G'^2)^{1/2}} + P^0 = 0 . \tag{19}$$

Уравнение записано в безразмерных переменных $\bar{z} = z \cdot R_0 / \ell_z$ и обозначено $G = g(\bar{z})/\ell_z$, ℓ_z - половина длины расплавленной зоны, P^0 - константа, определяемая в ходе решения уравнения с граничными условиями

$$\frac{G'}{(1+G'^2)^{1/2}} = \cos\alpha , \qquad \bar{z} = +1 ;$$

$$G = R_0/\ell_z , \qquad \bar{z} = \pm 1 . \tag{20}$$

Домножим (19) на GG' и проинтегрируем по $\bar{z}$. Получим:

$$\frac{2G}{(1+G'^2)^{1/2}} - G^2 P^0 = C . \tag{21}$$

Здесь C константа интегрирования. Теперь задача решается методом последовательных приближений. Уравнение (21) представим в виде:

$$\frac{2G_{i+1}}{(1+G_i'^2)^{1/2}} - G_{i+1}^2 P^0 = C . \tag{22}$$

Для нулевого приближения принимаются следующие значения:

$$G_0 = \frac{1}{2} \operatorname{ctg}\alpha \cdot (z^2 - 1) + \frac{R_0}{\ell_z} . \tag{23}$$

В нашем случае (при $\ell_z \leqslant 1{,}2\,см$, $R_0 = 0{,}75\,см$, $\alpha = \frac{\pi}{2} \pm 0{,}2$) этот итерационный процесс достаточно быстро сходится.

Счет тепловой задачи проводится в такой последовательности. Сначала жидкая зона задается с цилиндрической боковой поверхностью. По найденному полю температур и положению границы раздела фаз определяется длина боковой поверхности расплава. Для полученной величины ℓ_z рассчитывается форма боковой поверхности. Затем изменяется разбиение на конечные элементы в предполагаемой зоне расплава, чтобы учесть форму свободной поверхности, и проводится новый расчет температурного поля. Для небольшой мощности нагревателя ($P = 2\pi \ell q R_0 \approx 1{,}1\,кВт$) необходимо было провести 3-4 таким образом построенных уточнения решения. Для более мощного потока тепла хватало двух уточнений. При этом сама форма фронта по сравнению с первой итерацией изменялась в точке $r = 0$ на 5-10%. Результаты расчета температуры и формы фронта представлены на рис. I,2. На рис. I. изображены фронты кристаллизации соответственно для значений мощности нагревателя: I- $P = 1{,}15\,кВт$, 2- $P = 1{,}3\,кВт$, 3- $P = 1{,}6\,кВт$ (боковая поверхность расплава цилиндрическая). На рис.2 . изображена форма фронта кристаллизации при мощности нагревателя $P = 1{,}23\,кВт$ и соответственно значениях α : I- $\alpha = \frac{\pi}{2} + 0{,}2$, 2- $\alpha = \frac{\pi}{2}$, 3- $\alpha = \frac{\pi}{2} - 0{,}3$.

Для расчета напряжений разбиение области на конечные элементы изменяется с учетом полученной границы раздела фаз. Соотношение между деформациями и перемещениями имеют вид:

$$\varepsilon_r = \frac{\partial u}{\partial r};\ \varepsilon_\varphi = \frac{u}{r};\ \varepsilon_z = \frac{\partial w}{\partial z};\ \varepsilon_{rz} = \frac{1}{2}\left(\frac{\partial u}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial r}\right). \quad (24)$$

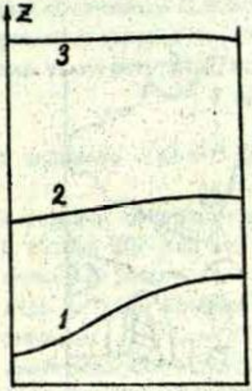


Рис. I.

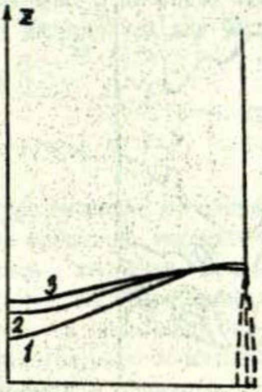


Рис. 2.

Уравнения состояния:

$$\sigma=[E]\varepsilon-[E]\varepsilon^{i} \quad , \tag{25}$$

где введены обозначения σ , ε , ε^{i} - вектор-столбцы следующего вида

$$\sigma=(\sigma_r , \sigma_\varphi , \sigma_z , \sigma_{rz})$$
$$\varepsilon=(\varepsilon_r , \varepsilon_\varphi , \varepsilon_z , \varepsilon_{rz})$$
$$\varepsilon^{i}=(\alpha_t T_* U , \alpha_t T_* U , \alpha_t T_* U , 0) .$$

Для матрицы $[E]$ имеем:

$$[E]=\begin{bmatrix} 1-\nu & \nu & \nu & 0 \\ \nu & 1-\nu & \nu & 0 \\ \nu & \nu & 1-\nu & 0 \\ 0 & 0 & 0 & (1-2\nu)/2 \end{bmatrix} .$$

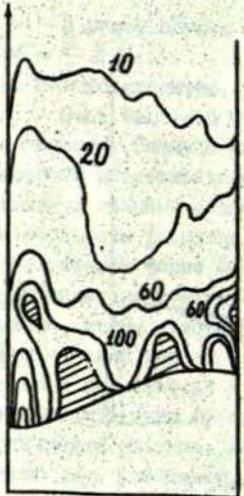


Рис. 3.

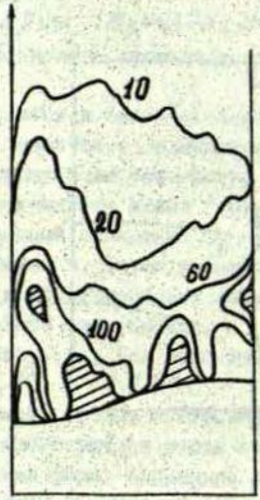


Рис. 4.

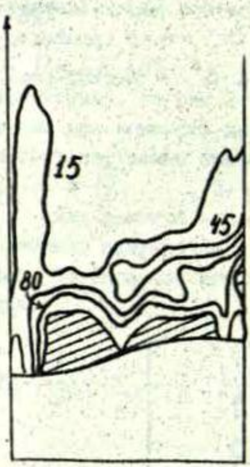


Рис. 5.

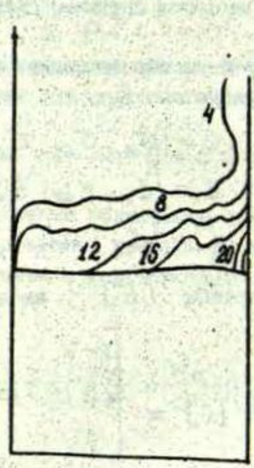


Рис. 6.

Расчеты проведены с помощью вычислительно комплекса /7/, разработанного С.Н.Коробейниковым. В качестве теста была решена задача о термоупругих напряжениях для распределения температуры вида:

$$T = cr^2$$

в цилиндре $(0 \leq r \leq 1; \quad -1 \leq z \leq 1)$; торцы

и боковая поверхность цилиндра свободны от напряжений. В работе /8/ для этой задачи приведено аналитическое решение. В работе /4/ эта задача в качестве тестовой решалась методом конечных разностей. Из сравнения полученных значений σ_r и σ_φ в расчетных точках с аналитическим решением получается, что точность метода конечных элементов одного порядка с точностью конечно - разностного метода.

Результаты основной задачи приведены на рис.3-6. Значения параметров соответствуют кремнию:

$$\varkappa_l = 50\ Вт/м\cdot к; \quad \varkappa_p = 29\ Вт/м\cdot к; \quad T_* = 1700\,^\circ K;$$

$$\varepsilon = 0,46; \quad T(r, \pm L/2) = 800\,^\circ K.$$

На рис.3-5 изображены изолинии τ при мощности $P = 1,23\ кВт$ и значениям угла α : рис.3 - $\alpha = \frac{\pi}{2} + 0,2$; рис. 4 - $\alpha = \frac{\pi}{2}$; рис.5 - $\alpha = \frac{\pi}{2} - 0,2$. Заштрихованы области, где $\tau \geq \tau_{кр}$. На рис.6 изображены изолинии τ при мощности $P = 1,6\ кВт$. Предельное значение $\tau_{кр}$ не достигается.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Дональд Д.К. Тепловой режим в условиях вакуумной плавки//Приборы для научных исследований. - 1961. - № 7. - С.42-44.
2. Kobayashi N. Power required to form a floating zone and the zone shape//J.Crystal Growth. - 1978. - P.417-424.
3. Анисютин Б.М. Численное исследование тепловой задачи для процесса бестигельной зонной плавки//Задачи гидродинамики и тепломассообмена со свободными границами: Межвуз. сб. науч. тр. - Новосибирск: НГУ, 1987. - С.25-34.
4. Вахрамеев С.С.Расчет термических напряжений, связанных с процессом выращивания монокристаллов из расплава// Численные методы механики сплошной среды. - 1977. - Т.8. - № 5. - С.32-35.
5. Авдонин Н.А., Вахрамеев С.С., Освенский В.Б. Постановка и численное решение термоупругопластической задачи с учетом движения дислокаций в плоскостях скольжения кристаллов, выращиваемых из расплава//Математическое моделирование. Получение монокристаллов и полупроводниковых структур. - М.:Наука, 1986. - С.158-171.
6. Шаскольская М.П. Акустические кристаллы. - М.:Наука, 1982. - 630с.
7. Коробейников С.Н. Многоцелевая вычислительная программа по решению задач линейной теории упругости//Динамика сплошной среды. - Новосибирск, 1986. - Вып.75. - С.78-89.
8. Коваленко А.Д. Термоупругость. - Киев: Вища школа,1975.

МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ
ПРИКЛАДНЫЕ ЗАДАЧИ МАТЕМАТИЧЕСКОЙ ФИЗИКИ, вып.I
Рига: Латвийский университет, 1990

УДК 537.84 : 536.25

А.В.Боярevич
Институт физики
Латвийской АН

ВОЗНИКНОВЕНИЕ ПРОСТРАНСТВЕННЫХ ОСЦИЛЛИРУЮЩИХ КОНВЕКТИВНЫХ ТЕЧЕНИЙ ПРИ $Pr \ll 1$ В ПРЯМОУГОЛЬНОЙ ПОЛОСТИ С ГОРИЗОНТАЛЬНЫМ ПЕРЕПАДОМ ТЕМПЕРАТУРЫ (ЭКСПЕРИМЕНТ)

Задача о естественной конвекции жидкости с $Pr \ll 1$ в прямоугольной полости с различно подогретыми вертикальными стенками широко исследуется как численно, так и экспериментально. В 1988 году была объявлена международная программа /I/, где такая задача использовалась в качестве теста для сравнения различных численных методик. Задача имеет также и прикладное значение. Например, как модель теплопереноса в процессах кристаллизации металлов и полупроводников из расплава. Эксперименты /2,3,4/ показали, что естественная конвекция переходит к осциллирующему режиму при числах Грасгофа выше критического значения $Gr \geq Gr_{кр}$ ($Gr = g\beta\Delta T H^4/(L\nu^2)$). Также известно, что наложение поперечного магнитного поля подавляет осцилляции конвекции /2,4/. При рассмотрении задачи часто применяется двумерное приближение. Предполагается, что при отношении ширины контейнера к высоте расплава W/H порядка единицы и больше двумерное приближение обосновано на плоскости симметрии $z = 0$ (см. рис.I). Но имеются экспериментальные данные, свидетельствующие о трехмерности естественной конвекции при переходе к осциллирующему режиму /2/.

В работе /2/ показано, что при конвекции жидкого галлия в ячейке с $H/L < 1$ при числе Грасгофа $Gr = g\beta\Delta T H^4/(L\nu^2)$, превышающем критическое значение $Gr_{кр}$, наблюдаются периодические осцилляции температуры. Было показано влия -

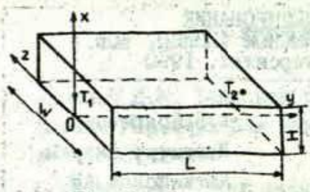


Рис.1. Схема экспериментальной ячейки.

ние геометрических параметров H/L и W/L на значение $Gr_{кр}$, а также установлено, что в осциллирующем режиме конвекции температурное поле существенно неоднородно в поперечном направлении по оси z. Приведенные в работе /2/ диаграммы распределения фазы гармонических колебаний температуры на поверхности расплава неоспоримо свидетельствуют о трехмерном характере осциллирующего режима естественной конвекции. В этой работе также указывается на вероятное изменение моды колебаний в зависимости от геометрического параметра H/L при $W/L = 0{,}43$. Из приведенной зависимости частоты колебаний температуры при $Gr = Gr_{кр}$ следует, что в диапазоне $H/L = 0{,}2 \div 0{,}28$ осциллирующий режим конвекции может иметь вид, по характеру отличный от наблюдаемого при других значениях H/L.

В настоящем экспериментальном исследовании была поставлена задача получить сведения об осциллирующем режиме конвекции жидкости с $Pr \ll 1$ при подогреве сбоку при фиксированном геометрическом параметре $H/L = 0{,}25$, соответствующем объявленному в /1/. Опыты проводились при двух значениях W/L: 0.91 и 1,36. В обоих случаях неизменной оставалась ширина полости $W = 60$ мм. В качестве рабочей жидкости использовался эвтектический сплав $In-Ga-Sn$ с $Pr \approx 0{,}019$ и следующими физическими свойствами: кинематическая вязкость $\nu = 3{,}1\cdot10^{-7}$ м^2/с, коэффициент объемного расширения $\beta = 1{,}4\cdot10^{-4}$ К$^{-1}$ и теплопроводность $\lambda = 31$ Вт·м$^{-1}$К$^{-1}$.

Днище – $x = 0$ и поперечные стенки – $z = W/2$ и $z = -W/2$ – экспериментальной ячейки были выполнены из органического стекла, теплопроводность которого намного меньше теплопроводности расплава $In-Ga-Sn$ – $\lambda_w/\lambda \approx 5\cdot10^{-3}$.

В качестве торцевых стенок полости служили полые медные термоды, через которые прокачивалась термостатированная вода, температура которой для каждого термода поддерживалась с точностью ± 0,05 К. Верхнюю границу расплава при $y = H$ покрывала пленка окисла. В опытах средняя температура расплава $(T_1 + T_2)/2$ выбиралась совпадающей с температурой воздуха в помещении лаборатории. Над верхней границей расплава экспериментальная ячейка закрывалась теплоизолирующей крышкой для уменьшения конвективного теплообмена воздухом. Вся ячейка теплоизолировалась. Таким образом, с достаточной точностью можно считать, что для установившегося стационарного теплопереноса торцевые стенки полости изотермичны, а остальные границы теплоизолированы.

Температура на торцевых стенках контролировалась двумя термопарами, расположенными на поверхности смачиваемой расплавом части плоскостей термодов в точках ($H/2$; 0,0) и ($H/2$; L ; 0), соответственно. Для измерений локальной температуры расплава использовались дифференциальные термопары медь-расплав-константан, принцип работы которых описан в /5/. Диаметр термопар не превышал 0,25 мм. Для регистрации сигналов термопар использовались нановольтметры постоянного тока Р - 341, что позволяло фиксировать локальную температуру расплава с точностью, превышающей 0,01 К.

В опытах основное внимание уделялось определению критического значения числа Грасгофа $Gr_{кр}$, при котором происходит переход к осциллирующему режиму естественной конвекции, и исследованию осциллирующего температурного поля в расплаве. Оказалось, что определение $Gr_{кр}$ затрудняет то, что для развития осциллирующего режима необходимо достаточно большое внешнее возмущение. В отсутствие такого даже при $\approx 2 \cdot Gr_{кр}$ стационарная конвекция наблюдалась в течение более чем одного часа. $Gr_{кр}$ было определено как при повышении перепада температуры $T_2 - T_1 = \Delta T$ с шагом 0,1 К, так и при понижении ΔT до значения $Gr_{кр}$, при котором локальные колебания температуры в расплаве гаснут до нуля. При обоих методах определения $Gr_{кр}$ значения совпадали с точностью шага изменения ΔT. Критические значения существенно отличались от двух реализованных значений геометрического отношения W/L – $Gr_{кр} = 5{,}2 \cdot 10^4$ при $W/L = 0{,}91$ и $Gr_{кр} = 3{,}8 \cdot 10^4$ при $W/L = 1{,}36$. Полученные значения достаточно хорошо согласуются с результатами подобных экспериментов (см.Табл.I), приведенных в /6/.

Таблица I

Расплав	Pr	H/L	W/L	$Gr_{кр}$	Лит-ра
In-Ga-Sn	0,0I9	0,25	0,9I	$(5{,}2 \pm 0{,}8)\ 10^4$	данная работа
In-Ga-Sn	0,0I9	0,25	I,36	$(3{,}8 \pm 0{,}8)\ 10^4$	- " -
In-Ga-Sn	0,0I9	0,25	I,36	$(3{,}7 \pm 0{,}5)\ 10^4$	/3/
Hg	0,026	0,25	0,95	$3{,}65\ 10^4$	/6/
Ga	0,02	0,2I	0,42	$2{,}5\ 10^4$	/2/
Ga	0,02	0,29	0,43	$7{,}0\ 19^4$	/2/

В установившемся осциллирующем режиме естественной конвекции в расплаве наблюдались строго периодические колебания локальной температуры расплава. Период колебаний температуры во всех точках объема одинаков, но амплитуда и форма сигналов температуры варьируются в пространстве (см. рис.2). Анализ полученных записей колебательных составляющих локальной температуры в расплаве показал, что в любой точке объема расплава колебания температуры имеют две гармоники – f и $2f$. Частоте f соответствует основной

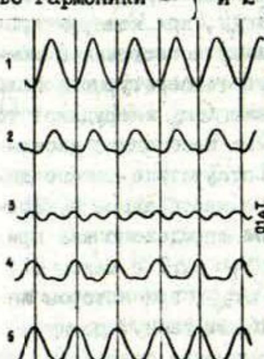


Рис.2. Синхронизированные диаграммы переменной составляющей температуры в пяти точках поперечного сечения ячейки $x = H$ и $y = 0{,}5L$: I) $z = 0$, 2) $z = 0{,}125W$, 3) $z = 0{,}25W$, 4) $z = 0{,}375W$, 5) $z = 0{,}48W$.

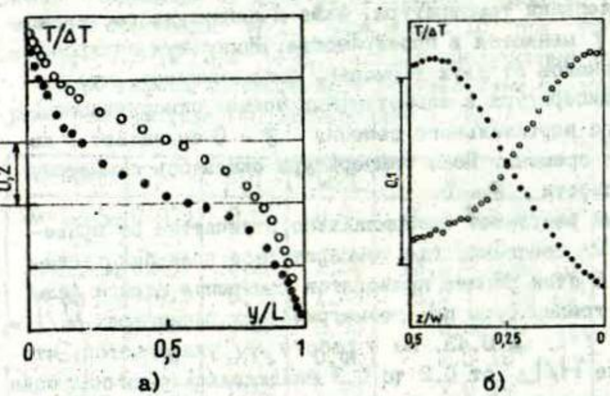
период колебаний температуры. Фаза и амплитуда составляющих f и $2f$ меняются в пространстве. Используя синхронную запись сигналов от двух термопар, было показано, что локальная температура в симметричных точках относительно продольного вертикального сечения $Z = 0$ совпадает в любой момент времени. Поле температуры оказалось симметричным к плоскости $Z = 0$.

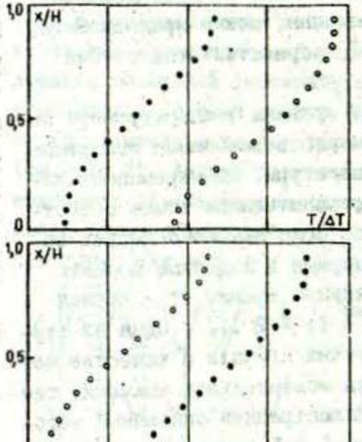
Данный результат принципиально отличается от приведенных в /2/ сведений, где температурное поле было асимметрично. В этой работе приводятся измерения сдвига фазы колебаний температуры при геометрических параметрах $H/L = 0{,}37$ и $W/L = 0{,}43$. Но в работе /2/ указывается, что в диапазоне H/L от 0,2 до 0,3 наблюдалась отличная мода колебаний температуры, которая детально не исследовалась. Хотя имеющиеся данные и недостаточны, можно предположить, что в названном диапазоне H/L осуществляется особая форма колебательной конвекции.

Используя периодичность во времени температурного поля в расплаве при $Gr \geqslant Gr_{кр}$ оказалось возможным измерение моментальных распределений температуры. Одновременное измерение температуры в ряде пространственных точек с соответствующим количеством термопар было заменено последовательным измерением двумя термопарами в подобные моменты времени $(t + \tau n)$, где t - текущее время, τ - период колебаний температуры и $n = 0 \pm 1; \pm 2 \ldots$. Одна из термопар с фиксированными координатами служила в качестве метки времени, а другая фиксировала моментальное значение температуры в исследуемой точке. Иллюстрацией описанной методики служит рис.2, где диаграммы I и 5 записаны синхронно, а 2,3 и 4 - со сдвигом во времени $n\tau$ относительно диаграммы I.

В опытах детально исследовалось периодическое во времени температурное поле в расплаве при $Gr = 2{,}3 \cdot Gr_{кр}$, $H/L = 0{,}25$ и $W/L = 0{,}9I$.

Размах осцилляций температуры в центре полости $(H/2, L/2, 0)$ достигал до 20% от продольного перепада температуры между торцевыми стенками ΔT. Период колебаний тем-





в)

г)

Рис.3. Распределение температуры в два момента со сдвигом во времени, равному половине периода колебаний. ○ – соответствует измерениям в моменты максимума температуры в точке $x = 0,5H$, $y = 0,5L$ и $z = 0$; ● – в моменты минимума температуры.
а) распределения $T/\Delta T$ в продольном направлении при $x = 0,5H$ и $z = 0$;
б) то же в поперечном направлении при $x = 0,94H$ и $y = 0,5L$ и в вертикальном направлении при $y = 0,5L$ и $z = 0$ (в) и $z = 0,48W$ (г).

пературы в этом режиме $\tau = (32{,}5 \pm 0{,}5)$с.

На рис.3 показаны моментальные распределения температуры в два момента периода τ колебаний температуры - кружочками показаны значения температуры в момент, когда в центре расплава ($H/2$, $L/2$, 0) наблюдается максимум температуры, а точками - минимум. На рис.3 а) показаны распределения температуры в продольном сечении $x = H/2$ и $z = 0$. Колебания в точке $y = L/2$ в этом сечении практически совпадают по форме с показанными на диаграмме 5 - рис.2. Локальные колебания температуры в данном сечении с приближением к термодам изменяются таким образом, что фазы частоты f и $2f$ сдвигаются вместе приблизительно на четверть периода и амплитуда частоты $2f$ растет относительно амплитуды частоты f. Здесь необходимо отметить, что на поверхности медных торцевых стенок размах колебаний температуры не достигал нулевого значения, что связано с конечной толщиной медной стенки термодов, разделяющей расплав и термостатированную воду, и высокой температуропроводностью меди. Отсюда следует, что в эксперименте не выполнялось строго условие изотермичности торцевых стенок.

Наиболее интересную информацию несут поперечные распределения температуры - рис.3 б) - при $y = L/2$. Моментальное значение поперечного перепада температуры, в среднем по времени близкое к нулю, достигает $\pm$ 0,I ΔT. На рис.2 показаны синхронные записи колебательных составляющих температуры в пяти точках поперечного сечения, соответствующих распределениям температуры на рис.3 б).

