Прикладные задачи математической физики

СБОРНИК НАУЧНЫХ ТРУДОВ

Рига 1985

Министерство высшего и среднего специального образования
Латвийской ССР
Латвийский ордена Трудового Красного Знамени
государственный университет имени Петра Стучки
Вычислительный центр

ПРИКЛАДНЫЕ ЗАДАЧИ МАТЕМАТИЧЕСКОЙ ФИЗИКИ

СБОРНИК НАУЧНЫХ ТРУДОВ

Латвийский государственный университет им. П.Стучки
Рига 1985

УДК 53:51

ПРИКЛАДНЫЕ ЗАДАЧИ МАТЕМАТИЧЕСКОЙ ФИЗИКИ

Прикладные задачи математической физики: Сборник научных трудов /Отв. ред. Н.А.Авдонин. - Рига: ЛГУ им. П.Стучки, 1985. - 208 с.

В сборник включены статьи, посвященные вопросам решения различных задач математической физики. Большинство работ содержит построение численных методов решения задач, моделирующих конкретные физические процессы гидродинамики, кристаллизации, фильтрации жидкости. Часть работ посвящена теоретическим исследованиям нелинейных задач математической физики.

Сборник предназначен для математиков, физиков и специалистов, занимающихся прикладными задачами тепло- массопереноса, а также для аспирантов и студентов старших курсов.

Илл. - 15; табл. - 6; список лит. - 127 назв.

РЕДАКЦИОННАЯ КОЛЛЕГИЯ:

Н.А.Авдонин (отв.редактор),
А.Ю.Гельфгат, Е.Д.Лимкис, Я.Я.Клявинь

Печатается по решению Издательского совета ЛГУ им. П.Стучки.

П $\frac{20402-050у}{М812(11)-85}$ 13.85.1704020000

© Латвийский государственный университет им. П.Стучки, 1985

LVU ZINĀTNISKĀ BIBLIOTEKA
12214 - 8 - 86

УДК 532.77.3+621.315.592

РАСЧЕТ РАСПРЕДЕЛЕНИЯ ЛЕГИРУЮЩЕЙ ПРИМЕСИ И КИСЛОРОДА В РАСПЛАВЕ ПРИ ВЫРАЩИВАНИИ КРИСТАЛЛОВ МЕТОДОМ ЧОХРАЛЬСКОГО

Е.Д.Люмкис
(ВЦ ЛГУ им.П.Стучки)

Из-за значительных трудностей проведения экспериментальных исследований резко возросло количество работ, посвященных численному моделированию процессов выращивания монокристаллов [1-9]. Интересы исследователей связаны с изучением распределения температуры в кристалле и расплаве, полей скоростей в расплаве и распределения примеси в кристалле. Степень однородности распределения легирующей примеси в значительной степени определяет качество выращенного материала. Для кристаллов кремния качество материала определяется также количеством кислорода, который появляется из-за растворения кварцевого тигля. Концентрация примеси или кислорода в кристалле пропорциональна величине соответствующей концентрации вблизи фронта кристаллизации со стороны расплава, которая может быть найдена из решения уравнения конвективной диффузии в зоне расплава. Поля скоростей в расплаве описываются уравнениями гидродинамики.

Методике расчета распределения примеси в расплаве при выращивании кристаллов методом Чохральского посвящены работы [4,5,9]. Разностная схема, использованная в настоящей работе, применялась ранее для расчета распределения примеси в расплаве при выращивании кристаллов методом бестигельной зонной плавки [7,8]. В основе ее лежит консервативная монотонная схема экспоненциального типа, свойства которой описаны в работе [7]. Ряд отличий расчета распределения примеси в методе Чохральского по сравнению с методом бестигельной зонной плавки связан с особенностями процесса выращивания.

§ I. Постановка задачи

Будем считать, что область, занятая расплавом, цилиндрическая, $0 < r < R$, $0 < z < H$, где R - радиус тигля, H - высота расплава, r и z - текущие координаты. Границы расчетной области (рис.I) состоят из поверхности кристалла O_2A, свободной поверхности AB, стенок тигля O_1CB. Распределение концентрации примеси $C(z, r)$ в расплаве подчиняется уравнению:

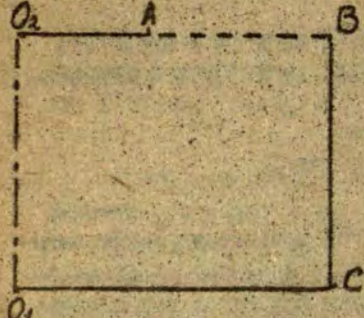

Рис.I. Сечение расчетной области.

$$\frac{\partial C}{\partial t} + V^z \frac{\partial C}{\partial z} + V^r \frac{\partial C}{\partial r} = \mathcal{D}\left(\frac{\partial^2 C}{\partial z^2} + \frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r} r \frac{\partial C}{\partial r}\right), \qquad \text{(I)}$$

$$0 < z < H, \quad 0 < r < R.$$

Здесь $\mathcal{D}$ - коэффициент диффузии примеси, V^z и V^r - осевая и радиальная компоненты скорости гидродинамического движения расплава, t - текущее время. Расплав считается вязкой несжимаемой жидкостью, поэтому для компонент скоростей выполняется уравнение неразрывности

$$\frac{\partial V^z}{\partial z} + \frac{1}{r}\frac{\partial (r V^r)}{\partial r} = 0. \qquad (2)$$

Для дальнейшего удобнее записать уравнение (I), с учетом (2), в дивергентном виде:

$$\frac{\partial C}{\partial t} = -\frac{\partial I^z}{\partial z} - \frac{1}{r}\frac{\partial (r I^r)}{\partial r}, \qquad (3)$$

где потоки I^z, I^r определены формулами:

$$I^z = -\mathcal{D}\frac{\partial C}{\partial z} + V^z C; \quad I^r = -\mathcal{D}\frac{\partial C}{\partial r} + V^r C. \qquad (4)$$

Предположим, что неоднородность распределения примеси не влияет на гидродинамику расплава. Это предположение выполнено с хорошей точностью для полупроводниковых материалов из-за малости процентного содержания примеси в расплаве. Поле скоростей в дальнейшем считается известным.

При вытягивании кристалла со скоростью V_0 уровень расплава понижается, т.е. $H = H(t)$. Скорость удлинения кристалла V_K слагается из скорости V_0 и скорости опускания расплава $V_e < 0$, $V_K = V_0 + |V_e|$. Из условия массового баланса находим

$$V_K = \frac{V_0 R^2}{R^2 - R^2_{кр}} ; \qquad V_e = -\frac{V_0 R^2_{кр}}{R^2 - R^2_{кр}} , \tag{5}$$

где $R_{кр}$ - радиус кристалла. Компонента V^z скорости расплава должна быть равна V_0 на фронте кристаллизации и V_e на свободной поверхности. Введем функцию тока Ψ,

$$V^z = -\frac{1}{r}\frac{\partial \Psi}{\partial r} ; \qquad V^r = \frac{1}{r}\frac{\partial \Psi}{\partial z} , \tag{6}$$

и положим ее равной нулю на стенках тигля (в силу условий непроницаемости). Тогда из-за (5) краевое условие для при $z = H$ должно иметь вид

$$\Psi(H,r) = \begin{cases} \frac{1}{2} V_0 r^2 , & 0 \le r \le R_{кр} , \\ V_0 \frac{R^2_{кр}}{2} \frac{R^2 - r^2}{R^2 - R^2_{кр}} , & R_{кр} < r \le R . \end{cases} \tag{7}$$

Обычно при гидродинамических расчетах полагают функцию тока при $z = H$ равной нулю из-за малости V_0. В данной работе при расчете распределения примеси функция тока бралась в виде

$$\Psi(z,r) = \Psi_r(z,r) + \Psi_1(z,r), \tag{8}$$

где Ψ_r - функция тока, найденная из гидродинамики, а функция Ψ_1 определялась равенством

$$\Psi_1(z,r)=\begin{cases} 0, & 0<z<H-\delta, \\ -\frac{1}{\delta^2}\Psi(H,r)(H-z)^2+\Psi(H,r), & H-\delta<z<H, \end{cases}$$

т.е. значение (7) продлевалось вглубь расплава на слой δ.

I.2. Для легирующей примеси поток частиц с поверхности тигля и со свободной поверхности равен нулю:

$$I^z(0,r)=0, \quad 0\leq r\leq R, \tag{9а}$$

$$I^z(H,r)=0, \quad R_{кр}<r\leq R, \tag{9б}$$

$$I^r(z,R)=0, \quad 0\leq z\leq H, \tag{10а}$$

$$I^r(z,0)=0, \quad 0<z\leq H. \tag{10б}$$

Условие (10б) является условием симметрии решения на оси. На границе расплав-кристалл краевое условие, выражающее соотношение баланса примеси, имеет вид:

$$I^z(r,H)=mV_0C, \qquad 0\leq r\leq R_{кр}, \tag{11}$$

где m - равновесный коэффициент распределения примеси. Легко видеть, что задача (3)-(4), (9)-(11) имеет только тривиальное стационарное решение $C(z,r)=0$. В то же время относительное распределение примеси меняется медленно. Покажем это, проведя оценки характерных времен. Если гидродинамические потоки вызваны только вращением кристалла с угловой скоростью ω, то характерное время конвективного перемешивания $\tau_r\sim n\,\omega$, где $n\sim10$. Характерное время чисто диффузионного процесса $\tau_Д\sim\delta^2/\mathcal{D}$, где δ - толщина диффузионного пограничного слоя. Согласно оценкам Бартона [10] величина $\delta\sim\mathcal{D}^{1/3}\nu^{1/6}\omega^{-1}$. Тогда

$\tau_Д \sim \mathcal{D}^{-1/3} \nu^{1/3} \omega^{-1}$. При $\mathcal{D} \sim 10^{-4}$ см^2/сек, $\nu \sim 10^{-3}$ см^2/сек получим $\tau_Д \sim k\,\omega^{-1}$, где $k \sim 1$. Время опорожнения тигля $\tau_0 \sim H / V_0$. При $H \sim 5$ см, $V_0 \sim 2$ мм/мин, $\omega \sim 1$ сек$^{-1}$ получим, что $\tau_r \sim \tau_Д \ll \tau_0$, т.е. на фоне медленного изменения полного содержания примеси в расплаве для относительного распределения примеси существует квазистационарное решение. В работах [4-5] добиваются получения стационарного решения наиболее простым способом: на стенках тигля для концентрации ставятся условия I-го рода. Приведенные выше физические оценки характерных времен могут служить некоторым основанием для такого подхода, хотя на самом деле подпитка расплава примесью со стенок тигля не имеет места. Гораздо более последовательным является подход, предложенный в работе [9], где $C(z, r, t)$ ищется в виде ряда по степеням малого параметра $V_0 / R\omega \sim 10^{-3}$. При этом для второго члена разложения получается уравнение с источником, распределенным по всей области, которое имеет ненулевое стационарное решение. Для гидродинамических уравнений авторы используют нулевое приближение, т.е. полагают вместо (7) $\Psi(H, r) = 0$, а H считается не зависящим от t.

В настоящей работе будем считать условие (7) выполненным, но зависимость $H(t)$ не будем учитывать ни в уравнениях гидродинамики, ни в уравнении (I). Введем среднюю по объему расплава концентрацию

$$\bar{C}(t) = \left(\int_0^R \int_0^H C(z,r,t)\, r\,dr\,dz \right) / \left(R^2 H / 2 \right), \qquad (12)$$

а относительную концентрацию $C_1(z, r, t)$ определим формулой

$$C_1(z,r,t) = C(z,r,t) / \bar{C}(t). \qquad (13)$$

Умножим (I) на $r\,dr\,dz / (0{,}5 R^2 H \bar{C}(t))$ и проинтегрируем по объему расплава. С учетом (9)-(II) и $H(t) = const$ получим:

$$\frac{1}{\bar{C}}\frac{\partial \bar{C}}{\partial t} = -\frac{m V_0}{0{,}5R^2H}\int\limits_0^{R_{кр}} C_1 r\,dr. \qquad (I4)$$

Нетрудно, выразив C из (I3) и подставив в (I), получить дифференциальную задачу для C_1 (z, r, t):

$$\frac{\partial C_1}{\partial t} + V^z\frac{\partial C_1}{\partial z} + V^r\frac{\partial C_1}{\partial r} = D\left(\frac{\partial^2 C}{\partial z^2} + \frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}r\frac{\partial C}{\partial r}\right) - \left(\frac{1}{\bar{C}}\frac{\partial \bar{C}}{\partial t}\right)C_1, \qquad (I5)$$

$$-D\frac{\partial C_1}{\partial z} + V^z C_1 = m V_0 C_1, \; z=H, \; 0<r<R_{кр}. \qquad (I6)$$

Краевые условия на остальных частях границы однородные и совпадают с (9), (I0). Таким образом, в (I5) по сравнению с (I) появился источник с плотностью, определяемой соотношением (I4). Из определения C_1 следует, что $\int\int C_1 r\,dr\,dz =$ = I, поэтому стационарное решение уравнения (I5) не может быть тривиальным. Легко убедиться также, используя (I4), в разрешимости стационарной задачи для C_1 (z, r). Из (I5) видно, что, аналогично [9], "подпитка" (источник) оказалась распределенной по всей области расплава.

При численной реализации для определения относительной концентрации не обязательно решать дифференциальную задачу (I5)-(I6), можно определять C (z, r, t) из исходной задачи и делить на $\bar{C}$ (t).

I.3. При выращивании кристаллов кремния горячий кварцевый тигель растворяется и в расплаве оказывается моноокись кремния. В результате атомы кислорода появляются и в закристаллизовавшемся кремнии. Распределение SiO (или "кислорода") в расплаве кремния также описывается уравнением (I). Краевые условия на дне и стенках тигля должны учитывать растворение кварца, а на свободной поверхности - испарение моноокиси кремния. Поток частиц, выходящих со свободной поверхности, равен

$$-I^z(H,r) = V_{исп}\cdot C, \quad R_{кр}<r<R. \qquad (I7)$$

Со стенок тигля в расплав поступает поток

$$q = V_{рост.}(C_{нас.} - C). \qquad (I8)$$

Здесь $V_{исп}$, $V_{раст}$ – скорости испарения моноокиси кремния и растворения SiO_2, $C_{нас.}$ – концентрация насыщения SiO в расплаве. Таким образом, при расчете распределения кислорода условие (I7) заменяет условие (9б), а вместо условий (9а), (10а) необходимо ставить условия:

$$I^z(0,r) = q(0,r);\ 0<r<R;\ I^r(z,R) = -q(z,R),\ 0<z<H. \qquad (I9)$$

Литературные данные о константах растворения и испарения весьма противоречивы и различаются на несколько порядков [II-I2]. Эти данные представляют собой средние скорости растворения и испарения в пограничных слоях вблизи поверхности тигля и свободной поверхности жидкости. С другой стороны, ввиду непрерывности поля концентрации при переходе через границу должно быть $C(H, r) = 0,\ R_{кр}<r<R,$ $C(z, R) = C_{нас},\ C(0, r) = C_{нас.},\ 0<z<H,$ $0<r<R$. Такие соотношения следуют из (I7), (I8) при $V_{исп} \to \infty$, $V_{раст} \to \infty$.

Отметим, что в отличие от задачи о распределении концентрации легирующей примеси, задача о распределении кислорода в кремнии имеет ненулевое стационарное решение.

§ 2. Метод численного решения

Уравнение конвективной диффузии в данной работе решается методом сеток. Из-за малости коэффициента диффузии применяется специальная схема экспоненциального типа. Не останавливаясь подробно на способе получения и свойствах разностной схемы (см. [7]), приведем здесь окончательные разностные уравнения.

На отрезках $0 \le z \le H$, $0 \le r \le R$ введем точки: $z_0 = 0;\ z_i = z_{i-1} + h_i,\ i = 1, \dots, N;\ z_N = H;\ r_0 = 0,$ $r_j = r_{j-1} + g_j;\ j = 1, \dots, M,\ r_M = 1$. Здесь h_i, g_j – шаги разностной сетки в направлении z и r. Функцию тока

будем считать заданной на сетке Ω узлов $X=(z_i, r_j)$, $i=0,\dots,N$; $j=0,\dots,M$, а концентрацию $C(z, r)$ будем определять на сетке $\hat{\Omega}$ узлов $\hat{X}=(z_{i+1/2}, r_{j+1/2})$: $z_0=z_{1/2}=0$; $z_{i+1/2}=(z_i+z_{i+1})/2$, $i=1,\dots,N-1$; $z_{N-1/2}\equiv z_N=H$; $h_i=z_{i+1/2}-z_{i-1/2}$, $i=1,\dots,N-1$; $r_0=0$; $r_{j+1/2}=(r_j+r_{j+1})/2$; $r_M=1$, $j=0,\dots,M-1$; $g_0=r_{1/2}-r_0$; $g_j=r_{j+1/2}$, $j=0,\dots,M-1$; $g_M=r_M-r_{M-1/2}$.
Соотношения (7) на введенной сетке аппроксимируются формулами:

$$V^z_{ij+1/2}=\frac{1}{r_{j+1/2}}\,\frac{\Psi_{ij+1}-\Psi_{ij}}{g_{j+1}},\ i=0,\dots,N;\ j=0,\dots,M-1; \tag{20}$$

$$V^r_{i+1/2j}=-\frac{1}{r_j}\,\frac{\Psi_{i+1j}-\Psi_{ij}}{h_{i+1}},\ i=0,\dots,N-1;\ j=0,\dots,M. \tag{21}$$

Тогда разностный аналог уравнения (2) имеет вид:

$$\frac{V^z_{i+1j+1/2}-V^z_{ij+1/2}}{h_{i+1}}+\frac{1}{r_{j+1/2}}\,\frac{r_{j+1}V^r_{i+1/2j+1}-r_jV^r_{i+1/2j}}{g_{j+1}}=0. \tag{22}$$

Консервативная аппроксимация уравнения (3) может быть записана в виде:

$$\frac{\overset{k+1}{C}_{i+1/2j+1/2}-\overset{k}{C}_{i+1/2j+1/2}}{\tau}=-\frac{I^z_{i+1j+1/2}-I^z_{ij+1/2}}{h_{i+1}}-\frac{1}{r_{j+1/2}}\,\frac{r_{j+1}I^r_{i+1/2j+1}-r_jI^r_{i+1/2j}}{g_{j+1}} \tag{23}$$

$$i=0,\dots,N-1;\quad j=0,\dots,M-1,$$

где верхний индекс - номер временного слоя, τ - величина шага по времени, I^z, I^r отнесены к верхнему временному слою, а их пространственная аппроксимация взята в виде:

$$I^z_{ij+1/2}=\frac{V^z_{ij+1/2}\left[C_{i-1/2j+1/2}-C_{i+1/2j+1/2}\exp\left(-V^z_{ij+1/2}h_i/D\right)\right]}{1-\exp\left(-V^z_{ij+1/2}h_i/D\right)} \tag{24}$$

$$i=1,\dots N-1,\qquad j=0,\dots,M-1.$$

$$I^{r}_{i+1/2\,j}=\frac{V^{r}_{i+1/2\,j}\left[C_{i+1/2\,j-1/2}-C_{i+1/2\,j+1/2}\exp\left(-V^{r}_{i+1/2\,j}\,g_j/\mathcal{D}\right)\right]}{1-\exp\left(-V^{r}_{i+1/2\,j}\,g_j/\mathcal{D}\right)}, \tag{25}$$

$$i=0,\ldots,N-1;\quad j=1,\ldots,M-1.$$

Аналоги краевых условий (9)-(II) для разностной задачи имеют вид:

$$I^{z}_{0j+1/2}=0;\ I^{z}_{Nj+1/2}=\begin{cases} m\,V_0\,C_{Nj+1/2}, & r_{j+1/2}<R_{кр},\ j=0,\ldots,M-1\\ 0, & r_{j+1/2}>R_{кр}. \end{cases} \tag{26}$$

$$I^{r}_{i+1/2\,0}=0;\ I^{r}_{i+1/2\,M}=0;\quad i=0,\ldots,N-1. \tag{27}$$

При расчете распределения кислорода разностные аналоги условий (I7), (I9) взяты в виде:

$$I^{z}_{Nj+1/2}=V_{исп.}\,C_{Nj+1/2};\quad R_{кр}<r_{j+1/2}<R, \tag{28}$$

$$I^{z}_{0j+1/2}=V_{раст.}\left(C_{нас.}-C_{0j+1/2}\right),\ j=0,\ldots,M-1, \tag{29}$$

$$I^{r}_{i+1/2\,M}=-V_{раст.}\left(C_{нас.}-C_{i+1/2\,M}\right),\ i=0,\ldots,N-1. \tag{30}$$

Поскольку на выбранной разностной сетке концентрация $C_{i+1/2\,M}$ при $r=R$ не определяется, необходимо дополнительное разностное уравнение. В качестве такого уравнения возьмем аппроксимацию потока $I^{r}(R,z)=-\mathcal{D}\frac{\partial C}{\partial r}\Big|_{r=R}$:

$$I^{r}_{i+1/2\,M}=-\mathcal{D}\,\frac{C_{i+1/2\,M}-C_{i+1/2\,M-1/2}}{g_M}. \tag{31}$$

При проведении расчетов построенная система разностных уравнений на каждом временном слое решалась либо строчным методом Зайделя с контролем сходимости итераций по балансу частиц примеси на слое, либо методом матричной прогонки.

§ 3. Результаты расчетов

При проведении расчетов реальных задач вначале определяется функция тока путем решения уравнений гидродинамики. В настоящей работе использовалась методика [3,8] расчета гидродинамических потоков с учетом вращения, тепловой и термокапиллярной конвекции. Из-за малости коэффициента диффузии сетка для диффузионной задачи выбиралась более подробной, чем для гидродинамической, а функция тока интерполировалась.

Определим безразмерную функцию тока $\bar{\Psi}$ равенством: $\bar{\Psi} = \Psi / (R^3 f)$, где f - частота вращения кристалла в гидродинамической задаче. Для функции тока $\bar{\Psi}$, приведенной на рис.2а, рассчитано распределение легирующей примеси в расплаве при значении параметров: R =6,5 см, R_{kp}=2 см, H =4 см: $\mathcal{D}$ =2,5 10^{-4}см^2/сек, V_0 =1,5 мм/мин, m =0,35, f =20 об/мин. Сетка выбиралась существенно неравномерная, N =41, M =31. Разброс примеси $\Delta C = (C_{max} - C_{min}) / (C_{max} + C_{min})$ на фронте кристаллизации составляет ~ 10% (рис.2б). Величина C_1 (z, r) в расплаве почти всюду постоянна и близка к единице, отличается от единицы только вблизи фронта кристаллизации. Полученные результаты хорошо совпадают с результатами расчета близкого варианта, приведенными в [9]. Отметим, что движение вторичного потока вблизи кристалла в данном варианте направлено от периферии к оси и приводит к максимуму примеси на оси при $m<1$, и к минимуму - при $m>1$, как для процесса бестигельной зонной плавки [7-8].

Распределение кислорода в зоне расплава может быть существенно более сложным, чем распределение легирующей примеси. В связи с этим для выявления некоторых качественных закономерностей расчеты концентрационной задачи проводились для модельной функции тока, заданной формулой:

$$\Psi_r = 3,375\,\gamma\, r^2 (1-r^2)^2 \left[\sin\left(\frac{2\pi}{H} - \frac{1}{4}\right) + 1\right] R^3 f,$$

где коэффициент γ , определяющий интенсивность течения, варьировался. При таком задании Ψ_r вторичное течение состоит из одного вихря, обтекающего кристалл от свободной поверхности к оси при $\gamma < 0$, и от оси к свободной поверхности - при $\gamma > 0$. Значения параметров в расчетах брались следующими: R =10 см, $R_{кр}$ =3 см, H =6 см, $\mathcal{D}$ = =10^{-4} см^2/сек, m =1.25, $C_{нас}$ =2,2 10^{18} ат/см^3, f =1 сек$^{-1}$.

Наиболее разумным значением скоростей $V_{раст.}$ и $V_{исп.}$ представляются достаточно большие их значения ($V_{раст.} \sim$ $\sim V_{исп} \gtrsim 10$ см/сек), обеспечивающие выполнение краевых условий 1-го рода. Поскольку в литературе этот вопрос еще дискутируется, были проведены также расчеты при вариации $V_{раст.}$ и $V_{исп}$. При γ = -0,3 распределение кислорода в кристалле для этих вариантов приведено на рис.3. Видно, что уровень кислорода в кристалле сильно меняется при изменении констант, хотя кривые подобны одна другой.

Последующие расчеты проводились при больших $V_{раст.}$ и $V_{исп.}$, когда условия C = $C_{нас}$ на поверхности тигля и C =0 - на свободной поверхности, оказывались выполненными с высокой точностью. На рис.4 изображены радиальные зависимости распределения кислорода в кристалле при изменении интенсивности течения* . Из рисунка видно, что при $\gamma < 0$ при уменьшении интенсивности течения падает и содержание кислорода в кристалле, что объясняется большим испарением кислорода со свободной поверхности. При $\gamma > 0$ поток транспортирует со дна тигля богатый кислородом расплав. В этом случае содержание кислорода в кристалле оказывается высоким, а зависимость от интенсивности течения незначительной.

Весьма важным представляется выяснение величины характерного времени выхода решения на стационарный режим для концентрационной задачи. На рис.5 представлена зависи-

* Отметим, что интенсивность течения можно регулировать посредством специально создаваемого магнитного поля [13].

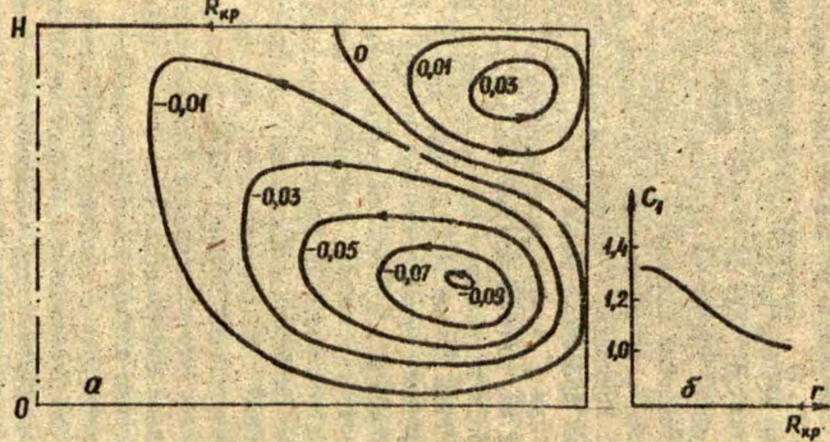

Рис.2. Изолинии функции тока $\bar{\Psi}_r$ (а) и относительное распределение примеси по радиусу кристалла (б).

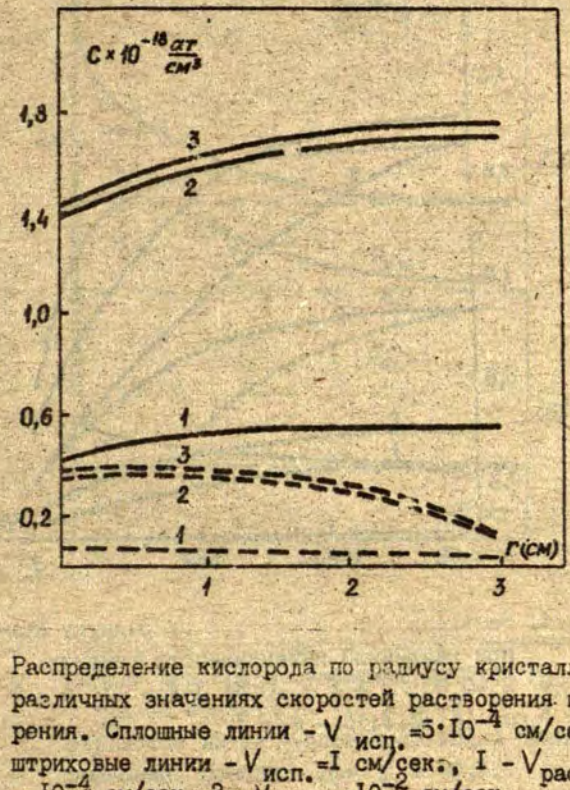

Рис.3. Распределение кислорода по радиусу кристалла при различных значениях скоростей растворения и испарения. Сплошные линии - $V_{исп.}=5\cdot10^{-4}$ см/сек, штриховые линии - $V_{исп.}=1$ см/сек., 1 - $V_{раст.}=10^{-4}$ см/сек, 2 - $V_{раст.}=10^{-2}$ см/сек, 3 - $V_{раст.}=1$ см/сек.

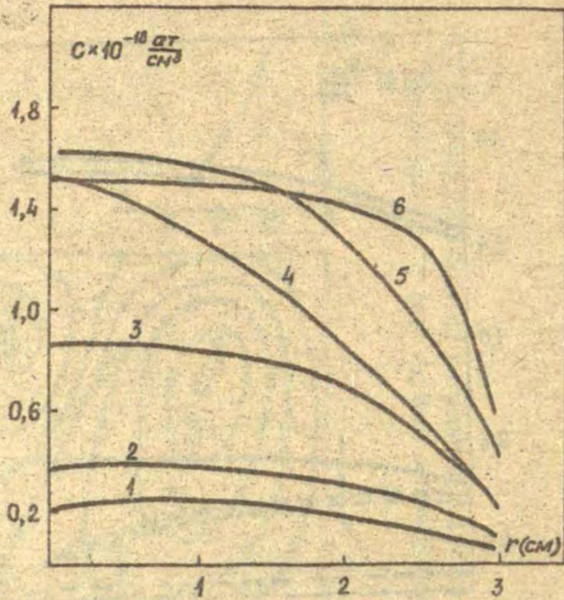

Рис.4. Распределение кислорода по радиусу кристалла при различной интенсивности течения. 1 - γ = = -0,03; 2 - γ = -0,3; 3-γ = -3; 4 - γ = 0,03; 5 - γ =0,3; 6 - γ = 3.

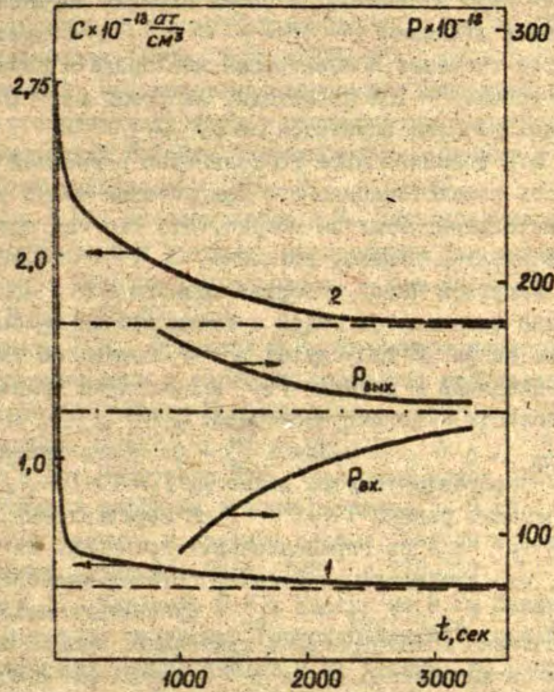

Рис.5. Зависимость от времени концентрации кислорода вблизи его оси и суммарных потоков $P_{вх}$ и $P_{вых}$ с границ области. I - γ = -0,3; 2 - γ = 0,3; штриховые линии - соответствующие стационарные значения. Потоки - при γ = -0,3.

LVU ZINĀTNISKĀ BIBLIOTEKA
12214-8-86

мость от времени концентрации кислорода в кристалле вблизи его оси для двух вариантов. В обоих случаях установление относительной величины $(C(t) - C_{ст})/C_{ст}$ (здесь $C_{ст.}$ - стационарное значение концентрации кислорода в выбранной точке) на уровне ~ 10% происходит за время $\Delta t \sim 20$ мин. За это время расплав опустится на $V_0 \frac{R^2_{bo}}{R^2 - R^2_{kp}} \sim$ 0,3 см. Поскольку эта величина мала по сравнению с высотой расплава, точность квазистационарного приближения можно считать удовлетворительной. Отметим только, что так как при $\Gamma > 0$ $C_{ст.}$ сравнительно велико, величина $C(t) - C_{ст.}$ также будет еще заметной через интервал времени Δt. При $\Gamma < 0$ эта величина оказывается малой с точки зрения требований технологии. На рис.5 для случая $\Gamma < 0$ приведены также суммарные входящий в расплав $P_{вх}$ и выходящий из него $P_{вых.}$ с границ области Г потоки кислорода: $P_{вх} = \frac{\mathcal{D}}{R} \sum_{\Gamma^+} I_n \Delta \sigma$, $P_{вых} = \frac{\mathcal{D}}{R} \sum_{\Gamma^-} I_n \Delta \sigma$. Здесь Γ^+ - та часть границы, где поток I_n направлен внутрь области, $\Gamma^- = \Gamma \setminus \Gamma^+$, $\Delta \sigma$ - элемент площади, равный $r_M h_i$ на вертикальных стенках тигля и $r_j g_j$ - на горизонтальных границах. Из графиков видно, что установление баланса потоков кислорода, когда $P_{вх} \longrightarrow P_{ст.}$, $P_{вых} \longrightarrow P_{ст.}$, происходит медленнее, чем установление концентрации в кристалле. Однако при выравнивании баланса через время Δt изменение концентрации в объеме происходит только во втором-третьем знаках.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Langlois W.E. Digital simulation of Czochralski bulk flow in a parameter range appropriate for liquid semiconductors. - J.Crystal Growth, 1977, v. 42, p.386-399.
2. Люмкис Е.Д., Мартузан В.Я., Мартузане Э.Н. К численному расчету потоков вязкой жидкости с вращением, гравитационной и термокапиллярной конвекцией. - В кн.: Прикладные задачи теоретической и математической физики. Рига, 1980, с.20-33.

3. Люмкис Е.Д., Мартузан Б.Я., Мартузане Э.Н. Численное исследование нестационарных гидродинамических и тепловых процессов в методе Чохральского. - Изв.АН СССР, Сер.физическая, 1980, № 2, с.373-377.
4. Ремизов И.А. Численное моделирование концентрационных полей легирующей примеси в расплаве при выращивании монокристаллов методом Чохральского. - Физика и химия обработки материалов, 1980, № 2, с.38-45.
5. Полежаев В.И., Простомолотов А.И. Исследование процессов гидродинамики и тепло массообмена при выращивании кристаллов методом Чохральского. - Изв.АН СССР, МЖГ, 1981, № 1, с.55-65.
6. Старшинова И.В., Фрязинов И.В. Численное исследование гидродинамических и тепловых процессов получения монокристаллов по методу Чохральского. - Препринт ИПМ им. М.В.Келдыша АН СССР,М.,1982,152.-21с.
7. Люмкис Е.Д., Мартузане Э.Н. Численный метод расчета конвективной диффузии в зоне расплава. - В кн.: Вычислительная техника и краевые задачи. Методы и специализированные средства. Рига, 1981, с.111-136.
8. Люмкис Е.Д., Мартузан Б.Я., Мартузане Э.Н. Взаимодействие потоков, вызванных термокапиллярной конвекцией и вращением при зонной плавке и их влияние на распределение примеси. - В кн.: Технологические эксперименты в невесомости. Свердловск, 1983, с.163-178.
9. Старшинова И.В., Фрязинов И.В. Постановка и численное исследование задачи о распределении легирующей примеси в процессе получения монокристаллов методом Чохральского. - Препринт ИПМ им.М.В.Келдыша АН СССР,М.,1982,№ 94.
10. Бартон Дж.А., Прим Р.Ч., Слихтер У.П. Распределение примесей в кристаллах, выращенных из расплава: Сб.переводов. Германий/Под ред.Д.А.Петрова , 1955, с.254.
11. Murgai A. Oxygen incorporation in Chrochralski-grown silicon.-Y American Conference of Crystal Growth. Abstract Conference program. 1981, July, p.19-24

12. Hirata H., Hashikawa K. The dissolution rate of silica in molten silicon. Jpn.Appl.Phys., 1980, v.19, N .8.

13. Гельфгат Ю.М., Горбунов Л.А., Соркин М.З. О магнитогидродинамическом воздействии на расплав полупроводниковых материалов в процессах получения монокристаллов по Чохральскому. II рижское совещание по магнитной гидродинамике: Тезисы докладов. Рига, 1984. - П, с.135-138.

УДК 519.632.4+519.624.2

АНАЛИЗ РАСПРЕДЕЛЕНИЯ СОДЕРЖАНИЯ КИСЛОРОДА И ЛЕГИРУЮЩЕЙ ПРИМЕСИ В РАСПЛАВЕ В ПРИБЛИЖЕНИИ ПАРАБОЛИЧЕСКОГО ПОГРАНСЛОЯ

Н.А.Авдонин, И.Н.Решетникова

(ВЦ ЛГУ им. П.Стучки)

При выращивании монокристаллов из расплава важное значение имеет определение неоднородности химсостава в кристалле. Химическая неоднородность в кристаллах кремния, выращиваемых из расплава способом Чохральского определяется содержанием кислорода и легирующих примесей в расплаве кремния в тигле при наличии конвективных потоков. Распределение концентрации кислорода в расплаве в общем случае определяется уравнением конвективной диффузии:

$$\frac{\partial c}{\partial t} + U_r \frac{\partial c}{\partial r} + U_z \frac{\partial c}{\partial z} = D \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r}\left(r \frac{\partial c}{\partial r}\right) + D \frac{\partial^2 c}{\partial z^2} \quad (I)$$

и соответствующими граничными условиями.
Здесь U_r, U_z - компоненты скорости в расплаве, C - концентрация.

Получение достаточно точного численного решения этого уравнения, как известно, вызывает значительные трудности из-за наличия малого коэффициента при старших производных. Однако при известном характере основных потоков в расплаве задачу можно свести к чрезвычайно простой постановке в приближении параболического погранслоя. Это дает возможность качественно проанализировать содержание кислорода и примеси в зависимости от характера потоков в расплаве.

I. Будем считать, что характер потоков в расплаве и скорость $\vec{U}$ известны из расчетов гидродинамической задачи или из эксперимента. Рассмотрим поток типа изображенного на рис.I. Будем рассматривать течение в погранслое толщиной h в установившемся режиме.

Предположим, что на каждом из участков I-5 движение идет только в одном направлении вдоль трубки тока. Тогда на участке I $U_z = 0$, а $U_r = U_0(z)\, r^{-1}$ из условия сохранения массового баланса вдоль трубки тока. Если на этом участке пренебречь диффузией вдоль оси r по сравнению с конвективным членом, то уравнение (I) в стационарном случае можно записать в виде:

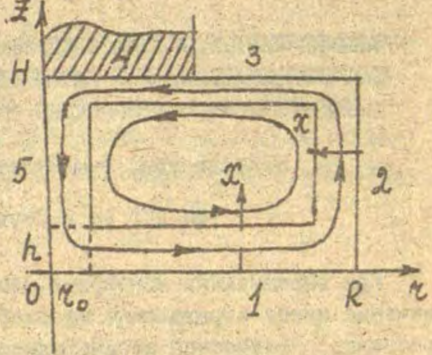

Рис.1. Схема потока в расплаве.

$$\frac{U_0(z)}{r}\frac{\partial C}{\partial r} = \mathcal{D}\frac{\partial^2 C}{\partial z^2}, \quad 0<r<R,\ 0<z<h. \qquad (I.I)$$

Аналогично, на участке 2 будет $U_r = 0$, $U_z = U_0(r)R^{-1}$, и, пренебрегая диффузионным членом $\mathcal{D}\frac{\partial^2 C}{\partial z^2}$, получим уравнение:

$$\frac{U_0(z)}{R}\frac{\partial C}{\partial z} = \mathcal{D}\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}\left(r\frac{\partial C}{\partial r}\right), \quad R-h<r<R<H, \quad 0<z<H. \qquad (I.2)$$

На участке 3 уравнение будет иметь вид (I.I), а на участке 4 следует учесть конвективный член, возникающий за счет движения кристалла со скоростью V_0 :

$$\frac{U_0(z)}{r}\frac{\partial C}{\partial r} = \mathcal{D}\frac{\partial^2 C}{\partial z^2} + V_0\frac{\partial C}{\partial z}, \quad 0<r<R; \quad H-h<z<H. \qquad (I.3)$$

R_1 - радиус кристалла.

Введем новые переменные - $\bar{x}$ - поперек течения в слое h ; $\bar{y}$ - вдоль направления течения. Переходя к безразмерным переменным:

$$x=\frac{\bar{x}}{h}\,;\; y=0{,}5\bar{y}^2h^2,\; 0<\bar{y}<R;\; y=R\bar{y}h^{-2},\; R<\bar{y}<R+H, \qquad (I.4)$$

запишем уравнения (I.I)-(I.2) на участках I-3 в единой форме:

$$U_0(x)\frac{\partial C}{\partial y}=D\frac{\partial^2 C}{\partial x^2},\quad 0<x<1;\; 0<y<\frac{R^2+RH}{h^2}-\frac{R_1^2}{2h^2}. \qquad (I.5)$$

На участке 4 в подкристальной облас и уравнение (I.3) принимает вид:

$$U_0(x)\frac{\partial C}{\partial y}=D\frac{\partial^2 C}{\partial x^2}+V_0 h\frac{\partial C}{\partial x},\quad 0<x<1;$$

$$\frac{R^2+RH}{h^2}-\frac{R_1^2}{2h^2}<y<\frac{R^2+RH}{h^2}. \qquad (I.6)$$

На участке 5 концентрация изменяться не будет в силу условия симметрии на оси цилиндра. Поэтому участок 5 можно выбросить из рассмотрения.

Перейдем к формулировке граничных условий. На границе h-слоя приближенно положим:

$$\left.\frac{\partial C}{\partial x}\right|_{x=h}=0; \qquad (I.7)$$

считая, что концентрация вне зоны h-слоя почти не меняется и равна некоторой средней величине в установившемся режиме. На стенках тигля происходит растворение кварца, и кислород с молекулами SiO попадает в расплав. Будем исходить из того, что процесс переноса кислорода (SiO) от стенок тигля лимитируется диффузией и конвекцией в расплаве. Тогда надо предположить, что на стенках тигля концентрация кислорода равна пределу насыщения $C_н$ [I], а поток от стенок тигля пропорционален разности $C - C_н$, т.е.

$$\mathcal{D}\frac{\partial C}{\partial x}\bigg|_{x=0} = \alpha_1 h (C - C_н), \quad 0 < y < \frac{R^2}{2h^2} + \frac{RH}{h^2}, \qquad \text{(I.8)}$$

причем коэффициент α_1, характеризующий скорость растворения кварца, можно положить приближенно равным $\alpha_1 = \mathcal{D}/\delta_1$ (δ_1 - ширина диффузионного погранслоя), либо определить экспериментально.

Аналогично можно сформулировать условие для потока на свободной поверхности расплава (участок 3), на которой происходит испарение кислорода (молекул SiO). Принимая концентрацию кислорода на этой поверхности равной нулю, запишем

$$\mathcal{D}\frac{\partial C}{\partial x}\bigg|_{x=0} = \alpha_2 h C, \quad \frac{R^2}{2h^2} + \frac{RH}{h^2} < y < \frac{R^2}{h^2} + \frac{RH}{h^2} - \frac{R_1^2}{2h^2}, \qquad \text{(I.9)}$$

причем $\alpha_2 \simeq \mathcal{D}\,\delta_2^{-1}$.

На границе кристалла (участок 4) формулируется обычное условие баланса при заданном коэффициенте равновесного распределения примеси m:

$$\mathcal{D}\frac{\partial C}{\partial x}\bigg|_{x=0} + V_0 h C = m V_0 h C, \qquad \text{(I.10)}$$

$$\frac{R^2 + RH}{h^2} - \frac{R_1^2}{2h^2} < y < \frac{R^2 + RH}{h^2}.$$

Учитывая цикличность потока, запишем условие периодичности концентрации С (участок 5 исключается из рассмотрения):

$$C\big|_{y=0} = C\big|_{y=(R^2+RH)h^{-2}}. \qquad \text{(I.II)}$$

Распределение по x скорости $U_0(x)$ можно задать из решения задачи обтекания стенки ламинарным потоком [2]:

$$U_0(x) = 1,5\, v_0 \left[1-(x-1)^2\right]. \qquad (I.12)$$

Таким образом, полностью сформулирована задача в приближении параболического погранслоя. Концентрация C определяется уравнениями (I.5), (I.6) и условиями (I.7)-(I.II). Функция $U_0(x)$ задается соотношением (I.I2), причем U_0 определяется из расчетов гидродинамической задачи. Численное решение этой задачи не представляет трудностей. Ее можно решать обычными разностными методами.

2. Для решения поставленной задачи применялась неявная разностная схема. Уравнения (I.5), (I.6) можно записать в едином виде, вводя функцию

$$v = \begin{cases} 0, & 0 < y < (R^2 + RH - 0,5R_1^2)\,h^{-2} \\ v_0, & (R^2 + RH - 0,5R_1^2)\,h^{-2} < y < (R^2+RH)\,h^{-2}. \end{cases} \qquad (2.I)$$

Тогда аппроксимация уравнений (I.5)-(I.6) запишется в виде:

$$U_{0i}\,\frac{C_{ij}^{k} - C_{ij-1}^{k}}{\Delta y} = D\,\frac{C_{i+1j}^{k} - 2C_{ij}^{k} + C_{i-1j}^{k}}{h^2} + v_j h\,\frac{C_{i+1j}^{k} - C_{ij}^{k}}{\Delta x}. \qquad (2.2)$$

Здесь $U_{0i} = U_0(x_i)$; $C_{ij} = C(x_i, y_j) = C(i\Delta x, j\Delta y)$,

$$i = 1, 2, \ldots, N; \quad j = 1, 2, \ldots, M;$$

k - номер итерации.

Граничные условия аппроксимируются следующим образом:

$$\mathcal{D}\,\frac{C_{2j}^{k}-C_{1j}^{k}}{\Delta x}=\alpha_1 h\left(C_{1j}^{k}-C_{H}\right),\quad j=1,2,\ldots,M_1; \tag{2.3}$$

$$\mathcal{D}\,\frac{C_{2j}^{k}-C_{1j}^{k}}{\Delta x}=\alpha_2 h\, C_{1j}^{k},\quad j=M_1+1,M_1+2,\ldots,M_2; \tag{2.4}$$

$$\mathcal{D}\,\frac{C_{2j}^{k}-C_{1j}^{k}}{\Delta x}=-(1-m)v_0 h\, C_1^{k},\quad j=M_2+1,M_2+2,\ldots,M. \tag{2.5}$$

$$C_{ij}^{k}=C_{iN}^{k-1},\quad i=1,2,\ldots,N. \tag{2.6}$$

Счет ведется прогонками по линиям $j=const$,начиная с j =I. При $j=N$ задается начальное приближение C_{iN}^{0}, а затем счет циклически повторяется, причем C_{iN}^{k-1}, согласно (2.6), берется с предыдущей итерации.

3. Для приближенных оценок содержания и перепадов концентрации кислорода и примеси можно получить простое аналитическое решение. Для этого найдем среднюю по сечению h - слоя концентрацию

$$\tilde{C}=\int_0^1 C(x,y)\,dx. \tag{3.I}$$

Интегрируя соответствующим образом уравнения (I.5), (I.6) и используя граничные условия (I.7)-(I.I0), на соответствующих участках контура получим осредненные уравнения для определения $\tilde{C}$ на каждом участке:

$$U_0\frac{\partial\tilde{C}}{\partial y}=-\alpha_1 h\left(\tilde{C}-C_H\right),\qquad 0\le y\le y_1 \tag{3.2}$$

$$U_0\frac{\partial C}{\partial y}=-\alpha_2 h\,\tilde{C},\qquad y_1\le y\le y_2 \tag{3.3}$$

$$U_0 \frac{\partial \tilde{C}}{\partial y} = (1-m) V_0 h \tilde{C}\ , \quad y_2 \le y \le y_3. \qquad (3.4)$$

В последнем уравнении мы пренебрегли слагаемым $V_0 h (\tilde{C} - C(h))$ ввиду малой разности $\tilde{C} - C(h)$

Здесь введены обозначения

$$y_1 = R(0{,}5R+H)h^{-2}\ ;\ y_2 = (R^2+RH-0{,}5R_1^2)h^{-2},\ y_3 = (R+H)h^{-2}. \qquad (3.5)$$

Интегрируя уравнения (3.2)-(3.4), найдем распределение концентрации на каждом участке при условии, что на входе каждого участка концентрация задана:

$$\tilde{C} = C_H + (C_1 - C_H)\exp(-\alpha_1 h U_0^{-1} y),\quad 0 < y < y_1\ ; \qquad (3.6)$$

$$\tilde{C} = C_2 \exp\left[-\alpha_2 h U_0^{-1}(y - y_1)\right],\quad y_1 < y < y_2\ ; \qquad (3.7)$$

$$\tilde{C} = C_3 \exp\left[-\alpha_2 h U_0^{-1}(y - y_2)\right],\quad y_2 < y < y_3\ ; \qquad (3.8)$$

C_1, C_2, C_3 - концентрация на входе I-го, 2-го, 3-го участков соответственно. Эти значения концентрации определяются из условий равенства концентраций на границах каждого участка и условия периодичности (I.II):

$$\begin{aligned} C_2 &= C_H + (C_1 - C_H)\exp(-\alpha_1 h U_0^{-1} y_1), \\ C_3 &= C_2 \exp\left[-\alpha_2 h U_0^{-1}(y_2 - y_1)\right], \\ C_1 &= C_3 \exp\left[(1-m) V_0 h U_0^{-1}(y_3 - y_2)\right]. \end{aligned} \qquad (3.9)$$

Отсюда находим:

$$\begin{aligned} C_1 = &\left[1 - \exp(-\alpha_1 h U_0^{-1} y_1)\right]\exp\left[(\alpha_2 (y_2 - y_1) - \right. \\ &\left. - (1-m) V_0 (y_3 - y_2)) U_0^{-1} h\right] \times C_H \Delta^{-1} \end{aligned} \qquad (3.10)$$

$$C_2=(1-\exp(-\alpha_1 h U_0^{-1} y_1)C_н \Delta^{-1}, \tag{3.11}$$

$$C_3'=(1-\exp(-\alpha_1 h U_0^{-1} y_1)\exp(-\alpha_2 h U_0^{-1}(y_2-y_1))\cdot C_н \Delta^{-1}, \tag{3.12}$$

$$\Delta=1-\exp\left[-U_0^{-1}h(\alpha_1 y_1+\alpha_2(y_2-y_1)-(1-m)V_0(y_3-y_2))\right] \tag{3.13}$$

Таким образом, полное распределение концентрации можно вычислить по формулам (3.6)-(3.8), где C_1, C_2, C_3 определены соотношениями (3.10)-(3.13).

Найдем еще относительный перепад концентрации по радиусу кристалла:

$$\Delta C=\frac{C_1-C_3}{C_3}=\exp\left[(1-m)hV_0U_0^{-1}(y_3-y_2)\right]-1. \tag{3.14}$$

Если показатель степени мал, то приближенно будем иметь:

$$\Delta C\simeq(1-m)V_0 h U_0^{-1}(y_3-y_2). \tag{3.14}$$

Полученные формулы дают возможность приближенно оценить среднюю концентрацию вблизи границы тигля и кристалла, а также перепад концентрации на любом участке контура границы.

4. Приведем некоторые результаты расчетов и их сравнение. Сравним результаты численного решения задачи в приближении параболического погранслоя для двух вариантов задания скорости $U_0(x)$. На рис.2 представлено распределение концентрации кислорода на стенках тигля, свободной поверхности и на границе кристалла при $x=0$, и при $x=h$ (пунктирные кривые). Напомним, что y - координата вдоль контура рассматриваемой области. Как видим, при задании основного вихря с направлением движения против часовой стрелки на стенках тигля происходит насыщение расплава кислородом. На свободной поверхности резкое падение содержания кислорода за счет испарения, и в подкристальной

области-незначительное падение содержания кислорода за счет вхождения кислорода в кристалл. На границе h -слоя содержание кислорода фактически не меняется и равно средней концентрации в расплаве. Задание осредненной по x скорости приводит к незначительной погрешности; отклонение не превышает 8-10%. На рис.3 представлено характерное распределение концентрации по x для нескольких значений y.

Расчеты проведены при следующих значениях исходных данных:

$U_0 = 1$ см^2/с; $\mathcal{D} = 10^{-4}$ см^2/с; $h = 0{,}2$ см; $R_1 = 3$ см; $R = 10$ см; $H = 10$ см; $\alpha_1 = 1{,}6 \cdot 10^{-4}$ см/с; $\alpha_2 = 5 \cdot 10^{-4}$ см/с; $C_H = 2{,}2 \cdot 10^{18}$ ат/см^3; $m = 1{,}25$.

В заключение приведем сравнение аналитического решения (п.3), результатов расчетов в приближении параболического погранслоя (п.2) с численным решением задачи в полной постановке, включая расчеты задачи гидродинамики [3].

Расчеты проводились при следующих значениях параметров: $\omega_T = -5$ об/мин, $\omega_K = 25$ об/мин, $\Delta T_K = 15\,°C$; $\Delta T_H = 40\,°C$, $R_1 = 3$ см; $R = 10$ см; $H = 6$ см.

При таких перепадах температуры на стенках и дне тигля и таком соотношении числа оборотов тигля и кристалла максимальное значение скорости в пределах погранслоя составляло ≈ 1 см^2/с. Распределение содержания кислорода вдоль контура представлено на рис.4. Расчеты в приближении параболического погранслоя (кривая 2), аналитическое решение (кривая 3) удовлетворительно согласуются с решением задачи в полной постановке. Всплески содержания кислорода вблизи оси тигля и в конце 1-го и 2-го участков вполне объясняются наличием дополнительных вихрей в указанных областях, которые не учитываются в приближенной постановке задачи.

Из проведенного анализа можно сделать вывод о возможности использования приближения параболического погранслоя и аналитического решения для оценок содержания кислорода и примеси в кристаллах кремния.

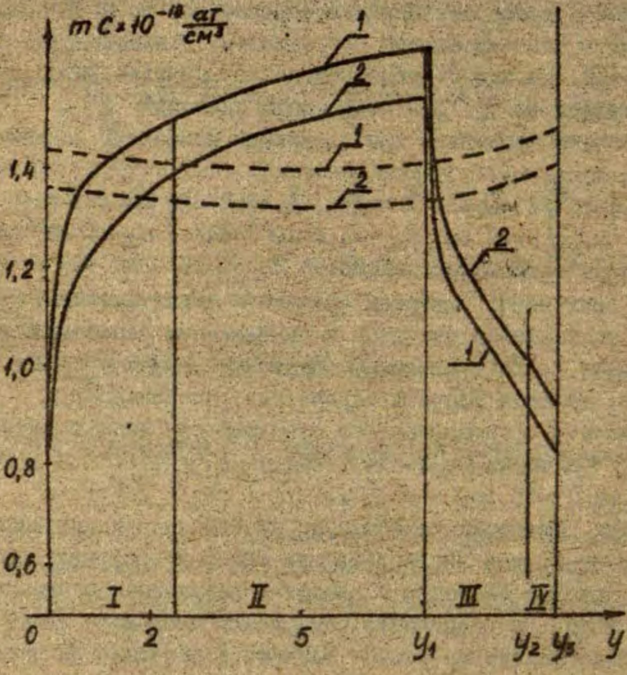

Рис.2. Распределение концентрации кислорода вдоль границы области. Решение в приближении параболического погранслоя.
I- $U(x)=1,5\,U_0(1-(x-1)^2)$; 2- $U(x)=U_0$
———— - концентрация при $x=0$.
- - - - - - концентрация при $x=h$.

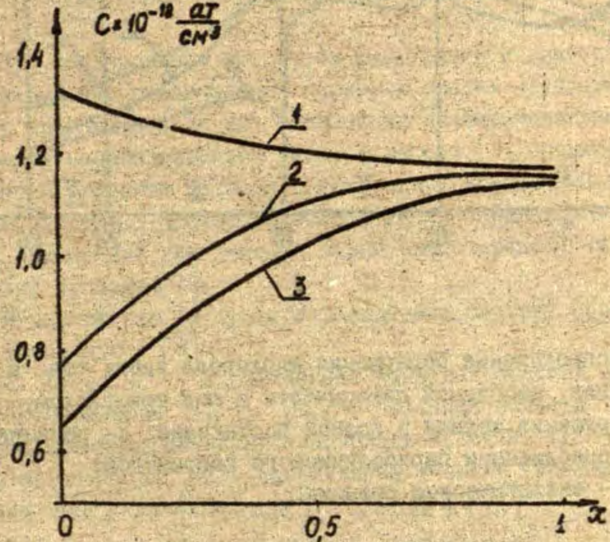

Рис.3. Распределение концентрации кислорода по x в пределах h -слоя.
I - $\bar{y}$ =7,5; 2 - $\bar{y}$ = 9; 3 - $\bar{y}$ =I0.

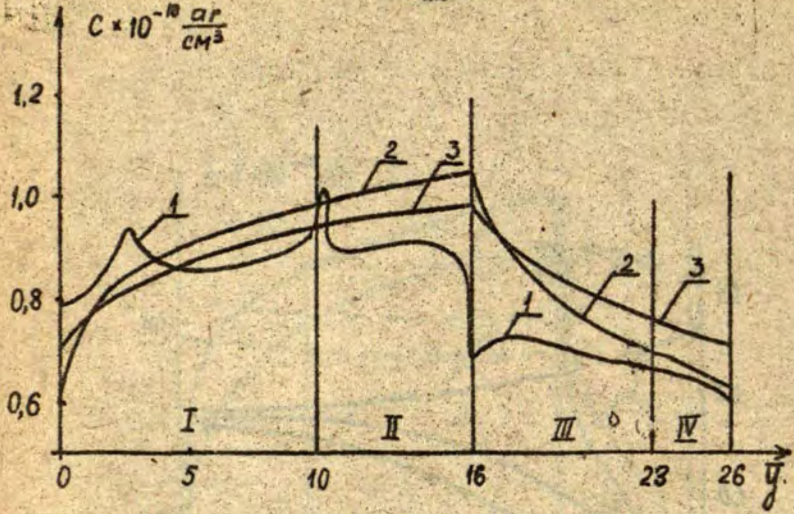

Рис.4. Распределение содержания кислорода вдоль сте к тигля, свободной поверхности и под кристаллом. 1-решение задачи в полной постановке; 2- решение в приближении параболического погранслоя; 3 - аналитическое решение.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Murgai A. Oxygen incorporation in Chzochralski grow silicon. - Y American Conference of Crystal. Abstract Conference program. 1981, July, p.19-24
2. Бэтчелор Дж. Введение в динамику жидкости. М., 1978.- 756 с.
3. Люмкис Е.Д. Расчет распределения легирующей примеси и кислорода в расплаве при выращивании кристаллов методом Чохральского. - В кн.: Прикладные задачи математической физики. Рига, 1985, с. 3-20

УДК 532.546:519.63

О РАЗРЕШИМОСТИ ОДНОГО НЕЛИНЕЙНОГО УРАВНЕНИЯ ПАРАБОЛИЧЕСКОГО ТИПА

И.И.Ляшко, Е.С.Вакал, С.Л.Кивва, О.Б.Стеля

(Киевский государственный университет)

При исследовании процессов фильтрации и влагопереноса в насыщенно-ненасыщенных пористых средах необходимо решать краевые задачи для нелинейных дифференциальных уравнений параболического типа. В работе [I] предложен численный алгоритм расчета таких задач, основанный на методе Ньютона - последовательной верхней релаксации. Этот метод применялся для решения задач влагопереноса на фоне действия дренажа [2].