На рис.3 в),г) показаны моментальные распределения по высоте в вертикальной плоскости $y = L/2$, включающей поперечное сечение, соответствующее рис.3б. Из них следует, что вертикальный перепад температуры меняется очень мало, и в любой момент периода τ остается положительным. В сечениях $y = L/2$, $z = 0$ и $y = L/2$, $z = 0{,}93 \cdot W/2$ составляющие колебания температуры f и $2f$, незначительно меняют фазу и амплитуду, т.е. колебания синфазны по всей глубине расплава.

Из анализа приведенных данных следует, что в осциллирующем режиме конвекции наряду с продольным теплопереносом от горячего термода к холодному существует также и интенсивный теплоперенос в поперечном направлении. Однако, осредненный во времени теплоперенос в поперечном направлении близок к нулю. Очевидно, что такое периодическое во времени поле температуры в расплаве может существовать лишь при существенно трехмерном характере теплопереноса. Следует, что поставленную в /I/ задачу об исследовании осциллирующего режима естественной конвекции в прямоугольной полости с $H/L = 0{,}25$ и $W/L \geq I$ необходимо обязательно решать в трехмерной постановке.

Так как результаты измерения поля температуры в расплаве не дают достаточно четкой и наглядной картины теплообмена в ячейке, представлялось целесообразным провести изучение движения на поверхности расплава путем визуализации возникающих здесь течений. При этом, безусловно, нарушались граничные условия на границе $y = H$, оговоренные ранее. Механически удалялась основная масса окисла с поверхности расплава. Над поверхностью расплава емкость заполнялась раствором HCl в этиловом спирте до высоты ≈ 2 мм. Это позволяло получать подвижную картину расплава. Такое изменение граничных условий не повлияло на период колебаний температуры в расплаве. При $Gr = 2{,}3\,Gr_{кр}$ период остался прежним - $\tau = (32 \pm 0{,}5)$К. Детальные исследования влияния изменений в граничных условиях на поле температуры не проводились. На рис.4 показана схема течения в два момента, отстоящих по времени на $\tau/2$. Визуализация проводилась мелкими частицами графита, которые лежали

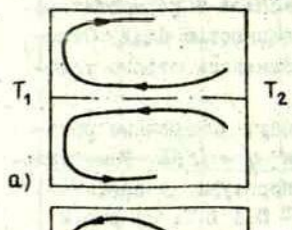


Рис.4. Схемы наблюдаемых картин течения на поверхности в два момента со сдвигом по времени, равному половине периода колебаний.

на подвижной поверхности расплава.

Наблюдаемое на поверхности движение имело явную периодичность, совпадающую с τ. При максимуме скорости течения на плоскости симметрии $z = 0$ при $y \geqslant L/2$ в направлении от горячего к холодному термоду вблизи холодной торцевой стенки наблюдалось симметричное растекание этой центральной струи вдоль торцевой стенки к поперечным и далее вдоль этих стенок в обратном направлении. Максимум температуры у поверхности при $y = L/2$ и $z = 0$ запаздывал в отношении максимума скорости приблизительно на четверть периода. Через четверть периода движение на поверхности почти затихало, а потом развивалась картина движения, показанная на рис.4,в.

Наблюдаемая картина движения на поверхности расплава хорошо коррелирует с данными измерений температуры и проясняет характер конвективного теплопереноса в поперечном направлении. Очевидной становится причина сдвига фазы основной частоты f приблизительно на противоположную между плоскостями $z = 0$ и $z = \pm W/2$. Двойная частота $2f$ связана, вероятно с наличием свободного сдвигового слоя скорости вблизи плоскостей $z = \pm W/4$ вне непосредственной близости торцевых стенок $y = 0$ и $y = L$.

Эксперимент показал, что в развитом колебательном режиме естественной конвекции при $Gr \geqslant Gr_{кр}$ теплоперенос в расплаве трехмерен. Об этом свидетельствует наличие существенных моментальных поперечных компонент градиента температуры $\partial T/\partial z$ и скорости U_z. Отсюда следует, что применение двухмерных численных моделей при исследовании колебательной естественной конвекции при рассмотренных значениях числа Прандтля Pr и геометрического соотношения H/L может не отражать реальных явлений.

Можно предположить, что существенное влияние поперечного размера ячейки - W/L - на величину $Gr_{кр}$ определяется не только вязким трением на поперечных стенках, но и тем, что длина волны в поперечном направлении развивающихся трехмерных возмущений стационарной конвекции может принимать лишь дискретные значения, соответствующие поперечному размеру ячейки.

Подчеркнем, что граничные условия задачи в /I/ практически неосуществимы в физическом эксперименте. Это следует из того, что наряду с упомянутой неопределенностью граничных условий для скорости на верхней границе при развитом колебательном режиме естественной конвекции невозможно также реализовать в опыте используемые в /I/ тепловые граничные условия. В эксперименте наблюдалось, что колебания температуры в расплаве имеют конечную амплитуду и на границах области. Это означает, что условия адиабатичности и изотермичности на соответствующих границах не выполняются. По-видимому, целесообразно при постановке задачи дополнительно включать в рассмотрение область стенок ячейки.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. "Numerical Simulation of Oscillatory Convection in Low Pr Fluids" //Notes Numer. Fluid Dyn., 1990. - V. 27.
2. Hurle D.T.J., Jakeman E., Johnson C.P. Convective temperature oscillations in molten gallium//J. Fluid Mech., 1974. - V. 64. - Part 3. - P. 565-576.
3. Bojarevitsh A.W., Gorbunov L.A., Kozyltev F.V., Lebedev A.P. An experimental stydy of critical regimes of flow in liquid metal layers // 5th EPS Liquid State Conference on Turbulence. Moscow, 1989. Abstracts.-P.298-301
4. Бояревич А.В., Горбунов Л.А. Влияние магнитных полей различной ориентации на термогравитационную конвекцию в электропроводящей жидкости при горизонтальном тепловом потоке//Магнитная гидродинамика, 1988.-№ 2.-С.17-24.
5. von Weissenfluh T. Probes for local velocity and temperature measurements in liquid metal flow. Int. J. Heat Mass Tranf., 1985. V.28. - No.8. - P. 1563-1574.
6. Gill A.E. A theory of thermal oscillations in liquid metals. J. Fluid Mech., 1974.- V.64. - Part 3.-P.577-588.

МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ
ПРИКЛАДНЫЕ ЗАДАЧИ МАТЕМАТИЧЕСКОЙ ФИЗИКИ, вып.1
Рига: Латвийский университет, 1990

УДК 536.2.02

С.И.Быков, А.А.Колышкин, Е.Г.Окулич-Казарин,
Т.Е.Смирнова РТУ, Рига

МАТЕМАТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ ДЛЯ КОМПЛЕКСА НЕСТАЦИОНАРНЫХ МЕТОДОВ ИССЛЕДОВАНИЯ ТЕПЛОПРОВОДНОСТИ ГАЗОВ И ЖИДКОСТЕЙ

Развитие современных технологий немыслимо без глубокого знания физико-химических и, в частности, теплофизических свойств перспективных, технически важных газов и жидкостей. Экспериментальные методы исследования теплофизических свойств веществ являются одним из важнейших источников информации при изучении структуры молекул, процессов переноса, критического состояния вещества и других фундаментальных физических проблем.

В настоящее время среди большого разнообразия методов исследования теплофизических свойств веществ начинают доминировать нестационарные методы, обладающие рядом преимуществ перед традиционными стационарными методами. Среди преимуществ можно отметить: малость и кратковременность возмущений, вносимых в излучаемую среду, что имеет принципиальное значение при исследовании в околокритической области и в электропроводящих средах, быстрота получения информации и возможность одновременного получения данных по комплексу теплофизических свойств, таких как теплопроводность, температуропроводность и теплоемкость, возможность глубокой автоматизации проведения эксперимента и обработки результатов. Различные вопросы, связанные с проблемами экспериментальных измерений, подробно обсуждаются в работах [1]-[4].

Использование быстродействующих микропроцессорных систем позволяет совместить ряд существующих нестационарных методов измерения, таких как метод линейного источника, импульсный метод и других в единый комплексный метод с получением в одном опыте данных о свойствах веществ при различных типах возмущения среды. Такой метод многократно повышает достоверность и информативность получаемого материала. С другой стороны, применение комплексного метода позволяет проводить исследование свойств электропроводящих сред, для которых получение надежных данных традиционными методами затруднено из-за шунтирующего действия исследуемой среды. В связи с этим становится необходимым иметь решение нестационарной задачи теплопроводности при наличии внутренних источников тепловыделения по всему объему изучаемой среды.

В качестве конкретной физической модели выбран метод возмущения тонкого цилиндрического зонда прямоугольным импульсом электрического тока переменной протяженности в электропроводящей среде. Измерение параметров исследуемой среды в эксперименте проводится на различных временных участках возмущающего воздействия и после его окончания.

Рассмотрим цилиндр исследуемой среды радиуса R_2, на оси которого расположена тонкая металлическая нить радиуса R_1. Внутреннее тепловыделение как в слое исследуемого вещества, так и в металлической нити в момент пропускания прямоугольного импульса тока считаем постоянным. Примем следующие основные предположения [1]:

1) теплофизические свойства исследуемой среды и ядра не зависят от температуры,
2) распределение температур в исследуемом слое и нити осесимметрично и не зависит от осевой координаты,
3) поток излучения с поверхности ядра пренебрежимо мал,

4) внешняя граница исследуемого слоя термостатирована,

5) температурный контакт на поверхности раздела сред считаем идеальным, т.е. пренебрегаем температурным скачком на границах.

Математическая постановка задачи с учетом сделанных предположений имеет вид

$$\frac{\partial^2 u_1}{\partial r^2}+\frac{1}{r}\frac{\partial u_1}{\partial r}-a^2\frac{\partial u_1}{\partial \tau}=Q_1\left[1-1(\tau-\tau_0)\right], \quad (I)$$

$$\frac{\partial^2 u_2}{\partial r^2}+\frac{1}{r}\frac{\partial u_2}{\partial r}-\frac{\partial u_2}{\partial \tau}=Q_2\left[1-1(\tau-\tau_0)\right], \quad (2)$$

$$u_2|_{r=1}=0,\ u_1|_{r=R}=u_2|_{r=R},\ K\frac{\partial u_1}{\partial r}\Big|_{r=R}=\frac{\partial u_2}{\partial r}\Big|_{r=R}, \quad (3)$$

$$u_1|_{\tau=0}=0,\ u_2|_{\tau=0}=0 \quad (4)$$

Здесь $a^2=a_2/a_1;\ a_i=\lambda_i/c_i\rho_i,\ i=1,2;\ K=\lambda_1/\lambda_2$, $R=R_1/R_2$, Q_1 и Q_2 - объемная мощность внутренних источников тепла в металлическом цилиндре и газовом слое соответственно, $1(\tau-\tau_0)=\begin{cases}1, & \tau>\tau_0\\ 0, & \tau<\tau_0\end{cases}$ - единичная функция Хевисайда, остальные обозначения общепринятые.

Решение задачи (I)-(4) может быть получено методом разделения переменных. В эксперименте измеряется средняя температура нити в различные моменты времени, поэтому представляет интерес величина

$$\hat{u}_1(\tau)=\frac{1}{\pi R^2}\int_0^{2\pi}d\varphi\int_0^R r\,u_1(r,\tau)\,dr$$

Расчетная формула для $\hat{u}_1(\tau)$, полученная на основании решения (I)-(4), имеет вид

$$\tilde{U}_1(\tau) = B\left[1 - 1(\tau-\tau_0)\right] + \sum_{n=1}^{\infty}\left[A_n e^{-\lambda_n^2 \tau} - A_n e^{-\lambda_n^2(\tau-\tau_0)} 1(\tau-\tau_0)\right], \tag{5}$$

где
$$A_n = \frac{4}{aR}\left[\frac{(Q_1 - Q_2 a^2)}{a^2\lambda_n^4} W_{01}(\lambda_n, \lambda_n R) + \frac{2Q_2}{\pi R \lambda_n^3}\right] J_1(a\lambda_n R) \times$$
$$\times \Big\{ aR J_1(aR\lambda_n) W_{01}(\lambda_n, \lambda_n R) + J_0(aR\lambda_n)\big[W_{11}(\lambda_n, \lambda_n R) + \frac{1}{\lambda_n} W_{01}(\lambda_n, \lambda_n R) + R W_{00}(\lambda_n R, \lambda_n)\big] + Ka\Big[\frac{J_1(aR\lambda_n)}{\lambda_n} - aR J_0(aR\lambda_n)\Big] W_{00}(\lambda_n R, \lambda_n) + Ka J_1(aR\lambda_n)\big[R W_{10}(\lambda_n R, \lambda_n) + W_{01}(\lambda_n R, \lambda_n)\big]\Big\}^{-1},$$

$$W_{mn}(x, y) = J_m(x) Y_n(y) - J_n(y) Y_m(x),$$

λ_n – корни уравнения

$$J_0(aR\lambda_n)\left[J_1(\lambda_n R) Y_0(\lambda_n) - J_0(\lambda_n) Y_1(\lambda_n R)\right] - Ka J_1(aR\lambda_n)\left[J_0(\lambda_n R) Y_0(\lambda_n) - J_0(\lambda_n) Y_0(\lambda_n R)\right] = 0, \tag{6}$$

$$B = -\frac{Q_1 R^2}{8} + \frac{Q_2(R^2-1)}{4} + \frac{R^2}{2}(KQ_1 - Q_2)\ln R$$

Эксперементальное измерение осредненной температуры происходит, как правило, в регулярном режиме [1]. При этом для математической обработки результатов измерений используется первый корень уравнения (6). Корни уравнения (6) являются, вообще говоря, функцией трех параметров: a, K и R. Поскольку в эксперименте ни a, ни K точно неизвестны (имеются лишь грубые оценки), то возникает задача выбора таких значений параметра R, при котр изменение величин a и K практически не оказывает влияния на первый корень уравнения (6). В условиях физического эксперимента радиус нити значительно меньше радиуса цилиндра, заполненного исследуемым веществом, т.е. $R \ll 1$. В связи с этим представляет интерес вопрос об упрощении как исходной модели, так и расчетных формул (5),(6) и границах применимости такого упрощенного подхода. Асимптотический анализ корней уравнения (6) проведен в [1], однако численные расчеты корней (6) при различных значениях K и a в [1] не проводились. Для выбора конкретных значений параметра R, удовлетворяющих сформулированному выше критерию, была проведена серия расчетов на ЭВМ корней уравнения (6). При этом встретились определенные трудности, связанные с тем, что функции $Y_0(\lambda_n R)$ и $Y_1(\lambda_n R)$ неограниченно возрастают по модулю при $R \to 0$. Для преодоления этих трудностей было получено упрощенное уравнение, которое получается из (6) разложением левой части (6) в ряд по степеням R и учетом квадратичных по R слагаемых. Таким образом, в области достаточно малых R уравнение (6) заменяется уравнением

$$J_0(\lambda_n) + R^2\left[\frac{\lambda_n^2}{4}J_0(\lambda_n)(1-2\gamma-a^2+2a^2K\gamma)+\right.$$
$$\left.+\frac{\lambda_n^2\pi}{4}Y_0(\lambda_n)(1-a^2K)\right]+$$
$$+R^2\ln\left(\frac{\lambda_n R}{2}\right)\frac{\lambda_n^2}{2}J_0(\lambda_n)(a^2K^2-1)=0 \tag{7}$$

При проведении расчетов использовалось уравнение (7) в области $R \leq 0.004$ и уравнение (6) для $R > 0.004$. Значения остальных параметров лежали в диапазоне $0.01 \leq a \leq 0.1$, $1000 \leq K \leq 40000$, что соответствует реальным условиям физического эксперимента. Контрольные расчеты первых корней (6) и (7) при $R = 0.005$ показали, что вычисленные корни различаются лишь в третьем знаке после запятой, так что использование (7) вместо (6) в области $R \leq 0.004$ вполне обоснованно. Анализ уравнений (6) и (7) показывает, что при малых R первый корень этих уравнений будет близок к первому корню $\alpha_1 = 2.4048...$ уравнения

$$J_0(\alpha) = 0 \tag{8}$$

Результаты расчетов первых корней уравнений (6) и (7) при указанных значениях параметров K и a приведены в Таблице 1, где указана относительная погрешность, допускаемая при замене корня λ_1 уравнения (6) на корень α_1 уравнения (8). Из таблицы видно, что при $R \leq 0.004$ эта погрешность во всем рассматриваемом диапазоне параметров не превосходит 1,3 %, т.е. в этом случае с достаточной для практики точностью в регулярном режиме можно пренебречь влиянием параметров нити и рассмотреть упрощенную модель процесса.

R	K	$\delta\%$
0.001	10000	0.02
	20000	0.04
	30000	0.04
	40000	0.07
0.002	10000	0.07
	20000	0.14
	30000	0.22
	40000	0.30
0.004	10000	0.30
	20000	0.61
	30000	0.93
	40000	1.26
0.006	10000	0.68
	20000	1.41
	30000	2.19
	40000	3.60
0.008	10000	1.23
	20000	2.61
	30000	4.11
	10000	5.73

Таблица I. Относительная погрешность, допускаемая при замене корня λ_1 уравнения (6) на корень α_1 уравнения (8). Значения a лежат в пределах $0.01 \le a \le 0.1$

Предположим, что в однородном газовом слое радиуса I имеется область $0 \le r \le R$, внутри которой в течение промежутка времени $0 \le \tau \le \tau_0$ выделяются внутренние источники тепла с заданной постоянной плотностью Q. Математическая постановка такой задачи имеет вид

$$\frac{\partial^2 u}{\partial r^2} + \frac{1}{r}\frac{\partial u}{\partial r} - \frac{\partial u}{\partial \tau} = Q(r)\left[1 - 1(\tau - \tau_0)\right], \quad (9)$$

$$u\big|_{r=1} = 0, \quad u\big|_{\tau=0} = 0, \quad (10)$$

где $Q(r) = \begin{cases} Q, & 0 \le r \le R, \\ 0, & R < r < 1 \end{cases}$

Применяя к (9),(10) преобразование Лапласа и усредняя полученное изображение Лапласа для температуры нити по сечению внутреннего цилиндра, получим

$$\bar{u}_{cp}(p) = \frac{Q}{p}\left(1 - e^{-p\tau_0}\right)\left\{-\frac{1}{p} + \frac{2I_1(R\sqrt{p})}{pI_0(\sqrt{p})}\left[I_1(R\sqrt{p})K_0(\sqrt{p}) + K_1(R\sqrt{p})I_0(\sqrt{p})\right]\right\} \quad (11)$$

Как известно [5], оригинал (11) может быть найден двумя способами: либо в виде ряда, быстро сходящегося для больших значений параметра τ, либо в виде формулы, очень удобной для расчетов при малых значениях τ. Для оценки значения τ, начиная с которого в системе устанавливается регулярный режим, необходимо иметь обе расчетные формулы. Отметим, что в зависимости от времени длительности импульса τ_0 возможен регулярный режим как в период $0 \le \tau \le \tau_0$, так и после "отключения" источников тепла. Для получения решения в виде ряда, быстро сходящегося при больших значениях τ, заметим, что особыми точками (11) будут полюсы первого порядка $p = 0$ и $p = -\alpha_n^2$, где α_n – корни уравнения (8). Применение основной теоремы о вычетах дает

$$u_{cp}(\tau) = \left[-\frac{QR^2}{2}\ln R + \frac{Q(R^2-1)}{4}\right]\left[1 - 1(\tau-\tau_0)\right] -$$

$$-2\pi Q \sum_{n=1}^{\infty} \frac{J_1^2(\alpha_n R)\, Y_0(\alpha_n)}{\alpha_n^3 J_1(\alpha_n)}\left[e^{-\alpha_n^2 \tau} - e^{-\alpha_n^2(\tau-\tau_0)}\, 1(\tau-\tau_0)\right]. \quad (12)$$

Для получения решения, удобного для расчетов при малых значениях τ, используем асимптотические разложения функций Бесселя при больших значениях аргумента

$$I_\nu(z) \sim \frac{e^{z}}{\sqrt{2\pi z}}, \quad K_\nu(z) \sim \sqrt{\frac{\pi}{2z}}\, e^{-z} \quad (13)$$

После подстановки (13) в (11) изображение осредненной температуры примет вид

$$\bar{u}_{cp}(p) = Q\left(1 - e^{-p\tau_0}\right)\left(-\frac{1}{p^2} + \frac{1 + e^{-2(1-R)\sqrt{p}}}{Rp^2\sqrt{p}}\right) \quad (14)$$

Применение к (14) обратного преобразования Лапласа дает оригинал $u_{cp}(\tau)$ в виде

$$u_{cp}(\tau) = Q\left[\varphi(\tau) - \varphi(\tau-\tau_0)\, 1(\tau-\tau_0)\right], \quad (15)$$

где $\varphi(\tau) = -\tau + \frac{4\tau\sqrt{\tau}}{3R\sqrt{\pi}}\, e^{-\frac{(1-R)^2}{\tau}} + \frac{1}{3R}\sqrt{\frac{\tau}{\pi}}\, e^{-\frac{(1-R)^2}{\tau}} -$

$$- \frac{2(1-R)}{R}\tau\, \mathrm{erfc}\left(\frac{1-R}{\sqrt{\tau}}\right) - \frac{4(1-R)^3}{3R}\mathrm{erfc}\left(\frac{1-R}{\sqrt{\tau}}\right) +$$

$$+ \frac{4}{3R\sqrt{\pi}}\tau\sqrt{\tau}$$

Формулы (12) и (15) достаточно просты и могут быть использованы для оценки времени τ^*, начиная с которого в системе возникает регулярный режим. Отметим в заключение, что модель с включением внутренних источников тепла в течение конечного промежутка времени позволяет, варьируя параметр τ_0, проводить измерение осредненной температуры нити как до, так и после момента отключения источников тепла. За счет этого можно значительно повысить достоверность получаемых экспериментальных данных.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Горшков Ю.А., Уманский А.С. Измерение теплопроводности газов.-М.:Энергоиздат.1982.-224 с.
2. de Groot,Kestin J., Sookiasian H. Instrument to measure the thermal conductivity of gases//Physica. 1974.-V. 75. P.454 - 482.
3. Sbaibi A., Paranthoen P., Lecordier J.C. Frequency response of fine wires under simultaneous radiative-convective heat transfer//J.Phys. E. 1989.-V.22. P. 14 - 18.
4. Fareleira J.M.N.A., Nieto de Castro C.A. Simultaneous measurement of the thermal conductivity and thermal diffusivity of fluids//High temperatures - High pressures. 1989.-V.21.-P. 363 - 371.
5. Карслоу Г., Егер Д. Теплопроводность твердых тел.-М.: Наука, 1964. 487 с.

МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ
ПРИКЛАДНЫЕ ЗАДАЧИ МАТЕМАТИЧЕСКОЙ ФИЗИКИ, вып.I
Рига: Латвийский университет, 1990

УДК 697.9

В.Н.Варапаев
И.В.Королёв
МИСИ им.В.В.Куйбышева,
Москва

ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ ТУРБУЛЕНТНОЙ СТРУИ СО ВСТРЕЧНЫМ ПОТОКОМ

Развитие турбулентной струи несжимаемой жидкости во встречном потоке рассматривалось экспериментально в /1/-/4/. В /4/ с помощью приближенного интегрального метода и некоторых гипотез получено теоретическое решение осесимметричной задачи. В этих работах рассматривался случай, когда размер встречного потока существенно больше размера щели, из которой вытекает струя.

В настоящей работе проведено численное исследование плоской задачи для умеренных отношений характерных размеров потока и струи. Используется полная система уравнений Рейнольдса для турбулентного движения с замыканием по (κ, ε) модели турбулентности /5/.

1. Рассматривается струя несжимаемой жидкости, вытекающая из щели высоты h и взаимодействующая с равномерным встречным потоком $u = -u_\infty$. Схема течения

приведена на рис. I. Предполагается, что границы $y=\pm H$ являются линиями симметрии и, следовательно, струя является частью многоструйной периодической системы. Определяющими параметрами задачи являются геометрический параметр $a=H/h$, характеризующий стесненность струи, и $g=u_\infty/u_o$, где u_o - средняя скорость струи на выходе из щели. Согласно опытным данным всё течение можно разделить на три области: замкнутая область Ω_1 внутри кривой $y_2(x)$, в которой скорость струи сохраняет первоначальное направление; область взаимодействия струи со встречным потоком Ω_2, расположенная между кривыми $y_2(x)$ и $y_3(x)$; область невозмущенного втречного потока Ω_3, расположенная вне кривой $y_3(x)$. Течение в области Ω_3 считается невозмущенным в том смысле, что в каждом её сечении $x=const$ профиль скорости является равномерным $u=-u_*$, причём $u_* \neq u_\infty$.

Область взаимодействия струи с потоком можно разделить на две зоны /рис.I/. В зоне I струя расширяется и давление в ней изменяется незначительно. В зоне II происходит торможение и разворот струи, статическое давление p в ней сильно изменяется. Описание течения в области II а, следовательно, и общей задачи возможно только в рамках полной системы уравнений Навье-Стокса. Решение в безразмерном виде ищется в области $-x_o \leq x \leq \ell$, $0 \leq y \leq a$, где $\ell = L/h$, L - длина области. При обезразмеривании за характерные скорость и длину приняты u_o и h. Область решения задачи и граничные

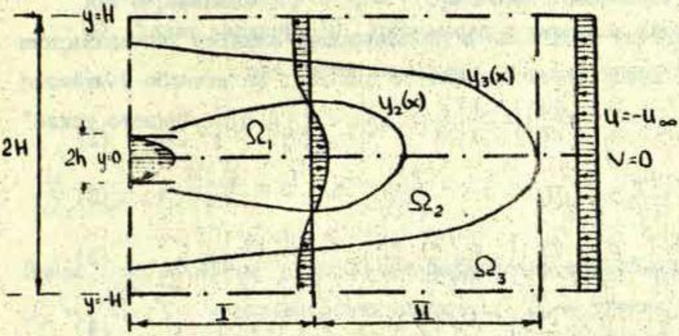


Рис.I. Схема течения для турбулентной струи, развивающейся во встречном потоке

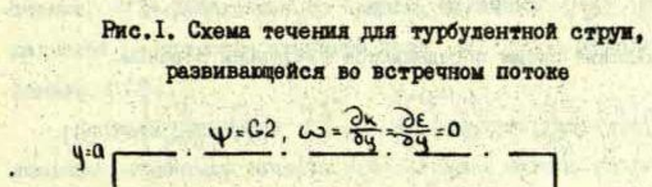


Рис.2. Область решения задачи и граничные условия после введения безразмерных переменных.

условия приведены на рис.2.

2. Численное исследование проводилось на основе (K, ε) модели турбулентности, в которой уравнения движения записаны в переменных ψ /функция тока/, ω /завихренность/. Эти уравнения имеют вид

$$\left[\frac{\partial}{\partial x}\left(\omega\frac{\partial\psi}{\partial y}\right)-\frac{\partial}{\partial y}\left(\omega\frac{\partial\psi}{\partial x}\right)\right]-\frac{\partial}{\partial x}\left[\frac{\partial}{\partial x}(\nu_T\omega)\right]-\frac{\partial}{\partial y}\left[\frac{\partial}{\partial y}(\nu_T\omega)\right]=S_\omega \quad (I)$$

$$\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2}+\frac{\partial^2\psi}{\partial y^2}=-\omega \quad (2)$$

$$\left[\frac{\partial}{\partial x}\left(K\frac{\partial\psi}{\partial y}\right)-\frac{\partial}{\partial y}\left(K\frac{\partial\psi}{\partial x}\right)\right]-\frac{\partial}{\partial x}\left(\frac{\nu_T}{\sigma_K}\frac{\partial K}{\partial x}\right)-\frac{\partial}{\partial y}\left(\frac{\nu_T}{\sigma_K}\frac{\partial K}{\partial y}\right)=S_K \quad (3)$$

$$\left[\frac{\partial}{\partial x}\left(\varepsilon\frac{\partial\psi}{\partial y}\right)-\frac{\partial}{\partial y}\left(\varepsilon\frac{\partial\psi}{\partial x}\right)\right]-\frac{\partial}{\partial x}\left(\frac{\nu_T}{\sigma_\varepsilon}\frac{\partial \varepsilon}{\partial x}\right)-\frac{\partial}{\partial y}\left(\frac{\nu_T}{\sigma_\varepsilon}\frac{\partial \varepsilon}{\partial y}\right)=S_\varepsilon \quad (4)$$

Источниковые члены определяются следующим образом

$$S_\omega=2\left[\frac{\partial u}{\partial y}\frac{\partial^2\nu_T}{\partial x^2}-\frac{\partial v}{\partial x}\frac{\partial^2\nu_T}{\partial y^2}+\left(\frac{\partial v}{\partial y}-\frac{\partial u}{\partial x}\right)\frac{\partial^2\nu_T}{\partial x\partial y}\right] \quad (5)$$

$$S_K=\nu_T\mathcal{F}_K-\varepsilon, \quad S_\varepsilon=C_{\varepsilon 1}\frac{\varepsilon}{K}\nu_T\mathcal{F}_K-C_{\varepsilon 2}\frac{\varepsilon^2}{K} \quad (6)$$

$$\mathcal{F}_K=2\left[\left(\frac{\partial u}{\partial x}\right)^2+\left(\frac{\partial v}{\partial y}\right)^2\right]+\left(\frac{\partial u}{\partial y}+\frac{\partial v}{\partial x}\right)^2 \quad (7)$$

Здесь ν_T - турбулентна: вязкость, определяемая как

$$\nu_T=C_D\frac{K^2}{\varepsilon} \quad (8)$$

а u, v - осредненные продольная и поперечная составляющие скорости

$$u=\frac{\partial\psi}{\partial y}, \quad v=-\frac{\partial\psi}{\partial x} \quad (9)$$

Константы модели равны: $\sigma_k = 1$; $\sigma_\varepsilon = 1,3$; $C_D = 0,09$; $C_{\varepsilon 1} = 1,44$; $C_{\varepsilon 2} = 1,92$.

Для переменных K, ε, ω граничные условия на непроницаемых стенках не задавались, а сносились внутрь расчётной области на один шаг сетки, где использовался "закон стенки"

$$\frac{u}{u_\tau} = \frac{1}{\varkappa} \ln \frac{u_\tau y}{\nu} + A, \quad K = \frac{u_\tau^2}{\sqrt{C_D}}, \quad \varepsilon = \frac{u_\tau^3}{\varkappa y} \qquad (10)$$

Здесь $\varkappa = 0,41$ и $A = 5,36$ -эмпирические константы, $u_\tau = \sqrt{\tau_w / \rho}$ - динамическая скорость, τ_w - трение на стенке, y - расстояние до стенки. Величина u_τ определяется в процессе итераций поля $\psi(x,y)$ с использованием (10).

Система уравнений (1) - (4) решалась гибридным конечно-разностным методом / 6 /. Смысл метода заключается в том, что в зависимости от значения сеточного числа Рейнольдса счёт проводится либо по схеме с центральными разностями (при $Re_c \leq 2$), либо по схеме с разностями "против потока" (при $Re_c > 2$). Использование этой схемы позволяет повысить точность расчёта, так как в отрывных и циркуляционных зонах, где скорости малы, используется аппроксимация второго порядка точности. В то же время схема является консервативной и устойчивой и позволяет, в принципе, проводить расчёты при любых числах Рейнольдса.

При расчёте использовались неравномерные сетки, с измельчением сетки в начальном участке струи и в окрестности границ. Типичные сетки: 28x80, 40x100. Система конечно-разностных уравнений решалась итерационным методом.

3. В расчётах исследовалось влияние параметров a и g на характеристики решения задачи. Рассматривались значения $a = 5; 7{,}5; 10$ и $g = 0{,}05 \div 0{,}6$. Соотношения параметров a и g выбиралось таким образом, чтобы в переменных (a, g) точка лежала в области существования решения. Дело в том, что рассматриваемое течение существует не при всех значениях параметров a и g. Область существования решения была получена путём использования уравнений для расхода, импульса и уравнения Бернулли и некоторых дополнительных предположений о виде профиля скорости в граничных сечениях. Вид этой области приведен на рис.3 область существования решения заштрихована.

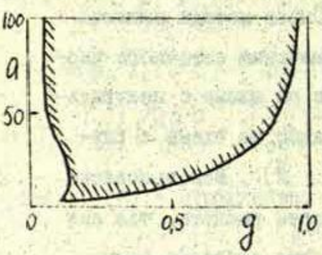


Рис.3. Область существования решения в переменных (a, g)

На рис.4 приведены линии тока для $g = 0{,}2$ и трёх значений $a = 5; 7{,}5; 10$.

С ростом величины a, т.е. с уменьшением стесненности, дальнобойность струи увеличивается и растёт вертикаль-

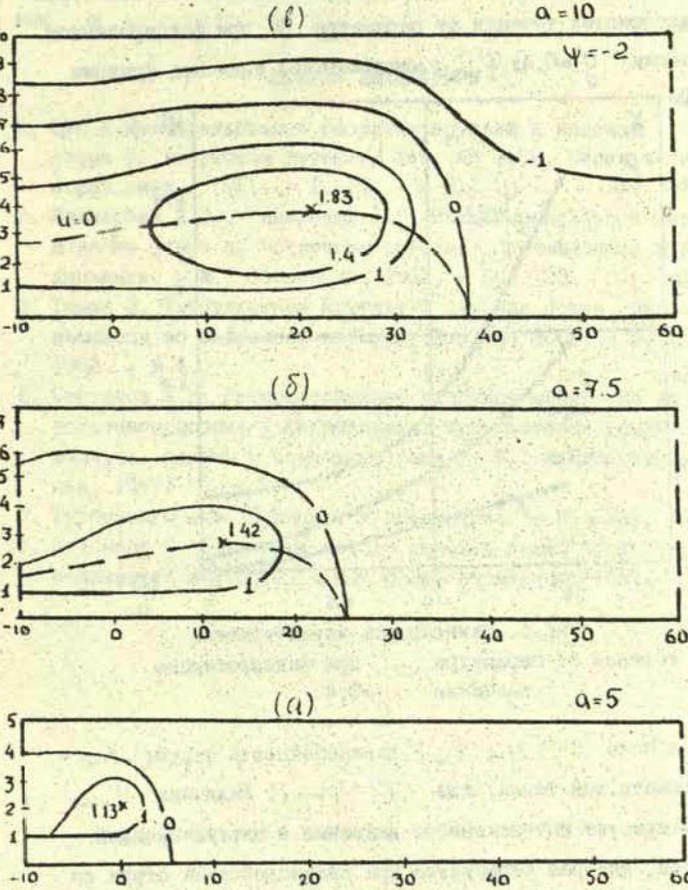


Рис.4. Изолинии функции тока
для g =0,2 и различных значений параметра a
a =5 (а) ; a =7,5 (б) ; a =10 (в)

ный размер области взаимодействия струи с потоком (область Ω_2 на рис.1). На рис.5 приведена зависимость некоторых характеристик течения от параметра a при фиксированном значении g =0,4: ψ_{max} - максимальное значение функции

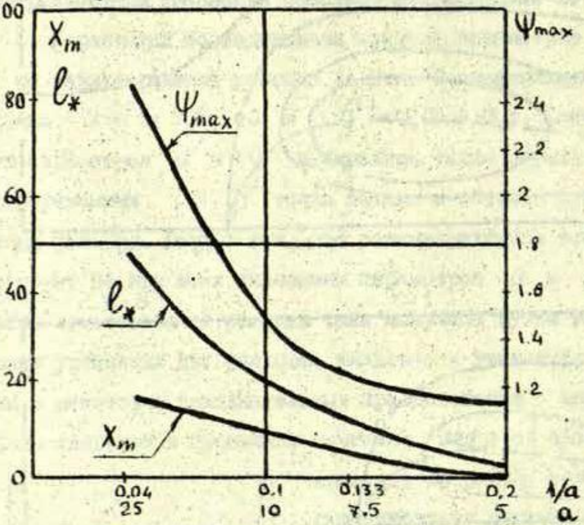


Рис.5. Зависимость характеристик течения от параметра при фиксированном значении =0,4

тока в поле $\psi(x,y)$; l_* - дальнобойность струи; X_m - координата той точки, где $\psi = \psi_{max}$. Величина ψ_{max} характеризует интенсивность движения в циркуляционной области, которая образуется при взаимодействии струи со встречным потоком.

Анализ гидродинамических полей показывает, что в области Ω_3 течение практически является безвихревым течением идеальной жидкости, а в областях Ω_1 и Ω_2 течение нельзя считать изобарическим при умеренных a.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Суй Х.Н. Исследование развития круглой и плоской струи во встречном потоке// Изв. АН ЭССР. Серия техн. и физ.-мат. 1961. - Т. 10. - № 3.
2. Илизарова Л.И., Гиневский А.С. Экспериментальное исследование струи во встречном потоке// Промышленная аэродинамика. - М.: Оборонгиз, 1962. - Вып. 23.
3. Тимма Э. Турбулентная круглая и плоская струи, развивающиеся во встречном потоке// Изв. АН ЭССР. - Т. 11.- 1962. - № 4.
4. Секундов А.Н. Распространение турбулентной струи во встречном потоке// Исследование турбулентных струй воздуха, плазмы и реального газа. - М.: Машиностроение, 1967.
5. Турбулентность. Принципы и применение. - М.: Мир, 1980.
6. Патанкар С. Численные методы решения задач теплообмена и динамики жидкости. - М.: Энергоатомиздат, 1984.

МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ
ПРИКЛАДНЫЕ ЗАДАЧИ МАТЕМАТИЧЕСКОЙ ФИЗИКИ, вып.I
Рига: Латвийский университет, 1990

УДК 519.6:539.379.4

С.С.Вахрамеев,
Н.В.Козельская
ИМИ ЛУ, Рига
В.И.Биберин, В.Б.Освенский
ГИРЕДМЕТ, Москва

ЧИСЛЕННЫЙ АНАЛИЗ ВЛИЯНИЯ ДАВЛЕНИЯ В ГАЗЕ НА ПЛОТНОСТЬ ДИСЛОКАЦИЙ В КРИСТАЛЛЕ ПРИ ВЫРАЩИВАНИИ ИЗ РАСПЛАВА

При выращивании монокристаллов из расплава ввиду неоднородного распределения температуры в кристалле возникают термические напряжения, которые являются основной причиной образования и размножения дислокаций. Для прогнозирования плотности дислокаций в зависимости от тепловых условий выращивания монокристаллов наобходимо решить задачу теплообмена и задачу упругопластического деформирования.

Целью данной работы является моделирование внешних тепловых условий выращивания с учетом давления газа в камере установки и анализ влияния давления в газе на величину плотности дислокаций в кристалле. Показано, что при определенных условиях имеется возможность снижения величины плотности дислокаций в кристалле в несколько раз.

Приведем основные соотношения для решения задачи определения термических напряжений, пластических деформаций и плотности дислокаций в кристалле. Подробное описание постановки задачи приведено в работе /I/.

Рассмотрим кристалл цилиндрической формы, выращиваемый из расплава методом Чохральского, схематическое изображение метода выращивания дано на рис. I.

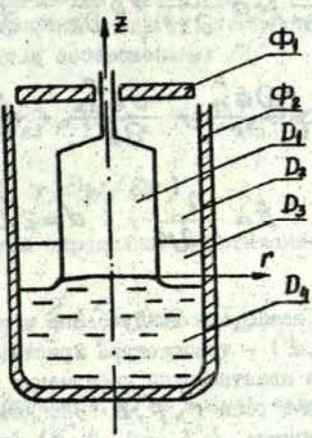


Рис. I. Схема выращивания кристалла из расплава Φ_1 - верхний экран, Φ_2 - стенка тигля или нагревателя, $\mathcal{D}_1$ - кристалл, $\mathcal{D}_2$ - газ, $\mathcal{D}_3$ - флюс, $\mathcal{D}_4$ - расплав.

Для области $\mathcal{D}_1$, занятой кристаллом высотой H и радиусом R в осесимметричной системе координат (r , z) уравнения упругопластического равновесия в перемещениях u и W записываются следующим образом:

$$a\frac{\partial}{\partial r}\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}(ru)+\frac{\partial^2 u}{\partial z^2}+b\frac{\partial^2 W}{\partial r\partial z}=$$

$$=d\frac{\partial T}{\partial r}+2\left[\frac{\partial \varepsilon_{11}^{p}}{\partial r}+\frac{\varepsilon_{11}^{p}-\varepsilon_{22}^{p}}{r}+\frac{\partial \varepsilon_{13}^{p}}{\partial z}\right],$$

$$\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}\left(r\frac{\partial W}{\partial r}\right)+a\frac{\partial^2 W}{\partial z^2}+b\frac{\partial}{\partial z}\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}(rU)=$$

$$=d\frac{\partial T}{\partial z}+2\left[\frac{\partial \varepsilon_{13}^{P}}{\partial r}+\frac{\partial \varepsilon_{33}^{P}}{\partial z}+\frac{\varepsilon_{13}^{P}}{\partial z}\right], \qquad (I)$$

$$a=2\frac{1-\mu}{1-2\mu}, \quad b=\frac{1}{1-2\mu}, \quad d=2\alpha\frac{1+\mu}{1-2\mu}$$

μ и α - коэффициенты Пуассона и термического расширения; $T(r,z)$ - температура кристалла; ε_{ij}^{P} - компоненты тензора пластической деформации в цилиндрической системе координат (оси r, φ, z обозначены индексами I, 2, 3 соответственно; i, j = I, 2, 3).

Граничные условия в перемещениях для свободной от внешних сил поверхности кристалла записываются следующим образом:

$$\frac{\partial u}{\partial r}+K\left(\frac{u}{r}+\frac{\partial W}{\partial z}\right)=cT+\frac{2}{a}\varepsilon_{11}^{P}$$

$$\frac{\partial u}{\partial z}+\frac{\partial W}{\partial r}=2\varepsilon_{13}^{P}. \qquad (2)$$

При плоской границе раздела фаз z = 0 и на верхнем торце кристалла $z = H$ граничные условия следующие:

$$\frac{\partial W}{\partial z}+K\left(\frac{\partial u}{\partial r}+\frac{u}{r}\right)=cT+\frac{2}{a}\varepsilon_{33}^{P}$$

$$\frac{\partial W}{\partial r}+\frac{\partial u}{\partial z}=2\varepsilon_{31}^{P} \qquad (3)$$

на оси кристалла r = 0 выполняются условия симметрии

$$u=0, \quad \partial W/\partial r=0. \qquad (4)$$

Если известны перемещения u и w , компоненты тензора суммарной деформации (упругой, температурной и пластической) определяются соотношениями /2/

$$\varepsilon_{11} = \partial u/\partial r, \quad \varepsilon_{22} = u/r, \quad \varepsilon_{33} = \partial w/\partial z, \tag{5}$$

$$2\varepsilon_{13} = (\partial u/\partial z + \partial w/\partial r),$$

а тензор напряжений определяется уравнениями

$$\sigma_{ij} = Ga\left[(1-\kappa)\varepsilon_{ij} - \frac{2}{a}\varepsilon^{p}_{ij} + (\kappa\varepsilon - cT)\,\delta_{ij}\right], \tag{6}$$

δ_{ij} - символ Кронекера, G - модуль сдвига,
$\varepsilon = \varepsilon_{11} + \varepsilon_{22} + \varepsilon_{33}$;

$$\kappa = \frac{\mu}{1-\mu}, \quad c = \alpha\frac{1+\mu}{1-\mu}.$$

Для решения задачи (I)-(6) следует задать температурное поле кристалла T и определить пластическую деформацию ε^{p}_{ij} . Задача определения температурного поля приводится ниже, определим тензор пластической деформации.

Тензор ε^{p}_{ij} определяется с учетом движения и размножения дислокаций по кристаллографическим системам скольжения под действием сдвиговых напряжений. Рассматривая кристалл арсенида галлия, имеющего I2 систем скольжения /3/, сдвиговые напряжения $\tau^{n,m}$ вычисляются следующим образом:

$$\tau^{n,m} = \alpha^{n,m}_{1i}\,\alpha^{n}_{3j}\,\sigma_{ij}, \tag{7}$$

n , m - номер плоскости и направления скольжения (n = I, 2, 3, 4; m = I, 2, 3); α_{3i} , α_{1i} - косинусы углов, определяющие систему скольжения относительно исходной системы координат; σ_{ij} - тензор напряжений.

Пластическая деформация $(\varepsilon^p)^{n,m}$ в (n,m)-ой системе скольжения определяется следующим образом /I/:

$$(\varepsilon^p)^{n,m}=\frac{b}{W_0}\int_0^z N_D^{n,m}V^{n,m}\,ds,\quad (\varepsilon^p)^{n,m}\Big|_{z=0}=0; \tag{8}$$

плотность дислокаций $N_D^{n,m}$ равна

$$N_D^{n,m}=N_0\exp\left(\frac{\beta}{W_0}\int_0^z V^{n,m}\,ds\right), \tag{9}$$

где b - величина вектора Бюргерса, N_0 - начальная плотность дислокаций, β - коэффициент размножения дислокаций, W_0 - скорость продвижения кристалла относительно неподвижной системы координат (r, z). В уравнениях (8), (9) скорость скольжения дислокаций[ж)] $V^{n,m}$ в зависимости от сдвиговых напряжений $\tau^{n,m}$ определяется полуэмперической зависимостью /I/:

$$V^{n,m}=V_0\left(\frac{\tau_{эф}^{n,m}}{\tau_0}\right)^q\exp\left(-\frac{U}{kT}\right) \tag{10}$$

$$\tau_{эф}^{n,m}=\begin{cases}|\tau^{n,m}|-G(\varepsilon^p)^{n,m}, & \tau_{эф}^{n,m}\geq\tau_{кр}\\ 0, & \tau_{эф}^{n,m}<\tau_{кр}\end{cases} \tag{11}$$

V_0, τ_0, $\tau_{кр}$ - определяются экспериментально.

ж) Отметим, что скорость скольжения дислокаций $V^{n,m}$ (10^3 - 10^4 см/с) на несколько порядков больше скорости продвижения кристалла W_0 ($0{,}5\cdot10^{-3}$ см/с), что дает основание рассматривать задачу в квазистатическом приближении.

По найденной пластической деформации $(\varepsilon^P)^{n,m}$ в (n,m)-ой системе можно восстановить весь тензор пластической деформации, используя формулы обратного преобразования тензоров. Заметим, что компоненты тензора пластической деформации $(\varepsilon^P_{ij})^{n,m}$ теперь зависят от угла φ. Для решения упругопластической задачи в осесимметричной постановке необходимо осреднить тензор пластической деформации по углу φ и вычислить тензор суммарной деформации по системам скольжения ε^P_{ij}.

$$\varepsilon^P_{ij}=\frac{1}{2\pi}\sum_{n=1}^{4}\sum_{m=1}^{3}\frac{1}{2}\int_0^{2\pi}(\varepsilon^P)^{n,m}(\alpha^{n,m}_{1i}\alpha^{n}_{3j}+\alpha^{n,m}_{1j}\alpha^{n}_{3i})d\varphi . \quad (12)$$

Суммарная плотность дислокаций по всем системам скольжения определяется следующим образом:

$$N_D=\sum_{n=1}^{4}\sum_{m=1}^{3}N_D^{n,m} . \quad (13)$$

Задача определения температурного поля $T(r,z)$ в кристалле решается в следующей постановке.