В данной статье будем использовать систему обозначений, введенную в [3].

I. Пусть Ω - ограниченная выпуклая область евклидова пространства E_n, $\partial\Omega$ - граница области Ω, которая предполагается кусочно-гладкой, $x=(x_1, x_2, \cdots, x_n)$ - точка области Ω, ν - направление внешней нормали к границе $\partial\Omega$, $Q=\Omega\times(0,T]$, $S=\partial\Omega\times[0,T]$.

Рассмотрим в области Q краевую задачу

$$w_t(x,u)=\sum_{i,j=1}^{n}\frac{\partial}{\partial x_i}\left(k_{ij}(x,u)\frac{\partial u}{\partial x_j}\right), \quad (x,t)\in Q, \tag{I}$$

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

$$\sum_{i,j=1}^{n}k_{ij}(x,u)\frac{\partial u}{\partial x_j}\cos(\nu,x_i)=0, \quad (x,t)\in S. \tag{3}$$

Будем считать, что $k_{ij}(x,u)$, $i,j=\overline{1,n}$ являются функциями, непрерывными по x и абсолютно непрерыв - ными по u , $w(x,u)$ - дифференцируема по $x\ \forall u\in E$ и трижды дифференцируема по $u\ \forall x\in\Omega$, $\varphi(x)\in W_2^1(\Omega)$. Кроме того, пусть

$$\nu_1\xi^2\le\sum_{i,j=1}^{n}k_{ij}(x,u)\xi_i\xi_j\le\mu_1\xi^2,$$

$$\forall u\in E,\quad \xi=(\xi_1,\xi_2,\dots,\xi_n)\in E_n,$$

$$w_u(x,u)>\mu,\ \forall u\in E,\ x\in\Omega,\ \mu,\mu_1,\nu_1-const>0.$$

2. Под обобщенным решением задачи (I)-(3) будем по - нимать функцию $u(x,t)$ из $V_2^{1,0}(Q)$, удовлетворяющую интегральному тождеству

$$\int\limits_{Q_t}\Big[-w\eta_t+\sum_{i,j=1}^{n}k_{ij}(x,u)u_{x_j}\eta_{x_i}\Big]dx\,dt+\int\limits_{\Omega}\varphi(x)\eta(x,0)dx=0,$$

для всех $t\in(0,T]$, $\eta(x,t)\in W_2^{1,1}(Q)$.

В силу сделанных предположений в п.I, уравнение (I) представим в виде

$$u_t-\sum_{i,j=1}^{n}\frac{\partial}{\partial x_i}\Big(\frac{k_{ij}(x,u)}{w_u(x,u)}\frac{\partial u}{\partial x_j}\Big)-\sum_{i,j=1}^{n}\frac{k_{ij}(x,u)u_{x_j}}{w_u^2(x,u)}\frac{dw_u(x,u)}{dx_i}=0.$$

Обозначая

$$a_{ij}(x,u)=k_{ij}(x,u)\cdot w_u^{-1}(x,u),$$

$$b(x,u,u_x)=-\sum_{i,j=1}^{n}k_{ij}(x,u)w_u^{-2}(x,u)\frac{dw_u(x,u)}{dx_i}u_{x_j},$$

получим

$$u_t-\sum_{i,j=1}^{n}(a_{ij}(x,u)u_{x_j})_{x_i}+b(x,u,u_x)=0. \tag{4}$$

Пусть $Q^m = \Omega_m \times (0,T]$, $m=1,2,\dots$ есть бесконечная последовательность вложенных друг в друга цилиндров, таких, что $Q^m \supset Q^{m+1} \supset Q$ для всех m, и таких, что границы Ω_m принадлежат $H^{2+\alpha}$ и имеют равномерно ограниченные нормы в C^2.

Функции $a_{ij}(x,u)$, $i,j=\overline{1,n}$ и $b(x,u,u_x)$ продолжим на область $\{(x,t)\in \bar{Q}^1, u\in E, u_x \in E_n\}$ с выполнением соответствующих функциям условий гладкости и

$$\nu_1 \xi^2 \le \sum_{i,j=1}^{n} a_{ij}(x,u)\xi_i\xi_j \le \mu_1 \xi^2,$$

а функцию $\varphi(x)$ на область $\bar{\Omega}$, так, чтобы

$$\sum_{i,j=1}^{n} k_{ij}(x,\varphi(x))\frac{\partial\varphi}{\partial x_j}\cos(\nu,x_i)=0,\quad x\in\partial\Omega^\circ,\quad \varphi(x)\in W_2^2(\Omega^\circ).$$

Построим по $a_{ij}(x,u)$, $i,j=\overline{1,n}$, $b(x,u,u_x)$ и $\varphi(x)$ усреднения $a_{ij}^m(x,u)$, $b^m(x,u,u_x)$, $\varphi^m(x)$ с радиусом усреднения $\rho_m = \frac{d}{m}$, где d - расстояние от S' до S.

Рассмотрим семейство задач

$$u_t^m - \sum_{i,j=1}^{n}(a_{ij}^m u_{x_j}^m)_{x_i} + b^m(x,u^m,u_x^m)=0,\ (x,t)\in Q^m. \quad (5)$$

$$u^m(x,0)=\varphi^m(x),\quad x\in\Omega_m, \quad (6)$$

$$\sum_{i,j=1}^{n} k_{ij}^m(x,u^m)\frac{\partial u^m}{\partial x_j}\cos(\nu,x_i)=0,\ (x,t)\in S^m,\ m=2,3,\dots \quad (7)$$

Пусть выполнены условия

$$|a^m_{iju}, a^m_{ijx}| \le \mu, \quad \text{при } (x,t) \in \bar{Q}^m \quad \text{и } |U| < M.$$

Тогда задача (5)-(7) однозначно разрешима в $H^{2+\alpha, 1+\frac{\alpha}{2}}(\bar{Q}^m)$ [3, с.560], и справедливы равномерно по m оценки [3, с.555, 497]

$$\|U^m\|_{H^{\beta,\frac{\beta}{2}}(Q^m)} \le C_1, \tag{8}$$

$$\|U^m_x\|_{H^{1,\frac{1}{2}}(Q_d)} + \|U^m_t\|_{L_2(Q_d)} + \|U^m_{xx}\|_{L_2(Q_d)} \le C_2(d), \tag{9}$$

где Q_d - любая подобласть Q, отстоящая от границы на расстояние $d > 0$. Из неравенств (8)-(9) следует, что можно выбрать подпоследовательность U^{m_k}, которая сходится почти всюду в Q и слабо в $W_2^{2,1}(Q_d)$ к некоторой ограниченной функции $U(x,t)$.

Так как функции $a_{ij}(x,u), i,j=\overline{1,n}, b(x,u,u_x)$ непрерывны по U и U_x для почти всех x и равномерно ограничены, то m_k выбираем так, чтобы последовательности a^m_{ij}, b^m, φ^m слабо сходились в $L_2(Q)$. Тогда, переходя к пределу в тождестве

$$\int_{Q^m} \Big[-U^m\eta_t + \sum_{i,j=1}^n a^m_{ij} U^m_{x_j} \eta_{x_i}\Big] dx\,dt + \int_{\Omega_m} \varphi^m \eta(x,0)\,dx = 0,$$

получим

$$\int_Q \Big[-U\eta_t + \sum_{ij=1}^n a_{ij} U_{x_j} \eta_{x_i}\Big] dx\,dt + \int_\Omega \varphi\eta(x,0)\,dx = 0,$$

для всех $\eta(x,t)\in W_2^{1,1}(Q')$. Следовательно, $u(x,t)$ - обобщенное решение задачи (I)-(3).

Покажем единственность решения задачи (I)-(3). Пусть $u^1(x,t)$ и $u^2(x,t)$ - решения искомой задачи. Обозначим $v(x,t)=u^1(x,t)-u^2(x,t)$. Тогда $v(x,t)$ удовлетворяет интегральному тождеству

$$\int_Q [-v\eta_t+\sum_{i,j=1}^{n}(a_{ij}(x,u^1)v_{x_j}+\Delta a_{ij}\,u^2_{x_j})\eta_{x_i}+\Delta b\,\eta]\,dx\,dt=0,$$

где $\Delta a_{ij}(x,u)=a_{ij}(x,u^1)-a_{ij}(x,u^2)$,

$$\Delta b(x,u,u_x)=b(x,u^1,u^1_x)-b(x,u^2,u^2_x).$$

Учитывая, что

$$\Delta b=\sum_{i=1}^{n}v_{x_i}\int_0^1\frac{\partial b[x,\tau u^1+(1-\tau)u^2,\tau u^1_x+(1-\tau)u^2_x]}{\partial u_{x_i}}d\tau+$$

$$+v\int_0^1\frac{\partial b[x,\tau u^1+(1-\tau)u^2,\tau u^1_x+(1-\tau)u^2_x]\,d\tau}{\partial u}=$$

$$=\sum_{i=1}^{n}b_i v_{x_i}+\tilde{b}v;$$

$$\Delta a_{ij}=v\int_0^1\frac{\partial a_{ij}(x,\tau u^1+(1-\tau)u^2)\,d\tau}{\partial u}=\tilde{a}_{ij}v.$$

Отсюда

$$\int_Q[-v\eta_t+\sum_{i,j=1}^{n}(a_{ij}(x,u^1)v_{x_j}+\tilde{a}_{ij}u^2_{x_j}v)\eta_{x_i}+$$

$$+(\sum_{i=1}^{n}b_i v_{x_i}+\tilde{b}v)\eta]\,dx\,dt=0. \qquad (10)$$

Из (I0) вытекает, что $v(x,t)\equiv 0$ [3], следовательно, $u^1 \equiv u^2$

Таким образом, справедлива

Теорема. Пусть выполнены условия п.I, тогда задача (I)-(3) имеет единственное решение $u(x,t)\in W_2^{2,1}(Q_d)$.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

I. Вакал Е.С., Мистецкий Г.Е., Стеля О.Б. К решению одного класса нелинейных уравнений параболического типа. - В кн.: Тез.докл. Ш Респ.конф. "Вычислительная математика в современном научно-техническом прогрессе". Киев, 1982, с.149-150.

2. Гладкий А.В., Вакал Е.С., Стеля О.Б. Расчет массопереноса в ненасыщенных средах. - В кн.: Современные проблемы и математические методы теории фильтрации: Тез. докл. Всесоюзн.семинара. М., 1984, с.I3I-I32.

3. Ладыженская О.А., Солонников В.А., Уральцева Н.Н. Линейные и квазилинейные уравнения параболического типа. М., 1967. - 736 с.

УДК 519.633.8

ЧИСЛЕННОЕ СРАВНЕНИЕ РАЗНОСТНЫХ СХЕМ ДЛЯ ЗАДАЧИ О ТЕЧЕНИИ ЖИДКОСТИ МЕЖДУ БЕСКОНЕЧНЫМИ ВРАЩАЮЩИМИСЯ ДИСКАМИ

Н.В.Козельская, Е.Д.Люмкис, А.А.Юдов
(ВЦ ЛГУ им. П. Стучки)

Теоретический анализ точности разностных схем дает лишь асимптотические оценки скорости сходимости приближенного решения к точному при стремлении шага разностной сетки h к нулю. В этой связи представляет интерес проведение модельных расчетов и сравнение между собой различных схем при одинаковой асимптотической скорости сходимости. Такая задача является особенно важной для уравнений, содержащих малый параметр при старших производных, в частности, для уравнений Навье-Стокса.

Для двумерных уравнений Навье-Стокса, как известно, практически отсутствуют точные аналитические решения. Задача о течении вязкой несжимаемой жидкости после преобразования Кармана [I] сводится в стационарном случае к системе краевых задач для обыкновенных дифференциальных уравнений. Эта система сохраняет многие особенности двумерной задачи, и, являясь одномерной, позволяет проводить расчеты на достаточно подробных разностных сетках и численно находить хорошее приближение к точному решению. В настоящей работе для этой задачи при различных числах Рейнольдса проводится сравнение по точности ряда известных схем (центрально-разностная схема, монотонная схема с реализацией краевых условий по Тому и Вудсу)и предложенной здесь схемой экспоненциального типа.

I. Рассмотрим пространство между двумя бесконечными коаксиальными дисками, заполненное несжимаемой изотермической жидкостью с плотностью ρ и кинематической вязкостью ν. Нижний диск вращается со скоростью ω, верхний - со скоростью $s\omega$, $-1 \leq s \leq 1$. Переходя к безразмерным переменным, в качестве единицы длины выберем расстояние между дисками d , единицы скорости $-\omega d$, $Re=\frac{\omega d^2}{\nu}$ - число Рейнольдса. Разыскивая компоненты скорости V_r , V_z , V_φ и давление P в виде

$$V_r = rF(z),\ V_z = R_e^{-1/2} H(z),\ V_\varphi = rG(z),\ P = \rho\nu P_0(z) + \frac{K\omega^2}{2} r^2 \quad (1),$$

после подстановки в стационарную систему уравнений Навье-Стокса получим:

$$F'' - Re^{1/2} HF' - Re\,(F^2 - G^2 + K) = 0,$$

$$G'' - Re^{1/2} HG' - 2\,Re\,FG = 0, \qquad (2)$$

$$H' = -2\,Re^{1/2} F, \quad 0 < z < 1.$$

При выполнении условий прилипания и непроницаемости на дисках краевые условия имеют вид:

$$H(0) = H(1) = 0,\ G(0) = 1,\ G(1) = S,\ F(0) = F(\ ) = 0. \qquad (3)$$

Лишнее краевое условие для системы пятого порядка используется для определения неизвестной константы K . Функция $P_0(z)$ может быть найдена после решения задачи (2)-(3).

Уравнения (2) можно записать и в ином виде. Продифференцируем первое уравнение системы (2) по z и подставим вместо функции F и ее производных их выражения, полученные из третьего уравнения. Введя обозначение ξ = $= -2\,R_e^{1/2} F'$, получим систему, эквивалентную (2):

$$\xi'' = Re^{1/2} H\xi + 4\,Re^{3/2}\,GG',$$

$$G'' = -Re^{1/2} H'G + Re^{1/2} G'H, \qquad (4)$$

$$H'' = \xi .$$

Краевые условия для H и G совпадают с (3), а вместо краевых условий для функции F, получим:

$$H'(0) = H'(1) = 0. \qquad (5)$$

Если определить "потоки" $I(z)$, $M(z)$ формулами

$$I(z) = G' - R_e^{1/2} G H,$$

$$M(z) = \xi' - R_e^{1/2} \xi H - 2 R_e^{3/2} G^2, \tag{6}$$

то уравнения (4) можно записать также в виде:

$$M' = -R_e^{1/2} \xi H',$$
$$I' = -2 R_e^{1/2} H' G, \tag{7}$$
$$H'' = \xi.$$

Уравнения (4), (7) являются одномерным аналогом двумерных уравнений Навье-Стокса, записанных в переменных вихрь-функция тока-вращательная компонента скорости, при этом вихрь может быть определен формулой $\xi' = -2 R_e^{1/2} r \xi$, а функция тока Ψ - формулой $\Psi = \frac{1}{2 R_e^{1/2}} H r^2$.

Отметим, что система уравнений (4) содержит основные вычислительные трудности, возникающие при разностном подходе к получению численного решения уравнений Навье-Стокса [2]: а) большой коэффициент при производной первого порядка ($\sim \sqrt{R_e}$); б) трудности при аппроксимации краевых условий (5) (условия для вихря на твердой стенке).

2. Переходя к разностной аппроксимации сформулированной краевой задачи, введем на отрезке [0,1] сетку $\bar{\Omega}$ узлов $\{x_i\}$, $x_0 = 0$, $x_i = x_{i-1} + h_i$, $i = 1, \dots, N$, $x_N = 1$. Введем также сетку $\bar{\Omega}_1$, включающую узлы $\{x_{i+1/2}\}$, $i = 0, \dots, N$, $x_{i+1/2} = \frac{x_i + x_{i+1}}{2}$, а также граничные узлы x_0 и x_N. Определим $\hbar_i = x_{i+1/2} - x_{i-1/2}$, $i = 1, \dots, N-1$, $\hbar_0 = h_1/2$, $\hbar_N = h_N/2$. Будем использовать стандартные обозначения разностных производных [3]:

$$y_x = \frac{y_{i+1} - y_i}{h_{i+1}}; \quad y_{\bar{x}} = \frac{y_i - y_{i-1}}{h_i}; \quad y_{\overset{\circ}{x}} = \frac{y_{i+1} - y_{i-1}}{2 \hbar_i}; \quad y_{\bar{x}\hat{x}} = \frac{1}{\hbar_i}(y_x - y_{\bar{x}}).$$

Сеточные функции будем обозначать теми же буквами, что и соответствующие дифференциальные.

В работах [4,5] для численного решения задачи (2)-(3) использовалась разностная схема с аппроксимацией производных I-го порядка центральными разностями:

$$
\begin{aligned}
&F_{\bar{x}\hat{x}} - R_e^{1/2} H F_{\overset{\circ}{x}} - R_e (F^2 - G^2 + K) = 0,\\
&G_{\bar{x}\hat{x}} - R_e^{1/2} H G_{\overset{\circ}{x}} - 2 R_e F G = 0, \qquad\qquad (8)\\
&H = -R_e^{1/2} (F_{i+1} + F_i),\\
&F_0 = H_0 = F_N = H_N = 0; \quad G_0 = 1, \ G_N = S.
\end{aligned}
$$

Легко показать, что при постоянном шаге сетки $h_i \equiv h$ разностная схема (8) эквивалентна одной из центрально-разностных аппроксимаций системы (4).

Разностная схема для уравнений (4) с монотонной аппроксимацией А.А.Самарского [3] для конвективных членов может быть записана в виде:

$$
\begin{aligned}
&\frac{1}{1+R} \xi_{\bar{x}\hat{x}} - R_e^{1/2} \frac{H-|H|}{2} \xi_x - R_e^{1/2} \frac{H+|H|}{2} \xi_{\bar{x}} - 4 R_e^{3/2} G G_{\overset{\circ}{x}} = 0,\\
&\frac{1}{1+R} G_{\bar{x}\hat{x}} - R_e^{1/2} \frac{H-|H|}{2} G_x - R_e^{1/2} \frac{H+|H|}{2} G_{\bar{x}} + R_e^{1/2} G H_{\overset{\circ}{x}} = 0,\\
&H_{\bar{x}\hat{x}} = \xi, \qquad\qquad (9)\\
&H_0 = H_N = 0, \quad G_0 = 1, \ G_N = S.
\end{aligned}
$$

Здесь $R = \frac{1}{2} R_e^{1/2} \hbar_i |H_i|$. Для функции ξ на границах воспользуемся аппроксимациями типа Тома или типа Вудса (см. [2]) краевых условий для вихря на твердой стенке. В данной задаче эти условия имеют вид: условия типа Тома

$$
\xi_1 = \frac{2 H_2}{h_2^2}, \qquad \xi_N = \frac{2 H_{N-1}}{h_N^2}; \qquad\qquad (10)
$$

условия типа Вудса -

$$
\xi_1 = \frac{3H_2}{h_2^2} - \frac{\xi_2}{2}, \qquad \xi_N = \frac{3H_{N-1}}{h_{N-1}^2} - \frac{\xi_{N-1}}{2}. \qquad\qquad (11)
$$

В схемах (8) и (9) все сеточные функции определены на сетке $\bar{\Omega}$. Перейдем теперь к построению разностной схемы, которую назовем схемой экспоненциального типа. Будем определять функции I, M и H на сетке $\bar{\Omega}$, а функции ξ и G – на сетке $\bar{\Omega}_1$. Применив метод баланса [3] и аппроксимируя правые части их значениями в средней точке, получим следующую разностную аппроксимацию уравнений (7):

$$I_{\bar{z}} = -2 R_e^{1/2} H_{\bar{z}} G_{i-1/2}, \quad i = 1, \ldots, N$$

$$M_{\bar{z}} = -R_e^{1/2} H_{\bar{z}} \xi_{i-1/2}, \quad i = 1, \ldots, N \tag{12}$$

$$H_{\bar{z}\hat{z}} = \xi_i, \quad i = 1, \ldots, N-1, \quad H_0 = H_N = 0.$$

Потоки I, M и функцию ξ_i, определенные на сетке $\bar{\Omega}$, необходимо выразить через $\xi_{i+1/2}$, $G_{i+1/2}$, H_i. Проиллюстрируем подробно методику аппроксимации потоков на примере потока I_i.

Если считать $I(z)$ известной функцией, то решение первого из уравнений (6) можно формально записать в виде:

$$G(z) \exp\left[-R_e^{1/2} \int_{z_{i-1/2}}^{z} H(t)\,dt\right] - G_{i-1/2} = \tag{13}$$
$$= \int_{z_{i-1/2}}^{z} I(\eta) \exp\left[-\int_{z_{i-1/2}}^{\eta} H(t)\,dt\right] d\eta.$$

Предположим, что на $[z_{i-1/2}, z_{i+1/2}]$ функции $H(z)$ и $I(z)$ мало меняются и равны значению в точке z_i, т.е.

$$H(z) \cong const = H_i, \; I(z) \cong I_i, \; z \in (z_{i-1/2}, z_{i+1/2}). \tag{14}$$

Используя (14), из (13) при $z = z_{i+1/2}$ найдем:

$$I_i = -\frac{P_i (G_{i+1/2} E_i - G_{i-1/2})}{(E_i - 1) h_i}, \tag{15}$$

где $P_i = R_e^{1/2} H_i h_i$, $E_i = \exp(-P_i)$.

Аналогично соотношению (I3) можно записать решение второго уравнения (6):

$$\xi^1(z) = \exp\left[-R_e^{1/2}\int\limits_{z_{i-1/2}}^{z} H(t)\,dt\right] - \xi_{i-1/2} =$$
$$= \int\limits_{z_{i-1/2}}^{z} M(\eta)\exp\left[-R_e^{1/2}\int\limits_{z_{i-1/2}}^{\eta} H(t)\,dt\right]d\eta + \tag{I6}$$
$$+ 2R_e^{3/2}\int\limits_{z_{i-1/2}}^{z} G^2(\eta)\exp\left[-R_e^{1/2}\int\limits_{z_{i-1/2}}^{\eta} H(t)\,dt\right]d\eta.$$

Дополнительно к (I4) полагаем:

$$M(z) \cong const = M_i, \quad z \in (z_{i-1/2}, z_{i+1/2}). \tag{I7}$$

Определив из (I3) с помощью (I4), (I5) вид функции $G(z)$ на $[z_{i-1/2}; z_{i+1/2}]$ и использовав предположения (I4), (I7), из (I6) при $z = z_{i+1/2}$ найдем M_i:

$$M_i = -\frac{P_i(\xi_{i+1/2}E_i - \xi_{i-1/2})}{h_i(E_i-1)} + 2R_e^{3/4}\left(a_i G_{i-1/2}^2 + b_i G_{i+1/2}^2 + \right. \tag{I8}$$
$$\left. + c_i G_{i-1/2} G_{i+1/2}\right);$$
$$a_i = (1 - E_i^2 - 2P_i E_i)/(E_i-1)^3;\ b_i = a_i E_i^3;\ c_i = \frac{2[2E_i(E_i-1) + P_i E_i(E_i+1)]}{(E_i-1)^3},$$
$$i = 1, \cdots, N-1.$$

При $P_i \to 0$ коэффициенты a_i, b_i, c_i стремятся к $\frac{1}{3}$.

Зная M_i и используя предположения (I4), (I7), из соотношения (I6) нетрудно определить ξ_i, которое является правой частью последнего уравнения системы (I2).

Соотношения типа (I3), (I6) нетрудно получить и вблизи границы. При этом вблизи левой границы интегрируем от 0 до $z_{1/2} = h_0$ (вблизи правой - от $z_{N-1/2}$ до

z_N), а значения функций $I(z)$, $M(z)$ полагаем равными I_0, M_0 (соответственно, I_N, M_N - вблизи правой границы). С учетом дифференциальных граничных условий получим:

$$I_0 = \frac{G_{3/2} - 1}{\hbar_0}; \qquad I_N = \frac{S - G_{N-1/2}}{\hbar_N}; \tag{19}$$

$$M_0 = \frac{\xi_{1/2} - \xi_0}{\hbar_0} - 2Re^{3/2}\left(\frac{G_{1/2}^2 + G_{1/2} + 1}{3}\right);$$

$$M_N = \frac{\xi_N - \xi_{N-1/2}}{\hbar_N} - 2Re^{3/2}\left(\frac{G_{N-1/2}^2 + G_{N-1/2}S + S^2}{3}\right). \tag{20}$$

Значения ξ_0, ξ_N выразим, разлагая функцию H в ряд Тейлора вблизи границы:

$$\xi_0 = \frac{2H_1}{h_1^2} - \frac{h_1}{3}\xi'(0) + O(h^2) = \frac{2H_1}{h_1^2} - \frac{h_1}{3}\left(M_0 + 2Re^{3/2}\right) + O(h^2), \tag{21}$$

$$\xi_N = \frac{2H_{N-1}}{h_N^2} - \frac{h_N}{3}\xi'(x_N) + O(h^2) = \frac{2H_{N-1}}{h_N^2} - \frac{h_N}{3}\left(M_N + 2Re^{3/2}S^2\right) + O(h^2). \tag{22}$$

Подставив (21),(22) в (20), найдем окончательные выражения для M_0, M_N:

$$M_0 = \frac{3\xi_{1/2}}{\hbar_0} - \frac{6H_1}{\hbar_0 h_1^2} + 4Re^{3/2} - 2Re^{3/2}\left(G_{1/2}^2 + G_{1/2} + 1\right); \tag{23}$$

$$M_N = \frac{6H_{N-1}}{\hbar_N h_N^2} - \frac{3\xi_{N-1/2}}{\hbar_N} + 4Re^{3/2}S^2 - 2Re^{3/2}\left(G_{N-1/2}^2 + G_{N-1/2}S + S^2\right). \tag{24}$$

Разностные уравнения (12) с потоками (1?), (18), (19),(23), (24) полностью определяют сеточные функции ξ, G на $\overline{\Omega}_1$ и H на Ω.

Системы разностных уравнений для всех разностных схем решались, аналогично [4], следующим образом: нелинейные уравнения линеаризовались методом Ньютона, и на каждой итерации система линейных уравнений, предварительно приведенная к ленточному виду (или почти ленточному, как для схемы (8)), решалась методом исключения Гаусса с учетом структуры матрицы. Итерации прекращались, если максимум невязки разностных уравнений был меньше 10^{-4}.

3. Поскольку в практических расчетах решения ищутся на сравнительно грубых сетках, в настоящей работе проводится численное сравнение результатов расчетов по разным схемам на сетке с $h_i = h = 1/20$. В качестве "точного" решения принимался расчет на сетке с $h = 1/100$, когда результаты, полученные по разным схемам, совпадают между собой с точностью до 2-3 значащих цифр. Сравнивались между собой: центрально-разностная схема (8) (ЦРС); монотонная схема (9) с условиями Тома (10) для ξ (МСТ); монотонная схема (9) с условиями Вудса (11) для ξ (МСВ); экспоненциальная схема (12),(15),(18) с граничными условиями (19),(23),(24) (ЭС). Расчеты проводились для различных чисел Рейнольдса при $S = -1$. Известно (см., напр., [4,5]), что при достаточно больших Re задача о течении жидкости между бесконечными дисками может иметь несколько решений. В данной работе приведены результаты расчетов для антисимметричного решения, когда $H(z) = H(1-z)$ (решение А), и одного из несимметричных решений (решение Б). Результаты расчетов на сетке $h = \frac{1}{20}$ в сравнении с точным решением представлены в таблицах 1 и 2 и на рис.1,2. В таблицах приведено также относительное отклонение δ максимального значения H^* на грубой сетке от точного значения H_{max}:

$$\delta = (|H_{max} - H^*|)/H_{max}.$$

На основе анализа результатов расчетов, представленных в таблицах и на графиках, можно сделать следующие выводы:

а) наиболее точные результаты получены по экспоненциальной схеме, причем различие между результатами по ЭС и

Таблица I

Значения H в точке максимума для решения А.

R_e	Точное значение H_{max}	Значения на грубой сетке					
		ЦРС		МСТ		ЭС	
		H^*	δ,%	H^*	δ,%	H^*	δ,%
I00	0,509	0,486	4,6	0,539	5,8	0,506	0,7
625	0,782	0,675	I3,7	0,890	I4,9	0,740	5,5
I000	0,796	0,672	I5,6	0,935	I7,5	0,736	7,5
2000	0,805	0,585	27,3	I,027	27,4	0,656	I8,5

Таблица 2

Значения H в точке максимума для решения Б

R_e	Точное значение H_{max}	Значения на грубой сетке			
		ЦРС		ЭС	
		H	δ,%	H	δ,%
625	I,25I3	0,895	29,I	I,06I	I5,9
I000	I,8547	I,I39	38,6	I,597	I4,0

другим схемам возрастает при увеличении R_e ;

б) схемы ЦРС и МСТ дают близкие по абсолютной величине ошибки, отклоняясь от точного решения в разные стороны;

в) различие между результатами по МСТ и МСБ уменьшается при увеличении R_e , поэтому повышение порядка аппроксимации краевого условия при больших R_e на грубых сетках представляется нецелесообразным.