Квазистационарное уравнение теплопроводности записывается следующим образом /4/

$$\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}\left(\lambda r\frac{\partial T}{\partial r}\right)+\frac{\partial}{\partial z}\left(\lambda\frac{\partial T}{\partial z}\right)-c\rho W_0\frac{\partial T}{\partial z}=0 \quad (14)$$

λ - коэффициент теплопроводности, c - удельная теплоемкость, ρ - плотность, W_0 - скорость вытягивания кристалла из расплава.

На фронте кристаллизации $z=0$ температура T равна температуре плавления

$$T=T_{пл.} \quad (15)$$

На остальной части поверхности кристалла граничные условия формулируются с учетом излучения по закону Стефана-Больцмана и с учетом конвективного теплообмена кристалла с флюсом и газом. Такая комбинация условий записывается в следующей форме:

на боковой поверхности при $r = R$

$$-\lambda \frac{\partial T}{\partial r} = \sigma\varepsilon\left(T^4 - \theta^4(z)\right) + \alpha_i\left(T - \theta(z)\right), \; i = 1, 2 \; ; \qquad (16)$$

на торце кристалла при $z = H$

$$-\lambda \frac{\partial T}{\partial z} = \sigma\varepsilon\left(T^4 - \theta_T^4(H)\right) + \alpha_2\left(T - \theta_T(H)\right), \qquad (17)$$

σ - постоянная Стефана-Больцмана, ε - степень черноты кристалла, $\theta(z)$ - температура вдоль боковой поверхности кристалла, θ_T - температура верхней экранировки, α_i - - коэффициент конвективного теплообмена с флюсом ($i = 1$) или газом ($i = 2$).

Упругопластическая задача (I)-(I3) совместно с задачей теплообмена (I4)-(I7) решаются численно методом конечных разностей. Разностная задача для уравнений (I)-(I3) решается на основе метода последовательных упругих решений /5/. Точность метода проверялась на модельных примерах /I/.

Рассмотрим результаты расчетов.

Зададим внешнюю температуру $\theta(z)$ следующим образом:

$$\theta(z) = \begin{cases} T_0 - K_1 z, & 0 \le z \le H_\varphi \\ T_0 - K_1 H_\varphi - K_2 (z - H_\varphi), & H_\varphi < z \le H \end{cases} \qquad (18)$$

T_0 - температура поверхности расплава, $T_0 = T_{пл} + \delta T_{пер}$ $\delta T_{пер}$ - перегрев расплава, H_φ - высота слоя флюса, - высота кристалла, K_1, K_2 - градиенты температур во флюсе и газе.

Предположим, что кристалл выращивается в направлении [100], K_1 = 40 К/см, K_2 = 60 К/см, H_φ = 2 см, температура θ_T = 1023 °К при высоте кристалла H = 10 см. Коэффициент конвективного теплообмена флюса α_1 принимался равным 2,6 10^{-2} вт/см^2. Коэффициент α_2 в газе зависит от давления p, график зависимости которого изображен на рис. 2.

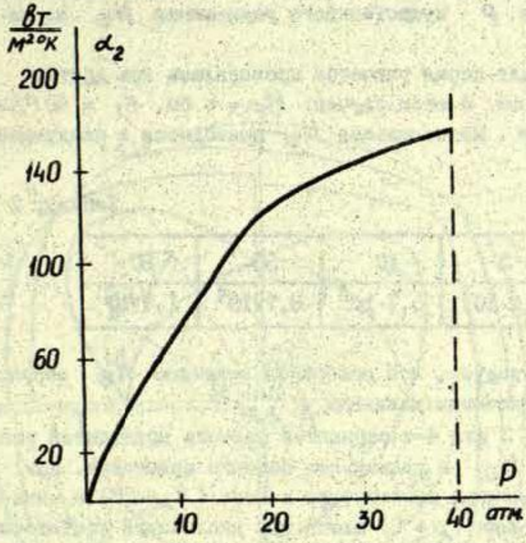


Рис. 2. Зависимость коэффициента конвективного теплообмена α_2 от давления p.

О максимальной расчетной плотности дислокаций N_D можно судить по следующей таблице:

Таблица I

$P_{атм}$	0	3	10	15	30
N_D см$^{-2}$	$7,7 \cdot 10^4$	$5,7 \cdot 10^4$	$3,3 \cdot 10^4$	$2,6 \cdot 10^4$	$2,3 \cdot 10^4$

Если давление $\rho = 0$, что означает выращивание кристалла в вакууме, то $N_{Д} = 7{,}7 \cdot 10^4$ см$^{-2}$. По мере увеличения давления ρ до 30 атм, плотность дислокаций $N_{Д}$ уменьшается более чем в 3 раза (при ρ = 30 атм, $N_{Д} = 2{,}3 \cdot 10^4$ см$^{-2}$).

Расчеты также показали, что при дальнейшем увеличении давления ρ существенного уменьшения $N_{Д}$ не наблюдается.

Следующая серия расчетов проводилась при других входных данных. В этом случае: $H_{ф} = 5$ см, $K_1 = 40$ $К/см$, $K_2 = 15$ $К/см$. Максимальная $N_{Д}$ приводится в следующей таблице:

Таблица 2

$P_{атм}$	3	10	30	60
$N_{Д}$ $см^{-2}$	$3{,}2 \cdot 10^4$	$5{,}1 \cdot 10^4$	$8{,}7 \cdot 10^4$	$1{,}4 \cdot 10^5$

Из таблицы следует, что расчетная величина $N_{Д}$ возрастает при увеличении давления ρ.

На рис. 3 для 4-х вариантов расчета приводится распределение $N_{Д}$ в радиальном сечении кристалла. При больших градиентах температуры в газе ($K_2 = 60$) и минимальном давлении ($\rho = 0$) плотность дислокаций достаточно велика ($N_{Д} = 6\text{–}7 \cdot 10^4$ см$^{-2}$, рис. 3а)). Для уменьшения $N_{Д}$ следует увеличить давление ($\rho = 30$), что означает увеличение коэффициента конвективного теплообмена α_2 (см. рис. 2). В этом случае $N_{Д}$ становится заметно меньше ($N_{Д} = 1\text{–}2 \cdot 10^4$ см$^{-2}$, рис. 3в)). На рис. 3с и 3d при небольших градиентах в газе ($K_2 = 15$) результаты противоположные. ($N_{Д} = 2\text{–}3 \cdot 10^4$ см$^{-2}$ при $\rho = 3$ и $N_{Д} = 10^5$ см$^{-2}$ при $\rho = 60$).

В заключение приведем величины физических констант и значения входных данных, при которых проводились расчеты совместной термоупругопластической задачи:

$G = 0{,}34 \cdot 10^6$ кг/см^2 , $\alpha = 0{,}64 \cdot 10^{-5} K^{-1}$, $\mu = 0{,}3$,

$b = 4 \cdot 10^{-8}$ см, $W_o = 0{,}5 \cdot 10^{-3}$ см/с, $V_o = 10$ см/с, $\tau_o = 10^2$ кг/см², $q = 1{,}5$, $\beta = 4$, $N_o = 1$ см$^{-2}$, $\tau_{кр} = 0{,}12 \times$ $\times exp(6 \cdot 10^3/T)$;

$\lambda = 0{,}13$ вт/см, $\varepsilon = 0.7$, $c = 0{,}431 \frac{к \cdot Дж}{кг \cdot к}$

$\rho = 2{,}3 \cdot 10^{-6}$ кг/см³, $R = 4$ см, $H = 10$ см.

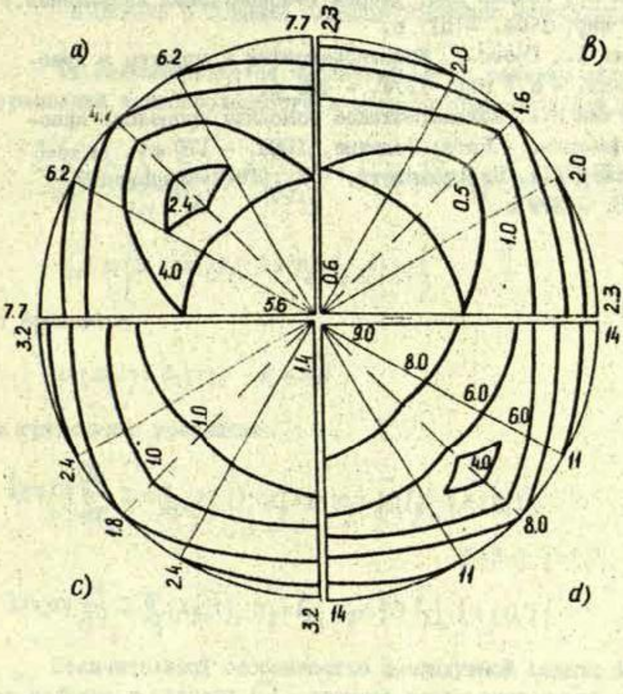


Рис. 3. Распределение плотности дислокаций N_D 10^4 см$^{-2}$ в радиальном сечении кристалла при: $H_\phi = 2$ см, $K1 = 40$ к/см, $K2 = 60$ к/см а) $\rho = 0$, в) $\rho = 30$; $H_\phi = 5$ см, $K_1 = 40$ к/см, $K_2 = 15$ к/см, с) $\rho = 3$, $d) \rho = 80$.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Авдонин Н.А., Бахрамеев С.С., Освенский В.Б. Постановка и численное решение термоупругопластической задачи с учетом движения дислокаций в плоскостях скольжения кристаллов, выращиваемых из расплава// Математическое моделирование. - М.: Наука, 1986. - С. 158-171.
2. Боли Б., Уэйнер Дж. Теория температурных напряжений.- М.: Мир, 1964. - 517 с.
3. Келли А., Гровс Г. Кристаллография и дефекты в кристаллах. - М.: Мир, 1974. - 496 с.
4. Авдонин Н.А. Математическое описание процессов кристаллизации. - Рига: Зинатне, 1980. - 178 с.
5. Ильюшин А.А. Пластичность. - М.: Гостехтеориздат, 1948. - 379 с.

МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ
ПРИКЛАДНЫЕ ЗАДАЧИ МАТЕМАТИЧЕСКОЙ ФИЗИКИ, вып.I
Рига: Латвийский университет, 1990

УДК 532.546:518.12

Л.И.Демченко, Г.Е.Мистецкий,
Е.С.Вакал
Киевский госуниверситет
им. Т.Г.Шевченко

ЧИСЛЕННОЕ РЕШЕНИЕ НЕЛИНЕЙНОГО УРАВНЕНИЯ ТЕПЛОПРОВОДНОСТИ В СРЕДАХ С ТОНКИМИ СЛАБОПРОВОДЯЩИМИ ВКЛЮЧЕНИЯМИ

I. Рассматривается численный метод решения нелинейного уравнения теплопроводности в области прямоугольной формы

$$\frac{\partial w(x,u)}{\partial t} = \sum_{\gamma=1}^{2} \frac{\partial}{\partial x_\gamma}\left(k(x,u)\frac{\partial u}{\partial x_\gamma}\right) + f, \quad (x,t) \in Q_T = \Omega \times (0,T], \tag{1}$$

$$\overline{\Omega} = \left\{ x = (x_1, x_2) : 0 \le x_\gamma \le l_\gamma,\ \gamma = 1,2 \right\}$$

с начальным

$$u(x,0) = u_0(x), \quad x \in \overline{\Omega} \tag{2}$$

и граничными условиями

$$k(x,u)\frac{\partial u}{\partial x_\gamma} = -g_\gamma(x_\beta, t),\ x_\gamma = 0,\ x_\beta \in [0, l_\beta],\ t \in (0,T], \tag{3}$$

$$\beta = 3-\gamma,\ \gamma = 1,2,$$

$$k(x,u)\frac{\partial u}{\partial x_\gamma} = \overline{g}_\gamma(x_\beta, t),\ x_\gamma = l_\gamma,\ x_\beta \in [0, l_\beta],\ t \in (0,T] \tag{4}$$

Отличительной особенностью исследуемой задачи является наличие в области Ω тонкого слабопроводящего включения. Для решения задачи применяется подход, согласно которому оно исключается из рассмотрения, а на моделирующей его линии $x_2 = l_3$ задаются специальные условия сопряжения типа условий неидеального контакта /1/

$$k(x,u)\frac{\partial u}{\partial x_2}=\alpha[u],\ \left[k(x,u)\frac{\partial u}{\partial x_2}\right]=0,\ x_2=l_3,\ x_1\in[0,l_1],\ t\in(0,T], \tag{5}$$

учитывающие влияние включения на характер протекания процессов в среде. Условия (5) являются нелинейными, так как в них α может зависеть от решения.

2. Для решения задачи (I)-(5) используется метод конечных разностей. В области $\bar{Q}_T=\bar{\Omega}\times[0,T]$ вводится неравномерная сетка $\bar{\omega}_{h\tau}$, на которой с помощью интегро-интерполяционного метода построена разностная схема, аппроксимирующая задачу (I)-(5).

3. Исследована погрешность аппроксимации полученной разностной схемы. Установлено, что разностная задача аппроксимирует исходную дифференциальную задачу с первым порядком по пространственным и временной переменным. Выражение для погрешности аппроксимации ψ во внутренних узлах сеточной области имеет вид

$$\psi=\psi_1+\psi_2+O(\tau+h_1^2+h_2^2), \tag{6}$$

где

$$\psi_\gamma=\frac{h_\gamma^+-h_\gamma^-}{2}\left(\frac{dk}{dx_\gamma}\frac{\partial^2 u}{\partial x_\gamma^2}+\frac{2}{3}k\frac{\partial^3 u}{\partial x_\gamma^3}+\frac{\partial u}{\partial x_\gamma}\left(\frac{\partial^2 k}{\partial x_\gamma^2}\frac{\partial^2 u}{\partial x_\gamma^2}\frac{\partial k}{\partial u}+\left(\frac{\partial u}{\partial x_\gamma}\right)^2\frac{\partial^2 k}{\partial u^2}+2\frac{\partial u}{\partial x_\gamma}\frac{\partial^2 k}{\partial x_\gamma\partial u}\right)\right).$$

Аналогичные оценки имеют место для погрешности аппроксимации граничных условий и условий сопряжения.

4. Построенная разностная схема представляет собой систему нелинейных алгебраических уравнений. Для ее решения используется итерационный процесс, основанный на комбинировании методов Ньютона и последовательной верхней релаксации ПВР.

Вводя некоторое нелинейное отображение $\mathcal{F}$ в конечномерном пространстве, дифференцируемое по Гато, запишем систему разностных уравнений в виде операторного уравнения

$$\mathcal{F}(Y)=0 \tag{7}$$

Обозначим через Y^s некоторое приближение к решению уравнения (7). Представим матрицу Якоби $A=\mathcal{F}'(Y^s)$ частных производных компонент отображения $\mathcal{F}$ в виде

$$A = D - L - U, \tag{8}$$

где D, L, U - соответственно диагональная, строго нижняя треугольная и строго верхняя треугольные матрицы.

Применим для решения системы (7) с учетом (8) одношаговый составной метод Ньютона - ПВР в виде

$$Y^{s+1} = Y^s - \omega(D - \omega L)^{-1} \mathcal{F}(Y^s)$$

или

$$(D - \omega L) Y^{s+1} = (D - \omega L) Y^s - \omega \mathcal{F}(Y^s). \tag{9}$$

Систему разностных уравнений, аппроксимирующую краевую задачу для уравнения (I) с условиями (2)-(5), запишем в векторном виде

$$\begin{gathered} -C_0 Y_0 + B_0 Y_1 = -F_0, \\ A_i Y_{i-1} - C_i Y_i + B_i Y_{i+1} = -F_i, \quad i = \overline{1, N_1 - 1}, \\ A_{N_1} Y_{N_1 - 1} - C_{N_1} Y_{N_1} = -F_{N_1}. \end{gathered} \tag{10}$$

Здесь Y_i, $i = \overline{0, N_1}$ - векторы неизвестных размерности $N_2 + 1$, компонентами которых являются значения сеточной функции y_{ij} в узлах сетки в m- тый момент времени на i - м столбце; A_i, B_i - квадратные диагональные матрицы размерности $(N_2 + 1) \times (N_2 + 1)$; C_i - квадратные трехдиагональные матрицы той же размерности. Перепишем систему (10) следующим образом

$$\begin{gathered} \mathcal{F}_0(Y_0, Y_1) = 0, \\ \mathcal{F}_i(Y_{i-1}, Y_i, Y_{i+1}) = 0, \quad i = \overline{1, N_1 - 1}, \\ \mathcal{F}_{N_1}(Y_{N_1 - 1}, Y_{N_1}) = 0 \end{gathered} \tag{11}$$

Определяя $\mathcal{F}_i$, $i = \overline{0, N_1}$ как компоненты отображения $\mathcal{F}$, используем для решения системы (II) итерационный процесс (9), который запишется в виде /2/

$$\begin{aligned}
&\frac{\partial \mathcal{F}_0}{\partial Y_0} Y_0^{s+1} = \frac{\partial \mathcal{F}_0}{\partial Y_0} Y_0^s - \omega \mathcal{F}_0(Y_0^s, Y_1^s),\\
&\frac{\partial \mathcal{F}_i}{\partial Y_i} Y_i^{s+1} = \frac{\partial \mathcal{F}_i}{\partial Y_i} Y_i^s - \omega \mathcal{F}_i(Y_{i-1}^{s+1}, Y_i^s, Y_{i+1}^s), \; i=\overline{1, N_1-1}, \qquad (12)\\
&\frac{\partial \mathcal{F}_{N_1}}{\partial Y_{N_1}} Y_{N_1}^{s+1} = \frac{\partial \mathcal{F}_{N_1}}{\partial Y_{N_1}} Y_{N_1}^s - \omega \mathcal{F}_{N_1}(Y_{N_1-1}^{s+1}, Y_{N_1}^s)
\end{aligned}$$

Записывая далее покомпонентно строки равенств (II), исходя из полученных разностных уравнений, определяем элементы матрицы Якоби $\frac{\partial \mathcal{F}_i}{\partial Y_i}$, $i=\overline{0, N_1}$. Окончательная численная процедура сводится к решению линейных систем с трехдиагональными матрицами методом немонотонной прогонки.

5. По предложенной методике проведены расчеты процессов влагопереноса на фоне действия систематического горизонтального дренажа в областях, содержащих тонкие слабопроницаемые прослойки. Указанные процессы описываются уравнением (I) с условиями (2)-(5) и следующим условием на дрене

$$u(x,t) = g_3(x_2,t),\; x_1 = l_1,\; x_2 \in [l_4, l_5],\; l_3 \bar{\in} [l_4, l_5] \qquad (13)$$

Графики зависимости коэффициента влагопроводности k и объемной влажности w от высоты давления P, где $P = u + x_2$, представлены на рис. I - 2.

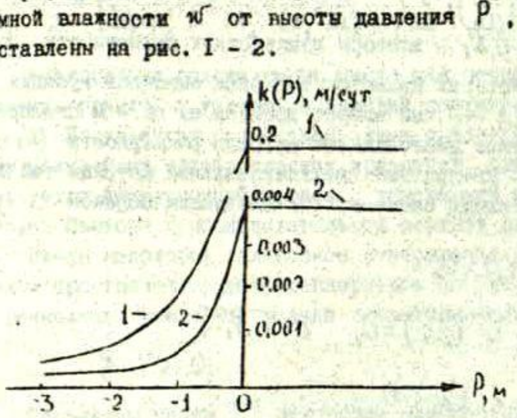


Рис. I. Зависимость коэффициента влагопроводности от высоты давления (I - для суглинков, 2 - для глинистой прослойки).

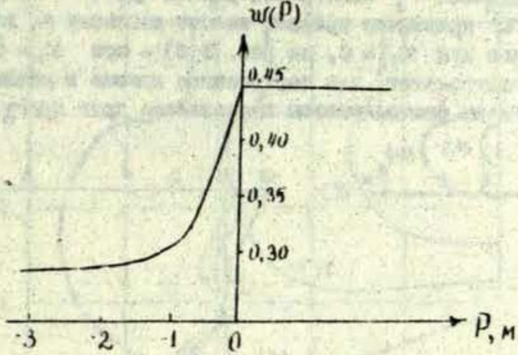


Рис. 2. Зависимость влажности грунта от высоты давления.

Рассматривалась задача влагопереноса при осушении полностью насыщенного грунта с прослойкой на глубине от 2 до 2,I5 м и подстилаемого водоупором (в условиях (4) $\gamma = 2$, $\bar{g}_2(x_1,t) = 0$). В начальный момент времени уровень грунтовых вод лежит на поверхности почвы. Для его понижения используется систематический горизонтальный дренаж. Диаметр дрен 0,I5 м, глубина их заложения 2,75 м, междренное расстояние 20 м (l_1= I0 м - половина междренного расстояния), мощность грунта l_2 = I0 м. На поверхности почвы задано испарение интенсивностью 0,0005 м/сут (в условиях (3) $\gamma = 2$, $g_2(x_1,t) = - 0{,}0005$). На линиях симметрии $x_1 = 0$, $x_1 = l_1$ задаются условия (3), (4) при $\gamma = 1$, $g_1(x_2,t) = 0$, $\bar{g}_1(x_2,t) = 0$. Начальное распределение напора $u_0(x)$ находилось из решения соответствующей напорной фильтрационной задачи, когда на поверхности почвы задан нулевой напор. Для определения коэффициента влагопроводности $k(x,u)$ и объемной влажности $w(x,u)$ использовались аналитические зависимости вида

$$k(x,u) = k(x)\exp(3{,}5(u+x_2)/1{,}5),$$

$$w(x,u) = 0{,}25 + 0{,}2\exp((u+x_2)/1{,}5).$$

Значения коэффициента фильтрации $k(x)$ для грунта и прослойки выбирались равными 0,2 м/сут и 0,004 м/сут соответственно. В уравнении (I) функция f полагалась равной нулю.

На рис. 3 а) приведены профили высоты давления по глубине на междренье при $x_1 = 0$, на рис. 3 б) - при $x_1 = l_1$. Анализ решения показывает, что построенные кривые в различные моменты времени располагаются параллельно друг другу.

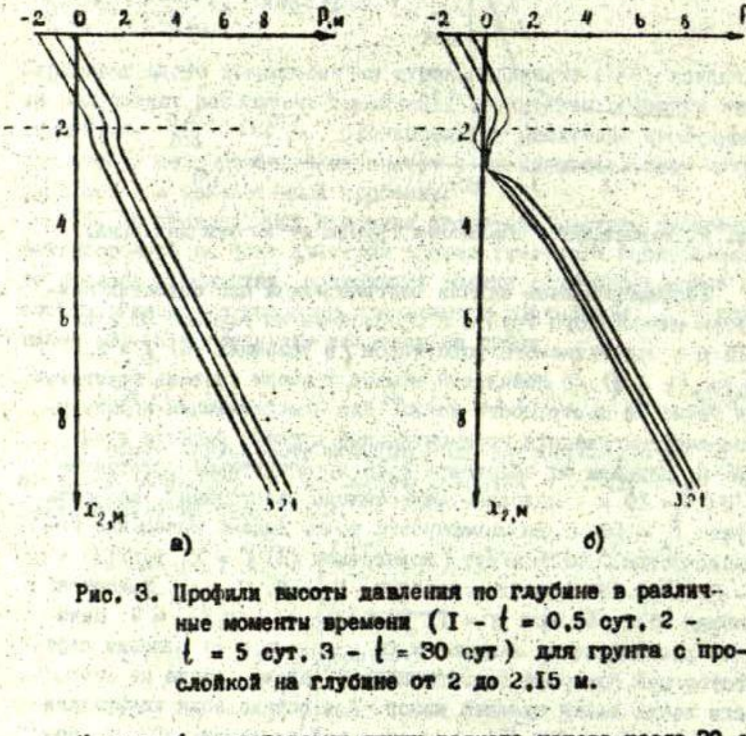


Рис. 3. Профили высоты давления по глубине в различные моменты времени (I - t = 0,5 сут, 2 - t = 5 сут, 3 - t = 30 сут) для грунта с прослойкой на глубине от 2 до 2,15 м.