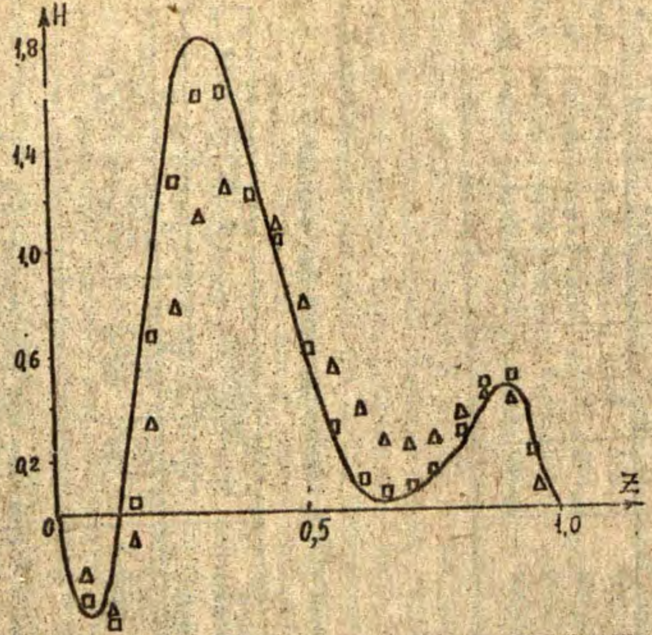

Рис.2. Зависимость $H(z)$ для решения Б при Re =1000.
Сплошная линия - точное решение, □ - ЭС, △ - ЦРС.

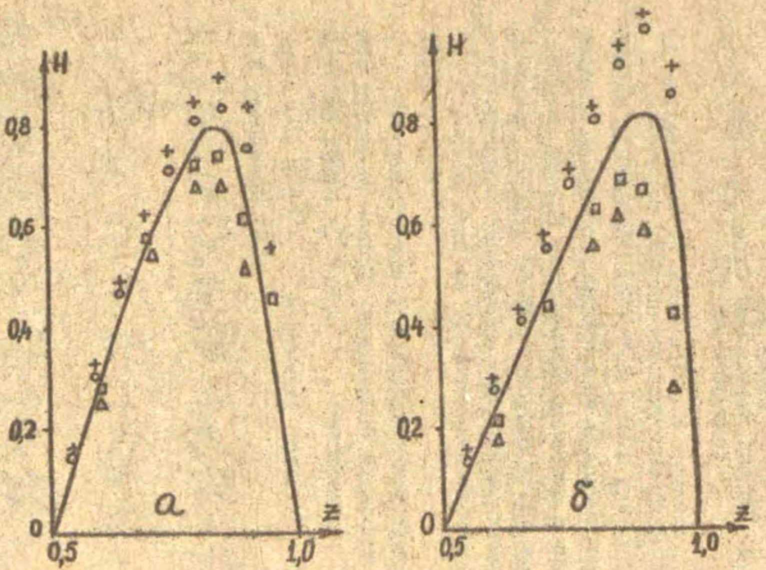

Рис.1. Зависимость $H(z)$ для решения А при Re =625 (а) и Re = 2000 (б). Сплошная линия - точное решение, + - МСТ, ○ - МСВ, □ - ЭС, △ - ЦРС.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

I. Karman T. Laminar und turbulente Reilung.- Z.angew. Math.Mech.,1921, v. 1, p.233.
2. Роуч П. Вычислительная гидродинамика. М., 1980,- 616 с.
3. Самарский А.А. Теория разностных схем. М.,1983.- 616 с.
4. Holodniak M., Kubucek M., Hlavacek V. Computation of the flow between two rotating coaxial disks. - J.Fluid Mech., 1977, v.81, p.689-699.
5. Козельская Н.В., Люмкис Е.Д. К расчету стационарной и нестационарной задач о движении жидкости между бесконечными вращающимися дисками. - В кн.: Прикладные задачи теоретической и математической физики. Рига, 1980,с.II-I9.

УДК 518.61

ПОСТРОЕНИЕ МОНОТОННОЙ РАЗНОСТНОЙ СХЕМЫ ДЛЯ РЕШЕНИЯ ЗАДАЧИ ОБ ОСЕСИММЕТРИЧНО-ВРАЩАТЕЛЬНЫХ КОНВЕКТИВНЫХ ТЕЧЕНИЯХ ВЯЗКОЙ НЕСЖИМАЕМОЙ ЖИДКОСТИ

Х.Э.Калис

(ЛГУ им.П.Стучки)

Построены монотонные векторно-разностная и соответствующая скалярная разностные схемы для решения начально-краевой задачи о конвективном осесимметрично-вращательном движении вязкой несжимаемой жидкости в замкнутом цилиндрическом сосуде, стенки которого могут вращаться с постоянной угловой скоростью. Разностная схема обобщает схему /1/ с учетом наличия вращательной составляющей вектора скорости.

Осесимметрично-вращательное нестационарное конвективное движение вязкой несжимаемой жидкости в переменных функции вихря $\zeta = \omega r^{-1}$, температуры T, момента вращения $W = V_\varphi r$ и функции тока Ψ описывается системой уравнений /2/:

$$Re\frac{\partial W}{\partial t} = -(r^{-1}+ReV_r)\frac{\partial W}{\partial r} - ReV_z\frac{\partial W}{\partial z} + \frac{\partial^2 W}{\partial r^2} + \frac{\partial^2 W}{\partial z^2}, \qquad (1)$$

$$ReP\frac{\partial T}{\partial t} = (r^{-1} - PReV_r)\frac{\partial T}{\partial r} - PReV_z\frac{\partial T}{\partial z} + \frac{\partial^2 T}{\partial r^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial z^2}, \qquad (2)$$

$$Re\frac{\partial \zeta}{\partial t} = (3r^{-1} - ReV_r)\frac{\partial \zeta}{\partial r} - ReV_z\frac{\partial \zeta}{\partial z} +$$

$$+\frac{\partial^2 \zeta}{\partial r^2} + \frac{\partial^2 \zeta}{\partial z^2} + \frac{2Re\Gamma^{-2}}{r^4} W\frac{\partial W}{\partial z} - \frac{G}{Re} r^{-1}\frac{\partial T}{\partial r}, \qquad (3)$$

$$0 = r\frac{\partial}{\partial r}\left(\frac{1}{r}\frac{\partial \psi}{\partial r}\right) + \frac{\partial^2 \psi}{\partial z^2} + r^2 \zeta, \tag{4}$$

где $V_r = -\frac{1}{r}\frac{\partial \psi}{\partial z}$, $V_z = \frac{1}{r}\frac{\partial \psi}{\partial r}$,

Re - число Рейнольдса, G - число Грасгофа,
P - число Прандтля, Γ - параметр закрутки,
(r, z, φ) - цилиндрические координаты точки,
t - время,
V_r, V_z, V_φ - радиальная, осевая и азимутальная составляющие вектора скорости,

$\omega = \frac{\partial V_r}{\partial z} - \frac{\partial V_z}{\partial r}$ - функция завихренности жидкости.

Для построения векторно-разностной схемы первые три уравнения (I-3) перепишем в матрично-векторном виде

$$R_e B \frac{\partial u}{\partial t} = \frac{\partial^2 u}{\partial r^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial z^2} + a^{(1)}\frac{\partial u}{\partial r} + a^{(2)}\frac{\partial u}{\partial z}, \tag{5}$$

где

$$u = \begin{pmatrix} W \\ T \\ \varphi \end{pmatrix}, \quad a^{(1)} = \begin{pmatrix} -r^{-1} - R_e V_r & 0 & 0 \\ 0 & r^{-1} - PR_e V_r & 0 \\ 0 & -G\,(R_e r)^{-1} & 3r^{-1} - R_e V_r \end{pmatrix},$$

$$a^{(2)} = \begin{pmatrix} -R_e V_z & 0 & 0 \\ 0 & -PR_e V_z & 0 \\ 2R_e \Gamma^2 W r^{-4} & 0 & -R_e V_z \end{pmatrix}, \quad B = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & P & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}.$$

Аналогично /I/, применяя интегро-интерполяционный метод Г.И.Марчука на неравномерной сетке:

$$W_h=\{(r_i,z_j),\ r_{i+1}-r_i=h_i^+,\ r_i-r_{i-1}=h_i^-,\ z_{j+1}-z_j=g_j^+,\ z_j-z_{j-1}=g_j^-\},$$

и проведя дискретизацию по времени с шагом τ, получим неявную монотонную векторно-разностную схему

$$(\Lambda_r+\Lambda_z)u_{ij}^{n+1}=R_eB\,\frac{u_{ij}^{n+1}-u_{ij}^{n}}{\tau},\quad n=0,1,\dots, \qquad (6)$$

где

$$\Lambda_r u_{ij}=B_{ij}^{(1)}(u_{i+1j}-u_{ij})-A_{ij}^{(1)}(u_{ij}-u_{i-1j}),$$

$$\Lambda_z u_{ij}=B_{ij}^{(2)}(u_{ij+1}-u_{ij})-A_{ij}^{(2)}(u_{ij}-u_{ij-1}),$$

$$B_{ij}^{(1)}=\hbar_i^{-1}\left(E-\exp(-a_{ij}^{(1)+}h_i^+)\right)^{-1}a_{ij}^{(1)+};$$

$$A_{ij}^{(1)}=\hbar_i^{-1}\left(\exp(a_{ij}^{(1)-}h_i^-)-E\right)^{-1}a_{ij}^{(1)-},$$

$$B_{ij}^{(2)}=\bar{g}_j^{-1}\left(E-\exp(-a_{ij}^{(2)+}g_j^+)\right)^{-1}a_{ij}^{(2)+},$$

$$A_{ij}^{(2)}=\bar{g}_j^{-1}\left(\exp(a_{ij}^{(2)-}g_j^-)-E\right)^{-1}a_{ij}^{(2)-},$$

$$a_{ij}^{(1)\pm}=a^{(1)}\Big|_{\substack{r=r_{i\pm}\\ z=z_j}},\qquad a_{ij}^{(2)\pm}=a^{(2)}\Big|_{\substack{r=r_i\\ z=z_{j\pm}}},$$

$$\hbar_i=0{,}5(h_i^++h_i^-),\qquad \bar{g}_j=0{,}5(g_j^++g_j^-),$$

$$r_{i\pm}=r_i\pm h_i^\pm/2,\qquad z_{j\pm}=z_j\pm g_j^\pm/2,$$

E - единичная матрица 3-го порядка.

При построении разностной схемы (6) надо вычислять стандартную функцию-матрицу

$$\delta(ha) = ha\,(\exp(ha) - E)^{-1} \tag{7}$$

на спектре матрицы $a(a^{(1)}, a^{(2)})$, используя интерполяционный многочлен Лагранжа-Сильвестра /3/.

Тогда

$$A_{ij}^{(1)} = (\hbar_i h_i^-)^{-1}\delta(h_i^- a_{ij}^{(1)-}),\quad A_{ij}^{(2)} = (\bar{g}_j g_j^-)^{-1}\delta(g_j^- a_{ij}^{(2)-}),$$

$$B_{ij}^{(1)} = (\hbar_i h_i^+)^{-1}\delta(-h_i^+ a_{ij}^{(1)+}),\quad B_{ij}^{(2)} = (\bar{g}_j g_j^+)^{-1}\delta(-g_j^+ a_{ij}^{(2)+}). \tag{8}$$

Так как собственные значения матрицы $a^{(1)}$ являются

$$\lambda_1^{(1)} = -r^{-1} - Re V_r,\quad \lambda_2^{(1)} = r^{-1} - PRe V_r,\quad \lambda_3^{(1)} = 3r^{-1} - Re V_r,$$

а матрицы $a^{(2)}$: $\lambda_1^{(2)} = \lambda_3^{(2)} = -Re V_z$, $\lambda_2^{(2)} = -Re P V_z$, то

$$\delta(ha^{(1)}) = \frac{(a^{(1)} - \lambda_1^{(1)}E)(a^{(1)} - \lambda_2^{(1)}E)}{(\lambda_3^{(1)} - \lambda_1^{(1)})(\lambda_3^{(1)} - \lambda_2^{(1)})}\,\delta(h\lambda_3^{(1)}) +$$

$$+ \frac{(a^{(1)} - \lambda_3^{(1)}E)(a^{(1)} - \lambda_1^{(1)}E)}{(\lambda_2^{(1)} - \lambda_3^{(1)})(\lambda_2^{(1)} - \lambda_1^{(1)})}\,\delta(h\lambda_2^{(1)}) + \frac{(a^{(1)} - \lambda_3^{(1)}E)(a^{(1)} - \lambda_2^{(1)}E)}{(\lambda_1^{(1)} - \lambda_3^{(1)})(\lambda_4^{(1)} - \lambda_2^{(1)})}\,\delta(h\lambda_1^{(1)}) =$$

$$= \begin{pmatrix} \delta(h\lambda_1^{(1)}) & 0 & 0 \\ 0 & \delta(h\lambda_2^{(1)}) & 0 \\ 0 & \tilde{G}\,\delta_{2,3} & \delta(h\lambda_3^{(1)}) \end{pmatrix},$$

$$\delta(ga^{(2)}) = \left[\frac{\delta(g\lambda_1^{(2)})}{\lambda_1^{(2)} - \lambda_2^{(2)}}E + \left(\frac{\delta'_\lambda(g\lambda_1^{(2)})}{\lambda_1^{(2)} - \lambda_2^{(2)}} - \frac{\delta(g\lambda_1^{(2)})}{(\lambda_1^{(2)} - \lambda_2^{(2)})^2}\right)(a^{(2)} -$$

$$- \lambda_1^{(2)}E)\right](a^{(2)} - \lambda_2^{(2)}E) + \frac{\delta(g\lambda_2^{(2)})}{(\lambda_2^{(2)} - \lambda_1^{(2)})^2}(a^{(2)} - \lambda_1^{(2)}E)^2 =$$

$$=\begin{pmatrix} \delta(g\lambda_1^{(2)}) & 0 & 0 \\ 0 & \delta(g\lambda_2^{(2)}) & 0 \\ \tilde{\Gamma}\delta'_\lambda(g\lambda_1^{(2)}) & 0 & \delta(g\lambda_1^{(2)}) \end{pmatrix};$$

$$\delta_{2,3}=\frac{\delta(h\lambda_2^{(1)})-\delta(h\lambda_3^{(1)})}{\lambda_2^{(1)}-\lambda_3^{(1)}}\to\delta'_\lambda(h\lambda_3^{(1)}),\ (\lambda_2^{(1)}\to\lambda_3^{(1)}),$$

$$\tilde{\Gamma}=2Re\,\Gamma^2 W r^{-4}, \qquad \tilde{G}=-G(Re\,r)^{-1},$$

$$\delta'_\lambda(g\lambda_1^{(2)})=\left.\frac{d\delta(g\lambda)}{d\lambda}\right|_{\lambda=\lambda_1^{(2)}}, \quad \delta'_\lambda(h\lambda_3^{(1)})=\left.\frac{d\delta(h\lambda)}{d\lambda}\right|_{\lambda=\lambda_3^{(1)}}.$$

Следовательно, векторно-разностная схема (6) расщепляется по отдельным уравнениям и принимает следующий вид:

$$b_{ij}^{W} W_{i+1j}^{n+1}+s_{ij}^{W} W_{i-1j}^{n+1}+c_{ij}^{W} W_{ij+1}^{n+1}+d_{ij}^{W} W_{ij-1}^{n+1}+W_{ij}^{n}=$$
$$=(1+b_{ij}^{W}+s_{ij}^{W}+c_{ij}^{W}+d_{ij}^{W})W_{ij}^{n+1}, \tag{9}$$

$$b_{ij}^{T} T_{i+1j}^{n+1}+s_{ij}^{T} T_{i-1j}^{n+1}+c_{ij}^{T} T_{ij+1}^{n+1}+d_{ij}^{T} T_{ij-1}^{n+1}+PT_{ij}^{n}=$$
$$=(P+b_{ij}^{T}+s_{ij}^{T}+c_{ij}^{T}+d_{ij}^{T})T_{ij}^{n+1}, \tag{I0}$$

$$b_{ij}^{\varphi}\varphi_{i+1j}^{n+1}+s_{ij}^{\varphi}\varphi_{i-1j}^{n+1}+c_{ij}^{\varphi}\varphi_{ij+1}^{n+1}+d_{ij}^{\varphi}\varphi_{ij-1}^{n+1}+\varphi_{ij}^{n}+$$
$$+l_{ij}^{W} W_{ij+1}^{n+1}+f_{ij}^{W} W_{ij-1}^{n+1}-(l_{ij}^{W}+f_{ij}^{W})W_{ij}^{n+1}+$$
$$+l_{ij}^{T} T_{i+1j}^{n+1}+f_{ij}^{T} T_{i-1j}^{n+1}-(l_{ij}^{T}+f_{ij}^{T})T_{ij}^{n+1}=$$
$$=(1+b_{ij}^{\varphi}+s_{ij}^{\varphi}+c_{ij}^{\varphi}+d_{ij}^{\varphi})\varphi_{ij}^{n+1}, \tag{II}$$

где $b_{ij}^{W}=\tau_1\delta(-h_i^{+}\lambda_{1+}^{(1)})$, $s_{ij}^{W}=\tau_2\delta(h_i^{-}\lambda_{1-}^{(1)})$,

$$c_{ij}^{W}=c_{ij}^{\xi}=\tau_3\delta(-g_j^{+}\lambda_{1+}^{(2)}),\quad d_{ij}^{W}=d_{ij}^{\xi}=\tau_4\delta(g_j^{-}\lambda_{1-}^{(2)}),$$

$$b_{ij}^{T}=\tau_1\delta(-h_i^{+}\lambda_{2+}^{(1)}),\quad s_{ij}^{T}=\tau_2\delta(h_i^{-}\lambda_{2-}^{(1)}),$$

$$c_{ij}^{T}=\tau_3\delta(-g_j^{+}\lambda_{2+}^{(2)}),\quad d_{ij}^{T}=\tau_4\delta(g_j^{-}\lambda_{2-}^{(2)}),$$

$$b_{ij}^{\xi}=\tau_1\delta(-h_i^{+}\lambda_{3+}^{(1)}),\quad s_{ij}^{\xi}=\tau_2\delta(h_i^{-}\lambda_{3-}^{(1)}),$$

$$l_{ij}^{W}=\tau_3\tilde{\Gamma}\delta_\lambda'(-g_j^{+}\lambda_{1+}^{(2)}),\quad f_{ij}^{W}=\tau_4\tilde{\Gamma}\delta_\lambda'(g_j^{-}\lambda_{1-}^{(2)}),$$

$$l_{ij}^{T}=\tau_1\tilde{G}\delta_{2,3}^{+},\quad f_{ij}^{T}=\tau_2\tilde{G}\delta_{2,3}^{-},$$

$$\tau_1=\tau/(Re\,\hbar_i h_i^{+}),\quad \tau_2=\tau/(Re\,\hbar_i h_i^{-}),$$

$$\tau_3=\tau/(Re\,\bar{g}_j g_j^{+}),\quad \tau_4=\tau/(Re\,\bar{g}_j g_j^{-}),$$

$$\lambda_{1\pm}=\lambda_1\Big|_{\substack{r=r_{i\pm}\\ z=z_j}},\quad \lambda_{2\pm}=\lambda_2\Big|_{\substack{r=r_i\\ z=z_{j\pm}}},$$

$$\delta_{2,3}^{\pm}=\delta_{2,3}\Big|_{\substack{r=r_{i\pm}\\ z=z_j}}$$

Для (4) разностные уравнения следующие:

$$b_{ij}^{\psi}\psi_{i+1j}^{n+1}+s_{ij}^{\psi}\psi_{i-1j}^{n+1}+c_{ij}^{\psi}\psi_{ij+1}^{n+1}+d_{ij}^{\psi}\psi_{ij-1}^{n+1}+$$

$$+r_i^2\varphi_{ij}^{n+1}=(b_{ij}^{\psi}+s_{ij}^{\psi}+c_{ij}^{\psi}+d_{ij}^{\psi})\psi_{ij}^{n+1},\tag{12}$$

где $b_{ij}^{\psi}=r_i/(r_{i+}h_i^{+}\hbar_i)$, $s_{ij}^{\psi}=r_i/(r_{i-}h_i^{-}\hbar_i)$,

$$c_{ij}^{\psi}=1/(g_j^{+}\bar{g}_j),\quad d_{ij}^{\psi}=1/(g_j^{-}\bar{g}_j).$$

Каждое из разностных уравнений (9-12) на $(n+1)$-ом временном слое можно представить в виде

$$b_{ij} P_{i+1j}^{n+1} + S_{ij} P_{i-1j}^{n+1} + C_{ij} P_{ij+1}^{n+1} + d_{ij} P_{ij-1}^{n+1} + F_{ij} = O_{ij} P_{ij}^{n+1}, \tag{13}$$

где O_{ij} - коэффициент в 5-и точечном шаблоне разностной схемы при центральном узле сетки,

F_{ij} - правая часть разностного уравнения (13), зависящая от других функций на n-ом и $(n+1)$-ом слоях времени, но не зависящая от P^{n+1}

P_{ij} - одна из неизвестных функций (Ψ, W, T или ξ).
Разностные уравнения (13) решаются итеративно, методом локальной релаксации /4,5/, т.е.

$$P_{ij}^{n+1,k+1} = (1-\omega_{ij}) P_{ij}^{n,k} + \omega_{ij} P_{ij}^{\neq}, \tag{14}$$

где

$$P_{ij}^{\neq} = \left(b_{ij} P_{i+1j}^{n+1,k} + S_{ij} P_{i-1j}^{n+1,k+1} + C_{ij} P_{ij+1}^{n+1,k} + d_{ij} P_{ij-1}^{n+1,k+1} + \right.$$

$$\left. + F_{ij} \right) / O_{ij}, \quad k = 0,1,2,\ldots,\mathcal{K},$$

$$P_{ij}^{n+1,0} = P_{ij}^{n}, \qquad P_{ij}^{n+1,\mathcal{K}+1} = P_{ij}^{n+1},$$

ω_{ij} - коэффициенты локальной релаксации $(0<\omega_{ij}<2)$, которые, например, можно определить по следующим формулам /4/:

$$\omega_{ij} = \min \left\{ \omega_{opt}, \frac{2}{1+\left[\frac{1}{O_{ij}}\left(\frac{(b_{ij}-S_{ij})^2}{|b_{ij}+S_{ij}|} + \frac{(C_{ij}-d_{ij})^2}{|C_{ij}+d_{ij}|}\right)\right]^{1/2}} \right\}, \tag{15}$$

ω_{opt} - оптимальный коэффициент релаксации для решения уравнения Лапласа.

Число итерации k определяется из условия сходимости итерации
$$\frac{\max\limits_{ij} |P_{ij}^{n+1,k+1} - P_{ij}^{n+1,k}|}{\max\limits_{ij} |P_{ij}^{n+1,k}|} < 10^{-4}.$$

Функции δ, δ' с учетом асимптотических формул для малых значений аргументов вычислены следующим образом:
$$\delta(h\lambda) = \begin{cases} \dfrac{h\lambda}{\exp(h\lambda)-1}, & |h\lambda| \geq 10^{-4} \\ \left(1+\dfrac{h\lambda}{2}+\dfrac{(h\lambda)^2}{6}\right)^{-1}, & |h\lambda| < 10^{-4}, \end{cases}$$

$$\delta'(h\lambda) = -h \cdot \begin{cases} \dfrac{\exp(h\lambda)-1-h\lambda\exp(h\lambda)}{(\exp(h\lambda)-1)^2}, & |h\lambda| \geq 10^{-3} \\ \dfrac{0{,}5+h\lambda/3}{1+h\lambda}, & |h\lambda| < 10^{-3}. \end{cases}$$

Построенная разностная схема является монотонной ($b_{ij}>0$, $s_{ij}>0$, $c_{ij}>0$, $d_{ij}>0$, $a_{ij} \geq b_{ij}+s_{ij}+d_{ij}+c_{ij}$) и эффективной для решения задач гидродинамики при больших параметрах Re, Gr, Γ.

В случае равномерной сетки разностная схема имеет второй порядок аппроксимации. В одномерном случае схема является точной, если матрицы коэффициентов $\lambda^{(1)}$, $a^{(2)}$ кусочно-постоянны. Она равномерно сходится при стремлении коэффициента у младшей производной к нулю /6/.

По данному алгоритму решена модельная задача кристаллизации для системы расплав-флюс в широком диапазоне параметров.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

I. Калис Х.Э., Пагодкина И.Э. Некоторые разностные схемы для решения задач конвекции вязкой несжимаемой жидкости. - В кн.: Прикладные задачи математической физики,

Рига, 1983,с.134-141.
2. Ватажин А.Б., Любимов Г.А., Регирер С.А. Магнитогидродинамические течения в каналах.- М., 1970. - 672 с.
3. Ланкастер П. Теория матриц. М., 1978. - 280 с..
4. Strikwerda J. Iterative methods for the numerical solution of second order elliptic equations with large first order terms. - SIAM, J,Sci.Stat.Comp, 1980, v.1, p.119-130
5. Botta E., Veldman A. On local relaxation methods and their application to convection-diffusion equations. - J.of Comp.Ph., 1982, v.48, p.127-149
6. Дулан Э., Миллер Дж., Шилдерс У. Равномерные численные методы решения задач с пограничным слоем. - М., 1983.-199 с.

УДК 517.947.43

ОПТИМИЗАЦИЯ ОДНОГО КЛАССА АСИМПТОТИЧЕСКИХ МЕТОДОВ ИНТЕГРИРОВАНИЯ ОДНОМЕРНОГО УРАВНЕНИЯ ТЕПЛОПРОВОДНОСТИ

С.З.Шихалиев
(УкрНИИ Госкомгидромета, г.Киев)

Рассматривая асимптотические (с порядком аппроксимации) методы, в которых минимизируется чебышевская норма погрешности решения задачи

$$u_t = u_{xx}, \quad t \geq 0, \quad x \in [0,1], \tag{1}$$

$$u(0,x) = u^0(x), \quad u(t,0) = u(t,1) = 0. \tag{2}$$

Функцию устойчивости $r_m(\eta)$ этих методов имеет вид*

$$r_m(\eta) = \sum_{s=1}^{m} a_s/(1+d\eta)^s, \quad \eta \geq 0, \tag{3}$$

где $\eta = \tau\lambda(A_h)$, τ - шаг временной сетки ω_τ, $\lambda(A_h)$ - произвольная точка спектра простейшего трехточечного разностного оператора второго порядка аппроксимации - A_h - разностного аналога оператора $-\partial^2/\partial x^2$, h - шаг пространственной сетки ω_h, $a_s(s=\overline{1,m})$ и $d>0$ - параметры метода (свои для каждого $m = 1,2,\ldots$).

Рассматриваемые методы можно интерпретировать как оптимальные в смысле [4] методы [3] (точнее их модификацию (3)).

Цель оптимизации состоит в повышении эффективности методов [2] и модифицированных методов [3] на всем диапазоне изменения $\eta \sim \tau/h^2$.

Идея оптимизации методов [3] в смысле минимизации

* Иногда, для удобства изложения, мы отождествляем метод и соответствующую ему функцию устойчивости.

какой-либо нормы погрешности впервые была высказана, по-видимому, в работе [3], где для этой цели предлагается использовать один только параметр α .

Ниже рассматривается многопараметрическая оптимизация в смысле [4] асимптотических методов (3).

Теоретический результат представлен следующей теоремой.

Теорема I. Существует последовательность $\{r_m(z)\}_{m=1}^{\infty}$ функций (3), удовлетворяющих следующим асимптотическим соотношениям:

$$e^{-z} - r_m(z) = O(z^{\nu}) \qquad \text{при } z \to 0 \tag{4}$$

и

$$\mu_\ell = O\left(\ell/2^\ell\right) \qquad \text{при } \ell \to \infty, \tag{5}$$

где $\ell = m - \nu$, $\nu \geq 2$

$$\mu_\ell = \inf_{r_m \in \mathcal{P}_m} \| e^{-z} - r_m(z) \|_{L_\infty[0,\infty]}, \tag{6}$$

$\mathcal{P}_m$ - множество всех функций вида (3), для которых справедлива оценка (4).

Доказательство этой теоремы существенно опирается на теорему 2.I работы [4].

Практический результат представлен параметрами методов (3) m -I и m -2-го порядка аппроксимации для $m \leq 10$.

I. Доказательство теоремы I. Доказательство теоремы проводится в два этапа: сначала доказывается, что существует последовательность функций (3), удовлетворяющих оценке (4), таких, что $\mu_\ell < \infty$ при любом $\ell > 0$, а затем доказывается, что последовательность таких функций, для которых справедлива оценка (5), может быть построена.

Доказательству теоремы предпошлем несколько вспомогательных утверждений, первые два из которых (теорема 2 и лемма I) заимствованы нами из работы [4].

Теорема 2. Существует последовательность $\{\bar{r}_n(z)\}_{n=1}^{\infty}$ функций

$$\bar{r}_n(z)=\sum_{s=0}^{n-1}\bar{P}_s z^s/(1+z/\beta)^n, \tag{7}$$

для которых справедлива оценка

$$\bar{\mu}_n=\inf_{r'\in\bar{\mathcal{P}}_n}\|e^{-z}-r_n'(z)\|_{L_\infty[0,\infty)}=O(n/2^n) \tag{8}$$

при $n\to\infty$, где $\bar{\mathcal{P}}_n$ - множество всех функций вида (7).

Лемма I. Для $\bar{\mu}_n$ при достаточно большом n справедливо неравенство

$$\bar{\mu}_n^2\leq\int_0^\infty e^{\varphi_n(z,\beta)}dz\int_0^\infty e^{-z}\omega_n(z)dz, \tag{9}$$

где второй интеграл при $n\to\infty$ оценивается величиной $O(n^4)$.

$$\varphi_n(z,\beta)=\beta+(1-\beta)z-(2n-2)\ln(1+z^{-1}). \tag{10}$$

Лемма 2. Оптимальное значение параметра β методов (7) не меньше единицы.

Доказательство. Из (10) видно, что условие $\beta\geq 1$ необходимо для ограниченности первого интеграла из (9) при любом n.

Замечание I. В работе [4] доказано, что оптимальное значение β равно n.

Замечание 2. Порядок скорости сходимости методов (7) не зависит от β, а это значит, что при обсуждении вопросов, связанных со скоростью сходимости рассматриваемых методов в смысле [4], значение β можно положить равным, например, единице.

Лемма 3. Существует последовательность $\{r_m(z)\}_{m=1}^{\infty}$ функций (3), удовлетворяющих условию (4), таких, что при любом $l=m-\nu\geq 0$, $\mu_l<\infty$.

Доказательство. Разложим функцию (3) в ряд Маклорена:

$$r_m(z)=\sum_{s=1}^{m} a_s \sum_{k=0}^{\infty} G_k^{(s)}\,\bar z^k, \tag{II}$$

где $\bar z=\alpha z$, $G_k^{(s)}=(-1)^k\binom{s+k-1}{k}$, $k=0,1,2,\ldots;\ s=\overline{1,m}$.

Меняя порядок суммирования и собирая члены при одинаковых степенях $\bar z$, из (II) будем иметь

$$r_m(z)=\sum_{k=0}^{\infty}\Big(\sum_{s=1}^{m} G_k^{(s)} a_s\Big)\bar z^k. \tag{I2}$$

Приравнивая, далее, коэффициенты при одинаковых степенях z ряда (I2) и ряда Маклорена функции e^{-z}, ограничившись первыми ν слагаемыми, получим систему нелинейных алгебраических уравнений относительно коэффициентов $a_s\ (s=\overline{1,m})$ и α:

$$B\tilde a=f(\beta), \tag{I3}$$

где $\beta=\alpha^{-1}$, B - $\nu\times m$ - матрица с элементами
$b_{ij}=\binom{i+j}{i}=\frac{(i+j)!}{i!\,j!}=C_{i+j}^{i}$
$i=\overline{0,\nu-1}$; $j=\overline{0,m-1}$,
$f(\beta)$ -вектор с координатами

$$f_i(\beta)=\beta^i/i!\ (i=\overline{0,\nu-1}),\ \tilde{a}_s=a_{s+1}\ (s=\overline{0,m-1}).$$

Замечание 3. Положив $\nu=m+1$ и решив систему (I3), можно получить для каждого m ровно m функций вида (3), удовлетворяющих условию (4) с $\nu=m+1$, приводящим к методам интегрирования уравнения теплопроводности m-го (в глобальном смысле) порядка аппроксимации - модифицированным методам [3].

Докажем, что система (I3) при любом $\nu\le m$ имеет бесконечно много решений. Для этого, очевидно, достаточно показать, что определитель матрицы $\overline{B}$ в элементами $b_{ij}\ (i,j=\overline{0,\nu-1})$ отличен от нуля.

Докажем, что при любом $\nu\le m$ $\det\overline{B}\ne 0$.

Учитывая симметричность матрицы $\overline{B}$ $(C^i_{i+j}=C^j_{i+j},\ i,j=\overline{0,\nu-1})$, рассмотрим ее LL^T разложение, где L - нижняя треугольная матрица, а L^T - транспонированная матрица L.

Обозначим элементы матриц L и L^T через l_{ij} и l^T_{ij} соответственно и рассмотрим матрицу $\mathcal{D}=LL^T$ с элементами

$$d_{ij}=\sum_{s=0}^{\nu-1} l_{is}l^T_{sj}=\sum_{s=0}^{\nu-1} l_{is}l_{js},\quad i,j=\overline{0,\nu-1}. \qquad (I4)$$

Так как L-треугольная матрица, то суммы (I4) можно считать до i (если $i\le j$) и до j - в противном случае.

Положим для определенности $i\le j$ и предположим, что $l_{ij}=C^j_i$. Тогда для элементов матрицы $\mathcal{D}$ будем иметь

$$d_{ij}=\sum_{s=0}^{i} l_{is}l_{js}=\sum_{s=0}^{i} C^s_i C^s_j=C^i_{i+j},$$

$i=\overline{0,\nu-1}$; $j\ge i$.

Аналогично, при $j \le i$,

$$d_{ij} = \sum_{s=0}^{j} l_{is} l_{js} = \sum_{s=0}^{j} C_i^s C_j^s = C_{i+j}^j = C_{i+j}^i,$$

$i = \overline{0, \nu-1}$, $j \le i$.

Таким образом, установлено, что $d_{ij} = b_{ij}$ $(i,j = \overline{0,\nu-1})$ и, следовательно, для элементов матрицы L LL^T разложения матрицы $\overline{B}$ справедлива формула $l_{ij} = C_i^j$.

Так как матрица L треугольная и $l_{ii} = C_i^i = 1$ $(i = \overline{0,\nu-1})$, для определителя матрицы $\overline{B}$ будем иметь

$$|\overline{B}| = |LL^T| = |L|^2 = \prod_{i=0}^{\nu-1} l_{ii}^2 = 1 \ne 0.$$

Замечание 4. Можно показать, что отличным от нуля является определитель любой квадратной подматрицы $\overline{B}_\nu$ ($\nu \le m$), составленной из первых ν строк матрицы B.

Действительно, элементы матрицы $\overline{B}_\nu$ могут быть вычислены как произведение первых ν строк матрицы L и соответствующих ν столбцов матрицы L^T, а так как среди строк и столбцов этой матрицы нет линейно-зависимых, ее определитель отличен от нуля и, следовательно, $|\overline{B}_\nu| = |L_\nu||L_\nu^T| = |L^T_\nu| \ne 0$, где L_ν^T – квадратная матрица ν-го порядка, составленная из элементов первых ν строк матрицы L^T.

Из доказанного утверждения и ограниченности снизу функционала

$$c_m(a,\alpha) = \| e^{-\tau} - r_m(a,\alpha,\tau) \|_{L_\infty[0,\infty)}, \qquad (15)$$

где $a \in R^m$, следует справедливость леммы 3.

Лемма 4. Существует последовательность $\{r_m(\tau)\}_{m=1}^{\infty}$ функций (3), удовлетворяющих оценке (4), таких, что для постоянных M_l ($l \to \infty$) этих функций справедлива оценка (5).

Доказательство. Представим функцию (3) в эквивалентном виде

$$r_m(\tau)=\frac{\lambda^{(\ell-1)}(\bar{\tau})}{q^{(\ell)}(\bar{\tau})}+r_\nu(\bar{\tau})\cdot\frac{1}{q^{(\ell)}(\bar{\tau})}, \tag{16}$$

где $\ell=m, \quad q^{(\ell)}(\bar{\tau})=(1+\bar{\tau})^{\ell}$,

$r_\nu(\bar{\tau})=\sigma^{(\nu-1)}(\bar{\tau})/q^{(\nu)}(\bar{\tau})$,

$\lambda^{(\ell-1)}(\bar{\tau})$ и $\sigma^{(\nu-1)}(\bar{\tau})$ - полиномы степеней $\ell-1$ и $\nu-1$ соответственно.

Обозначим через λ вектор коэффициентов полинома $\lambda^{(\ell-1)}(\bar{\tau}):\lambda=(\lambda_0,\lambda_1,\dots,\lambda_{\ell-1})$. Тогда для вектора λ справедливо представление

$$Q\lambda=C\tilde{a}, \tag{17}$$

где Q - квадратная верхняя треугольная ленточная матрица ℓ-го порядка с шириной ленты, равной $\nu+1$ (числу коэффициентов полинома $q^{(\nu)}(\bar{\tau})$) с диагональными элементами $q_{ii}=C_i^i=1$, C - квадратная нижняя треугольная матрица ℓ-го порядка с ненулевыми элементами

$$c_{ij}=C_{m-1-j}^{i+\nu}, \quad i=\overline{0,\ell-1}; \; j\leq i.$$

Покажем, что для функции $r_m(\tau)$ при $\ell\to\infty$ и фиксированных ν справедливо представление

$$r_m(\tau)=\tilde{r}_0(\tau)=\lambda^{(\ell-1)}(\bar{\tau})/q^{(\ell)}(\bar{\tau}). \tag{18}$$

Действительно, из условий аппроксимации (13) следует, что функция $\psi(\tau)=e^{-\tau}-r_m(\tau)$ не может достигать своего наибольшего значения в точке $\tau=0$. Из этого свойства функции $\psi(\tau)$, неотрицательности коэффициентов полинома $q^{(e)}(\tau)$ и того, что свободный член $q_0^{(e)}$ этого полинома равен единице, следует, что $[q^{(e)}(\bar{\tau})]^{-1}\to 0$ при $\ell\to\infty$ для любого $\bar{\tau}\in(0,\infty)$. Если учесть также, что при выполнении условий (I3) дробь $r_\nu(\bar{\tau})$ ограничена при любых $\tau>0$ и ℓ, то, переходя в (I6) к пределу при $\ell\to\infty$ получим (I8).

Положив теперь $\ell=n$ достаточно большим и параметр β в функциях (7) и (I8) равным единице (см. Замечание 2), потребуем выполнения тождества $\tilde{r}_e(\tau)=\bar{r}_e(\tau)$. Для выполнения этого тождества, очевидно, достаточно приравнять коэффициенты при одинаковых степенях τ числителей дробей $\tilde{r}_e(\tau)$ и $\bar{r}_e(\tau)$: $\lambda_s^{(\ell-1)}=\bar{P}_s^{(\ell-1)}$ $(s=\overline{0,\ell-1})$ или, с учетом (I6),

$$C\tilde{\alpha}=Q\bar{P}, \tag{I9}$$

где $\bar{P}=(\bar{P}_0,\bar{P}_1,\dots,\bar{P}_{\ell-1})$ – коэффициенты полинома в числителе функции (7).

Система (I9) имеет единственное решение.

Действительно, элементы матрицы C, расположенные на ненулевой диагонали, равны единице: $C_{i,\ell-i-1}=C_{i,m-\nu-i-1}=C_{i+\nu}^{i+\nu}=1$ и, следовательно, $|C|=1$.

Вычислив из системы (I9) первые $m-\nu$ коэффициенты функции $r_m(\tau)$, можно их подставить в систему (I3) и вычислить из нее остальные ν коэффициенты этой функции. Это всегда можно сделать, ибо подлежащая в этом случае решению система ν-го порядка, матрица которой B_ν состоит из первых ν строк и последних ν столбцов матрицы B системы (I3). Но мы уже знаем (см. замечание 4), что определитель матрицы $\bar{B}_\nu$ отличен от нуля и, следовательно, задача определения последних ν коэффициентов функции $r_m(\tau)$ корректно разрешима.

На этом завершается доказательство леммы 4, а вместе с ним и теоремы I.

2. Результаты численных исследований. Ниже приводятся параметры методов I-9-го порядков аппроксимации с одно- и двухпараметрической минимизацией функционала (I5). Значения константы μ_ℓ ($m=\overline{2,10}$; $\ell=0,1$) приведены в табл. I*. Из этой таблицы видно, что при фиксированном ℓ с увеличением m убывание значений μ_ℓ замедляется. Поэтому в табл.2 и 3 приведены значения параметра α и коэффициентов a_s методов (3) только до $m=6$.

Были проведены численные исследования относительной эффективности методов экстраполяции по Ричардсону, в основу которых положен неявный метод Эйлера [с. I80] (ЭМЭ), модифицированных методов [-3], чебышевских методов [2], представляющих собой модификацию методов [4], методов (3,0) и (3,I) – методов (3) с $\ell=0$ и $\ell=1$ соответственно. Эти исследования проводились на примере решения задачи

$$\begin{gathered} u_t = u_{xx} + k e^{-kt} x^3 - 6(2-e^{-kt})x, \\ t\geq 0, \quad x\in[0,1], \\ u(x,0)=x^3, \quad x\in[0,1], \\ u(0,t)=0, \quad u_x(1,t)=3(2-e^{-kt}),\ t\geq 0, \end{gathered} \tag{20}$$

точное решение которой:

$$u(x,t)=(2-e^{-kt})x^3,\ x\in[0,1],\ t\geq 0$$

при $k=1,5,10$ на равномерных сетках: ω_h с числом узлов I6I, ω_τ с числом узлов $N=100$ с шагами $\tau=ch$ ($c=0.5$, I., 2., 4., 8., I6).

* В столбце этой таблицы, помеченном звездочкой, для сравнения приведены значения функционала (I5) для $m=\overline{1,10}$ методов [3] I-I0-го порядков аппроксимации.

Результаты исследований приведены в табл.4. В этой таблице приведены значения $L_2(\omega_h)$ -эффективности перечисленных выше методов, вычисленные по формулам

$$E_2 = \frac{\| \varepsilon^{э} \|_{L_2(\omega_h)}}{5 \| \underline{\varepsilon} \|_{L_2(\omega_h)}},$$

Таблица I

m \ ℓ	*	0	I
I	0.203632	-	-
2	0.171794	0.047185	-
3.	0.130450	0.031643	0.028580
4	0.102494	0.026144	0.013901
5	0.088167	0.018892	0.007151
6	0.079493	0.015041	0.005483
7	0.073690	0.012819	0.004680
8	0.068729	0.011388	0.004280
9	0.061183	0.010394	0.004131
I0	0.055723	0.010163	0.004022

Таблица 2

m \ ℓ	0	I
2	0.394596	-
3	0.615485	0,651763
4	0.831292	0.375267
5	0.354788	0.457038
6	0.431301	0.557124

Таблица 3

m	s	$a_{s,0}$	$a_{s,1}$
2	I	-0.534234 (00)	
	2	0.I53423 (0I)	
3	I	-0.554320 (00)	-0.533808 (00)
	2	0.248390 (0I)	0.25333I (0I)
	3	-0.929587 (00)	-0.999509 (00)
4	I	-0.6I3643 (00)	0.556957 (-0I)
	2	0.375268 (0I)	-0.I27565 (0I)
	3	-0.286738 (0I)	0.37I946 (0I)
	4	0.728345 (00)	-0.I49950 (0I)
5	I	0.505962 (00)	0.202852 (00)
	2	-0.408065 (0I)	-0.246883 (0I)
	3	0.908548 (0I)	0.764305 (0I)
	4	-0.577I43 (0I)	-0.587902 (0I)
	5	0.I26064 (0I)	0.I50I94 (0I)
6	I	0.486220 (00)	0.230I04 (00)
	2	-0.473922 (0I)	-0.3236I8 (0I)
	3	0.I3376I (02)	0.I242I2 (02)
	4	-0.I27687 (02)	-0.I43064 (02)
	5	0.562I35 (0I)	0.73483I (0I)
	6	-0.974724 (00)	-0.I45709 (0I)

где $\|\varepsilon\|_{L_2(\omega_h)} = \max\limits_{1 \le j \le N} \|\varepsilon_h(t_j)\|_{L_2(\omega_h)}$

- L_2 - погрешность соответствующего метода, $\varepsilon_h(t_j)$ - погрешность сеточного решения, полученного соответствующим методом в момент времени $t_j \ (j=\overline{1,N})$, $\|\varepsilon^э\|_{L_2(\omega_h)}$ - L_2 - погрешность неявного метода Эйлера, s - число обращений к подпрограмме решения задачи (20) неявным методом Эйлера равное $m(m+1)/2$ для методов экстраполяции m -го порядка точности и m для остальных методов.

Таблица 4

Метод		0.5	I.0	2.	4.	8.	I6.	*
ЭМЭ		2.4	3.3	4.2	6.6	7.4	I2.5	I2.5
/3/		9.3	41.0	8.7	I4.3	II.6	4.6	41.0
(3,0)	I	0.6	2.7	59.6	9.5	8.I	3.3	59.6
(3,I)		0.6	2.9	7I.7	I0.9	9.6	4.I	7I.9
/2/		0.0	0.0	0.I	0.5	I.6	5.3	5.3
ЭМЭ		I0.4	I9.9	I9.I	36.6	6I.8	60.7	6I.8
/3/		3I.5	74.4	32.9	I5.4	6.8	2.8	74.4
(3,0	5	6.6	27.7	24.3	II.0	4.9	2.0	27.7
(3,I)		6.7	35.9	I9.3	9.5	4.8	2.4	35.9
/2/		0.0	0.5	I.8	3.2	8.6	3.6	8.6
ЭМЭ		30.5	30.7	46.9	89.5	48.I	I9.7	89.5
/3/		I0I.2	3I.7	I5.7	7.9	4.0	I.8	I0I.2
(3,0)	I0	26.2	27.8	II.4	5.5	2.6	I.2	27.8
(3,I)		22.0	I8.5	I2.7	5.0	2.2	I.I	22.0
/2/		0.I	I.4	4.7	7.9	5.7	2.5	7.9

В методах экстраполяции m полагалось равным 2 и 3, а в остальных методах $m = \overline{2,6}$. В таблице приведены наи - высшие значения эффективности, достигнутой соответствую - щим методом для конкретного значения C. В столбце табл. 4, помеченном звездочкой, выписаны наивысшие значения эф- фективности для соответствующего метода на всем диапазоне изменения сеточного параметра C.

Несмотря на то, что исследованию были подвергнуты только одно- и двухпараметрически оптимизированные методы, основные выводы относительно их практической ценности можно сделать и по представленным в табл.4 результатам:

I) по эффективности методы (3) занимают промежуточное положение между асимптотическими [3] и чебышевскими [2] методами;

2) эффективность методов [3] так же, как и эффективность методов [2], тем выше, чем глаже решение задачи. В частности, при K =I наивысшая эффективность методов [3] оказалась выше, чем у других методов.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

I. Марчук Г.И. Методы вычислительной математики. - Новосибирск, 1973.- 352 с.

2. Шихалиев С.З.- А-регуляризация одного класса оптимальных методов интегрирования уравнения теплопроводности.-В кн.: Тезисы докл. П Всесоюзной научно-технической конференции "Проблемы нелинейной электротехники". Киев, 1984, ч.3, с.I24-I25.

3. Nörsett S.P. Restvicted Pade Approximations to the Exponential Function. - SIAM J.Numer.Anal., 1978,v.15, №5, p.1008-1029.

4. Saff E.B., Shönhage A., and Varga R.S. Geometric Convergence to e^{-z} by Ra·:onal Functions with Real Poles. - Numer.Math., 1976, v.25, p.307-322.

УДК 536.25

УСТОЙЧИВОСТЬ ТЕРМОКАПИЛЛЯРНОЙ КОНВЕКЦИИ В ЖИДКОМ ЦИЛИНДРЕ, СОЗДАВАЕМОЙ ВНЕШНИМ НАГРЕВАТЕЛЕМ С АКСИАЛЬНЫМ ГРАДИЕНТОМ ТЕМПЕРАТУРЫ

А.Ю.Гельфгат, Б.Я.Мартузан
(ВЦ ЛГУ им. П.Стучки)

В настоящее время активно изучается влияние термокапиллярной конвекции (конвекции Марангони) на структуру гидродинамических течений, возникающих при выращивании кристаллов из расплава. В частности, экспериментальные исследования термокапиллярных явлений, возникающих в процессах зонной плавки, проведены в работах [1-4]. В [1] показано, что при некоторых условиях конвекция Марангони полностью подавляет гравитационную конвекцию. Начиная с некоторых чисел Марангони в расплаве наблюдаются осцилляции температуры и скорости. В [2,4] наблюдалось появление азимутальной составляющей скорости, несмотря на осевую симметрию всех условий.

В [3] отмечается, что потеря устойчивости термокапиллярной конвекции может иметь как конвективную природу, так и капиллярную, связанную с деформацией свободной поверхности. Исследованию этих механизмов неустойчивости в плоском слое посвящены работы [5-6]. В [7] изучается устойчивость поверхности бесконечного жидкого цилиндра относительно социлляций температуры на боковой поверхности. В [8] найдены условия возникновения термокапиллярной конвекции в цилиндрическом слое между твердой и свободной поверхностями, имеющими разную температуру. В [9] показано, что термокапиллярный эффект может создавать неустойчивость и в случае абсолютно устойчивой гравитационной конвекции. В [10-12] исследуется устойчивость совместной гравитационной и термокапиллярной конвекции в плоском слое с постоянным продольным градиентом температуры на свободной поверхности.

В данной работе, с целью приблизиться к условиям экспериментов [I-4], начато изучение устойчивости термокапиллярной конвекции в бесконечном жидком недеформируемом цилиндре. Движение жидкости происходит под действием аксиального градиента температуры на боковой поверхности, создаваемого внешним нагревателем. При этом, в отличие от [8,I0-I2], не фиксируется температура на свободной поверхности, что больше соответствует реальным условиям экспериментов и технологических процессов.

I^0. Рассматривается устойчивость стационарной термокапиллярной конвекции в жидком круговом цилиндре, получающем тепло от внешнего нагревателя по линейному закону

$$\chi \frac{\partial T}{\partial r}\Big|_{r=R} = -\alpha \left(T|_{r=R} - T_H \right), \tag{I}$$

где

$$T_H = kz \tag{2}$$

- температура нагревателя,

χ - коэффициент теплопроводности,

α - коэффициент теплоотдачи,

R - радиус цилиндра.

Движение жидкости описывается системой уравнений свободной конвекции в приближении Буссинеска с условиями непротекания и замкнутости потока.

Градиент температуры на боковой поверхности, определяющий термокапиллярную силу, параллелен оси цилиндра, поэтому скорость имеет лишь одну аксиальную составляющую $\vec{V} = (0, 0, V_z)$. Из уравнения неразрывности следует, что V_z не зависит от координаты z. Считая течение осесимметричным и выбирая в качестве масштабов скорости, времени, температуры, давления, соответственно, a/R, R^2/ν, kR, $\rho\nu a/R^2$ (ν - кинематическая вязкость, ρ - плотность, a - коэффициент температуропроводности), получаем следующую систему уравнений (система координат-цилиндрическая):

$$\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}\left(r\frac{\partial V_z}{\partial r}\right)=\frac{\partial P}{\partial z} \qquad (3)$$

$$\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}\left(r\frac{\partial T}{\partial r}\right)+\frac{\partial^2 T}{\partial z^2}=V_z\frac{\partial T}{\partial z}. \qquad (4)$$

Условие (I) принимает вид:

$$\left.\frac{\partial T}{\partial r}\right|_{r=1}=-Bi\left(T|_{r=1}-z\right), \qquad (5)$$

где $Bi=\alpha R/\chi$.

Скорость V_z удовлетворяет условию замкнутости потока

$$\int_0^1 V_z\,dr=0 \qquad (6)$$

и условию равновесия касательных напряжений на свободной поверхности:

$$\left.\frac{\partial V_z}{\partial r}\right|_{r=1}=-Ma\left.\frac{\partial T}{\partial z}\right|_{r=1} \qquad (7)$$

,где $Ma=\left|\frac{\partial \sigma}{\partial T}\right|\frac{kR^2}{a\nu\rho}$, σ - коэффициент поверхностного натяжения.

Решение задачи (3-7) имеет вид:

$$V_z^*=\frac{1}{6}Ma\,(1-3r^2) \qquad (8)$$

$$T^* = z + \frac{Ma}{16}\left(4r^2 - 3r^4 + \frac{4-Bi}{Bi}\right) \qquad (9)$$

$$p^* = -\frac{Ma}{2} z + p_0, \qquad (10)$$

где p_0 - внешнее давление.

Далее исследуется устойчивость этого течения относительно стационарных неосесимметричных, пространственно-периодических возмущений.

2°. Уравнения для малых возмущений имеют вид:

$$\Delta \vec{V} - V_z^* \frac{\partial \vec{V}}{\partial z} = \mathrm{grad}\, p \qquad (11)$$

$$\Delta T - V_z^* \frac{\partial T}{\partial z} = V_z + \frac{\partial T^*}{\partial r} V_r \qquad (12)$$

$$\mathrm{div}\, \vec{V} = 0. \qquad (13)$$

Здесь $\vec{V} = \vec{V}(r, \varphi, z)$; $p = p(r, \varphi, z)$; $T = T(r, \varphi, z)$ - малые возмущения скорости, давления и температуры, которые ищутся в Фурье-представлении:

$$\vec{V} = \vec{V}(r) \exp i(\lambda z + n\varphi), \quad \vec{V}(r) = (u(r), v(r), w(r)) \qquad (14)$$

$$p = p(r) \exp i(\lambda z + n\varphi) \qquad (15)$$

$$T = \theta(r) \exp i(\lambda z + n\varphi). \qquad (16)$$

Тогда, для $\vec{V}(r)$, $p(r)$, $T(r)$ имеем:

$$u'' + \frac{1}{r}u' - \left(\frac{n^2+1}{r^2} + \lambda^2\right)u + \frac{2n}{r^2}v - \frac{a}{12}(1-3r^2)u = p' \qquad (17)$$

$$v''+\frac{1}{r}v'-\left(\frac{n^2+1}{r^2}+\lambda^2\right)v+\frac{2n}{r^2}u-\frac{a}{12}(1-3r^2)v=\frac{n}{r}p \qquad (18)$$

$$w''+\frac{1}{r}w'-\left(\frac{n^2}{r^2}+\lambda^2\right)w-\frac{a}{12}(1-3r^2)w+Ma\,r\,u=i\lambda p \qquad (19)$$

$$u'+\frac{u}{r}-\frac{n}{r}v+i\lambda w=0 \qquad (20)$$

$$\theta''+\frac{1}{r}\theta'-\left(\frac{n^2}{r^2}+\lambda^2\right)\theta-\frac{a}{12}(1-3r^2)\theta=w+\frac{Ma}{4}(2r-3r^3)u, \qquad (21)$$

где $a=2i\lambda Ma$.

Из (I7-20) можно получить:

$$p''+\frac{1}{r}p'-\left(\frac{n^2}{r^2}+\lambda^2\right)p=a\,r\,u. \qquad (22)$$

Исключая из (I7,I8,22) u и v, получаем:

$$\Delta^3 p-\frac{a}{6}(1-3r^2)\Delta^2 p+\left(\frac{a}{12}\right)^2(1-3r^2)^2\Delta p- \qquad (23)$$
$$-2a\left(p''+\frac{1}{r}p'+\left(\lambda^2-\frac{n^2}{r^2}\right)p\right)+\frac{a^2}{12}r(1-3r^2)p'=0,$$

где $\Delta=\frac{\partial^2}{\partial r^2}+\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}-\left(\lambda^2+\frac{n^2}{r^2}\right)$. (24)

Граничные условия для u, v, w, θ

$$u(1)=0 \qquad (25)$$
$$w'(1)=-i\lambda Ma\,\theta(1) \qquad (26)$$
$$v'(1)-v(1)=-Ma\,n\,\theta(1) \qquad (27)$$
$$i\lambda v(1)+n w(1)=0 \qquad (28)$$
$$\theta'(1)=-Bi\,\theta(1). \qquad (29)$$

Условие замкнутости потока при $n \neq 0$ выполняется тождественно.

3°. Для нахождения критических чисел Марангони используется метод Галеркина. Из условия (25) следует, что функцию $u \cdot r$ можно разложить в следующий ряд по функциям Бесселя:

$$r u = \sum_{k=1}^{\infty} C_k J_n(\alpha_k r); \quad J_n(\alpha_k) = 0. \tag{30}$$

Выражения для v, ω и p находим из (I7),(20) и (22):

$$p = C_0 I_n(\lambda r) - a \sum_{k=1}^{\infty} C_k (\alpha_k^2 + \lambda^2)^{-1} J_n(\alpha_k r) \tag{3I}$$

$$v = \frac{\lambda}{2n} r^2 C_0 I_n'(\lambda r) + \frac{r}{2n} \sum_{k=1}^{\infty} C_k \left[\frac{a}{12}(1-3r^2)+\lambda^2+\alpha_k^2\right] J_n(\alpha_k r) + \frac{1}{n} \sum_{k=1}^{\infty} C_k \alpha_k \left[1-\frac{1}{2} a r^2 (\lambda^2+\alpha_k^2)^{-1}\right] J_n'(\alpha_k r) \tag{32}$$

$$\omega = -\frac{i}{2} r I_n'(\lambda r) - \frac{i}{2\lambda} \sum_{k=1}^{\infty} C_k \left[\frac{a}{12}(1-3r^2)+\lambda^2+\alpha_k^2\right] J_n(\alpha_k r) + \frac{ia}{2\lambda} r \sum_{k=1}^{\infty} C_k \alpha_k (\alpha_k^2+\lambda^2)^{-1} J_n'(\alpha_k r). \tag{33}$$

Функцию $\theta(r)$ ищем в виде:

$$\theta = B_0 + \sum_{k=1}^{\infty} B_k J_n(\alpha_k r). \tag{34}$$

Если потребовать, чтобы при $r = I$ выражения в (2I) и (23) были равны нулю, то в качестве проекционной системы можно использовать функции $\mathcal{J}_n(\alpha_k r)$.

Подставляя (30-34) в (27-35) и минимизируя невязки в (21), (23), получаем однородную систему линейных алгебраических уравнений относительно $C_к$ и $B_к$. Условие разрешимости (линейной зависимости) этой системы дает уравнение для определения критического числа Марангони

$$Ma_{кр} = Ma_{кр}(\lambda). \tag{35}$$

Не приводя выражений для коэффициентов системы, укажем следующее:

- Коэффициенты системы, а следовательно, и критические числа Марангони не зависят от числа Био. Это объясняется постоянством градиента температуры на боковой поверхности цилиндра. Однако, от числа Био могут зависеть вторичные течения.

- Условие разрешимости для системы линейных уравнений относительно $C_к$ и $B_к$ распадается на условия линейной зависимости: 1) коэффициентов при переменных $C_к$ и 2) коэффициентов при переменных $B_к$. Каждое из этих условий определяет критические числа Марангони. Возмущения, соответствующие первому условию, назовем "возмущениями скорости" (они изменяют и температуру, и скорость), а соответствующие второму условию - "тепловыми возмущениями" (эти возмущения не изменяют скорости).