На рис. 4 представлены линии равного напора после 30 суток осушения грунта. Они испытывают преломление при переходе через линию x_2 = 2 м, моделирующую прослойку.

Расчеты выполнены на сетке, состоящей из 810 узлов. Точность вычислений принималась равной 0,0001. Значение релаксационного параметра ω в зоне полного насыщения $(P \geqslant 0)$ выбиралось равным 1,8, в зоне неполного насыщения $(P < 0)$ - от 0.5 до 0.9. Для достижения сходимости итерационного процесса

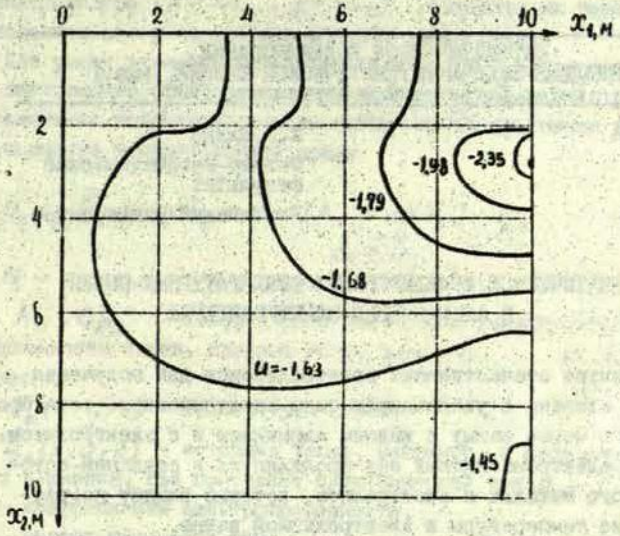


Рис. 4. Линии равного напора после 30 сут осушения для грунта с прослойкой на глубине от 2 до 2,15 м.

на каждом временном слое потребовалось 50 ÷ 60 итераций.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Мистецкий Г.Е., Вакал Е.С., Кивва С.Л. Влагосолеперенос в многослойных грунтах со слабопроницаемыми прослойками // Некоторые модели движения сплошных сред и их приложения. - М.: Наука, 1988. - С. 32-41.
2. Вакал Е.С., Кивва С.Л., Мистецкий Г.Е., Стеля О.Б. Об одном методе решения нелинейного уравнения параболического типа // Вычисл. и прикл. математика. - 1985. - Вып. 56. - С. 36-43.

МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ
ПРИКЛАДНЫЕ ЗАДАЧИ МАТЕМАТИЧЕСКОЙ ФИЗИКИ, вып.I
Рига: Латвийский университет, 1990

УДК 538.4

Х.Э.Калис
Физико-математический факультет
Латвийский университет

МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ТЕМПЕРАТУРНЫХ ПОЛЕЙ В АЛЮМИНИЕВЫХ ЭЛЕКТРОЛИЗЕРАХ

Развитие отечественных электролизеров для получения алюминия связано с увеличением силы электрического тока,пропускаемого через ванну с жидким алюминием и с электролитом. Действие электромагнитных сил проявляется в создании потоков жидкого металла и электролита, которые влияют на распределение температуры в электролизной ванне.

Электролизная ванна представляет собой параллелепипед $(-L_x \le x \le L_x, -L_y \le y \le L_y, H_0 \le z \le H_N)$ внутри которого расположена многослойная среда, т.е. проводящие слои $(H_{k-1} \le z \le H_k, \ k=\overline{1,N})$ с поверхностями раздела параллельно плоскости Oxy, например, слои графита, электролита, алюминия, железа, теплоизоляции. Здесь L_x, L_y - полудлина и полуширина ванны, H_N - высота ванны. Все эти слои за исключением слоев электролита и алюминия твердые. После определения планарных осредненных течений (в плоскости Oxy) электролита и алюминия /I/, т.е. определения составляющих вектора скорости $u, v \ (W=0)$, необходимо расчитать температурное поле электролизера с учетом джоулевого выделения тепла и обмена тепла с внешней средой. Для этого в сечениях (x,y) электролизера вводится неравномерная сетка $N_1 \times N_2$ узлов

$$\omega_h=\{(x_i,y_j), h_i^{(x)}=x_i-x_{i-1}, h_j^{(y)}=y_j-y_{j-1}, i=\overline{1,N_1}, j=\overline{1,N_2}\},$$

где $h_1^{(x)},\dots,h_{N_1+1}^{(x)}; h_1^{(y)},\dots,h_{N_2+1}^{(y)}$ - последовательность шагов соответственно в направлении осей Ox, Oy, причем стенки электролизера $(x=\pm L_x, y=\pm L_y)$ находятся на расстояние половины шагов от крайних узловых линий сетки.

Для учета взаимодействия тепловых полей в электролизере в зависимости от гидродинамики течения в слоях электролита и алюминия необходимо решать стационарные уравнения теплопроводности в многослойной среде

$$\rho_k c_{p_k} \vec{V}_k \, grad\, T_k = div\,(\lambda_k \, grad\, T_k) + q_k \,, \quad k=\overline{1,N}, \tag{I}$$

где N - число слоев в направлении оси Oz,

$\rho_k, \lambda_k, c_{p_k}$ - коэффициенты плотности, теплопроводности и теплоемкости слоев, которые могут зависеть от (x,y) координат,

$T_k = T_k(x,y,z)$ - температура слоев,

$q_k = q_k(x,y,z)$ - источник тепла, например, в слое электролита и алюминия, где протекает электрический ток $q_k = \vec{j}_k^{\,2}/\sigma_k$,

σ_k - коэффициенты электропроводности,

$\vec{j}_k$ - вектор плотности тока,

$\vec{V}_k$ - вектор скорости в жидких слоях (алюминий, электролит) с учетом, что $\vec{V}_k = (u_k, v_k, 0)$, т.е. учитывается только планарное течение (в твердых слоях $\vec{V}_k \equiv 0$).

Уравнения (I) замыкаются граничными условиями вида

$$-\lambda \frac{\partial T}{\partial n} = \alpha\,(T - T_B) \tag{2}$$

и условиями сопряжения на поверхностей раздела сред $(z = H_k)$

$$\begin{cases} T_k(x,y,H_k) = T_{k+1}(x,y,H_k) \\ \lambda_k \dfrac{\partial T_k}{\partial z}(x,y,H_k) = \lambda_{k+1} \dfrac{\partial T_{k+1}}{\partial z}(x,y,H_k), \; k=\overline{1,N-1}, \end{cases} \tag{3}$$

где n - внешняя нормаль на границе электролизера,

T_B - температура на внешней границе,

α - коэффициент теплопередачи.

В граничное условие (2) может быть включено влияние тепловых свойств окружающей среды, состоящей из твердых слоев с разными λ. Например, на нижней границе $z = H_0$ можно задавать граничное условие третьего рода в виде

$$\lambda_1 \frac{\partial T_1}{\partial z}(x,y,H_0) = \alpha_*(T_1 - T_B),$$

где

$$\alpha_*^{-1} = \alpha_{-m}^{-1} + \sum_{i=-m}^{0} l_i \lambda_i^{-1},$$

$l_0, l_{-1}, \ldots, l_{-m}$ - высота $(m+1)$ нижних дополнительных слоев электролизера,

α_{-m} - коэффициент теплопередачи нижнего слоя с номером $(-m)$ с окружающей средой,

$\lambda_0, \lambda_{-1}, \ldots, \lambda_{-m}$ - коэффициенты теплопроводности слоев,

T_B - внешняя температура слоя с номером $(-m)$.

Эффективное значение коэффициента теплопередачи α_* определяется в предположении линейности распределения температуры по высоте слоев.

Из (2) следует, что при $z = H_0$ (нижняя граница), $z = H_N$ (верхняя граница):

$$\begin{cases} \lambda_1 \frac{\partial T_1}{\partial z}(x,y,H_0) = \alpha_1 (T_1(x,y,H_0) - T_{B_1}), \\ -\lambda_N \frac{\partial T_N}{\partial z}(x,y,H_0) = \alpha_N (T_N(x,y,H_N) - T_{B_N}). \end{cases} \tag{4}$$

Проведя осреднение уравнения (I) в K-ом слое по высоте слоя $l_k = H_k - H_{k-1} (k=\overline{1,N})$ следует

$$l_k^{-1}\left(\lambda_k \frac{\partial T_k}{\partial z}\Big|_{z=H_k} - \lambda_k \frac{\partial T_k}{\partial z}\Big|_{z=H_{k-1}}\right) + L(\overline{T}_k) + \overline{q}_k = 0, \tag{5}$$

где

$$L(\overline{T}_k) = \frac{\partial}{\partial x}\left(\lambda_k \frac{\partial \overline{T}_k}{\partial x}\right) + \frac{\partial}{\partial y}\left(\lambda_k \frac{\partial \overline{T}_k}{\partial y}\right) - \rho_k c_{p_k}\left(u_k \frac{\partial \overline{T}_k}{\partial x} + v_k \frac{\partial \overline{T}_k}{\partial y}\right),\ \overline{T}_k = l_k^{-1}\int_{H_{k-1}}^{H_k} T_k(x,y,z)\,dz,\ \overline{q}_k = l_k^{-1}\int_{H_{k-1}}^{H_k} q_k(x,y,z)\,dz.$$

После определения потоков тепла

$$Q_k^B = -\lambda_k \frac{\partial T_k}{\partial z}\Big|_{z=H_k}, \quad Q_k^H = \lambda_k \frac{\partial T_k}{\partial z}\Big|_{z=H_{k-1}}$$

через верхнюю и нижнюю поверхность раздела можно решать уравнения (5) в многослойной среде (метод понижения размерности).

Далее применяется интерполяция с параболическим сплайном в виде /2/

$$T_\kappa(x,y,z)=T^o_\kappa(x,y)+m_\kappa(x,y)(z-\bar{z}_\kappa)+\frac{e_\kappa(x,y)}{\lambda_\kappa \ell_\kappa}(z-\bar{z}_\kappa)^2, \quad (6)$$

где
$$\bar{z}_\kappa=(H_\kappa+H_{\kappa-1})/2, \quad \kappa=\overline{1,N}.$$

Для определения $3N$ неизвестных коэффициентов $T^o_\kappa, m_\kappa, e_\kappa$ сплайна (6), применяются условия осреднения, сопряжения (3) и граничные условия (4), т.е.

$$\bar{T}_\kappa=T^o_\kappa+e_\kappa G_\kappa/12 \ (G_\kappa=\ell_\kappa/\lambda_\kappa), \quad \kappa=\overline{1,N}; \quad (7)$$

$$T^o_\kappa+m_\kappa\ell_\kappa/2+e_\kappa G_\kappa/4=T^o_{\kappa+1}-m_{\kappa+1}\ell_{\kappa+1}/2+e_{\kappa+1}G_{\kappa+1}/4; \quad (8)$$

$$\lambda_\kappa m_\kappa+e_\kappa=\lambda_{\kappa+1}m_{\kappa+1}-e_{\kappa+1}, \quad \kappa=\overline{1,N-1}; \quad (9)$$

$$\lambda_1 m_1(1+\alpha_1 G_1/2)-e_1(1+\alpha_1 G_1/4)=\alpha_1(\mathring{T}_1-T_{B_1}); \quad (10)$$

$$\lambda_N m_N(1+\alpha_N G_N/2)+e_N(1+\alpha_N G_N/4)=\alpha_N(T_{B_N}-\mathring{T}_N). \quad (11)$$

Исключая из (8) величины $m_{\kappa+1}$, $\mathring{T}_\kappa \cdot \mathring{T}_{\kappa+1}$:

$$\frac{m_\kappa\lambda_\kappa}{2}(G_\kappa+G_{\kappa+1})+\frac{e_\kappa}{2}\left(\frac{G_\kappa}{3}+G_{\kappa+1}\right)+\frac{e_{\kappa+1}}{3}G_{\kappa+1}=\bar{T}_{\kappa+1}-\bar{T}_\kappa, \quad (12)$$
$$\kappa=\overline{1,N-1}.$$

Аналогично, уменьшая индекс κ на единицу, из (8) исключаются величины $m_{\kappa-1}, \mathring{T}_\kappa, \mathring{T}_{\kappa-1}$:

$$\frac{m_\kappa\lambda_\kappa}{2}(G_\kappa+G_{\kappa-1})-\frac{e_{\kappa-1}}{3}G_{\kappa-1}-\frac{e_\kappa}{2}\left(\frac{G_\kappa}{3}+G_{\kappa-1}\right)=$$
$$=\bar{T}_\kappa-\bar{T}_{\kappa-1}, \quad \kappa=\overline{2,N}. \quad (13)$$

После исключения из (12), (13) величины m_κ при $\kappa=\overline{2,N-1}$ следует система линейных уравнений для определения коэффициентов e_κ :

$$e_{K-1}\frac{G_{K-1}}{3}(G_K+G_{K+1})+\frac{e_K}{2}\Big[\Big(\frac{G_K}{3}+G_{K-1}\Big)(G_K+G_{K+1})+$$

$$+\Big(\frac{G_K}{3}+G_{K+1}\Big)(G_K+G_{K-1})\Big]+e_{K+1}\frac{G_{K+1}}{3}(G_K+G_{K-1})=$$

$$=(\bar T_{K+1}-\bar T_K)(G_K+G_{K-1})-(\bar T_K-\bar T_{K-1})(G_K+G_{K+1}). \tag{I4}$$

Аналогично, исключая $\overset{\circ}{T}_1$, m_1 из (I0) при помощи (I2) $(K=1)$, а $\overset{\circ}{T}_N, m_N$ из (I3) при помощи (I3) $(K=N)$, следует дополнительные условия для замыкания системы уравнений (I4) в виде

$$e_1\Big[\Big(1+\frac{\alpha_1G_1}{6}\Big)(G_1+G_2)+\Big(1+\frac{\alpha_1G_1}{2}\Big)\Big(\frac{G_1}{3}+G_2\Big)\Big]+e_2\frac{2G_2}{3}\Big(1+\frac{\alpha_1G_1}{2}\Big)=$$

$$=2\Big(1+\frac{\alpha_1G_1}{2}\Big)(\bar T_2-\bar T_1)-\alpha_1(G_1+G_2)(\bar T_1-T_{B_1}); \tag{I5}$$

$$e_N\Big[\Big(1+\frac{\alpha_NG_N}{6}\Big)(G_N+G_{N-1})+\Big(1+\frac{\alpha_NG_N}{2}\Big)\Big(\frac{G_N}{3}+G_{N-1}\Big)\Big]+$$

$$+e_{N-1}\frac{2G_{N-1}}{3}\Big(1+\frac{\alpha_NG_N}{2}\Big)=2\Big(1+\frac{\alpha_NG_N}{2}\Big)(\bar T_{N-1}-\bar T_N)+$$

$$+\alpha_N(G_N+G_{N-1})(T_{B_N}-\bar T_N). \tag{I6}$$

Следовательно, из системы линейных уравнений (I4), (I5), (I6) однозначно можно определить величины $e_1, e_2, \dots, e_N$, так как система диагонально доминирующая. В случае граничных условий первого рода (4), надо в формулах (I5), (I6) перейти к пределу, когда α_1 или α_N стремится к бесконечности.

Легко проверить, что в уравнении (5)

$$\ell_K^{-1}\Big(\lambda_K\frac{\partial T_K}{\partial z}\Big|_{z=\bar H_K}\lambda_K\frac{\partial T_K}{\partial z}\Big|_{z=H_{K-1}}\Big)=\frac{2e_K}{\ell_K}. \tag{I7}$$

Из (7), (I2), (I3) можно вычислять остальные коэффициенты сплайна (6) T_K^o, m_K и получить пространственное распределение температуры

$$T_\kappa(x,y,z)=\bar{T}_\kappa(x,y)+m_\kappa(x,y)(z-\bar{z}_\kappa)+$$
$$+\frac{e_\kappa(x,y)G_\kappa}{\ell_\kappa^2}\left[(z-\bar{z}_\kappa)^2-\ell_\kappa^2/12\right],\ \kappa=\overline{1,N}.$$

Так как в электролизере число основных слоев $N\leqslant 3$ (слои графита, электролита и алюминия), то рассмотрим определение коэффициентов сплайна в этих случаях.

При $N=3$ из (15), (14), (16) следует система из 3 уравнений

$$\begin{cases} e_1 a_1+e_2 b_1=c_1\\ e_1 a_2+e_2 b_2+e_3 d_2=c_2\\ e_2 b_3+e_3 d_3=c_3, \end{cases}$$

где

$$a_1=\left(1+\frac{\alpha_1 G_1}{6}\right)(G_1+G_2)+\left(1+\frac{\alpha_1 G_1}{2}\right)\left(\frac{G_1}{3}+G_2\right),$$
$$b_1=\frac{2G_2}{3}\left(1+\frac{\alpha_1 G_1}{2}\right),\ c_1=2\left(1+\frac{\alpha_1 G_1}{2}\right)(\bar{T}_2-\bar{T}_1)-\alpha_1(\bar{T}_1-T_{B_1})(G_1+G_2),$$
$$a_2=\frac{G_1}{3}(G_2+G_3),\ b_2=\frac{1}{2}\left[\left(\frac{G_2}{3}+G_1\right)(G_2+G_3)+\left(\frac{G_2}{3}+G_3\right)(G_2+G_1)\right],$$
$$d_2=\frac{G_3}{3}(G_2+G_1),\ c_2=(\bar{T}_3-\bar{T}_2)(G_2+G_1)-(\bar{T}_2-\bar{T}_1)(G_2+G_3),$$
$$b_3=\frac{2G_2}{3}\left(1+\frac{\alpha_3 G_3}{2}\right),\ d_3=\left(1+\frac{\alpha_3 G_3}{6}\right)(G_3+G_2)+\left(1+\frac{\alpha_3 G_3}{2}\right)\left(\frac{G_3}{3}+G_2\right),$$
$$c_3=2\left(1+\frac{\alpha_3 G_3}{2}\right)(\bar{T}_2-\bar{T}_3)+\alpha_3(T_{B_3}-\bar{T}_3)(G_3+G_2).$$

Следовательно,

$$e_1=[c_1 b_{23}-c_2 b_1 d_3+c_3 b_1 d_2]\delta^{-1},\ e_2=[-c_1 a_2 d_3+c_2 a_1 d_3-$$
$$-c_3 a_1 d_2]\delta^{-1},\ e_3=[c_1 a_2 b_3-c_2 a_1 b_3+c_3 a_{12}]\delta^{-1},$$
$$b_{23}=b_2 d_3-b_3 d_2>0,\ a_{12}=a_1 b_2-a_2 b_1>0,$$

где

$$\delta=a_1 b_2 d_3-a_1 b_3 d_2-a_2 b_1 d_3>0.$$

Следовательно, осредненные уравнения (5) принимают следующий вид:

$$\begin{cases} 2\ell_1^{-1}(-A_1\bar{T}_1+B_1\bar{T}_2-D_1\bar{T}_3+C_1)+L(\bar{T}_1)+\bar{q}_1=0 \\ 2\ell_2^{-1}(B_2\bar{T}_1-A_2\bar{T}_2+D_2\bar{T}_3+C_2)+L(\bar{T}_2)+\bar{q}_2=0 \\ 2\ell_3^{-1}(-D_3\bar{T}_1+B_3\bar{T}_2-A_3\bar{T}_3+C_3)+L(\bar{T}_3)+\bar{q}_3=0, \end{cases} \tag{18}$$

где

$$A_1=[(2+2\alpha_1G_1+\alpha_1G_2)b_{23}+(G_2+G_3)b_1d_3]\delta^{-1}>0,$$

$$B_1=[(2+\alpha_1G_1)b_{23}+(G_1+2G_2+G_3)b_1d_3+(2+\alpha_3G_3)b_1d_2]\delta^{-1}>0,$$

$$D_1=[(G_2+G_3)b_1d_3+(2+2\alpha_3G_3+\alpha_3G_2)b_1d_2]\delta^{-1}>0,$$

$$C_1=[\alpha_1T_{B_1}(G_1+G_2)b_{23}+\alpha_3T_{B_3}(G_2+G_3)b_1d_2]\delta^{-1};$$

$$B_2=[(2+2\alpha_1G_1+\alpha_1G_2)a_2d_3+(G_2+G_3)a_1d_3]\delta^{-1}>0,$$

$$A_2=[(2+\alpha_1G_1)a_2d_3+(G_1+2G_2+G_3)a_1d_3+(2+\alpha_3G_3)a_1d_2]\delta^{-1}>0,$$

$$D_2=[(G_1+G_2)a_1d_3+(2+2\alpha_3G_3+\alpha_3G_2)a_1d_2]\delta^{-1}>0,$$

$$C_2=-[\alpha_1T_{B_1}(G_1+G_2)a_2d_3+\alpha_3T_{B_3}(G_2+G_3)a_1d_2]\delta^{-1};$$

$$D_3=[(2+2\alpha_1G_1+\alpha_2G_2)a_2b_3+(G_2+G_3)a_1b_3]\delta^{-1}>0,$$

$$B_3=[(2+\alpha_1G_1)a_2b_3+(G_1+2G_2+G_3)a_1b_3+(2+\alpha_3G_3)a_{12}]\delta^{-1}>0,$$

$$A_3=[(G_2+G_1)a_1b_3+(2+2\alpha_3G_3+\alpha_3G_2)a_{12}]\delta^{-1}>0,$$

$$C_3=[\alpha_1T_{B_1}(G_1+G_2)a_2b_3+\alpha_3T_{B_3}(G_2+G_3)a_{12}]\delta^{-1}.$$

Систему уравнений (18) с учетом граничных условий вида (2) на боковых стенок электролизной ванны можно решать методом сеток, применяя монотонные разностные схемы $(\rho_к C_{F_к} \approx 10^7)$.

Для реализации разностной схемы применяется метод итерации.