4°. Тепловые возмущения определяются функциями $\theta(r)$ удовлетворяющими уравнению (21) и условиям

$$\theta(1) = \theta'(1) = 0. \tag{36}$$

Эти возмущения не изменяют температуру на свободной поверхности, а, следовательно, и термокапиллярную силу. Поэтому, в приближении Буссинеска, скорость течения остается неизменной.

В разложении (34) $B_0 = 0$, а система уравнений для $B_к$ имеет вид:

$$\sum_{k=1}^{N+1} \alpha_k B_k J_n(\alpha_k) = 0 \tag{37}$$

$$\sum_{k=0}^{N+1} B_k \left(\left[a(3r^2-1) - \lambda^2 - \alpha_k^2 \right] J_n(\alpha_k r),\ J_m(\alpha_k r) \right) = 0, \tag{38}$$

$$m = 1, 2, \ldots, N,$$

где

$$(f, g) = \int_0^1 r f(r) g(r)\, dr. \tag{39}$$

Достаточная точность в методе Галеркина (37-38) достигается при N =5 (результаты для N =5 и N=6 отличаются в четвертом знаке). Расчеты показывают, что система уравнений (37-38) имеет нетривиальное решение только при n =I. Зависимость (35) в этом случае показана на рис.I.

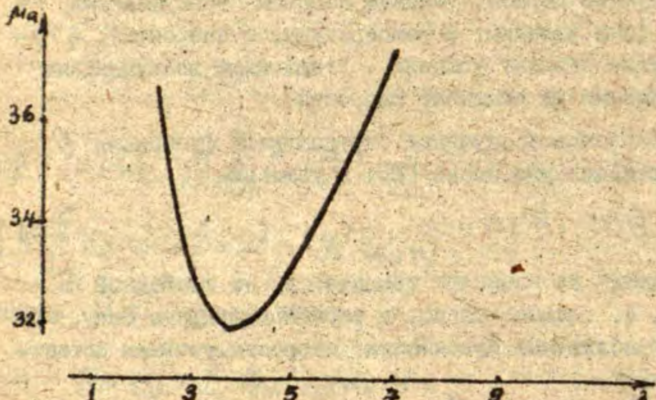

Рис.I.Зависимость $Ma = Ma(\lambda)$ для тепловых возмущений.

5°. Достаточная точность для возмущений скорости достигается при 11 членах в ряде (30). Критическое число Марангони, как и в случае температурных возмущений, зависит от волнового числа λ. При определении минимальных критических чисел для разных n получены следующие результаты:

при $n=1$ $Ma_{кр}=25,3$ $\lambda_{кр}=1,192$

$n=2$ $Ma_{кр}=23,38$, $\lambda_{кр}=1,676$.

Таким образом, возмущения скорости опаснее тепловых возмущений. Однако, наиболее опасные возмущения могут быть определены только после решения соответствующей нестационарной задачи.

Легко убедиться, что при $\lambda=0$ система уравнений (17-21) с условиями (25-29) имеет единственное нетривиальное решение $\theta=0$, $\vec{V}(0, \omega r, 0)$, что соответствует равномерному вращению цилиндра вокруг оси. Однако такие возмущения, возможные и при $Ma=0$, не представляют интереса.

Осесимметричные возмущения ($n=0$) должны рассматриваться отдельно, так как в этом случае уравнение (23) не имеет места.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Schwabe D., Scharmann A., Preisser F., Oeder R. Experiments on Surface Tension Driven Flow in Floating Zone Melting. - J.Cryst.Growth., 1978, v. 43, p.305-312.
2. Preisser G., Schwabe D., Scharmann A. Steady and Oscillatory Thermocapillary Convection in Liquid Columns with Free Ctlindrical Surface. - J.Fluid.Mech.,1983, v. 126, p.545-567.
3. Kamatiany G., Ostrach S., Vargas M. Oscillatory Thermocapillary Convection in a Simulated Floating-zone Configurations. - J.Cryst.Growth, 1984, v. 66, p. 83-90.

4. Chun C.-H., Wuest W. Experiments on the Transition from the Steady to the Oscillatory Marangoni-convection of a Floating Zone Under Reduced Grawity Effect.- Acta Astranautica, 1979, v. 6, p. 1073-1083.
5. Smith M.K., Davis S.H. Instabilities of Dynamic Thermocapillary Liqued Layers. Part.1.Convective Instabilities. - J. Fluid.Mech., 1983, v. 132, p. 119-144.
6. Smith M.K., Davis S.H. Instabilities of Dynamic Thermocapillary Liquid Layers. Part.2. Surface-wave Instabilities. - J.Fluid.Mech., 1983, v.132, p. 145-162.
7. Bauer H.F. Liquid Surface Oscillations Induced by Themperature Fluctuacions. - Z.Flugwiss.Weltraumforsch., 1983, Bd 7, s 4., pp.274-278.
8. Антимиров М.Я., Лиепиня В.Р. Возникновение термокапиллярной конвекции в цилиндрическом слое жидкости в условиях невесомости. - Изв.АН ЛатвССР, 1978, № 3, с. 90-99.
9. Непомнящий А.А. О длинноволновой конвективной неустойчивости в горизонтальных слоях с деформируемой границей. - В кн.: Конвективные течения. Пермь, 1983, с.25-31.
10. Мызников В.М. О спектре декрементов возмущений стационарного адвективного движения, вызываемого продольным градиентом температуры. -В кн.: Конвективные течения и гидродинамическая устойчивость. Свердловск, 1979, с.29-35.
11. Мызников В.М. Об устойчивости стационарного адвективного движения в горизонтальном слое со свободной границей относительно пространственных возмущений. - В кн.: Конвективные течения. Пермь, 1981, с.76-82.
12. Мызников В.М. Конечноамплитудные пространственные возмущения адвективного движения в горизонтальном слое со свободной границей.- В кн.: Конвективные течения. Пермь, 1981, с.83-88.

УДК 532.516

ИССЛЕДОВАНИЕ ПОТОКА ВЯЗКОЙ НЕСЖИМАЕМОЙ ЖИДКОСТИ МЕЖДУ БЕСКОНЕЧНЫМИ ОСЦИЛЛИРУЮЩИМ И НЕПОДВИЖНЫМ ДИСКАМИ

Б.Я.Мартузан, М.Я.Ошманис
(ВЦ ЛГУ им. П.Стучки)

При выращивании монокристаллов разнообразных материалов в настоящее время применяют различные способы вращения кристалла. При этом нередко применяется вращение с переменной угловой скоростью и в том случае реверсивное вращение, когда кристалл вращается периодически то в одну, то в другую сторону.

Наиболее простым течением, моделирующим поведение расплава при реверсивном вращении, является течение вязкой несжимаемой изотермической жидкости между двумя бесконечными осциллирующими дисками. При изучении таких течение обычно рассматривалась асимптотика при очень маленьких амплитудах осцилляции дисков (см.статью Дохара Н. [I] и упомянутые в этой статье работы). Более подробное исследование квазистационарного течения проводилось в работах Схипперса [3,4], где рассмотрены как результаты приближенного аналитического исследования интегральных характеристик, так и результаты численного решения задачи.

Особенно интересным является открытый Дийкстрой Д., Схипперсом Х. и Зандбергеном П. [2] факт, что квазистационарное течение, устанавливающееся после многих циклов осцилляции дисков, может зависеть от начального состояния, а именно, оно зависит от того, в каком направлении вращался диск во время первого полупериода первого цикла.

В настоящей работе проводится численное исследование квазистационарного течения между двумя бесконечными дисками, один из которых неподвижен, а второй вращается с постоянной угловой скоростью Ω , но периодически меняет направление вращения с периодом Т. Закон изменения его угловой скорости задается функцией

$$g(t) = \begin{cases} \Omega, \text{ при } t \in [T(n-1), Tn - \frac{T}{2}) \\ -\Omega, \text{ при } t \in [Tn - \frac{T}{2}, Tn), \end{cases} \quad n \in N. \qquad (1)$$

Целью исследований было нахождение качественных характеристик квазистационарного течения в зависимости от числа Рейнольдса и длины периода.

Постановка задачи

Для исследования квазистационарного течения использовались безразмерные уравнения Навье-Стокса в цилиндрических координатах.

Т.Карман показал [5], что для осесимметричного течения жидкости между двумя бесконечными дисками существует возможность выразить осевую (w), угловую (v) и радиальную (u) компоненты скорости при помощи следующего преобразования подобия.

$$u = r \cdot F(t,z), \quad v = r \cdot G(t,z), \quad w = R^{-\frac{1}{2}} H(t,z), \qquad (2)$$

где $R = \frac{d^2 \Omega}{\nu}$ - число Рейнольдса, d - расстояние между дисками, ν - кинематическая вязкость, Ω - угловая скорость, по которой производится нормирование.

Возможность использования преобразования (2) сохраняется и в случае переменной скорости вращения дисков. Новые неизвестные функции F, G, H определялись из системы уравнений Навье-Стокса в цилиндрической системе координат. Для нормирования пространственных координат, времени и скорости использовались, соответственно, d, Ω^{-1} и Ωd:

$$
\begin{cases}
K = H''_{zz} \\
K'_t = -4R^{\frac{1}{2}} G G'_z - R^{-\frac{1}{2}} K'_z H + R^{-1} K''_{zz} \\
G'_t = R^{-1} G''_{zz} - R^{-\frac{1}{2}} G'_z H - 2FG \\
F = -\frac{1}{2} R^{-\frac{1}{2}} H'_z
\end{cases} \qquad (3)
$$

На дисках ставились краевые условия непроницаемости и прилипания:

$$
\begin{aligned}
&G(t,1) = H(t,0) = H(t,1) = F(t,0) = F(t,1) = 0 \\
&G(t,0) = g(t).
\end{aligned} \qquad (4)
$$

Для численного решения системы уравнений (3) с краевыми условиями (4) использовалась разностная аппроксимация с центральными разностями для конвективных членов. При решении нелинейной системы разностных уравнений значения функций в нелинейных членах на каждом временном слое брались с предыдущей итерации. Краевые условия для функции K аппроксимировались формулой типа формулы Тома.

Решение краевой задачи проводилось до квазистационарного состояния, т.е. до такого момента времени t_n, при котором для функций G, H, F выполняется условие

$$f(t+T) = f(t) \qquad \text{для любого } t > t_n.$$

Так как квазистационарное состояние может зависеть от пути выхода на него, то все варианты счета, рассматриваемые в дальнейшем, начинались от начального состояния

$$G(0,z) = H(0,z) = F(0,z) = 0. \qquad (5)$$

Результаты расчетов

При небольших значениях числа Рейнольдса распределение радиальной компоненты скорости (функции F) качественне совпадает в случаях постоянного вращения диска и реверсивного вращения. Вблизи подвижного диска жидкость течет в направлении от оси вращения, а вблизи неподвижного диска-устремляется к ней. Поведение вращательной компоненты скорости (функции G), естественно, для этих двух случаев сильно отличается. В случае реверсивного вращения в жидкости образуются слои с противоположным направлением вращения. При этом указанные слои за время периода квазистационарного течения продвигаются в сторону неподвижного диска. Существенно то, что квазистационарное распределение компонент скорости при малых числах Рейнольдса инвариантно относительно следующего преобразования:

$$G\left(t+\frac{T}{2},z\right)=-G(t,z)\ ,\quad F\left(t+\frac{T}{2},z\right)=F(t,z) \qquad (6)$$

для любого $t \geq t_n$.

Рассмотрим более подробно пример расчета квазистационарного течения при R=I00 и T=I0 (Рис.I).

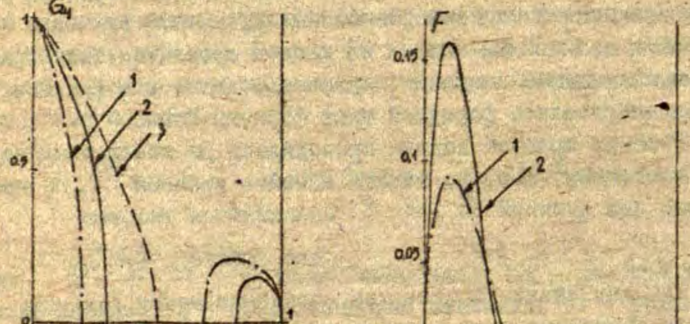

Рис.I.Зависимость функций а) G_4, б) F от координаты для различных моментов времени при квазистационарном состоянии, R=I00, T=I0.
I- t=0.IT, 2- t=0.2T, 3- t=0.4T.

В момент времени t =0.IT в областях $0 < z \leq 0.2$, $0.7 \leq z < 1$ жидкость вращается с положительной угловой скоростью. Если в первой области это происходит из-за силы трения, то во второй - это влияние предшествующего положительного полупериода. При t =0.2T качественная картина не изменилась, однако увеличился слой жидкости с положительной угловой скоростью вблизи подвижного диска и уменьшился вблизи неподвижного, благодаря силе трения между слоями. К t =0.4T исчез слой с положительной угловой скоростью вблизи неподвижного диска,и уже не сказывалось влияние предыдущего положительного полупериода.

Распределение функции G_4 при t =0.6T, t =0.7T, t = =0.9T может быть получено симметричным отражением относительно оси z распределение для t =0.IT, t =0.2T, t = =0.4T соответственно (6).

В этом и в некоторых последующих случаях вместо функции G изображается функция

$$G_4(t,z) = (\operatorname{sign} G(t,z)) \cdot \sqrt[4]{|G(t,z)|}. \qquad (7)$$

Выбор такой функции позволяет на графиках лучше отобразить исследуемые процессы в случаях, когда диапазон значений велик.

Для малых значений числа Рейнольдса уменьшение длины периода приводит к увеличению числа слоев жидкости с противоположным направлением вращения (рис.2)

При больших значениях числа Рейнольдса квазистационарное распределение вращательной компоненты существенно другое. Вблизи неподвижного диска имеется слой, вращающийся в течение всего периода в одну сторону [2] , а вблизи подвижного диска-слой, меняющий направление вращения вместе с диском. Пример такого течения представлен на рис. 3.

В области $0.3 \leq z <$ I значения функции $G(t,z)$ изменяются мало, и, независимо от направления вращения диска, сохраняется начальное направление вращения.

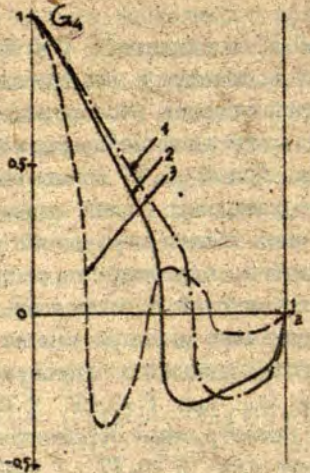

Рис.2. Зависимость функции G_4 от координаты z для различных значений длины периода T при квазистационарном состоянии, R =100, t =0.4T.
I - T =20, 2-T =10, 3-T =2.

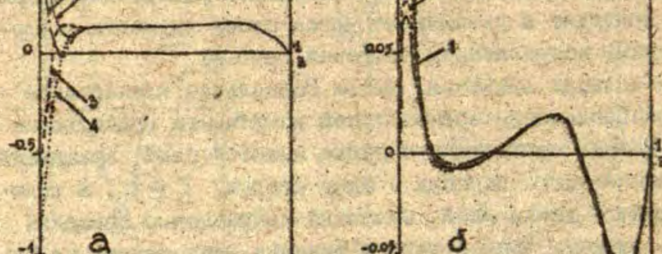

Рис.3. Зависимость функций а) G, б) F от координаты z для различных моментов времени при квазистационарном состоянии, R = 1000, T =10.
I - t=0.IT, 2- t=0.2T, 3- t=0.6T, 4- t=0.9T.

В момент времени $t=0.1T$ вблизи вращающегося диска образовался слой $0 < z \lesssim 0.07$, который из-за силы трения вращается в том же направлении, что и диск. В области $0.07 \lesssim z \lesssim 0.1$ еще сказывается влияние предыдущего полупериода с отрицательной скоростью вращения.

В момент времени $t=0.2T$ вся жидкость вращается в одном и том же направлении, и значения функции $G(t,z)$ вблизи $z=0.1$ растут.

При $t=0.6T$ уже произошло изменение направления вращения диска, и некоторый слой вблизи него ($0 < z \lesssim 0.05$) вращается в ту же сторону, что и диск.

При $t=0.9T$ влияние вращения диска увеличилось, и с отрицательной угловой скоростью вращается жидкость в области $0 < z \lesssim 0.1$.

Распределение функции F (рис.3б) имеет качественно другой характер, чем при малых значениях числа Рейнольдса, но сходно с распределением функции F, получающимся в стационарном состоянии при постоянном вращении диска.

При малых значениях длины периода были обнаружены еще и режимы, имеющие промежуточный характер. Пример такого течения приводится на рис.4

На слое вблизи подвижного диска ($0 < z \lesssim 0.4$) сохраняется симметрия при переходе из одного полупериода в другой. При этом распределение вращательной компоненты имеет сложную структуру, характерную для течений с малым числом Рейнольдса. Вблизи неподвижного диска имеется слой ($0.53 \lesssim z < 1$), где функция сохраняет знак начальной скорости вращения. Интересно отметить, что функция F для этого варианта (рис.4б) практически не меняется в течение периода. Качественное поведение этой функции такое же, как для течения с малым числом Рейнольдса (рис.1б).

Более полную картину поведения функции G_4 при изменении числа Рейнольдса можно получить из рисунка 5, где приводятся распределения для различных R, но в один и тот же момент периода. Здесь можно проследить переход из одного режима в другой.

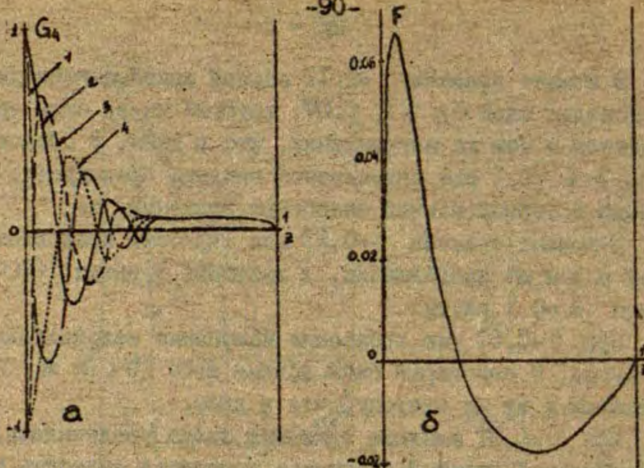

Рис.4. Зависимость функций а) G_4, б) F от координаты z для различных моментов времени при квазистационарном состоянии, R =300, T = 2.
I - t =0.IT, 2- t =0.4T, 3- t =0.6T, 4- t =0.9т.

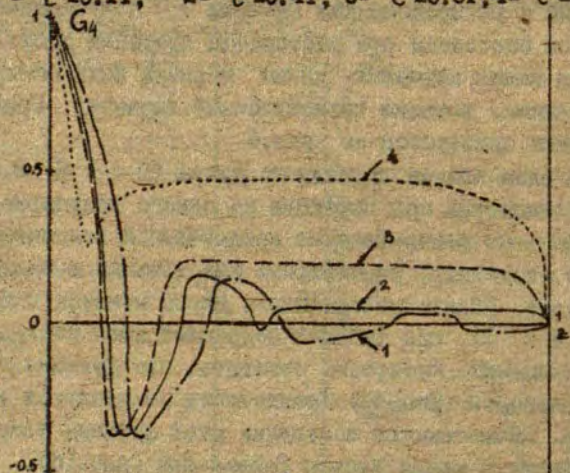

Рис.5. Зависимость функции G_4 от координаты z для различных значений числа Рейнольдса R при квазистационарном состоянии, T=2, t =0.4T.
I- R=200, 2- R=300, 3- R=400, 4- R=I000.

В результате расчетов были получены следующие области на плоскости R-T: сохранения начального вращения (I), режима колебаний (П) и переходного режима (заштрихованная область).

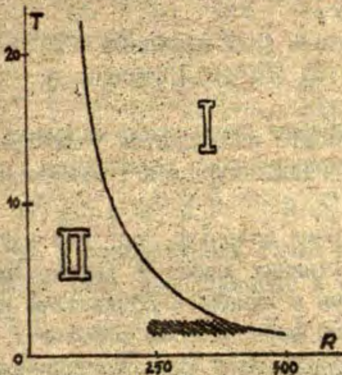

Рис.6. Зависимость развития процесса от значения числа Рейнольдса и длины периода T. I- область сохранения начального вращения, П-область режима колебаний, ▒ - область переходного режима.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Dōhara N. The flow and heat transfer between a torsionally oscillating and a stationary disk.- J.Engng. Math.,1981, v.15, N. 1, p.1-13.
2. Dijkstra D., Schippers H., Zandbergen P.J. On certain solutions of the non-stationary equations for rotating flow.-Proc.6th International Conference on Numerical Methods in Fluid Dynamics, 1978, v.1, p.53-59.
3. Schippers H. Application of multigrid methods for integral equations to two problems from fluid dynamics.- J.Comput.Phys., 1982, v.48, N.3, p.441-461.
4. H.Schippers. Analytical and numerical results for the non-stationary rotating disk flow. -J.Engng.Math., 1979, v.13, N.2, p.173-192.
5. Karman T. Über laminare und turbulente Reibung . - ZAMM, 1921, v.1, p.233-248.

УДК 536.25

О НЕКОТОРЫХ ВОПРОСАХ КОНВЕКТИВНОЙ УСТОЙЧИВОСТИ ТРЕХКОМПОНЕНТНОЙ ЖИДКОСТИ

С.Я.Герценштейн (НИИ механики МГУ),
А.Я.Калейс (ВЦ ЛГУ им. П.Стучки)

В настоящей работе исследуется устойчивость конвективных движений горизонтального слоя трехкомпонентной вязкой жидкости.

В настоящее время довольно подробно изучен вопрос об устойчивости конвективных движений двухкомпонентной жидкости. Анализ задачи в линейной постановке проведен в работах [I,2]. Влияние перекрестных эффектов: термодиффузии (эффект Соре) и диффузионной теплопроводности (эффект Дюфора) изучено в работах [I,3]. Линейный анализ устойчивости показал, что в этой задаче имеет место как монотонная, так и колебательная неустойчивость, притом они могут существовать даже ниже границы нейтральной устойчивости ("парадокс устойчивости"). Исследование конечно-амплитудных возмущений проведено в работах [4,5]; здесь обнаружено существование подкритических конечно-амплитудных движений ("жесткое" возбуждение). Численное моделирование нелинейных надкритических конвективных движений на основе уравнений Навье-Стокса дано в работах [6] (метод Бубнова-Галеркина) и [7] (метод конечных разностей).

Анализ линейной устойчивости для трехкомпонентной жидкости проведен в рабте [8]. Экспериментальные наблюдения описаны в работах [9,10].

Теперь рассмотрим постановку задачи о конвективных движениях трехкомпонентной жидкости в горизонтальном слое. Пусть на границах слоя поддерживаются постоянными температура раствора T_Σ и концентрации тяжелых компонент $S_{1\Sigma}$ и $S_{2\Sigma}$, причем поперек слоя задано линейное распределение температуры и концентрации, обеспечивающее на нижней границе слоя при

$$z=0:\ T_\Sigma=T_0,\ S_{1\Sigma}=S_{10},\ S_{2\Sigma}=S_{20},$$

а на верхней границе при

$$z=d:\ T_\Sigma=T_0-\tilde{T},\ S_{1\Sigma}=S_{10}-\tilde{S}_1,\ S_{2\Sigma}=S_{20}-\tilde{S}_2.$$

При возникшем движении отклонения температуры и концентраций от заданного начального распределения обозначим через $T(x,y,z,t)$, $S_1(x,y,z,t)$ и $S_2(x,y,z,t)$, соответственно. Тогда в произвольной точке слоя температура и концентрации могут быть представлены в следующем виде:

$$T_\Sigma(x,y,z,t)=T_0-\tilde{T}\,z/d+T(x,y,z,t)$$
$$S_{1\Sigma}(x,y,z,t)=S_{10}-\tilde{S}_1\,z/d+S_1(x,y,z,t) \qquad (I)$$
$$S_{2\Sigma}(x,y,z,t)=S_{20}-\tilde{S}_2\,z/d+S_2(x,y,z,t).$$

Для плотности раствора ρ_Σ учитывается только линейная зависимость от температуры и концентраций:

$$\rho_\Sigma=\rho_0\{1-\tilde{\alpha}(T-\tilde{T}z/d)+\tilde{\beta}_1(S_1-\tilde{S}_1 z/d)+\tilde{\beta}_2(S_2-\tilde{S}_2 z/d)\}, \qquad (2)$$

где $\tilde{\alpha}$, $\tilde{\beta}_1$, $\tilde{\beta}_2$ – соответствующие "коэффициенты расширения" при постоянных других параметрах, притом выбранные так, что они положительны, когда температура или концентрации увеличиваются.

Для описания конвективного движения будем использовать трехмерные уравнения Навье-Стокса в классическом для задач конвекции приближении Буссинеска [I]. Температура и концентрации раствора должны,в свою очередь,удовлетворять, соответственно, уравнению теплопроводности и уравнению диффузии. В этих уравнениях имеются члены, учитывающие перекрестные эффекты: термодиффузия, диффузионная теплопроводность и взаимная диффузия. Если к уравнениям движения применить оператор rot и учесть уравнение неразрывности, затем перейти к безразмерным переменным с учетом соотношений:

$[t]=d^2/\nu, [v]=\nu/d, [T]=\tilde{T}, [S_1]\ \tilde{S}_1, [S_2]=\tilde{S}_2, [x]=[y]=[z]=d$, то

систему, описывающую конвективное движение, можно представить в виде:

$$(u'_z-W'_x)'_t=[(\bar{v}\bar{\nabla})w]'_x-[(\bar{v}\bar{\nabla})u]'_z+\{-Gr_T T'_x+Gr_1 S'_{1x}+Gr_2 S'_{2x}\}+\Delta(u'_z-W'_x)$$

$$(V'_z-W'_y)_t\ [(\bar{v}\bar{\nabla})w]'_y-[(\bar{v}\bar{\nabla}).]'_z+\{-Gr_T T'_y+Gr_1 S'_{1y}+Gr_2 S'_{2y}\}+\Delta(V'_z-W'_y)$$

$$(u'_y-V'_x)'_{ot}=[(\bar{v}\bar{\nabla})V]'_{ox}-[(\bar{v}\bar{\nabla})u]'_{oy}+\Delta(u'_y-V'_x).$$

$$u'_x+V'_y+W'_z=0 \qquad (3)$$

$$T'_t=W-(\bar{v}\bar{\nabla})T+\frac{1}{P_r}\Delta T+B_1\Delta S_1+B_2\Delta S_2$$

$$S'_{1t}=W-(\bar{v}\bar{\nabla})S_1+\frac{1}{Sc_1}\Delta S_1+C_1\Delta T+D_1\Delta S_2$$

$$S'_{2t}=W-(\bar{v}\bar{\nabla})S_2+\frac{1}{Sc_2}\Delta S_2+C_2\Delta T+D_2\Delta S_1,$$

где I) Pr - число Прандтля, Sc_1, Sc_2 - числа Шмидта, характеризующие физический свойства среды; 2) Gr_T -тепловое число Грасгофа, Gr_1, Gr_2 - диффузионные числа Грасгофа, характеризующие условия внешнего воздействия и 3) $B_1, B_2, C_1, C_2, D_1, D_2$, характеризующие перекрестные эффекты.

Предполагая границы слоя зободными от касательных напряжений и учитывая, что температура и концентрации на них фиксированы, получим для возмущений при $z=0$ и $z=1$ следующие граничные условия:

$$T=S_1=S_2=W=u'_z=V'_z=0. \qquad (4)$$

Система уравнений (3) с граничными условиями (4) позволяет исследовать пространственное конвективное движение в плоском горизонтальном слое при наличии потоков тепла и веществ, определяемых направлениями заданных градиентов температуры и концентраций.

Для решения задачи (3)-(4) использовался метод Бубнова-

Галеркина. Был выбран вид решения, учитывающий взаимодействие возмущений, определяемых волновыми векторами $\vec{\alpha}_j$, параллельными плоскости OXY и образующими угол δ_j с плоскостью OXZ :

$$Q_i=\sum_{n=0}^{N}\sin(\varkappa_i\pi/2+n\pi z)\sum_{m_1=0}^{M_1}\sum_{m_2=-M_2}^{M_2}\sum_{m_\ell=-M_\ell}^{M_\ell}A_{i,n,m_1,\dots m_\ell}(t)\times$$

$$\times\,\varphi_{i,m_1,\dots,m_\ell}(x,y); \tag{5}$$

$$\varphi_{i,m_1,\dots,m_\ell}=\sin\Big(\eta_i\pi/2+\pi x\sum_{j=1}^{\ell}m_j\alpha_j\cos\delta_j+\pi y\sum_{j=1}^{\ell}m_j\alpha_j\sin\delta_j\Big),$$

где Q_i при i =1,2,3,4,5,6 соответствуют искомым функциям u, v, w, T, S_1, S_2, причем $\varkappa_1=\varkappa_2=\eta_3=\eta_4=\eta_5=\eta_6=1$, $\varkappa_3=\varkappa_4=\varkappa_5=\varkappa_6=\eta_1=\eta_2=0$ и $\alpha_j=|\vec{\alpha}_j|$.

Очевидно, что без потери общности можно полагать δ_1 =0, то есть считать, что направление волнового вектора совпадает с осью OX.

Интегрирование полученной системы обыкновенных дифференциальных уравнений для амплитуд проводилось по схеме типа Рунге-Кутта с автоматическим выбором шага и контролем заданной точности вычислений.