В случае 2 слоев (электролит и алюминий, $N = 2$) из (15), (16) следует система 2 уравнений

$$\begin{cases} e_1 a_1 + e_2 b_1 = c_1 \\ e_1 a_2 + e_2 b_2 = c_2 \ , \end{cases}$$

где

$$a_1 = \left(1 + \frac{\alpha_1 G_1}{6}\right)(G_1 + G_2) + \left(1 + \frac{\alpha_1 G_1}{2}\right)\left(\frac{G_1}{3} + G_2\right),$$

$$b_1 = \frac{2G_2}{3}\left(1 + \frac{\alpha_1 G_1}{2}\right), \ c_1 = 2\left(1 + \frac{\alpha_1 G_1}{2}\right)(\bar{T}_2 - \bar{T}_1) -$$

$$-\alpha_1(\bar{T}_1 - T_{B_1})(G_1 + G_2), \ a_2 = \frac{2G_1}{3}(1 + \alpha_2 G_2/2),$$

$$b_2 = \left(1 + \frac{\alpha_2 G_2}{6}\right)(G_2 + G_1) + \left(1 + \frac{\alpha_2 G_2}{2}\right)\left(\frac{G_2}{3} + G_1\right),$$

$$c_2 = 2\left(1 + \frac{\alpha_2 G_2}{2}\right)(\bar{T}_1 - \bar{T}_2) + \alpha_2(T_{B_2} - \bar{T}_2)(G_1 + G_2).$$

Следовательно,

$$e_1 = -A_1 \bar{T}_1 + B_1 \bar{T}_2 + C_1, \quad e_2 = B_2 \bar{T}_1 - A_2 \bar{T}_2 + C_2 \ ,$$

где

$$A_1 = 4\left[1 + \alpha_1 G_1 + \frac{1}{3} G_2(\alpha_1 + \alpha_2 + \alpha_1 \alpha_2 (G_1 + G_2)) - \alpha_1 \alpha_2 G_2^2/4\right]\delta^{-1};$$

$$A_2 = 4\left[1 + \alpha_2 G_2 + \frac{1}{3} G_1(\alpha_1 + \alpha_2 + \alpha_1 \alpha_2 (G_1 + G_2)) - \alpha_1 \alpha_2 G_1^2/4\right]\delta^{-1};$$

$$B_1 = B_2 = (2 + \alpha_1 G_1)(2 + \alpha_2 G_2)\delta^{-1};$$

$$C_1 = (\alpha_1 T_{B_1} b_2 - \alpha_2 T_{B_2} b_1)\delta^{-1}; \ C_2 = (\alpha_2 T_{B_2} a_1 - \alpha_1 T_{B_1} a_2)\delta^{-1};$$

$$\delta = \frac{8}{3}\left[(G_1 + G_2)(1 + \alpha_1 \alpha_2 G_1 G_2/12) + \frac{\alpha_1 G_1}{2}\left(\frac{G_1}{2} + \frac{2}{3} G_2\right) + \right.$$
$$\left. + \frac{\alpha_2 G_2}{2}\left(\frac{G_2}{2} + \frac{2}{3} G_1\right)\right].$$

Следовательно, уравнения (5) принимают вид

$$\begin{cases} 2\ell_1^{-1}(-A_1 \bar{T}_1 + B_1 \bar{T}_2 + C_1) + L(\bar{T}_1) + \bar{q}_1 = 0 \\ 2\ell_2^{-1}(B_1 \bar{T}_1 - A_2 \bar{T}_2 + C_2) + L(\bar{T}_2) + \bar{q}_2 = 0, \end{cases} \qquad (19)$$

т.е. имеем связанную систему из двух уравнений, которые можно решать методом сеток, применяя монотонные разностные схемы.

После определения осредненных температур $\bar{T}_1, \bar{T}_2$ из (19) с учетом граничных условий на боковых стенках ванны, вычисляются локальные тепловые потоки через поверхности раздела и через верхнюю и нижнюю поверхности электролизера:

$$-Q_k^B = \lambda_k \frac{\partial T_k}{\partial z}(x,y,H_k) = \lambda_k m_k + e_k =$$

$$= 2(G_k + G_{k+1})^{-1}\left[\bar{T}_{k+1} - \bar{T}_k + \frac{1}{3}(e_k G_k - e_{k+1} G_{k+1})\right], \ k = \overline{1, N-1}, \quad (20)$$

$$Q_N^B = -\lambda_N m_N - e_N = -2(G_N + G_{N-1})^{-1}\left[\bar{T}_N - \bar{T}_{N-1} + \right.$$

$$\left. + \frac{e_{N-1}}{3} G_{N-1} + e_N\left(G_{N-1} + \frac{2}{3} G_N\right)\right], \quad (21)$$

$$Q_1^H = \lambda_1 m_1 - e_1 =$$

$$= \frac{1}{2}(G_1 + G_2)^{-1}\left[\bar{T}_2 - \bar{T}_1 - \frac{e_2}{3} G_2 - e_1\left(G_2 + \frac{2}{3} G_1\right)\right]. \quad (22)$$

В случае $N=3$ формулы (20-22) сохраняются, а при $N=2$ формулы (21), (22) сохраняются, а (20) справедлива при $k=1$ Интегральные потоки через поверхности определяются по квадратурной формулой прямоугольника на узлах сетки (x_i, y_i):

$$Q_z^- = \int_{-L_y}^{L_y} \int_{-L_x}^{L_x} Q_1^H(x,y)\,dx\,dy \approx \sum_{i=1}^{N_1} \sum_{j=1}^{N_2} h_i^{(x)} h_j^{(y)} (Q_1^H)_{i,j};$$

$$Q_z^+ = \int_{-L_y}^{L_y} \int_{-L_x}^{L_x} Q_N^B(x,y)\,dx\,dy \approx \sum_{i=1}^{N_1} \sum_{j=1}^{N_2} h_i^{(x)} h_j^{(y)} (Q_N^B)_{i,j};$$

$$Q_k = -\int_{-L_y}^{L_y} \int_{-L_x}^{L_x} Q_k^B(x,y)\,dx\,dy \approx -\sum_{i=1}^{N_1} \sum_{j=1}^{N_2} h_i^{(x)} h_j^{(y)} (Q_k^B)_{i,j}, \quad k = \overline{1, N-1},$$

где N_1, N_2 - число внутренних узловых линий сетки, а величины Q определяются в серединах элементарных прямоугольников, т.е. в точках с координатами

$$(x_{i+1} + x_i)/2, \quad (y_{j+1} + y_j)/2.$$

Формула (6) справедлива также для одного слоя $(N=1)$ например, слоя электролита, когда условия сопряжения (3) отсутствуют. Коэффициенты m_1, e_1 определяются из граничных условий (4), которые удобнее переписать в виде

$$\lambda_1 \frac{\partial T_1}{\partial z}(x,y,H_0) = \alpha_1 (T_1 - T_{B_1});$$

$$-\lambda_1 \frac{\partial T_1}{\partial z}(x,y,H_1) = \tilde{\alpha}_1 (T_1 - \tilde{T}_{B_1}), \tag{23}$$

где $\tilde{\alpha}_1, \tilde{T}_{B_1}$ - соответствующие коэффициенты на верхней поверхности $(z = H_1)$. В этом случае из (10), (11) с учетом (7) следует, что

$$\begin{cases} \lambda_1 m_1 (1 + \alpha_1 G_1/2) - e_1 (1 + \alpha_1 G_1/6) = \alpha_1 (\bar{T}_1 - T_{B_1}), \\ \lambda_1 m_1 (1 + \tilde{\alpha}_1 G_1/2) + e_1 (1 + \tilde{\alpha}_1 G_1/6) = \tilde{\alpha}_1 (\tilde{T}_{B_1} - \bar{T}_1), \end{cases} \tag{24}$$

где $e_1 = -A_1 \bar{T}_1 + c_1,$

$$A_1 = (\tilde{\alpha}_1 + \alpha_1 + \alpha_1 \tilde{\alpha}_1 G_1)\delta^{-1},$$

$$c_1 = (\tilde{\alpha}_1 \tilde{T}_{B_1}(1 + \alpha_1 G_1/2) + \alpha_1 T_{B_1}(1 + \tilde{\alpha}_1 G_1/2))\delta^{-1},$$

$$\delta = 2 + \frac{2}{3}\alpha_1 G_1 + \frac{2}{3}\tilde{\alpha}_1 G_1 + \frac{1}{6}\alpha_1 \tilde{\alpha}_1 G_1^2.$$

Следовательно, осредненное уравнение (5) имеет вид

$$2\ell_1^{-1}(-A_1 \bar{T}_1 + c_1) + L(\bar{T}_1) + \bar{q}_1 = 0. \tag{25}$$

Если заданы граничные условия первого рода, например, на части нижней $(z = H_0)$ и верхней поверхности $(z = H_1)$, то в (25) берется $\alpha_1 \to \infty$, $\tilde{\alpha}_1 \to \infty$, т.е.

$$A_1 = G_1 \delta^{-1},\ c_1 = G_1 (T_{B_1} + \tilde{T}_{B_1})\delta^{-1}/2,\ \delta = G_1^2/6.$$

Для определения потоков имеем

$$Q_1^B = -\lambda_1 m_1 - e_1 = (-2\tilde{\alpha}_1 \tilde{T}_{B_1}(1 + \alpha_1 G_1/3) - \alpha_1 T_{B_1} \tilde{\alpha}_1 G_1/3 + \\ + \bar{T}_1 (2\tilde{\alpha}_1 + \alpha_1 \tilde{\alpha}_1 G_1))\delta^{-1},$$

$$Q_1^H = \lambda_1 m_1 - e_1 = (-2\alpha_1 T_{B_1}(1 + \tilde{\alpha}_1 G_1/3) - \tilde{\alpha}_1 \tilde{T}_{B_1} \alpha_1 G_1/3 + \\ + \bar{T}_1 (2\alpha_1 + \alpha_1 \tilde{\alpha}_1 G_1))\delta^{-1},$$

так как из (23)

$$\lambda_1 m_1 = (\tilde{\alpha}_1(\tilde{T}_{B_1}-\bar{T}_1)(1+\alpha_1 G_1/6)+\alpha_1(\bar{T}_1-T_{B_1})(1+\tilde{\alpha}_1 G_1/6))\delta^{-1}.$$

Аналогично вычисляются интегральные потоки тепла через верхную и нижную поверхность слоя электролизера.

В случае $u_\kappa = v_\kappa = 0,\ \kappa = \overline{1,N}$ уравнение (25) имеет самосопряженный вид и его разностный аналог можно решать итерационным методом Холецкого /3/. В этом случае также можно решать системы уравнений (18), (19), если еще применять итерации между отдельными уравнениями. Рассмотрим разностный аналог уравнения (25), при $u_1 \neq 0,\ v_1 \neq 0$, используя экспоненциальную аппроксимацию /4/:

$$\tilde{B}^{(1)}_{ij}(T_{i+1,j}-T_{i,j})-\tilde{A}^{(1)}_{ij}(T_{ij}-T_{i-1,j})+\tilde{B}^{(2)}_{i,j}(T_{i,j+1}-T_{ij})-$$
$$-\tilde{A}^{(2)}_{ij}(T_{ij}-T_{i,j-1})+\tilde{Q}_{ij}\hbar^{(x)}_i\hbar^{(y)}_j=-\tilde{F}_{ij}\hbar^{(x)}_i\hbar^{(y)}_j, \qquad (26)$$
$$i=\overline{1,N_1},\ \ j=\overline{1,N_2},$$

где

$$\tilde{B}^{(1)}_{ij}=f(\beta^{(1)}_{i+1/2,j}h^{(x)}_{i+1})\lambda_{i+1/2,j}\hbar^{(y)}_j(h^{(x)}_{i+1})^{-1}>0,$$

$$\tilde{A}^{(1)}_{ij}=g(\beta^{(1)}_{i-1/2,j}h^{(x)}_i)\lambda_{i-1/2,j}\hbar^{(y)}_j(h^{(x)}_i)^{-1}>0,$$

$$\tilde{B}^{(2)}_{ij}=f(\beta^{(2)}_{i,j+1/2}h^{(y)}_{j+1})\lambda_{i,j+1/2}\hbar^{(x)}_i(h^{(y)}_{j+1})^{-1}>0,$$

$$\tilde{A}^{(2)}_{ij}=g(\beta^{(2)}_{i,j-1/2}h^{(y)}_j)\lambda_{i,j-1/2}\hbar^{(x)}_i(h^{(y)}_j)^{-1}>0,$$

$$\beta^{(1)}=\rho c_p u/\lambda,\quad \beta^{(2)}=\rho c_p v/\lambda,$$

$$T_{i,j}=\bar{T}_1(x_i,y_j),\ \tilde{Q}_{i,j}=2\ell_1^{-1}A_1(x_i,y_j),$$

$$\tilde{F}_{ij}=\bar{q}_1(x_i,y_j)+2\ell_1^{-1}C_1(x_i,y_j),$$

$$\hbar^{(x)}_i=(h^{(x)}_i+h^{(x)}_{i+1})/2,\ \ \hbar^{(y)}_j=(h^{(y)}_j+h^{(y)}_{j+1})/2.$$

Для вычислений функций

$$f(s)=s/(e^s-1),\ g(s)=s/(1-e^{-s})$$

можно применять степенную аппроксимацию /4/ в виде

$$f(s)=\tilde{f}(|s|)+max(-s,0),\ g(s)=\tilde{f}(|s|)+max(s,0),$$

где $$\tilde{f}(|s|)=max\,(0,(1-0{,}1|s|)^5).$$

Аппроксимация граничных условий (2) на боковых стенках ванны $(x=\pm L_x,\ y=\pm L_y)$ не представляет больших трудностей. Так при $i=1$ в уравнении (26) надо положить

$$T_{1,j}-T_{0,j}=r_{1,j}\,(T_{1,j}-T_B),$$

где

$$r_{1,j}=1/(0{,}5+\lambda_{1/2,j}/(\alpha_{1/2,j}\cdot h_1^{(x)})),\ j=\overline{1,N_2}.$$

Аналогично, при $j=1,\ i=N_1,\ j=N_2$ имеем

$$T_{N_1+1,j}-T_{N_1,j}=-r_{N_1,j}(T_{N_1,j}-T_B),\ \ j=\overline{1,N_2},$$
$$T_{i,1}-T_{i,0}=r_{i,1}(T_{i,1}-T_B),\quad i=\overline{1,N_1},$$
$$T_{i,N_2+1}-T_{i,N_2}=-r_{i,N_2}(T_{i,N_2}-T_B),\ \ i=\overline{1,N_1},$$

где

$$r_{i,1}=1/(0{,}5+\lambda_{i,1/2}/(\alpha_{i,1/2}\,h_1^{(y)})),$$
$$r_{N_1,j}=1/(0{,}5+\lambda_{N_1+1/2,j}/(\alpha_{N_1+1/2,j}\cdot h_{N_1}^{(x)})),$$
$$r_{i,N_2}=1/(0{,}5+\lambda_{i,N_2+1/2}/(\alpha_{i,N_2+1/2}\,h_{N_2}^{(y)})).$$

При численном решении уравнения (25) важно, чтобы для дифференциальной и дискретной задачи выполнялись интегральные законы сохранения. После интегрирования уравнения (25) по сечению электролита с учетом $div\,\vec{v}_\kappa=0$ следует

$$Q_F=Q_x^+ + Q_x^- + Q_y^+ + Q_y^-,$$

где

$$Q_F=\int_{-L_x}^{L_x}\int_{-L_y}^{L_y}(\bar{q}_1+2\ell_1^{-1}(c_1-A_1\bar{T}_1))\,dx\,dy,$$

$$Q_x^{\pm}=\mp\int_{-L_y}^{L_y}\lambda\frac{\partial\bar{T}_1}{\partial x}\Big|_{x=\pm L_x}dy,\quad Q_y^{\pm}=\mp\int_{-L_x}^{L_x}\lambda\frac{\partial\bar{T}_1}{\partial y}\Big|_{y=\pm L_y}dy$$

есть тепловые потоки соответственно из-за электрического тока и через боковые стенки ванны. Аналогично, суммируя разностные уравнения (26) по узловым точкам сетки с учетом,

что
$$g(s)=f(s)+s,\ g(0)=f(0)=1,$$
$$(u_1)_{N_1+1/2,j}=(u_1)_{1/2,j}=(v_1)_{i,1/2}=(v_1)_{i,N_1+1/2}=0,$$
имеем
$$Q_F^h+R=Q_x^{+h}+Q_x^{-h}+Q_y^{+h}+Q_y^{-h},$$
где
$$Q_F^h=\sum_{i=1}^{N_1}\sum_{j=1}^{N_2}\hbar_i^{(x)}\hbar_j^{(y)}(\bar{q}_1+2\ell_i^{-1}(c_1-A_1\bar{T}_1))_{i,j},$$
$$Q_x^{+h}=-\sum_{j=1}^{N_2}\hbar_j^{(y)}\lambda_{N_1+1/2,j}(T_{N_1+1,j}-T_{N_1,j})(h_{N_1+1}^{(x)})^{-1},$$
$$Q_x^{-h}=\sum_{j=1}^{N_2}\hbar_j^{(y)}\lambda_{1/2,j}(T_{1,j}-T_{0,j})(h_1^{(x)})^{-1},$$
$$Q_y^{+h}=-\sum_{i=1}^{N_1}\hbar_i^{(x)}\lambda_{i,N_2+1/2}(T_{i,N_2+1}-T_{i,N_2})(h_{N_2+1}^{(y)})^{-1},$$
$$Q_y^{-h}=\sum_{i=1}^{N_1}\hbar_i^{(x)}\lambda_{i,1/2}(T_{i,1}-T_{i,0})(h_1^{(y)})^{-1},$$
$$R=\rho c_p\sum_{j=1}^{N_2}\sum_{i=1}^{N_1}\hbar_i^{(x)}\hbar_j^{(y)}T_{ij}\tilde{D}_{ij},\quad \tilde{D}_{ij}=((u_1)_{i+1/2,j}-$$
$$-(u_1)_{i-1/2,j})(\hbar_i^{(x)})^{-1}+((v_1)_{i,j+1/2}-(v_1)_{i,j-1/2})(\hbar_j^{(y)})^{-1}.$$

Видно, что величины $Q_F^h, Q_x^{\pm h}, Q_y^{\pm h}$ соответственно аппроксимируют потоки тепла $Q_F, Q_x^{\pm}, Q_y^{\pm}$, а R есть величина дисбаланса закона сохранония. Для занумерования величины R достаточно потребовать, чтобы разностная аппроксимация уравнения неразрывности $(\operatorname{div}\vec{v})_{ij}=\tilde{D}_{ij}=0$ выполнялась точно в узлах сетки.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Бояревич В.В., Калис Х.Э., Миллере Р.П., Пагодкина И.Э. Математическая модель для расчета параметров алюминиевого электролизера// Цветные металлы. - 1988. - № 7. - С.63-67.

2. Буйкис А.А. Интерполяция интегральных средних кусочно-гладкой функции параболическим сплайном// Латвийский математический ежегодник, 1985. - Т.29. - С.191-193.

3. ELLDEC-комплекс программ для решения эллиптических краевых задач. Часть 2. Подпрограмма ICCGO. Отдел разностных методов НИВЦ МГУ, 1980.-Ч.2. - С. 13.1-13.26.

4. Патанкар С. Численные методы решения задач теплообмена и динамики жидкости. - М.: Энергоатомиздат, 1984. - 151 с.

МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ.
ПРИКЛАДНЫЕ ЗАДАЧИ МАТЕМАТИЧЕСКОЙ ФИЗИКИ, вып.I
Рига: Латвийский университет, 1990

УДК 517.947:519.6:556.388

З.Ю. Титушкина
Ин-т физики ЛАН,
Рига

МОДЕЛИРОВАНИЕ ДВИЖЕНИЯ ЗАГРЯЗНЯЮЩИХ ВЕЩЕСТВ В ПОДЗЕМНЫХ ВОДАХ И ПОЧВЕ

В связи с активным воздействием человека на природу большую угрозу ресурсам подземных вод в последнее время представляют загрязнения. Под загрязнением подземных вод понимается любое ухудшение качества, делающее их непригодными для использования. Так как в почве происходит движение подземных вод и диффузия загрязнителя, этот процесс может распространяться на большие расстояния и делать непригодными для употребления подземные воды на значительном удалении от источника загрязнения. Вместе с этим при движении загрязнённой воды в почве идёт и её очистка вследствие выпадения загрязняющих веществ на частицы породы - сорбции загрязнителя. Обратимость сорбции приводит к повторному загрязнению воды за счёт десорбции загрязняющих веществ при изменении внешних условий.

Таким образом, в зоне загрязнения возникает и развивается динамичное концентрационное поле загрязняющих веществ, находящихся в воде между частицами породы в свободном состоянии. Параллельно появляется и второе концентрационное поле - поле сорбированных почвой загрязняющих веществ. В дальнейшем рассматриваются загрязнения подземных вод химической природы. Под этим понимается появление в составе подземных вод химических веществ выше допустимых концентраций. При математическом моделировании движения загрязняющих веществ следует учитывать динамику свободного загрязнителя в воде, загрязнителя, сорбированного на частицах породы, и характер самого процесса сорбции, обусловленный конкретным видом почвы и загрязнителя.

Описание модели. Рассмотрим двумерную пространственную область Ω (рис.I). В Ω движется вызванный внешними причинами поток подземных вод со скоростью фильтрации $\bar{v}$ в направлении оси x. Он входит в область через границу $[0,Y]$. Предполагается, что в момент времени $t=0$ произошёл выброс загрязняющих веществ на отрезке $[y_1,y_2]$. В дальнейшем этот источник загрязнения действует в зоне выброса $[y_1,y_2]$ с той же или переменной интенсивностью. Потоком подземных вод загрязняющие вещества увлекаются в направлении оси x со скоростью фильтрации $\bar{v}$. Прямоугольник $ABGF$, одной из сторон которого является отрезок $[y_1,y_2]$, назовём конвективным следом зоны выброса. Общепринято для задач миграции подземных вод не учитывать диффузию в направлении оси x /I/. Диффузия загрязнителя вдоль оси y учитывается с коэффициентом диффузии D.

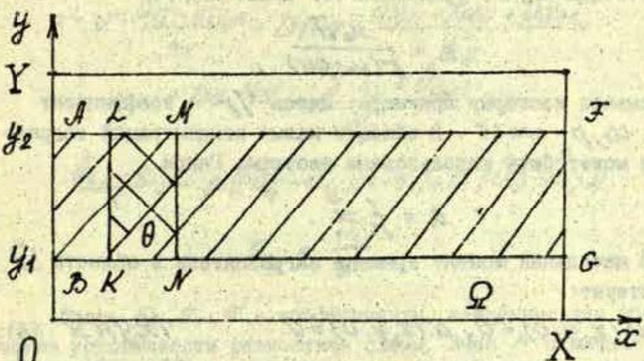


Рис. I. Область распространения и сорбции загрязняющих веществ.

Обозначим через $u(x,y,t)$ концентрацию загрязняющих веществ, находящихся между частицами породы в свободном состоянии $a(x,y,t)$ - концентрацию сорбированных загрязняющих веществ, $\tilde{u}(x,y,t)$ - равновесную концентрацию, характеризующую подвижное динамическое равновесие процессов сорбции и десорбции. Здесь t - время.

Уравнения, описывающие процесс в области Ω, имеют вид /I, 2/

$$\beta(u-\tilde{u})+m\frac{\partial u}{\partial t}=-v\frac{\partial u}{\partial x}+D\frac{\partial^2 u}{\partial y^2} \qquad (I)$$

$$\frac{\partial a}{\partial t}=\beta(u-\tilde{u}) \qquad (2)$$

$$a=f(\tilde{u}), \qquad (3)$$

где β - кинетический коэффициент, зависящий от свойств породы и загрязняющего вещества, m - пористость.

Уравнение (I) описывает конвективный и диффузионный перенос загрязнителя, уравнение (2) - кинетику сорбции загрязнителя в проводящей среде, и уравнение (3) характеризует изотерму сорбции.

В общем случае уравнение (3) имеет вид /3/

$$a=\frac{u_0\tilde{u}}{\gamma(u_0+pu)}$$

и описывает изотерму Лэнгмюра. Здесь $1/\gamma$ - коэффициент Генри; $u_0, p - const$. В области малых концентраций загрязнителя может быть использована изотерма Генри

$$a=\frac{1}{\gamma}\tilde{u}.$$

В начальный момент времени загрязнитель в области Ω отсутствует:

$$u(x,y,0)=0,\ a(x,y,0)=0 \qquad (x,y)\in\Omega \qquad (4)$$

В общем случае на границах $y=0$, $y=Y$ может быть задана величина потока вещества, вызванная его диффузией:

$$-D\frac{\partial u}{\partial y}(x,0,t)=\psi_1(x,t),$$

$$D\frac{\partial u}{\partial y}(x,Y,t)=\psi_2(x,t), \qquad (5)$$

где ψ_1, ψ_2 - заданные функции x и t.