Расчеты проводились при симметричном наборе гармоник по волновым числам α_j, т.е. $M_1=M_2=\dots=M_\ell=L$, причем смешанные гармоники набирались по треугольной схеме : $|m_1|+|m_2|+\dots+|m_\ell|\le L$ с четной суммой индексов, т.е. $n+m_1+m_2+\dots+m_\ell=2k$, ввиду того, что в силу квадратичной нелинейности гармоники с нечетной суммой индексов сохраняют нулевое значение в процессе решения. Практически значения чисел N и L задавались в диапазоне 2÷12, а количество различных порождающих мод не превышало четырех ($\ell\le 4$). Эти ограничения определялись, главным образом, быстродействием используемой для вычислений ЭВМ ЕС-1060.

Полученные значения амплитуд использовались для вычисления температуры, концентраций, плотности и компонент скорости в различных точках слоя, а также для определения интенсивности тепло-массопереноса, характеризуемой, соответственно, тепловым и диффузионными числами Нуссельта.

Были приведены методические расчеты с целью определения оптимального числа используемых гармоник. Расчеты велись для бинарной смеси в режиме "солевых пальцев" при следующих определяющих параметрах:

$Pr = 1$, $Sc_1 = 3.162$, $Gr_T = -7 \cdot 10^5$, $Gr_1 = -6 \cdot 10^5$

Возмущения задавались ортогональными векторами:

$\alpha_1 = 10$, $\alpha_2 = 10$, $\delta_2 = 90^\circ$

Числа N и L менялись следующим образом:

$N = 2 \div 12$, $L = 2; 4$.

В качестве основной характеристики точности получаемых результатов выбирались числа Нуссельта (N_T, N_S). Полученные результаты показывают, что увеличение числа гармоник по x и y не меняет значений числа Нуссельта. Зависимость N_T, N_S от числа гармоник по z (N) показана на рис.1. Как видно, вполне удовлетворительные результаты получаются при N =6;8.

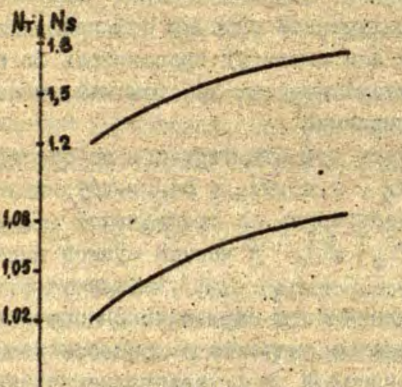

Рис.1. Зависимость чисел Нуссельта от числа гармоник по z.

Был проведен предварител ый анализ стационарных конечно-амплитудных режимов для нелинейной двухмерной задачи (полагалось, что движение зависит только от x и z, не учитывались перекрестные эффекты). Обычным образом введем функцию тока Ψ ($u = \Psi'_z$, $w = -\Psi'_x$; $u'_z - w'_x = \Delta\Psi$) и пр дставим систему (3) в следующем виде:

$$\begin{cases} J(\Psi, \Delta\Psi) + \{-Gr_T T'_x + Gr_1 S'_{1x} + Gr_2 S'_{2x}\} + \Delta(\Delta\Psi) = 0; \\ J(\Psi, T) - \Psi'_x + \dfrac{1}{Pr}\Delta T = 0; \\ J(\Psi, S_1) - \Psi'_x + \dfrac{1}{Sc_1}\Delta S_1 = 0; \\ J(\Psi, S_2) - \Psi'_x + \dfrac{1}{Sc_2}\Delta S_2 = 0, \end{cases} \tag{6}$$

где $J(\Psi, A) = \Psi'_x A'_z - \Psi'_z A'_x$.

Для этой системы будем искать решение следующего вида:

$$\begin{aligned} \Psi &= A \cdot \sin(\pi\alpha x) \cdot \sin(\pi z); \\ T &= B\cos(\pi\alpha x)\sin(\pi z) + C\sin(2\pi z); \\ S_1 &= D_1\cos(\pi\alpha x)\sin(\pi z) + E_1\sin(2\pi z); \\ S_2 &= D_2\cos(\pi\alpha x)\sin(\pi z) + E_2\sin(2\pi z). \end{aligned} \tag{7}$$

Подставляя это решение в систему (6) и собирая коэффициенты у одина ковых гармоник, получаем систему алгебраических уравнений для амплитуд, зависящих от параметров задачи. Нам необходимо найти значения параметров задачи, при которых эта система имеет ненулевое решение.

Для бинарной смеси границу этой области можно представить в аналитическом виде:

$$Gr_T^F = \frac{1}{Sc_1}\left(\left(\frac{(1+\alpha^2)^3\pi^4}{\alpha^2}\left(\frac{Sc_1}{Pr} - \frac{Pr}{Sc_1}\right)\right)^{1/2} - \left(Gr_1 Pr\right)^{1/2}\right)^2. \tag{8}$$

Был проведен линейный анализ устойчивости, результаты которого хорош согласовались с полученными в работе 8 . Приведем основные результаты, которые соответствуют случаю отсутствия перекрестных эффектов. Тогда граница монотонной неустойчивости имеет вид:

$$Gr_T^c = -\frac{Gr_1 Sc_1}{Pr} + \frac{Gr_2 Sc_2}{Pr} + \frac{(1+\alpha^2)^3\pi^4}{\alpha^2 Pr}. \quad (9)$$

Граница колебательной неустойчивости –

$$Gr_T^o = \left(\omega^2 + \frac{(1+\alpha^2)^2\pi^4}{Pr^2}\right)\left(\frac{Gr_1}{\frac{(1+\alpha^2)^2\pi^4}{Sc_1^2}+\omega^2} + \frac{Gr_2}{\frac{(1+\alpha^2)\pi^4}{Sc_2^2}+\omega^2} - \frac{1+\alpha^2}{\alpha^2}\right), \quad (10)$$

где частота нейтральных колебаний (ω) определяется из уравнения:

$$\frac{Gr_1\left(\frac{1}{Sc_1}-\frac{1}{Pr}\right)}{\frac{(1+\alpha^2)^2\pi^4}{Sc_1^2}+\omega^2} + \frac{Gr_2\left(\frac{1}{Sc_2}-\frac{1}{Pr}\right)}{\frac{(1+\alpha^2)^2\pi^4}{Sc_2^2}+\omega^2} + \frac{(1+\alpha^2)}{\alpha^2}\left(1+\frac{1}{Pr}\right) = 0. \quad (11)$$

Для случая маленьких коэффициентов диффузии (больших чисел Шмидта) эта граница хорошо аппроксимируется двумя прямыми:

$$Gr_{T_1}^o = \frac{Gr_1 + Gr_2}{1+\frac{1}{Pr}} + \frac{(1+\alpha^2)^3\pi^4}{\alpha^2 Pr};$$

$$Gr_{T_2}^o = \frac{(Gr_1 + Gr_2)\frac{1}{Pr}}{\frac{1}{Sc_1}-\frac{1}{Sc_2}} + \frac{(1+\alpha^2)^3\pi^4}{\alpha^2 Pr}. \quad (12)$$

Эти границы для различных значений параметров задачи изображены на рис.2 и рис.3.

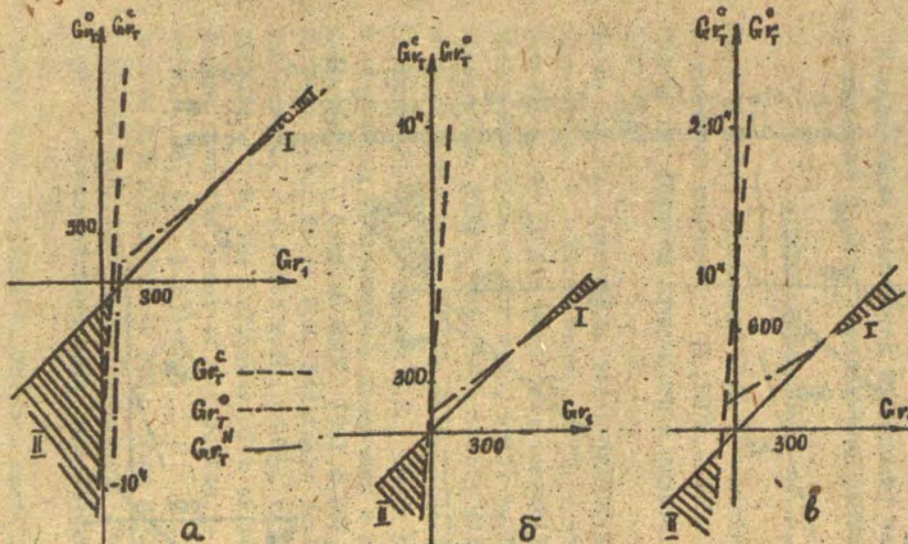

Рис.2. Границы колебательной и монотонной неустойчивости для $Pr=7$, $Sc_1=769$, $Sc_2=625$; $Gr_2=-100$(а), $Gr_2=0$(б), $Gr_2=100$(в).

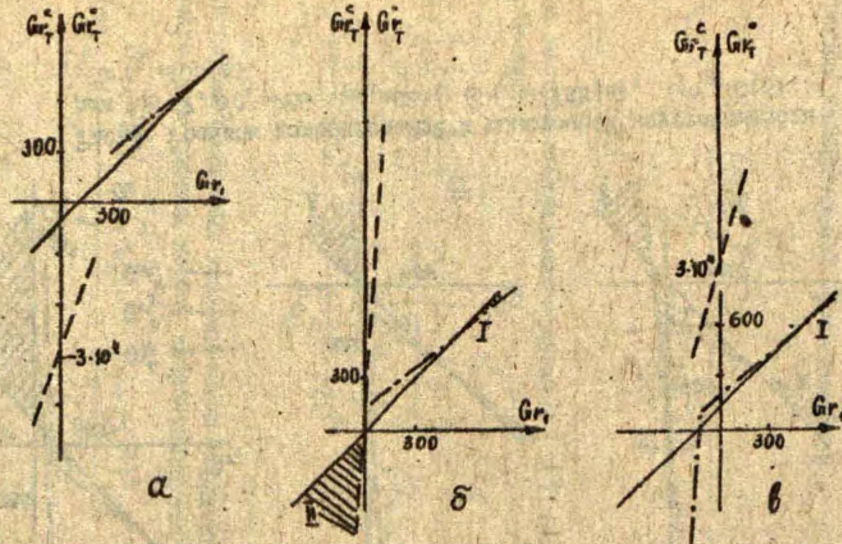

Рис.3. Границы колебательной и монотонной неустойчивости для $Pr = 7$, $Sc_1 = 769$, $Sc_2 = 2222$; $Gr_2 = -100$(а), $Gr_2 = 0$(б), $Gr_2 = 100$(в).

Рассмотренные случаи соответствуют водным растворам натриевой и калиевой соли и натриевой соли и сахара. На рис.2 и рис.3 в областях I наблюдается "парадокс устойчивости", области II соответствуют режимам "солевых пальцев".

В дальнейшем намечается проведение нелинейных расчетов и сравнение с экспериментальными данными.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Гершуни Г.З., Жуховицкий Е.М. Конвективная устойчивость несжимаемой жидкости. М.,1972.- 392с.
2. Тернер Дж. Эффекты плавучести в жидкостях. М., 1977.-432 с.
3. Hurle D.T.J., Jakeman E. Soret-driven thermosolutal convection. - J.Fluid Mech., 1971, v.47, N 4, p.667-687.
4. Veronis G. On finite amplitude instability in thermohaline convection.-J.Mar.Res., 1965, v.23, N 1, p.1-18.
5. Straus J.M. Finite amplitude doubly diffusive convection. - J.Fluid.Mech., 1972, v.56, N 2, p.353-374.
6. Герценштейн С.Я., Родичев Е.Б., Сенин В.Н., Шмидт В.М. О нелинейных конвективных движениях в средах с "двойной диффузией". - Докл.АН СССР, 1981,т.257,№ 3,с.350-354.
7. Huppert H.E., Moore D.R. Nonlinear double diffusive convection. - J.Fluid Mech., 1976, v.78, N 4, p.821-854.
8. Griffiths R.W. The influence of a third diffusing component upon the onset of convection. - J.Fluid Mech., 1979, v.92, N 4, p.659-670.
9. Degens E.T., von Herzen R.P., Wong H.K., Deuser W.G., Jannasch H.W. Lake Kivu: structure, chemistry and biology of a East African rifs lake.-Geo.Remdschan, 1973, v.62, p.245-277.
10. Hurle T.J., Jakeman E. Thermal oscillations and their effect on solidification processes.-Rev.Phys.Techn., 1972, v.3, N 1, p. 3-30.

УДК 519.6

О РАЗВИТИИ НЕУСТОЙЧИВОСТИ КАПЛИ МАГНИТНОЙ ЖИДКОСТИ ПРИ НАЛИЧИИ ОКРУЖАЮЩЕЙ ВЯЗКОЙ СРЕДЫ

А.А.Земитис, А.О.Цеберс
(ЛГУ им.П.Стучки, Институт физики АН ЛатвССР)

Уже почти тридцатилетнюю историю имеют исследования об устойчивости вытеснения одной жидкости другой (см.[3-7]). Экспериментальные, аналитические, численные исследования дали возможность установить, что процесс вытеснения более вязкой жидкости с помощью менее вязкой неустойчив, т.е. приводит к языкообразованию. Нами рассмотрен другой процесс, который приводит к аналогичным явлениям.

В работах [1],[2] с помощью численного эксперимента доказано существование для зажатой капли магнитной жидкости (МЖ) других устойчивых форм,кроме тривиальной - круглой. Установлено также существование нескольких критических значений магнитного числа Бонда (Bm) при которых начинают развиваться неустойчивости различных типов. Так, при $Bm > 20$ магнитная капля может иметь такие относительно устойчивые формы, как гантелеобразную форму нескольких разветвленных форм. Какую именно из возможных форм капля примет, зависит от характера возмущений, которые приданы начальной форме капли. Цель настоящей работы - исследовать, какие еще факторы,кроме характеристик самой капли, внешнего магнитного поля могут повлиять на развитие того или иного типа неустойчивости. Будет показано, что в случае, когда магнитная капля помещена в немагнитную среду с более высокой вязкостью,чем вязкость магнитной капли, то может развиваться неустойчивость такого типа, которая не обусловлена начальными возмущениями капли.

Для исследования выше упомянутых явлений будем использовать следующую математическую модель. Как и в [I], будем считать, что внутри капли $G(t)$ с границей $\Gamma(t)$ усредненная по сечению слоя скорость $\vec{v}$ магнитной жидкости подчиняется уравнению типа Дарси

$$-\alpha_1 \vec{v}_1 - grad\, p_1 + \frac{2M}{h} grad\, \psi_M = 0, \qquad (I)$$

а также условию несжимаемости

$$div\, \vec{v}_1 = 0,$$

где $\alpha_1 = \frac{12\eta_1}{h^2}$, h - толщина слоя, η_1 - вязкость, $M = M(H_0)$ - намагниченность МЖ в намагничивающем внешнем поле H_0, p_1 - давление, ψ_M - значение потенциала собственного магнитного поля МЖ на границе плоского слоя, соответствующей северному полюсу постоянного жидкого магнита - капли МЖ.

$$\psi_M = -M \iint\limits_{G(t)} \left(\frac{1}{|\vec{\rho}_0 - \vec{\rho}|} - \frac{1}{|\vec{\rho}_0 - \rho - h\vec{e}_z|} \right) dS, \qquad (2)$$

где интегрирование осуществляется по поперечному сечению капли, dS - элемент площади. Здесь $\vec{\rho}_0$ - радиус-вектор фиксированной точки, в которой вычисляется ψ_M, $\vec{\rho}$ - радиус-вектор текущей точки интегрирования, $\vec{e}_z$ - единичный орт в направлении оси z (поперек слою).

Вне области $G(t)$, где жидкость магнитными свойствами не обладает, имеем аналогичные уравнения, только без ψ_M и с другой вязкостью:

$$\begin{aligned} -\alpha_2 \vec{v}_2 - grad\, p_2 = 0, \\ div\, \vec{v}_2 = 0. \end{aligned} \qquad (3)$$

На границе соприкосновения обеих жидкостей давление о имеет скачок, равный лапласовскому давлению. Мениском по толщине слоя пренебрегаем.

Из уравнений (I),(3) следует, что общее движение капли МЖ и окружающей ее жидкости потенциально. Потенциал φ выражается так:

$$\varphi(Q) = \begin{cases} -\frac{1}{\alpha_1}\left(p_1 - \frac{2M}{h}\psi_M\right), & Q \in G(t) \\ -\frac{1}{\alpha_2} p_2, & Q \bar{\in} G(t). \end{cases} \qquad (4)$$

Теперь можем сформулировать основную математическую задачу для определения φ :

$$\frac{\partial^2 \varphi_1}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \varphi_1}{\partial y^2} = 0, \ Q \in G(t), \tag{5}$$

$$\frac{\partial^2 \varphi_2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \varphi_2}{\partial y^2} = 0, \ Q \bar{\in} G(t) \tag{6}$$

$$(\alpha_1 \varphi_1(Q) - \alpha_2 \varphi_2(Q))\Big|_{Q \in \Gamma(t)} = -\left(\frac{\sigma}{R_\Gamma} - \frac{2M}{h}\psi_M\right), \tag{7}$$

$$\frac{\partial \varphi_1}{\partial n}\Big|_{Q \in \Gamma(t)} = \frac{\partial \varphi_2}{\partial n}\Big|_{Q \in \Gamma(t)}, \tag{8}$$

$$\frac{\partial x}{\partial t} = \frac{\partial \varphi_1}{\partial x}, \ \frac{\partial y}{\partial t} = \frac{\partial \varphi_1}{\partial y}, \tag{9}$$

$x(s,0) = x^0(s)$, $y(s,0) = y^0(s)$, где $x(s,t)$, $y(s,t)$ — (10) параметрическое представление границы $\Gamma(t)$, в момент времени t, s - параметр $s \in [0, 2\pi]$, $\vec{n}$ - внешняя нормаль к контуру $\Gamma(t)$; σ - коэффициент поверхностного натяжения, R_Γ - кривизна граничного контура $\Gamma(t)$ в соответствующей точке Q. Отметим, что условие (8) выражает непрерывность потока на границе.

При решении задачи (5)-(9) удобно вместо потенциала скорости φ искать функцию тока ψ, обладающую свойствами:

$$\frac{\partial \psi}{\partial x} = -\frac{\partial \varphi}{\partial y}, \ \frac{\partial \psi}{\partial y} = \frac{\partial \varphi}{\partial x}. \tag{11}$$

Если рассматривать точки на границе $\Gamma(t)$ и два перпендикулярных направления $\vec{n}$ - внешняя к $G(t)$ нормаль, $\vec{l}$ - касательная, направленная в положительном направлении обхода контура $\Gamma(t)$ относительно области $G(t)$, то выполняются аналогичные уравнениям (11) соотношения. Здесь только надо дополнительно обозначить сторону, с которой мы приближаемся к границе. Будем ставить "-", если рассматривается предел с внутренности $G(t)$ и

"+"- в противоположном случае. Тогда будем иметь:

$$\left(\frac{\partial\psi}{\partial n}\right)_{\pm} = -\left(\frac{\partial f}{\partial l}\right)_{t}, \left(\frac{\partial\psi}{\partial l}\right)_{\pm} = \left(\frac{\partial f}{\partial n}\right)_{\pm}. \tag{12}$$

Из условий (8) и (11) следует непрерывность функции тока ψ на границе. В таком случае ψ можно искать в виде потенциала простого слоя:

$$\psi(x(s_0,t), y(s_0,t)) = -\frac{1}{2\pi}\oint_{\Gamma(t)} f(s)\ln\sqrt{(x(s,t)-x(s_0,t))^2+(y(s,t)-y(s_0,t))^2}\,dl, \tag{13}$$

где $f(s)$ - плотность потенциала простого слоя, dl - элемент дуги, соответствующий текущей точке $(x(s,t), y(s,t))$. Дифференцируя условие (7) по направлению l и используя соотношения (12), найдем величину скачка для нормальной производной функции ψ :

$$-\left(\alpha_1\left(\frac{\partial\psi}{\partial n}\right)_{-} - \alpha_2\left(\frac{\partial\psi}{\partial n}\right)_{+}\right) = -\frac{\partial}{\partial l}\left(\frac{G}{R_r} - \frac{4M}{h}\psi_M\right). \tag{14}$$

С другой стороны, по теории потенциала ([3]), предельные значения нормальной производной потенциала простого слоя выражаются так:

$$\left(\frac{\partial\psi}{\partial n}\right)_{-} = -\frac{1}{2}f(s_0) + \frac{1}{2\pi}\oint_{\Gamma(t)} f(s)\frac{\partial}{\partial n}\left(\ln\sqrt{(x(s,t)-x(s_0,t))^2+(y(s,t)-y(s_0,t))^2}\right)dl, \tag{15}$$

$$\left(\frac{\partial\psi}{\partial n}\right)_{+} = \frac{1}{2}f(s_0) + \frac{1}{2\pi}\oint_{\Gamma(t)} f(s)\frac{\partial}{\partial n}\left(\ln\sqrt{(x(s,t)-x(s_0,t))^2+(y(s,t)-y(s_0,t))^2}\right)dl. \tag{16}$$

Подставляя (15) и (16) в (14), получим интегральное уравнение для определения плотности потенциала простого слоя:

$$f(s_0) - \frac{\alpha_1-\alpha_2}{(\alpha_1+\alpha_2)\pi}\oint_{\Gamma(t)} f(s)\frac{\partial}{\partial n}\left(\ln\sqrt{(x(s,t)-x(s_0,t))^2+(y(s,t)-y(s_0,t))^2}\right)dl = -\frac{1}{\alpha_1+\alpha_2}\frac{\partial}{\partial l}\left(\frac{G}{R_r} - \frac{4M}{h}\psi_M\right). \tag{17}$$

Теперь исходную задачу можно переписать относительно плотности потенциала простого слоя $f(s)$ и функций параметрического представления границы $\Gamma(t)$ $x(s,t)$ и $y(s,t)$ в следующем виде:

$$f_1(s_0)-\frac{\alpha_1-\alpha_2}{(\alpha_1+\alpha_2)\pi}\int_0^{2\pi} f_1(s)\,\times$$

$$\times\frac{(y(s,t)-y(s_0,t))x'_s(s_0,t)-(x(s,t)-x(s_0,t))y'_s(s_0,t)}{(x(s,t)-x(s_0,t))^2+(y(s,t)-y(s_0,t))^2}ds=-2\frac{\partial \tilde{p}_r}{\partial s},\quad(18)$$

$$\frac{\partial x}{\partial t}=\frac{x'_s(s_0,t)\,f_1(s_0)}{2(x'^2_s(s_0,t)+y'^2_s(s_0,t))}-\frac{1}{2\pi}\int_0^{2\pi} f_1(s)\frac{[y(s,t)-y(s_0,t)]}{(x(s,t)-x(s_0,t))^2+(y(s,t)-y(s_0,t))^2}ds,\quad(19)$$

$$\frac{\partial y}{\partial t}=\frac{y'_s(s_0,t)\,f_1(s_0)}{2(x'^2_s(s_0,t)+y'^2_s(s_0,t))}+\frac{1}{2\pi}\int_0^{2\pi} f_1(s)\frac{x(s,t)-x(s_0,t)}{(x(s,t)-x(s_0,t))^2+(y(s,t)-y(s_0,t))^2}ds,\quad(20)$$

где $f_1(s)=f(s)\cdot\sqrt{x'^2_s(s,t)+y'^2_s(s,t)}\cdot\dfrac{\alpha_1+\alpha_2}{\sigma}\cdot R,$

$$\tilde{p}_r=\frac{1}{R_r}+\frac{B_m R^2}{h^2}\iint\limits_{G(t)}\left(\frac{1}{|\vec{\rho}_0-\vec{\rho}|}-\frac{1}{|\vec{\rho}_0-\vec{\rho}-\frac{h}{R}\vec{e}_z|}\right)dS\qquad(21)$$

$$t>0,\ s\in[0,2\pi]$$

$$x(s,0)=x^0(s),\ y(s,0)=y^0(s).\qquad(22)$$

Эта система написана в безразмерном виде. Обезразмеривание проводилось: для расстояний - по радиусу круга, равному по площади фигуре капли, для давления - по характерному капиллярному давлению для круга $\frac{\sigma}{R}$, для времени $\bar{t}=t\,\frac{\sigma}{R^2(\alpha_1+\alpha_2)}$ (в формулах черта над t опущена), $B_m=\frac{4 M^2 h}{\sigma}$ - магнитное число Бонда, характеризует соотношение магнитных и капиллярных сил.

Отметим, что формулу (21) можно переписать в виде:

$$\tilde{p}_r(s_0)=\frac{x'_s(s_0,t)\,y''_{ss}(s_0,t)-y'_s(s_0,t)\,x''_{ss}(s_0,t)}{(x'^2_s(s_0,t)+y'^2_s(s_0,t))^{3/2}}+$$

$$+\frac{B_m R^2}{h^2}\int\limits_0^{2\pi} \ln \frac{\left|y(s,t)-y(s_0,t)+\sqrt{(x(s,t)-x(s_0,t))^2+(y(s,t)-y(s_0,t))^2}\right|}{\left|y(s,t)-y(s_0,t)+\sqrt{(x(s,t)-x(s_0,t))^2+(y(s,t)-y(s_0,t))^2+\frac{h^2}{R^2}}\right|}\,ds \quad (23)$$

Для решения задачи (18)-(22) используется метод, который изложен в работе [1], поэтому подробно его излагать не будем. Напомним лишь основные этапы. Форма капли в любой момент времени t_0 задается положением N точек - маркеров, с координатами (x_i, y_i), $i=\overline{1,N}$.
По этим точкам строится функции $x(s,t_0)$, $y(s,t_0)$ с помощью кубических сплайнов. После этого вычисляется общая длина контура и находятся новые маркеры $(\bar{x}_i, \bar{y}_i)$, $i=\overline{1,N}$ со свойством, чтобы расстояния по дуге контура между соседними маркерами были одинаковы. Потом численно решается интегральное уравнение (18). Приближенное значение f_{1i}, $i=\overline{1,N}$ относится к узловой точке с номером i, однако необходимые значения функции $\tilde{p}_r$ ищутся в средних точках между двумя маркерами. После нахождения f_{1i} проделываем один шаг по времени по разностной схеме Эйлера для уравнений (19), (20), т.е. определяем положение маркеров для следующего момента времени. После этого можно приступить к осуществлению следующего шага аналогичным образом. Отметим, что выравнивание маркеров существенно. Например, при $B_m = -12$, $h/R = 2$, если выравнивание произвести через каждые 5 временных шагов, то нельзя считать с шагом $\tau = 0.002$, так как появляется неустойчивость - болтанка маркеров. Если же выравнивание производить на каждом временном слое, то счет устойчив.

Если при решении задач, которые изложены в [1], [2], мы старались найти стационарное решение - т.е. получить форму капли, которая со временем больше не меняется, то в этом случае ставился другой принципиальный вопрос - повлияет или не повлияет наличие вокруг капли жидкости с большей вязкостью на развитие таких возмущений, которые в начальный момент времени не имели места. Поясним более подробно

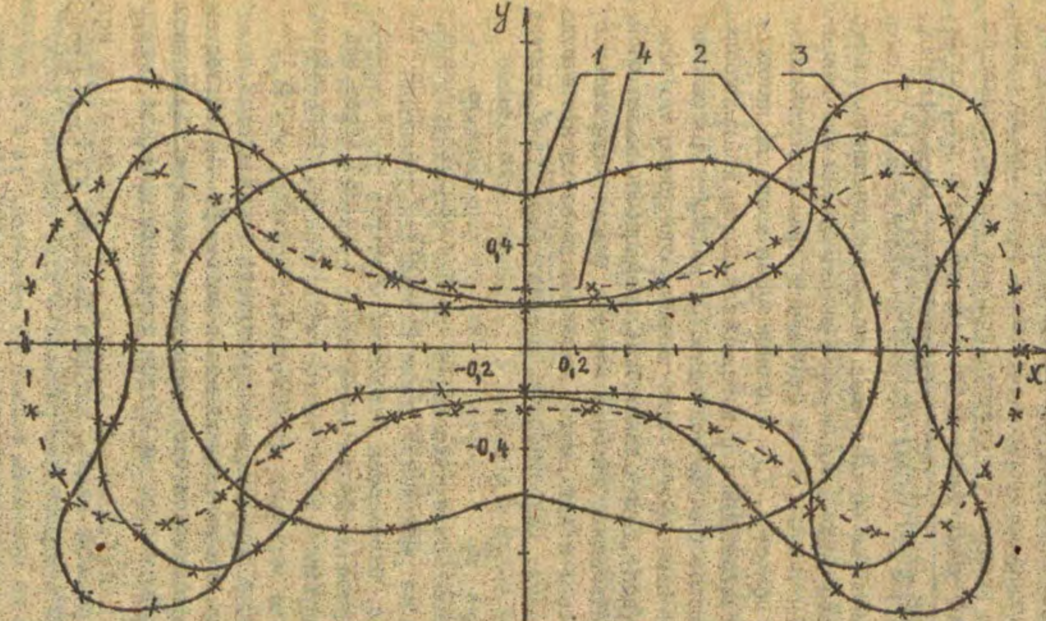

Рис.I.