При выборе достаточно большой ширины области можно считать, что

$$\psi_1(x,t)\equiv 0\ ,\ \psi_2(x,t)\equiv 0.$$

На левой границе области Ω задаётся концентрация свободного загрязнителя как функция времени:

$$u(0,y,t)=\varphi(y,t). \tag{6}$$

Описание численных алгоритмов. Численное решение задачи (I)-(6) проводилось конечно-разностным методом на равномерной сетке

$$\{x_i=ih_x\ ,\ i=\overline{1,M}\ ;\ y_j=jh_y\ ,\ j=\overline{1,N}\}.$$

Для изотермы Генри уравнения (I)-(3) аппроксимируются выражениями

$$m\,\frac{\hat{u}_{ij}-u_{ij}}{\tau}+\beta\big((u_{ij}-\tilde{u}_{ij})(1-\sigma_0)+\sigma_0(\hat{u}_{ij}-\hat{\tilde{u}}_{ij})\big)=$$

$$=-v\,\frac{u_{ij}-u_{ij-1}}{h_x}+D(1-\sigma)\,\frac{u_{ij-1}-2u_{ij}+u_{ij+1}}{h_y^2}+ \tag{7}$$

$$+D\sigma\,\frac{\hat{u}_{ij-1}-2\hat{u}_{ij}+\hat{u}_{ij+1}}{h_y^2}$$

$$\frac{\hat{a}_{ij}-a_{ij}}{\tau}=\beta\big((u_{ij}-\tilde{u}_{ij})(1-\sigma_1)+\sigma_1(\hat{u}_{ij}-\hat{\tilde{u}}_{ij})\big) \tag{8}$$

$$a_{ij}=\frac{\tilde{u}_{ij}}{\gamma} \tag{9}$$

Здесь $\sigma_0\,,\sigma_1\,,\sigma$ - коэффициенты, введённые для обеспечения устойчивости разностной схемы. Знак $\wedge$ означает верхний временной слой.

Разностное уравнение (7) приводится к прогоночному виду

$$A\hat{u}_{ij-1}-C\hat{u}_{ij}+B\hat{u}_{ij+1}=-F_j\ . \tag{10}$$

Здесь
$$A=B=\frac{D\sigma}{h_y^2}\ ,\ C=\frac{m}{\tau}+\beta\sigma_0-\frac{\beta^2\sigma_0\sigma_1\tau\gamma}{1+\beta\tau\gamma\sigma_1}+\frac{2D\sigma}{h_y^2}\ ,$$

$$F_j = u_{i-1j}\frac{v}{h_x} + (u_{ij+1} + u_{ij-1})\frac{D(1-\sigma)}{h_y^2} + u_{ij}\Big(\frac{m}{\tau} - \frac{v}{h_x} - \frac{2D(1-\sigma)}{h_y^2} -$$
$$-\beta(1-\sigma_0) + \frac{\beta^2\tau\gamma\sigma_0(1-\sigma_1)}{1+\beta\tau\gamma\sigma_1}\Big) + \tilde{u}_{ij}\Big(\beta(1-\sigma_0) + \beta\sigma_0\frac{1-\beta\tau\gamma(1-\sigma_1)}{1+\beta\tau\gamma\sigma_1}\Big).$$

Входные параметры. Численное решение задачи проводилось при постоянных и переменных граничных условиях в зоне выброса. При этом принимались следующие значения коэффициентов: σ =0,5; σ_0 =0,5; σ_1 =0,9; D =0,0001 $м^2$/сут; v =0,1 м/сут; β =0,5;1;2;2,5 1/сут; γ =1,5;2; 4; m =0,4; Y =1 м; X =2,5 м; y_1 =0,2 м; y_2 =0,8 м.

Отношение длины зоны выброса $[y_1, y_2]$ к длине границы $[0,Y]$ составляло 3/5.

При постоянных граничных условиях φ имела вид

$$\varphi(y,t) = \begin{cases} 0, & 0<y<y_1,\ y_2<y\le Y; \\ 1, & y_1\le y\le y_2. \end{cases}$$

При переменных граничных условиях на отрезке $[y_1, y_2]$ она принималась в начале процесса равной 1, а затем изменялась от 1 до 0 по закону $\varphi(t) = -at + b$, где a и b положительные постоянные.

Анализ результатов показывает, что концентрации свободного, сорбированного и равновесного с сорбированным загрязнителя уменьшаются как в направлении движения конвективного потока, так и от середины области Ω к границам y =0 и $y = Y$. Наибольших значений величина u и a достигает на конвективном следе. В области диффузионного загрязнения $OBCX$ значения u и a существенно меньше.

На прямой y =0,1, параллельной скорости движения жидкости и расположенной между границей области и конвективным следом, (рис.2) с течением времени происходит параболический всплеск концентрации. Наибольшее значение u = =0,450.10^{-2} наблюдается в момент времени t =7. Это происходит потому, что загрязняющее вещество поступает сюда только диффузионным путём, а конвекция сносит его в на-

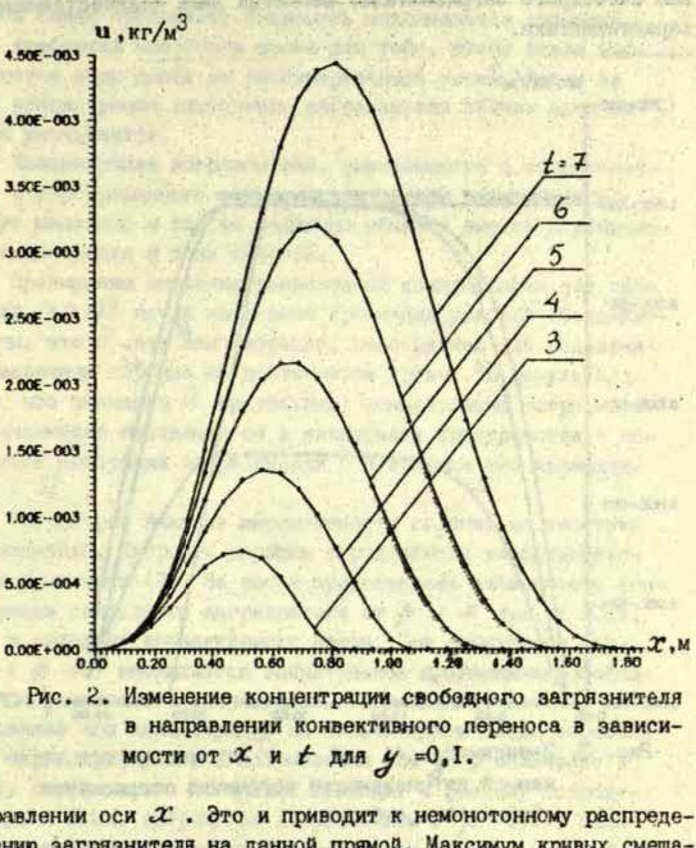


Рис. 2. Изменение концентрации свободного загрязнителя в направлении конвективного переноса в зависимости от x и t для y =0,I.

правлении оси x . Это и приводит к немонотонному распределению загрязнителя на данной прямой. Максимум кривых смещается с течением времени в направлении оси x , потому что загрязняющие вещества, поступившие из центра области за счёт диффузии постепенно сносятся конвективным потоком. Увеличение максимальной концентрации объясняется дополнительным диффузионным потоком загрязнителя из точек, лежащих далее вдоль оси x .

Изменение концентрации сорбированного загрязнителя вблизи конвективного следа зоны выброса аналогично изменению свободного загрязнителя. Меняются лишь количественные характеристики.

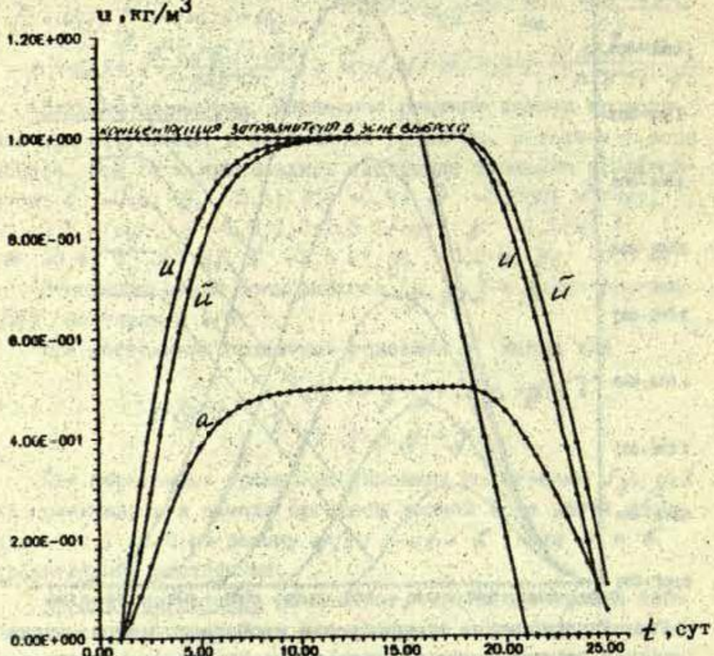


Рис. 3. Зависимость u , a и $\tilde{u}$ от времени при переменной интенсивности источника загрязнения вблизи зоны выброса.

На рис.3 представлена зависимость концентрации свободного, сорбированного и равновесного с сорбированным загрязнителя от времени на конвективном следе вблизи зоны выброса при переменных граничных условиях. Вблизи этой зоны концентрация свободного загрязнителя резко увеличивается в начальной фазе процесса, а затем растет медленно и равномерно $(6 < t < 12)$, достигая максимального значения, равного I. При уменьшении концентрации загрязнителя в зоне выброса величина свободной концентрации вблизи этой зоны на конвективном следе продолжает сохранять максимальное значение, т.к. требуется некоторое время для того, чтобы более чистый поток воды дошёл до рассматриваемой точки. Вслед за этим концентрация свободного загрязнителя вблизи зоны выброса уменьшается.

Концентрация загрязнителя, равновесного с сорбированным, и сорбированного загрязнителя вблизи зоны выброса растут медленно и так же медленно убывают вместе с убыванием концентрации в зоне выброса.

Превышение значения равновесной концентрации над свободной $(t > 18)$ после изменения граничных условий объясняется тем, что $\tilde{u}$ это концентрация, необходимая для поддержания величины сорбции на достигнутом уровне. В результате того, что значение $\tilde{u}$ превосходит концентрацию загрязнителя фактически находящегося в межпоровом пространстве и начинается десорбция загрязнителя с повторным его перемещением в Ω .

Рассмотрим влияние интенсивности сорбции на кинетику загрязнителя. Скорость сорбции определяется коэффициентом β в уравнении (2). На рис.4 представлена зависимость концентрации свободного загрязнителя от β и x при y =0,5, т.е. в середине конвективного следа. При отсутствии сорбции (β =0) наблюдается значительное продвижение свободного загрязнителя в направлении конвективного потока, уменьшение его концентрации на конвективном следе определяется только диффузией в направлении оси y . Включение в работу сорбционного механизма приводит к резкому сокращению длины зоны, затронутой загрязнением (β =0,5), однако, дальнейшее увеличение интенсивности сорбции (β =0,5-2,5) мало влияет на динамику концентрации свободного загрязнителя.

Влияние коэффициента γ в изотерме Генри на величину свободного и сорбированного загрязнителя исследовалось в характеристической области θ , определяемой прямоугольником $KLMN$. Эта область расположена на конвективном следе вблизи зоны выброса. Выбор этой зоны и её положение по-

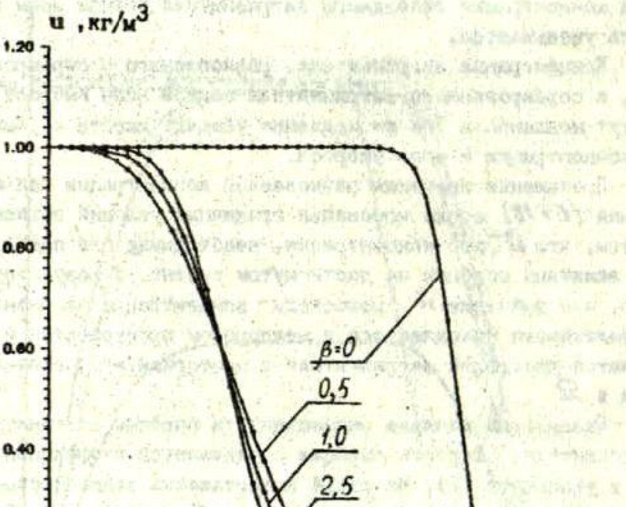


Рис. 4. Зависимость концентрации свободного загрязнителя от величины β (t =10сут; y =0,5м; γ =2).

зволяет исследовать осреднённый отклик моделируемой системы на изменение как внутренних её характеристик, так и граничных условий. В таблице приводятся средние по характеристической области θ значения u и a в зависимости от γ в различные моменты времени. Анализ результатов показывает, что в промежутке времени от 0 до 10 в области

Таблица I

T (сут)	U (кг/м^3) γ=I,5	U (кг/м^3) γ=2	U (кг/м^3) γ=4	A (кг/м^3) γ=I,5	A (кг/м^3) γ=2	A (кг/м^3) γ=4
1.0	.191	.205	.253	.040	.039	.035
2.0	.418	.485	.664	.179	.173	.143
3.0	.594	.670	.844	.310	.287	.202
4.0	.717	.794	.902	.414	.364	.223
5.0	.798	.858	.917	.488	.410	.229
6.0	.849	.891	.921	.537	.436	.230
7.0	.880	.907	.922	.569	.449	.230
8.0	.898	.915	.922	.588	.455	.231
9.0	.909	.919	.922	.600	.458	.231
10.0	.915	.921	.922	.606	.460	.231

θ увеличение γ от I,5 до 4 п,иводит к монотонному возрастанию величины свободного загрязнителя. Характер изменения сорбированного загрязнителя в зависимости от γ иной. Возрастание γ приводит к уменьшению a .

Выражаю признательность Буйкису Андрису Альбертовичу за помощь, оказанную при написании этой статьи.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

I. Шестаков В.М. Динамика подземных вод. - М.: МГУ, 1979. - 368 с.

2. Бочевер Ф.М., Орадовская А.Е. Гидрогеологическое обоснование защиты подземных вод и водозаборов от загрязнений. - М.: Недра, 1972. - 128 с.

3. Лукнер Л., Шестаков В.М. Моделирование геофильтрации. - М.: Недра, 1986. - 407 с.

МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ
ПРИКЛАДНЫЕ ЗАДАЧИ МАТЕМАТИЧЕСКОЙ ФИЗИКИ, вып.I
Рига: Латвийский университет, 1990

УДК 519.6+539.379.4

Р.А. Якушенок
ИМИ ЛУ, Рига

ЧИСЛЕННОЕ РЕШЕНИЕ ЗАДАЧИ ТЕРМОУПРУГОСТИ В НАПРЯЖЕНИЯХ В КРИВОЛИНЕЙНОЙ ОБЛАСТИ

В работе приводится разностная аппроксимация задачи термоупругости для области с участками криволинейных границ. Построена аппроксимация второго порядка точности. Применяется эффективная итерационная схема, описанная в /I/ для случая прямоугольной области.

I. Рассмотрим осесимметричную задачу термоупругости в цилиндрической системе координат (r z). Упруго-деформированное состояние тела в этом случае характеризуют компоненты тензора напряжений $\sigma^{rr}, \sigma^{\varphi\varphi}, \sigma^{zz}, \sigma^{rz}$ и тензора деформаций $\varepsilon^{rr}, \varepsilon^{\varphi\varphi}, \varepsilon^{zz}, \varepsilon^{rz}$.Введем векторы /I,2/:

$$\vec{S} = \begin{pmatrix} s^1 \\ s^2 \\ s^3 \\ s^4 \end{pmatrix} \qquad \vec{e} = \begin{pmatrix} e^1 \\ e^2 \\ e^3 \\ e^4 \end{pmatrix},$$

где $s^1 = \sigma^{rr} - \sigma^{\varphi\varphi}, s^2 = \sigma^{\varphi\varphi}, s^3 = \sigma^{zz}, s^4 = \sigma^{rz}, e^1 = \varepsilon^{rr}, e^2 = \varepsilon^{rr} + \varepsilon^{\varphi\varphi}, e^3 = \varepsilon^{zz}, e^4 = \varepsilon^{rz}$. Используем также вектор перемещения $\vec{u} = \begin{pmatrix} u^r \\ u^z \end{pmatrix}$ с компонентами u^r и u^z. Для определения этих векторов имеем уравнения равновесия

$$L\vec{S} = -\vec{f} \tag{I.I}$$

соотношения Коши

$$\vec{e} = R\vec{u} \tag{I.2}$$

и закона Гука

$$\vec{S} = H\vec{e} - \vec{\beta}\,T \qquad (I.3)$$

в котором учтено тепловое расширение зависящее от температуры Т. В этих формулах:

$$R=\begin{pmatrix} \frac{\partial}{\partial r} & 0 \\ \frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}r & 0 \\ 0 & \frac{\partial}{\partial z} \\ \frac{1}{2}\frac{\partial}{\partial z} & \frac{1}{2}\frac{\partial}{\partial r} \end{pmatrix};\quad L=\begin{pmatrix} \frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}r & \frac{\partial}{\partial r} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \frac{\partial}{\partial z} & \frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}r \end{pmatrix}$$

$$H=\begin{pmatrix} 4\mu & -2\mu & 0 & 0 \\ -2\mu & \lambda+2\mu & \lambda & 0 \\ 0 & 0 & \lambda+2\mu & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 2\mu \end{pmatrix};\ \vec{\beta}=\begin{pmatrix} 0 \\ \beta \\ \beta \\ 0 \end{pmatrix};\ \vec{f}=\begin{pmatrix} f^r \\ f^z \end{pmatrix};\ \beta=(3\lambda+2\mu)\alpha;$$

$\lambda;\mu$ - коэффициенты Ламе; α - коэффициент температурного расширения; $f^r; f^z$ - компоненты вектора массовых сил.

Граничные условия будем задавать в напряжениях. На внешней границе запишем:

$$(S^1+S^2)n_r + S^4 n_z = P^r\,, \qquad (I.4)$$

$$S^4 n_r + S^3 n_z = P^z\,, \qquad (I.5)$$

где P^r, P^z - компоненты усилия приложенного к границе, а n_r, n_z - компоненты вектора нормали. На оси симметрии запишем

$$u^r|_0 = 0\ ;\quad S^4|_0 = 0\,. \qquad (I.6)$$

Как известно /2/ оператор $-L$ сопряжен к R, т.е. $-L=R^*$.

Воспользуемся разностным методом. В начале рассмотрим разностные аналоги операторов R и R^* в прямоугольной области $z_0 \leq z \leq z_M$; $r_0 \leq r \leq r_N$; $r_0 = 0$ /2/. Введем неравномерную сетку с шагами h_i, g_j. В точках с координатами $(r_i + h_{i+1}/2, z_j + g_{j+1}/2)$ будем определять $S^k_{i+1/2\,j+1/2}$; $e^k_{i+1/2\,j+1/2}$; $k=1,2,3$, в точках $(r_i, z_j) - S^4_{ij}$; e^4_{ij} $(r_i, z_j + g_{j+1}/2) - U^r_{ij+1/2}$; $(r_i + h_{i+1}/2, z_j) - U^z_{i+1/2\,j}$ (рис.I).

Запишем в разностном виде соотношения Коши - оператор R_h:

$$e^1_{i+1/2\,j+1/2} = U^r_{r,\,ij+1/2} = \frac{U^r_{i+1\,j+1/2} - U^r_{ij+1/2}}{h_{i+1}}; \quad e^2_{i+1/2\,j+1/2} = \frac{1}{r_{i+1/2}}(rU^r)_{r\,ij+1/2}$$

$$e^3_{i+1/2\,j+1/2} = U^z_{z,\,i+1/2\,j} = \frac{U^z_{i+1/2\,j+1} - U^z_{i+1/2\,j}}{g_{j+1}}; \quad 0 \leq i \leq N-1; \; 0 \leq j \leq M-1;$$

$$e^4_{ij} = \frac{1}{2}\left(U^r_{\bar{z},\,ij-1/2} + U^z_{\bar{r},\,i-1/2\,j}\right) = \frac{1}{2}\left(\frac{U^r_{ij+1/2} - U^r_{ij-1/2}}{\tilde{g}_j} + \frac{U^z_{i+1/2\,j} - U^z_{i-1/2\,j}}{\tilde{h}_i}\right);$$

$$1 \leq i \leq N-1; \; 1 \leq j \leq M-1; \; \tilde{h}_i = \frac{1}{2}(h_{i+1} + h_i); \; \tilde{g}_j = \frac{1}{2}(g_{j+1} + g_j).$$

Затем можно построить $R^*_h = -L_h$, получив тем самым в разностном виде уравнения равновесия:

$$\frac{1}{r_i}(rS^1)_{\bar{r},\,i-1/2\,j+1/2} + S^2_{\bar{r},\,i-1/2\,j+1/2} + S^4_{z,\,ij} = -f^r_{ij+1/2}; \; 1 \leq i \leq N-1; \; 0 \leq j \leq M-1;$$

$$S^3_{\bar{z},\,i+1/2\,j-1/2} + \frac{1}{r_{i+1/2}}(rS^4)_{r,\,ij} = -f^z_{i+1/2\,j}; \; 0 \leq i \leq N-1; \; 1 \leq j \leq M-1,$$

и граничные условия:

$$S^1_{N-1/2\,j+1/2}\frac{r_{N-1/2}}{r_N} + S^2_{N-1/2\,j+1/2} = P^r_{N-1/2\,j+1/2}; \; U^r_{0j+1/2} = 0; \; 0 \leq j \leq M-1;$$

$$S^3_{i+1/2\,1/2} = P^z_{i+1/2\,1/2}; \; S^3_{i+1/2\,M-1/2} = P^z_{i+1/2\,M-1/2}; \; 0 \leq i \leq N-1;$$

$$S^4_{i0} = P^r/_{z_M i}; \; S^4_{iM} = P^r/_{z_0 i}; \; 0 \leq i \leq N;$$

$$S^4_{Nj} = P^z/_{r_N j}; \; S^4_{0j} = 0; \; 0 \leq j \leq M.$$

Учитывая уравнения равновесия (I), можно записать:

$$P^r_{N-1/2\,j+1/2} = P^r\big|_{r_N j+1/2} + (P^z_{z,r_N j} - f^r_{N-1/2\,j+1/2})\,h_N/2$$

$$P^z_{i+1/2\,1/2} = P^z\big|_{z_0 i+1/2} - [(rP^r)_{r,z_0 i}/r_{i+1/2} - f^z_{i+1/2\,1/2}]\,g_1/2$$

$$P^z_{i+1/2\,M-1/2} = P^z\big|_{z_M i+1/2} + [(rP^r)_{r,z_0 i}/r_{i+1/2} - f^z_{i+1/2\,M-1/2}]\,g_M/2.$$

Тогда при h_i, g_j - постоянных получим аппроксимацию второго порядка.

Закон Гука запишем следующим образом:

$$\begin{pmatrix} S^1 \\ S^2 \\ S^3 \end{pmatrix}_{i+1/2\,j+1/2} = \begin{pmatrix} 4\mu & -2\mu & 0 \\ -2\mu & \lambda+2\mu & \lambda \\ 0 & \lambda & \lambda+2\mu \end{pmatrix}_{i+1/2\,j+1/2} \begin{pmatrix} e^1 \\ e^2 \\ e^3 \end{pmatrix}_{i+1/2\,j+1/2} + \begin{pmatrix} 0 \\ \beta \\ \beta \end{pmatrix}_{i+1/2\,j+1/2} \cdot T_{i+1/2\,j+1/2}$$

$$S^4_{ij} = 2\mu_{ij}\,e^4_{ij}.$$

Как уже было сказано эта аппроксимация имеет место в случае прямоугольной области. Тогда граничные условия существенно упрощаются за счет того, что одна из компонент нормали равна 0, а другая - I. Далее попытаемся получить аппроксимацию граничных условий для области отличной от прямоугольной.

Проведем в рассматриваемой прямоугольной области линию, начиная с точки, индексы координат которой $NL+1/2$, $M-1>L>0$, если $M<N$ или $M-1>L>M-N$, если $M>N$, по точкам с индексами $N-1/2\;L+1,\;N-1\;L+3/2,\ldots,$ $N-K+1/2\;L+K,\ldots,N-(M-L)+1/2\;M\;(K=1/2,1,3/2,2,\ldots,M-L-1/2,M-L)$ (Рис.I). Указанные точки это точки, в которых по выбранной аппроксимации определяются смещения $U^r_{N-K+1/2\,L+K}$ при полуцелых K и $U^z_{N-K+1/2\,L+K}$ при целых значениях K. Эту линию будем считать границей области.

Выберем для более подробного рассмотрения какое либо полуцелое значение K и введем обозначение $N-K+1/2=I$, $L+K=J+1/2$ - точка на границе, в которой определяется компонента смещения $U^r_{I\,J+1/2}$. Запишем в этой точке граничное условие (I.4). Примем во внимание, что

$n_r = \frac{g_{J+1}}{\sqrt{g^2_{J+1}+\tilde{h}^2_I}}$, $n_z = \frac{\tilde{h}_{I+K}}{\sqrt{g^2_{J+1}+\tilde{h}^2_I}}$ и при помощи ряда Тейлора выразим $S^1_{IJ+1/2}$ и $S^2_{IJ+1/2}$ через $S^1_{I-1/2\,J+1/2}$ и $S^2_{I-1/2\,J+1/2}$, а $S^4_{IJ+1/2}$ через S^4_{IJ}. Тогда, учитывая еще уравнение равновесия (I) получим:

$$\left(S^1_{I-1/2\,J+1/2}\frac{r_{I-1/2}}{r_I} - S^2_{I-1/2\,J+1/2}\right)\frac{g_{J+1}}{\sqrt{g^2_{J+1}+\tilde{h}^2_I}} + \tag{I.7}$$
$$+ S^4_{IJ}\frac{\tilde{h}_I}{\sqrt{g^2_{J+1}+\tilde{h}^2_I}} = P^r_{IJ+1/2} + f^r_{IJ+1/2}\frac{g_{J+1}\tilde{h}_I}{2\sqrt{g^2_{J+1}+\tilde{h}^2_I}}.$$

Аналогичным образом из условия (I.5) в точке $I+1/2\,J$ получим

$$S^4_{IJ}\frac{r_I}{r_{I+1/2}}\frac{\tilde{g}_J}{\sqrt{\tilde{g}^2_J+h^2_{I+1}}} + S^3_{I+1/2\,J-1/2}\frac{h_{I+1}}{\sqrt{\tilde{g}^2_J+h^2_{I+1}}} = P^z_{I+1/2\,J} + \tag{I.8}$$
$$+ \frac{h_{I+1}\,\tilde{g}_J}{2\sqrt{\tilde{g}^2_J+h^2_{I+1}}}.$$

Эти выражения при равномерных шагах аппроксимируют граничные условия (I.4) и (I.5) со вторым порядком точности.

В реальной задаче с криволинейной областью приходится подстраивать разностную сетку так, чтобы точки $IJ+1/2$ и $I+1/2\,J$ попали на криволинейный участок границы. Учитывая возможность переменных шагов h_i и g_j такую сетку можно подстроить для достаточно широкого круга областей. Ограничения здесь очевидно будут накладываться из-за возможности чрезмерного измельчения шага в каком-либо направлении и образования неоправданно большого количества узлов сетки.

Для решения системы уравнений, получаемой в результате аппроксимации в работе использовалась итерационная схема:

$$\frac{\vec{S}^{m+1}-\vec{S}^m}{\tau_{m+1}} + HRC^{-1}(R^*\vec{S}^m + \vec{f}) = 0. \tag{I.9}$$

В /I/ эта итерационная схема использовалась для задачи в прямоугольной области. Там же был построен оператор C исходя из разностного оператора Ламе R^*HR, следуя идеям методов неполного разложения Холецкого /3/ и /4/ для уравнения эллиптического типа с одной неизвестной сеточной функцией. В рассматриваемом случае для MAF

Таблица. Значения напряжений σ^{rr} (верхнее число в ячейке), $\sigma^{\varphi\varphi}$ (среднее), σ^{zz} (нижнее) в точках сетки, полученные в расчете при отсеченном угле области

I,9	-I,003 -I,003 0	0,69I -I,345 0			
I 7	2,380 2,380 I,283	2,25I I,75I I,I69	I,9I5 0,444 0,846		
I,5	3,978 3,978 2,78I	3,606 3,I77 2,485	2,86I I,530 I,759	I,757 -0,990 0,33I	
I,3	4,650 4,650 3,957	4,I70 3,753 3,495	3,242 I,933 2,403	I,964 -0,84I 0,339	0,5I3 -4,620 -3,2I3
I,I	4,884 4,884 4,584	4,359 3,942 4,026	3,365 2,042 2,732	2,024 -0,84I 0,340	0,525 -4,740 -3,645
0,9	4,896 4,896 4,58I	4,368 3,95I 4,026	3,373 2,052 2,736	2,038 -0,833 0,354	0,525 -4,737 -3,646
0,7	4,686 4,686 3,948	4,203 3,789 3,492	3,27I I,968 2,4I0	I,983 -0,8I2 0,358	0,5I3 -4,605 -3,222
0,5	4,038 4,038 2,760	3,669 3,240 2,470	2,929 I,609 I,760	I,838 -0,9I6 0,330	0,492 -4,328 -2,367
0,3	2,445 2,445 I,257	2,3I9 I,824 I,I48	2,0I7 0,540 0,859	I,442 -I,496 0,2I6	0,492 -4,434 -I,I67
0,I	-0,972 -0,972 0	-0,668 -I,3I9 0	-0,I62 -2,048 0	0,435 -3,255 0	0,573 -5,I5I 0
z / r	0,I	0,3	0,5	0,7	0,9

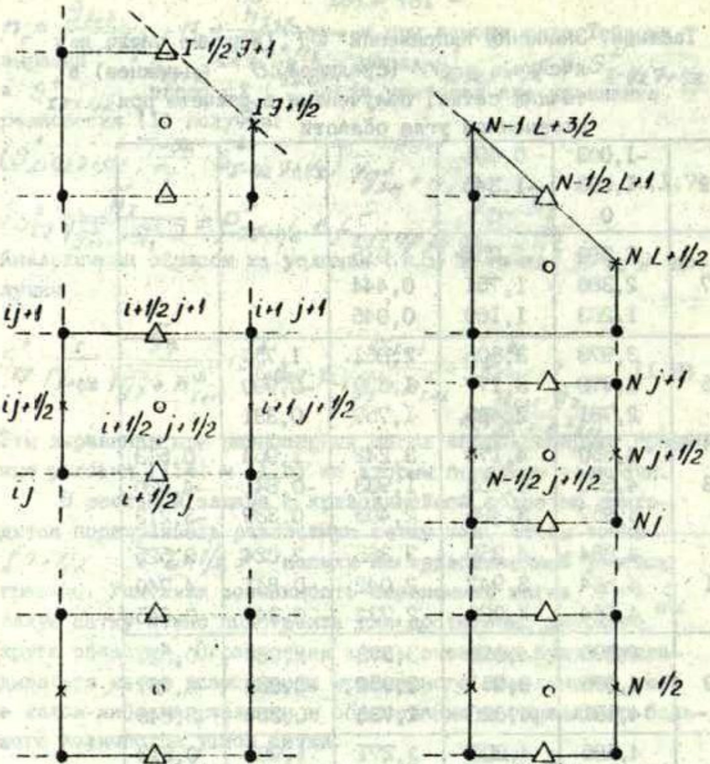


Рис.I. Разностная сетка для задачи термоупругости.
o – точки определения $S^1_{i+1/2\,j+1/2}$, $S^2_{i+1/2\,j+1/2}$, $S^3_{i+1/2\,j+1/2}$; $e^1_{i+1/2\,j+1/2}$, $e^2_{i+1/2\,j+1/2}$, $e^3_{i+1/2\,j+1/2}$;
● – точки определения
S^4_{ij}, e^4_{ij}; × – $u^1_{ij+1/2}$; Δ – $u^2_{i+1/2\,j}$

/4/ для уравнения эллиптического типа с одной неизвестной сеточной функцией. В рассматриваемом случае для построения C необходимо было сделать соответствующие изменения в коэффициентах этой матрицы.

На основании вышеизложенного разработана программа на языке FORTRAN-IY, реализующая расчет термических напряжений.

В работе /I/ приводился пример расчета тестовой задачи для прямоугольной области. В качестве теста бралась задача с температурной нагрузкой $T = T_0 r^2$ и условиями свободной поверхности на границе прямоугольной области. Сравнение показало хорошее совпадение расчетных данных с точным решением тестовой задачи /5/. Приведем здесь результаты расчета по изложенной выше методике для прямоугольника с конической верхней частью. На конической части границы зададим нагрузки, рассчитанные по результатам расчетов тестовой задачи, приведенной в /I/. В этом случае результаты расчета для области с конической частью должны совпадать с расчетами задачи в /I/. В таблице приведены результаты расчета указанной задачи в области с конической частью. Приводятся значения напряжений σ^{rr}, $\sigma^{\varphi\varphi}$, σ^{zz} в различных точках области. Максимальные отклонения от решения в прямоугольной области составило I%, 2%, 2%, I% для компонент σ^{rr}, $\sigma^{\varphi\varphi}$, σ^{zz}, σ^{rz} соответственно. Отметим также, что число итераций в итерационной схеме не увеличилось. Разработанное программное обеспечение использовалось для расчета температурных напряжений в монокристаллах, выращиваемых из расплавов при различных температурных нагрузках.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

I. Якушенок Р.А. Неявные итерационные схемы для статической задачи термоупругости в напряжениях // Прикладные задачи мат.физики. Рига: ЛГУ им.П.Стучки, 1989.- - С.161-177.

2. Коновалов А.Н., Сорокин С.Б. Структура уравнений теории упругости: Статическая задача.- Препринт ВЦ СО АН СССР.- Новосибирск, 1986.- № 665.
3. Гончаров А.Л. Реализация метода неполной LU-декомпозиции сопряженных градиентов для решения сеточных уравнений на различных шаблонах.- Препринт ИПМ им.П.Стучки М.В.Келдыша АН СССР.- М., 1984.- № 174.
4. Кучеров А.Б., Макаров М.М. Метод приближенной факторизации для решения разностных смешанных эллиптических краевых задач // Разностные методы математической физики. М.: Изд-во Московского у-та, 1984.- С.54-65.
5. Коваленко А.Д. Основы термоупругости.- Киев: Наукова думка, 1970.- 307 с.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Результаты опубликованных в настоящем сборнике работ по математическому моделированию могут быть использованы для оптимизации выращивания полупроводниковых и в том числе полупрозрачных монокристаллов, путем повышения их химической однородности, минимизации напряжений и плотности дислокаций, увеличения скорости выращивания путем управления внешними параметрами технологической установки. Разработанные математические модели и численные методы могут быть использованы при разработке пакетов прикладных программ для управления технологическими процессами.

РЕФЕРАТЫ

УДК 517.956.223

О НЕСОСТОЯТЕЛЬНОСТИ ДИФФУЗИОННОЙ МОДЕЛИ ОСМОСА. Рубинштейн И.Л., Рубинштейн Л.И. // Математическое моделирование. Прикладные задачи математической физики. Рига: ЛУ, 1990. - Вып.I. - С.6-17.

На основе рассмотрения одномерной системы осмометр-полупроницаемая мембрана - неограниченный водный бассейн демонстрируется несостоятельность чисто диффузионной модели осмоса.

Библиогр. 10 назв.

УДК 536.421.I+536.74

МЕТОД ЛОКАЛЬНОГО ОСРЕДНЕНИЯ ПРИ ЧИСЛЕННОМ РЕШЕНИИ ЗАДАЧИ РОСТА КРИСТАЛЛА ИЗ БИНАРНОГО РАСПЛАВА. Авдонин Н.А., Гулбе М.Л. // Прикладные задачи математической физики. Рига: ЛУ, 1990. - Вып.I. - С.18-27.

Применяется метод локального осреднения для решения задачи кристаллизации в классической постановке. Приводятся результаты численного решения полученной осредненной модели.

Ил. I, библиогр. 5 назв., табл. I.

УДК 519.6+536.42

ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ТЕПЛОМАССООБМЕНА ПРИ ВЫРАЩИВАНИИ БИНАРНЫХ СИСТЕМ МЕТОДОМ ДВИЖУЩЕГОСЯ НАГРЕВАТЕЛЯ. Апанович Ю.В., Люмкис Е.Д.// Математическое моделирование// Прикладные задачи математической физики. Рига: ЛУ, 1990. - Вып.I. - С.28-67.

Рассмотрена математическая модель процесса выращивания бинарного полупроводникового материала из расплава. Численно исследуется влияние конвекции и тепломассопереноса на положение и форму межфазной границы и радиальную однородность состава растущего кристалла. Расчеты проводились на согласованной с границей и фронтами фазового перехода подвижной сетке из ячеек Дирихле. Изучаются случаи линейной и нелинейной зависимости плотности расплава от температуры и состава. Показано, в частности, что если скорость нагревателя направлена вертикально вверх, в расплаве может реализоваться случай устойчивой плотности стратификации.

Ил. 15, библиогр. 25 назв.

УДК 519.6+532.77

ЧИСЛЕННОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ВЛИЯНИЯ ГИДРОДИНАМИКИ И РАДИАЦИОННОГО ТЕПЛООБМЕНА В ПРОЦЕССЕ ГОРИЗОНТАЛЬНОЙ НАПРАВЛЕННОЙ КРИСТАЛЛИЗАЦИИ НА ПОЛОЖЕНИЕ И ФОРМУ МЕЖФАЗНОЙ ГРАНИЦЫ. Апанович Ю.В., Люмкис Е.Д., Пакул Л.А.// Математическое моделирование. Прикладные задачи математической физики. Рига:ЛУ, 1990. - Вып.I. - С.68-90.

Предложена двумерная математическая модель процесса горизонтальной направленной кристаллизации, учитывающая гравитационную и термокапиллярную конвекции в расплаве, теплоперенос в кристалле, расплаве и в полупрозрачных лодочке и ампуле, выделение скрытой теплоты на фронте кристаллизации, радиационный теплообмен между поверхностями расплава-кристалла и муфеля. Описан алгоритм решения системы разностных уравнений, возникающих после аппроксимации на сетке из ячеек Дирихле сформулированных дифференциальных уравнений. Проводится анализ влияния различных эффектов на форму фронта кристаллизации.

Ил. 9, библиогр. II назв.

УДК 620.179.4

ПРИМЕНЕНИЕ МЕТОДА МАЛОГО ПАРАМЕТРА ДЛЯ РЕШЕНИЯ ЗАДАЧИ О ВЗАИМОДЕЙСТВИИ ИЗЛУЧАТЕЛЯ С НЕОДНОРОДНЫМ ПРОВОДЯЩИМ ПОЛУПРОСТРАНСТВОМ. Антимиров М.Я., Лиепиня В.Р.// Математическое моделирование. Прикладные задачи математической физики. Рига: ЛУ, 1990. - Вып.I. - С.91-100.

Методом малого параметра решается задача о взаимодействии излучателя в виде двухпроводной линии с полупространством, различные области которого имеют проводимости σ_1 и σ_2. Предполагается, что величина σ_2/σ_1-1 достаточно мала и может быть использована в качестве малого параметра.

Ил. 1, библиогр. 3 назв.

УДК 519.6:539.319

РАСЧЕТ ТЕМПЕРАТУРЫ И ТЕРМОУПРУГИХ НАПРЯЖЕНИЙ В МОНОКРИСТАЛЛАХ ПРИ БЕСТИГЕЛЬНОЙ ЗОННОЙ ПЛАВКЕ. Белова И.В. //Математическое моделирование. Прикладные задачи математической физики. Рига: ЛУ, 1990. - Вып.I. - С.101-110.

В статье рассмотрена математическая модель установившейся зонной плавки со свободной боковой поверхностью расплава, Приведены результаты расчетов полей температуры и упругих напряжений в зависимости от полученной формы проплавленной зоны.

Ил. 6, библиогр. 8 назв.

УДК 537.84:536.25

ВОЗНИКНОВЕНИЕ ПРОСТРАНСТВЕННЫХ ОСЦИЛЛИРУЮЩИХ КОНВЕКТИВНЫХ ТЕЧЕНИЙ ПРИ $Pr \ll 1$ В ПРЯМОУГОЛЬНОЙ ПОЛОСТИ С ГОРИЗОНТАЛЬНЫМ ПЕРЕПАДОМ ТЕМПЕРАТУРЫ (ЭКСПЕРИМЕНТ). Бояревич А.В.// Математическое моделирование. Прикладные задачи математической физики. Рига: ЛУ, 1990. - Вып.I. - С.111-120.

Экспериментально исследуется влияние магнитного поля на возникновение осциллирующих режимов конвективного течения в нагреваемой сбоку полости отношением высоты к длине 0,25. Показано, что возникающее в результате потери устойчивости осциллирующее течение является существенно трехмерным.

Ил. 4, библиогр. 6 назв.

УДК 536.2.02

МАТЕМАТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ ДЛЯ КОМПЛЕКСА НЕСТАЦИОНАРНЫХ МЕТОДОВ ИССЛЕДОВАНИЯ ТЕПЛОПРОВОДНОСТИ ГАЗОВ И ЖИДКОСТЕЙ. Быков С.И., Кольцкин А.А., Окулич-Казарин Е.Г., Смирнова Т.Е.// Математическое моделирование. Прикладные задачи математической физики. Рига: ЛУ, 1990. - Вып.I. - С.I2I-I30.

Описывается математическая модель метода возмущения тонкого цилиндрического зонда прямоугольным импульсом электрического тока переменной протяженности в электропроводящей среде.

Библиогр. 5 назв.

УДК 697.9

ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ ТУРБУЛЕНТНОЙ СТРУИ СО ВСТРЕЧНЫМ ПОТОКОМ. Варапаев В.Н., Королев И.В.// Математическое моделирование. Прикладные задачи математической физики. Рига: ЛУ, 1990. - Вып.I. - С.I3I-I39.

В работе проведено численное исследование взаимодействия струи со встречным потоком в рамках (k , ε) модели турбулентности для умеренных отношений характерных размеров потока и струи. Получены гидродинамические характеристики течения.

Ил. 5, библиогр. 5 назв.

УДК 519.6:539,379.4

ЧИСЛЕННЫЙ АНАЛИЗ ВЛИЯНИЯ ДАВЛЕНИЯ В ГАЗЕ НА ПЛОТНОСТЬ ДИСЛОКАЦИЙ В КРИСТАЛЛЕ ПРИ ВЫРАЩИВАНИИ ИЗ РАСПЛАВА. Вахрамеев С.С., Козельская Н.В., Биберин В.И., Освенский В.Б.// Математическое моделирование. Прикладные задачи математической физики. Рига: ЛУ, 1990. - Вып.I. - С.140-150.

Производится математическое моделирование внешних тепловых условий выращивания с учетом давления газа в камере. Результаты расчетов совместной термо- упруго-пластической задачи показывают, что при определенных условиях имеется возможность снижения величины плотности дислокаций в кристалле в несколько раз.

Ил. 3, библиогр. 5 назв., табл. 2.

УДК 532.546:518.12

ЧИСЛЕННОЕ РЕШЕНИЕ НЕЛИНЕЙНОГО УРАВНЕНИЯ ТЕПЛОПРОВОДНОСТИ В СРЕДАХ С ТОНКИМИ СЛАБОПРОВОДЯЩИМИ ВКЛЮЧЕНИЯМИ. Демченко Л.И., Мистецкий Г.Е., Вакал Е.С.// Математическое моделирование. Прикладные задачи математической физики. Рига: ЛУ, 1990. - Вып.I. - С.151-157.

Описывается численный метод решения уравнения теплопроводности в области, содержащей тонкое слабопроводящее включение. Предлагаемая замена включения специальным граничным условием типа условий неидеального контакта.

Библиогр. 2 назв.

УДК 538.4

МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ТЕМПЕРАТУРНЫХ ПОЛЕЙ В АЛЮМИНИЕВЫХ ЭЛЕКТРОЛИЗЕРАХ. Калис Х.Э.// Математическое моделирование. Прикладные задачи математической физики. Рига: ЛУ, 1990. - Вып.I. - С.158-171.

Описывается математическая модель и численный метод для моделирования распределения температуры в алюминиевом электролизере с учетом потока жидкого металла, создаваемого действием электромагнитных сил.

Библиогр. 4 назв.

УДК 517.947:519.6:
556.388

МОДЕЛИРОВАНИЕ ДВИЖЕНИЯ ЗАГРЯЗНЯЮЩИХ ВЕЩЕСТВ В ПОДЗЕМНЫХ ВОДАХ И ПОЧВЕ. Титушкина З.Ю.// Математическое моделирование. Прикладные задачи математической физики. Рига: ЛУ, 1990. - Вып.I. - С.172-180.

Рассматривается математическая модель движения загрязняющих веществ в подземных водах и почве. Разработан алгоритм численного решения поставленной задачи и проведен расчет модельного примера для изотермы Генра. Анализ результатов расчетов показывает, что модель достаточно полно отражает процессы распространения загрязняющих веществ, их конвективного переноса с водой, диффузии и сорбции в почве.

Ил. 5, библиогр. 3 назв., табл. I.

УДК 519.6+539.379.4

ЧИСЛЕННОЕ РЕШЕНИЕ ЗАДАЧИ ТЕРМОУПРУГОСТИ В НАПРЯЖЕНИЯХ В КРИВОЛИНЕЙНОЙ ОБЛАСТИ. Якушенок Р.А.// Математическое моделирование. Прикладные задачи математической физики. Рига: ЛУ, 1990. - Вып.I. - С.181-190.

В работе приводятся разностная аппроксимация задачи термоупругости для области с участками криволинейных границ. Построена аппроксимация второго порядка точности. Приводится решение для случая прямоугольной области.

Ил. I, библиогр. 5 назв., табл. I.

МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ
ПРИКЛАДНЫЕ ЗАДАЧИ МАТЕМАТИЧЕСКОЙ ФИЗИКИ, вып. 2
Рига: Латвийский университет, 1991

ПРАВИЛА ОФОРМЛЕНИЯ СТАТЕЙ

Текст печатается ярким шрифтом в рамке 15x23,5 см через 1,5 интервала. Объем статьи - не более 10 полных страниц. В верхней части первой страницы печатается название сборника так, как показано в данных правилах. Заголовок статьи оформляется следующим образом:

УДК И.О.ФАМИЛИЯ, И.О.ФАМИЛИЯ
Организация, город

НАЗВАНИЕ СТАТЬИ

Не допускается появление "висячих строк", т.е. новая страница не может начинаться с последней строки абзаца. Нумерация формул обязательна. Ссылки на лит. источники в тексте - в косых скобках /8/ . Нумерация ссылок в порядке цитирования. Рисунки оформляются черной тушью на белой бумаге и вклеиваются в текст статьи в любом, выбранном автором, месте.

К статье прилагаются: экспертное заключение (2 экз.), письмо из организации, в которой выполнена работа и краткий реферат.

Статьи принимаются до 1 апреля 1991 г.

Рукописи статей направлять по адресу:

226250, г. Рига,
бульв. Райниса, 29,
ИМИ ЛУ
Гельфгату А.Ю.