$B_m = 24$, $\frac{h}{R} = 2$; I- начальное состояние;

$$\left.\begin{aligned} 2 - t &= 0{,}350, \\ 3 - t &= 0{,}520, \end{aligned}\right\} \frac{\alpha_1 - \alpha_2}{\alpha_1 + \alpha_2}; \quad 4 - t = 0{,}370, \ \frac{\alpha_1 - \alpha_2}{\alpha_1 + \alpha_2} = 1.$$

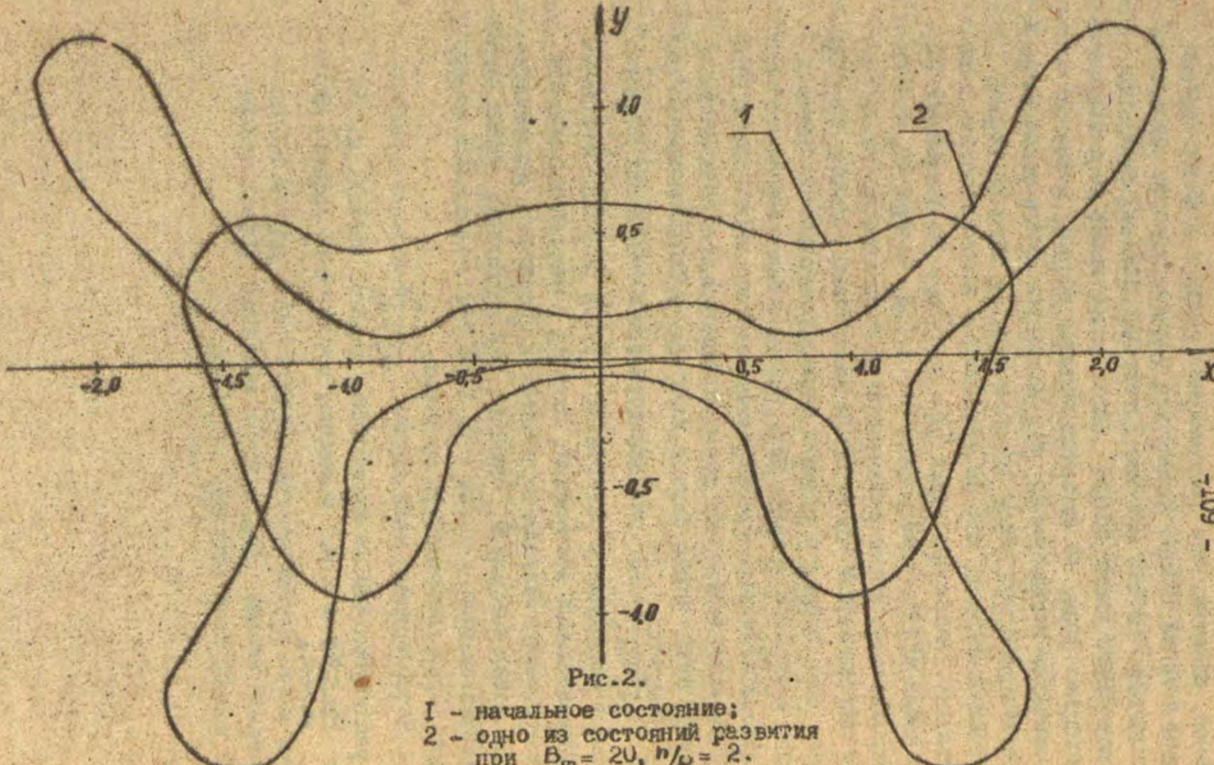

Рис.2.

I - начальное состояние;
2 - одно из состояний развития при $B_m = 20$, $h/R = 2$.

Сравнив задачу (18)-(22) с исследованной ранее в [1-2] задачей, заметим, что стационарные решения в обоих случаях одни и те же. Могут изменяться только скорости выхода на стационар. Но так как при достаточно больших значениях (магнитного числа Бонда) капля может иметь несколько стационарных форм, то остается открытым вопрос, можно ли только изменением коэффициента α_2 заставить выйти каплю на другую стационарную форму по сравнению со случаем $\alpha_2 = 0$. Расчеты показали, что на этот вопрос можно ответить положительно. Например, когда $h/R = 2$, $B_m = 24$, начальная форма капли эллипс с полуосями 0.6 и 1.4, то при $\alpha_2 = 0$ эллипсоидальная форма развивается в гантелеобразную форму. Так как магнитное число Бонда достаточно большое, то получение стационарного решения задачи требовало бы слишком много машинного времени ЭВМ. Однако опыт, полученный при расчетах этих задач, дает возможность заключить, что в этом случае гантелеобразная форма сохранится и в стационарном случае, лишь может быть с изгибом. При рассмотрении случая $\frac{\alpha_1 - \alpha_2}{\alpha_1 + \alpha_2} = -1$ уже для достаточно небольших моментов времени наблюдалось качественно другое развитие начальных эллипсоидальных возмущений. Начиная с некоторого момента времени концы гантели тормозятся и постепенно развиваются в две ветви (см.рис.1). Отметим, что аналогично капля будет развиваться при $\alpha_2 = 0$, если она в начальный момент имеет форму, изображенную на рис.2.

Рассмотренный нами случай $\frac{\alpha_1 - \alpha_2}{\alpha_1 + \alpha_2} = -1$ на практике не реализуем. Однако аналогичная картина наблюдаема уже при $\frac{\alpha_1 - \alpha_2}{\alpha_1 + \alpha_2} = 0.9$. Очевидно, что похожие эффекты наблюдаемы и при других отношениях вязкостей. Другой вопрос - при каких числах B_m и каких начальных формах капли. Этот вопрос пока остается открытым.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

I. Цеберс А.О., Земитис А.А. Численный эксперимент по моделированию МГД неустойчивости свободной поверхности зажатой капли магнитной жидкости. I. - Магнитная гидродинамика, 1983, № 4, с.I5-26.

2. Цеберс А.О. Численный эксперимент по моделированию МГД неустойчивости свободной поверхности зажатой капли магнитной жидкости. II.- Магнитная гидродинамика, 1984, № 2, с.43-46.

3. Тихонов А.Н., Самарский А.А. Уравнения математической физики. М.,1966.- 724с.

4. Мусхелишвили Н.И. Сингулярные интегральные уравнения. М.,1968.- 5IIс.

5. Saffman P.G., Taylor G.I. The penetration of fluid into a porous medium or Hele-Shaw all.-Proceeding of the Royal Society, 1958, № 245, p.312-329.

6. Рыжик В.М., Кисличенко Б.Е. Исследование устойчивости продвижения границы раздела воды и нефти в пористой среде. Физико-геологические факторы при разработке нефтяных и нефтегазоконденсатных месторождений. М.,1969.- 120с.

7. Л.В. Индельман, Р.М.Кац, М.И.Швидлер. Исследование процессов неустойчивости вытеснения с помощью численного моделирования.-В кн.: Численное решение задач фильтрации многофазной несжимаемой жидкости. Новосибирск, 1975, с.97-II4.

УДК 573.3II.5

ЧИСЛЕННОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ВЛИЯНИЯ БОКОВОГО ТОКООТВОДА В МОДЕЛИ ПЕЧИ ЭЛЕКТРОШЛАКОВОГО ПЕРЕПЛАВА

Г.Р.Луринс, А.Ю.Чудновский
(ВЦ ЛГУ им.П.Стучки, Институт физики АН
Латвийской ССР)

В реальных установках электрошлакового переплава (ЭШП) часто наблюдаются пробои электрического тока на стенку кристаллизатора [I]. При этом до 60% тока отводится по схеме: токоподвод- шлаковая ванна - кристаллизатор, и только 40% проходит через металлическую ванну, фронт кристаллизации и слиток. Пробои, как правило, локализуются либо в верхней части шлаковой ванны, либо в районе границы между шлаковой и металлической ваннами, либо в обоих местах одновременно. Исследование влияния этого явления на процессы в шлаковой ванне проводились на основе ртутной модели печи ЭШП, описанной в [2]. Там же приводилась математическая модель и методика численного расчета. В модели явление пробоя моделируется боковым токоотводом, который характеризуется высотой z_c проводящей части боковой стенки - электрода и параметром k, указывающим часть тока, отводимой через нижний электрод.

Численные результаты приведены для цилиндрической ванны, высота которой равна радиусу и равна 0,2 м, при погружении верхнего электрода радиусом 0,I2 м на глубину 0,02 м и токе IА. Литерой "а" помечены рисунки для постоянного тока, а литерой "б" - для переменного с частотой 50 Hz. Сплошными линиями изображена функция гидродинамического тока при $\Psi/|\Psi|_{max}$ =0.9; 0,7; 0,5;0,3. Линии электрического тока при $rH_\varphi/(rH_\varphi)_{max}$ = 0,9; 0,5; 0,I прерывистые (H_φ - угловая компонента интенсивности магнитного пода). Проводились расчеты и плотности джоулевого тепла $Q=(j_r^2+j_z^2)/\sigma$, где σ - электропроводность, j_r , j_z - компоненты плотности электрического тока. Область основного тепловыделения, где

$Q \geq 0{,}1 \cdot Q_{max}$, обведена линией с иголками внутрь.

На рис.I показан случай, когда боковая стенка полностью непроводящая, и весь ток отводится через нижний электрод. Постоянный ток и тепловыделение равномерно распределены по всему объему. Переменный ток концентрируется около острой кромки токоподвода и в нижней части ванны возле стенки из-за скин-эффекта, который сильнее проявляется в электродах. В результате тепло в основном выделяется в тех же местах, что, вероятно, является причиной прожега непроводящей шлаковой корки и пробоя тока на кристаллизатор в реальных устройствах ЭШП. На рис.2. вся боковая поверхность электропроводящая. При этом часть тока идет по схеме: токоподвод - ванна - нижний электрод, а другая часть - по схеме: токоподвод - ванна - стенка - ванна - нижний электрод. В случае постоянного тока по второй схеме идет примерно 30% всего тока. В результате область основного тепловыделения и интенсивность электровихревого течения (ЭВТ) несколько уменьшились (рис.2.а). 70% переменного тока идет через стенку, поэтому ЭВТ значительно ослаблено, и центр ее переместился ближе к свободной поверхности и боковой стенке. Тепло в основном выделяется у края верхнего электрода вплоть до бокового электрода, хотя имеется небольшая область интенсивного тепловыделения в самом нижнем углу ванны (рис.2.б). На рис.3. в отличие от рис.2, только 40% всего тока отводится через нижний электрод, а остальная часть - с боковой стенки. И в этом случае некоторая часть переменного тока возвращается из стенки в ванну и отводится через нижний электрод, несмотря на боковой токоотвод. Для постоянного тока этого не наблюдается. Интенсивность ЭВТ несколько возросла (по сравнению с рис.I.а, 2.а) , но ее характер практически не изменился. Зона основного тепловыделения при этом окружает верхний электрод, что и требуется в реальном процессе ЭШП (3.а). Для переменного тока ЭВТ практически такое же, как на рис.2.б, а тепловыделение происходит в основном у края токоподвода

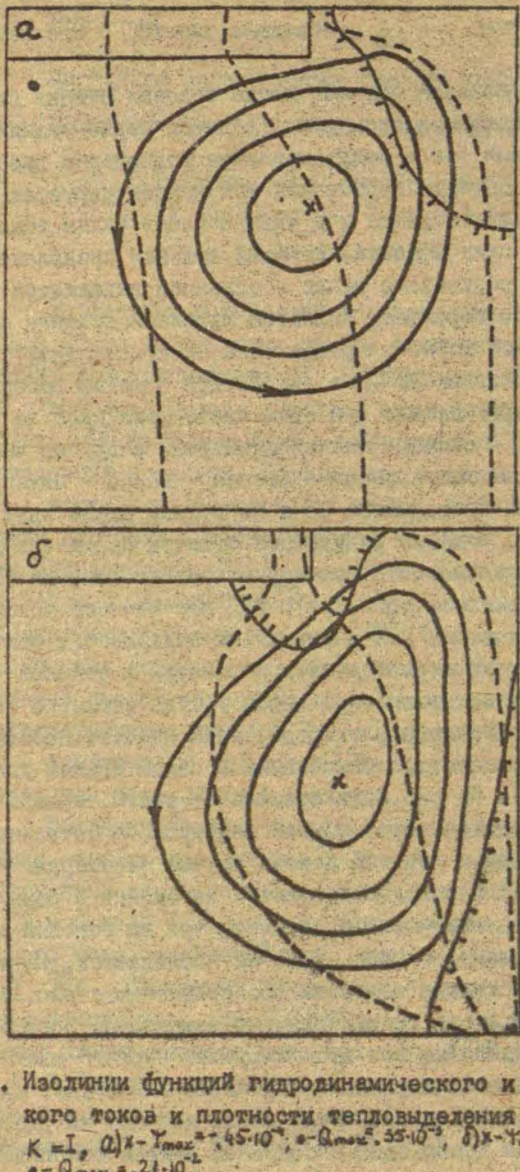

Рис.I. Изолинии функций гидродинамического и электрического токов и плотности тепловыделения при $Z_c = 0$, $K = I$, а) $x - \Psi_{max} = -.45 \cdot 10^{-4}$; $\bullet - Q_{max} = .55 \cdot 10^{-3}$, б) $x - \Psi_{max} = -.19 \cdot 10^{-4}$, $\bullet - Q_{max} = .21 \cdot 10^{-2}$.

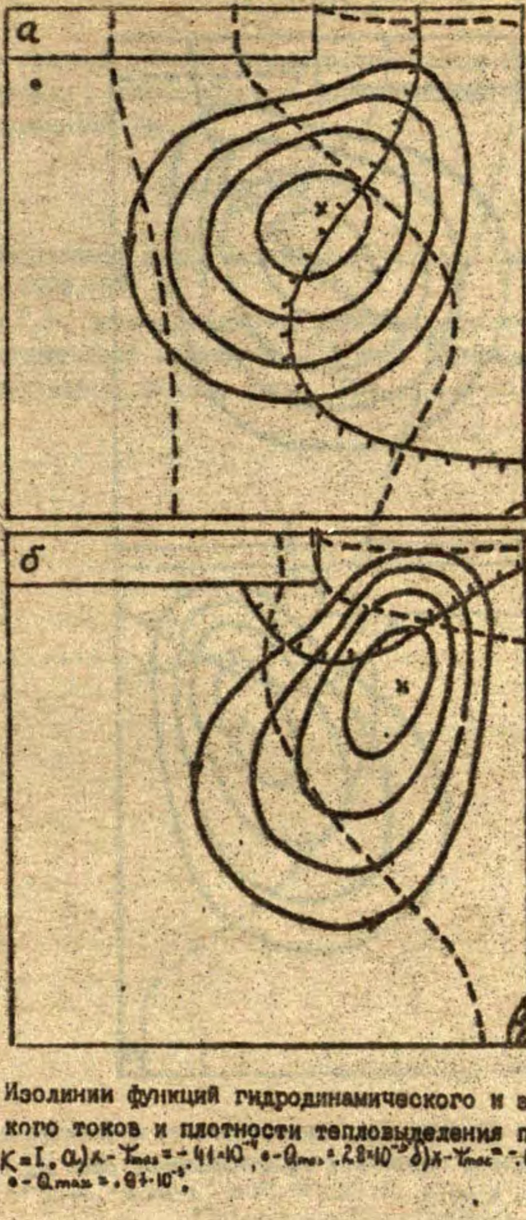

Рис.2. Изолинии функций гидродинамического и электрического токов и плотности тепловыделения при $z_c = 0.2$м. $K = 1$, а) x - $\Psi_{max} = -.41 \cdot 10^{-4}$, • - $Q_{max} = .28 \cdot 10^{-3}$ б) x - $\Psi_{max} = -.14 \cdot 10^{-4}$, • - $Q_{max} = .97 \cdot 10^{-3}$.

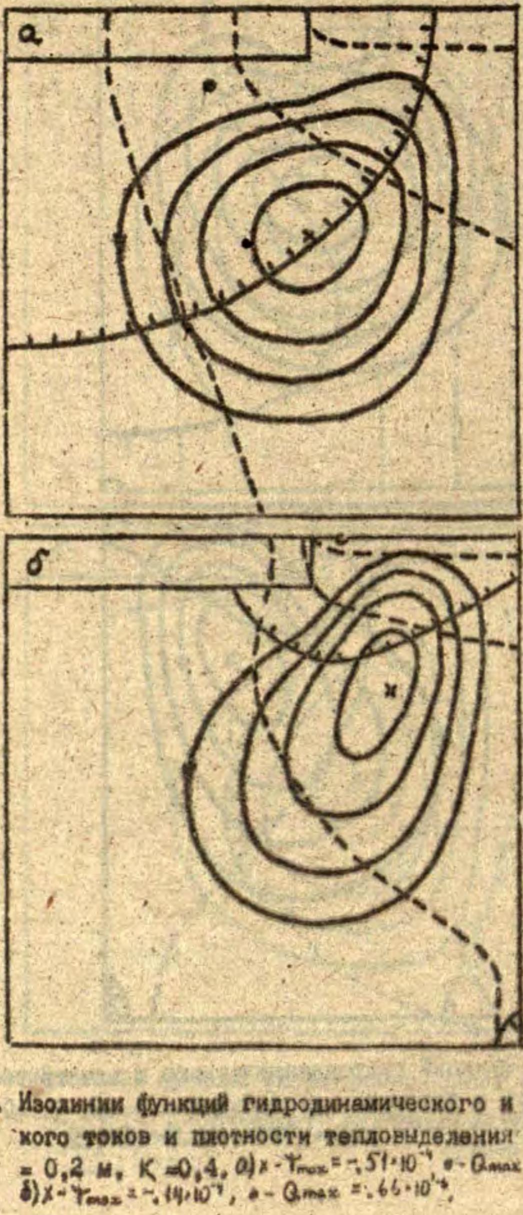

Рис.3. Изолинии функций гидродинамического и электрического токов и плотности тепловыделения при Z_c = 0,2 м, K =0,4, а) x - Ψ_{max} = -,51·10^{-4}, $\bullet$ - Q_{max} = ,34·10^{-5}, б) x - Ψ_{max} = -,14·10^{-4}, $\bullet$ - Q_{max} = ,66·10^{-4}.

вплоть до боковой стенки. Такое распределение тепловыделения и приводит к конусообразной форме плавящегося слитка в реальном процессе ЭШП.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Электрошлаковые печи./Под ред.Б.Е.Патона. Киев, 1979.-337 с.
2. Дуринс Г.Р. Численный расчет движения жидкости в модели электрошлакового переплава. - В кн.: Прикладные задачи математической физики. Рига, 1983, с.142-151.

УДК 536.21.548

ВЛИЯНИЕ АНИЗОТРОПИИ ТЕПЛОПРОВОДНОСТИ НА ТЕМПЕРАТУРНОЕ ПОЛЕ

Р.А.Якушенок

(ВЦ ЛГУ им.П.Стучки)

При выращивании монокристаллов методом Чохральского приходится учитывать большое количество разнообразных физических явлений, среди которых основную роль играет теплообмен. Обычно при моделировании используется изотропное уравнение теплопроводности, что вполне оправдано для монокристаллов кубической симметрии. Однако на практике иногда приходится иметь дело с анизотропными кристаллами, для чего необходима оценка влияния анизотропии на температурное поле.

Применительно к методу Чохральского следует рассматривать анизотропный теплоперенос в цилиндрической системе координат в отличие от обычного рассмотрения в декартовой системе координат [1,2]. В этом случае температурное поле при отсутствии источников тепла описывается следующим уравнением:

$$\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}\left[r\left(\bar{K}_{11}\frac{\partial U}{\partial r}+\bar{K}_{12}\frac{1}{r}\frac{\partial U}{\partial \varphi}+\bar{K}_{13}\frac{\partial U}{\partial z}\right)\right]+$$

$$+\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial \varphi}\left(\bar{K}_{21}\frac{\partial U}{\partial r}+\bar{K}_{22}\frac{1}{r}\frac{\partial U}{\partial \varphi}+\bar{K}_{23}\frac{\partial U}{\partial z}\right)+ \qquad (1)$$

$$+\frac{\partial}{\partial z}\left(\bar{K}_{31}\frac{\partial U}{\partial r}+\bar{K}_{32}\frac{1}{r}\frac{\partial U}{\partial \varphi}+\bar{K}_{33}\frac{\partial U}{\partial z}\right)=0,$$

где $\begin{pmatrix}\bar{K}_{11} & \bar{K}_{12} & \bar{K}_{13}\\ \bar{K}_{21} & \bar{K}_{22} & \bar{K}_{23}\\ \bar{K}_{31} & \bar{K}_{32} & \bar{K}_{33}\end{pmatrix}$ - тензор теплопроводности, связанный с соответствующим тензором в декартовых координатах определенными соотношениями.

В работе рассматривается тензор теплопроводности, который в декартовой системе координат, совпадающей с главными осями кристалла, имеет только три составляющие, из которых две равны между собой:

$$\begin{pmatrix} K_1 & 0 & 0 \\ 0 & K_1 & 0 \\ 0 & 0 & K_1 \end{pmatrix}.$$

Тензор такого вида соответствует кристаллам тетрагональной системы.

В дальнейшем будем считать, что

$$\frac{|K_1 - K_3|}{K_1} \ll 1,$$

т.е. K_3 мало отличается от K_1 .

В декартовой системе координат, получаемой поворотом осей так, чтобы старая ось z' образовывала бы с новыми осями x , y , z углы, косинусы которых C_x , C_y , C_z, этот тензор будет иметь следующий вид:

$$\begin{pmatrix} K_1 - C_x^2 (K_1 - K_3) & -C_x C_y (K_1 - K_3) & -C_x C_z (K_1 - K_3) \\ -C_x C_y (K_1 - K_3) & K_1 - C_y^2 (K_1 - K_3) & -C_y C_z (K_1 - K_3) \\ -C_x C_z (K_1 - K_3) & -C_y C_z (K_1 - K_3) & K_1 - C_z^2 (K_1 - K_3) \end{pmatrix}.$$

Затем в цилиндрической системе отсчета при совпадающих осях z получим:

$$K_1 \left[\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} - \right.$$

$$\left. -\varepsilon \begin{pmatrix} (1-C_z^2)\sin^2(\alpha+\varphi) & (1-C_z^2)\sin(\alpha+\varphi)\cos(\alpha+\varphi) & C_z\sqrt{1-C_z^2}\,\sin(\alpha+\varphi) \\ (1-C_z^2)\sin(\alpha+\varphi)\cos(\alpha+\varphi) & (1-C_z^2)\cos^2(\alpha+\varphi) & C_z\sqrt{1-C_z^2}\,\cos(\alpha+\varphi) \\ C_z\sqrt{1-C_z^2}\,\sin(\alpha+\varphi) & C_z\sqrt{1-C_z^2}\,\cos(\alpha+\varphi) & C_z^2 \end{pmatrix} \right],$$

где $\mathcal{E} = \frac{K_1 - K_3}{K_1}$,

$$\sin\alpha = \frac{C_x}{\sqrt{C_x^2 + C_y^2}}\ ; \quad \cos\alpha = \frac{C_y}{\sqrt{C_x^2 + C_y^2}}.$$

и учтено $C_x^2 + C_y^2 + C_z^2 = 1$.

Если обозначить

$$\sqrt{\frac{1 - C_z^2}{C_z^2}}\,\sin(\alpha + \varphi) = A(\varphi)$$

$$\sqrt{\frac{1 - C_z^2}{C_z^2}}\,\cos(\alpha + \varphi) = B(\varphi),$$

а в определении $\mathcal{E}$ включить C_z^2 множителем, то тензор теплопроводности можно записать следующим образом:

$$K_1\left[\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} - \mathcal{E}\begin{pmatrix} A^2 & A\cdot B & A \\ AB & B^2 & B \\ A & B & 1 \end{pmatrix}\right] =$$

$$= K_1\left[\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} - \mathcal{E}\begin{pmatrix} A & 0 & 0 \\ B & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} A & B & 1 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}\right]. \qquad (2)$$

Далее уравнение (I) можно переписать в операторном виде:

$$(\Delta - \mathcal{E}Q)U = 0, \qquad (3)$$

где $\Delta = \frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}\left(r\frac{\partial}{\partial r}\right) + \frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial \varphi^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}$ - обычный

оператор Лапласа в цилиндрической системе отсчета, а

$$Q = S^2 = \left[A(\varphi)\frac{\partial}{\partial r} + B(\varphi)\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial \varphi} + \frac{\partial}{\partial z}\right]^2.$$

Учитывая, что $\mathcal{E}$ считается малым, можно искать температуру в виде разложения по $\mathcal{E}$

$$U = U_0 + \mathcal{E} U_1 + \mathcal{E}^2 U_2 + \dots,$$

где U_0; U_1; $U_2, \dots$ должны удовлетворять следующим уравнениям:

$$\Delta U_0 = 0$$

$$\Delta U_1 = Q U_0$$

$$\Delta U_2 = Q U_1.$$

Для определения температурного поля необходимо знать также и граничные условия. В этой связи предлагается следующая модельная задача. Предполагается, что в стержне имеются два горизонтальных сечения, на которых температура может считаться постоянной и заданной. Для боковой поверхности задается поток тепла, пропорциональный разности температуры между поверхностью и окружающей средой, причем температура последней пропорциональна координате z. Таким образом, получаем:

$$U\big|_{z=0} = U_0$$

$$U\big|_{z=l} = U_l,$$

где U_0 и U_l значения температуры на торцах стержня. Поток тепла через боковую поверхность

$$q_r = h\left[U - \left(U_0 - \frac{U_0 - U_l}{l} z\right)\right]_{r=R},$$

где h - коэффициент теплообмена, l - длина стержня, R - радиус стержня. В нашем случае поток записывается следующим образом:

$$q_r = -\left(\bar{K}_{11}\frac{\partial U}{\partial r} + \bar{K}_{12}\frac{1}{r}\frac{\partial U}{\partial \varphi} + \bar{K}_{13}\frac{\partial U}{\partial z}\right) =$$

$$= -K_1\left\{\frac{\partial U}{\partial r} - \varepsilon A(\varphi)\left[A(\varphi)\frac{\partial U}{\partial r} + B(\varphi)\frac{1}{r}\frac{\partial U}{\partial \varphi} + \frac{\partial U}{\partial z}\right]\right\},$$

или в операторном виде:

$$q_r = -K_1\left[P - \varepsilon A(\varphi) S\right]U,$$

где

$$P = \frac{\partial}{\partial r}.$$

Далее можно записать для нахождения $U_0; U_1; U_2; \ldots$ ряд краевых задач:

1) $\Delta U_0 = 0$

$$\frac{\partial U}{\partial r} + H U_0 = H\left(U_0 - \frac{\mathcal{U}_0 - \mathcal{U}_e}{e}\right)\Big|_{r=R}$$

$$U_0\big|_{z=0} = \mathcal{U}_0$$

$$U_e\big|_{z=1} = \mathcal{U}_e\ ;$$

2)

$$\Delta U_1 = Q U_0$$

$$\frac{\partial U_1}{\partial r} + H U_1 = A(\varphi) S U_0\big|_{r=R}$$

$$U_1\big|_{z=0} = U_1\big|_{z=e} = 0$$

и так далее.

Здесь $H = h/K_1$.

Функция $U_0 = \mathcal{U}_0 - \dfrac{\mathcal{U}_0 - \mathcal{U}_e}{e} z$

удовлетворяет первой из этих задач.

Далее следует, что

$$S U_0 = -\frac{U_0 - U_e}{l}$$

$$Q U_0 = 0$$

и можно приступ"ть к нахождению U_1 .

Эту функцию будем писать в форме:

$$U_1 = -v(r,z)\sqrt{\frac{1-C_z^2}{C_z^2}}(U_0 - U_e)\sin(\alpha + \varphi).$$

Тогда для $v(r,z)$ олучим:

$$\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r} r \frac{\partial v}{\partial r} - \frac{v}{r^2} + \frac{\partial^2 v}{\partial z^2} = 0$$

$$v\Big|_{z=0} = v\Big|_{z=l} = 0$$

$$\frac{\partial v}{\partial r} + Hv = \frac{1}{l}\Big|_{r=R}.$$

Используя метод разделения переменных, находим, что

$$v = \sum_{k=1}^{\infty} D_{2k-1} I_1\left(\frac{2k-1}{l}\pi r\right)\sin\left(\frac{2k-1}{l}\pi z\right),$$

где

$$D_{2k-1} = \frac{4}{\pi}\frac{1}{2k-1} \Big/ \left[(2k-1)\lambda I_0\left(\frac{2k-1}{l}\pi k\right) - \left(\frac{l}{R} - lH\right)\right]\left(\frac{2k-1}{l}\pi k\right.$$

I_0 и I_1 - модифицированные функции Бесселя.

Если считать параметр ε достаточно малым и ограничиться только членом первой с.епени ε , то температурное поле запишется следующим соотношением:

$$U = U_0 - \frac{U_0 - U_e}{\ell} z = \frac{K_1 - K_3}{K_1} C_z \sqrt{1 - C_z^2} (U_0 - U_e) \sin(2+\varphi) V(r; z); \quad (4)$$

Из этого соотношения видно, что добавка к температурному полю из-за анизотропии зависит от множителя

$$\frac{K_1 - K_3}{K_1} \cdot \frac{1}{2} \sin 2\gamma,$$

где γ - угол между направлением выращивания кристалла и кристаллографической осью, и является наибольшим при $\gamma = 45^0$. Величину добавки определяет также значение функции $V(r; z)$, максимум которой, очевидно, достигается в точке $r = R; z = \ell/2$. Анализ величины $V(R; \ell/2) = V_{max}$ затруднителен аналитическими методами. Для вычисления этой функции была составлена программа на языке ФОРТРАН для реализации на ЭВМ СМ-4, с помощью которой в любом конкретном случае может быть произведен расчет.

Применительно к выращиванию кристаллов была проведена следующая приблизительная оценка. В этом случае обычно теплоотдачу от поверхности рассчитывают по закону Стефана-Больцмана:

$$K_1 \frac{\partial U}{\partial r} = \delta \sigma (U_\infty^4 - U^4),$$

где δ - степень черноты, $\sigma = 5{,}67 \cdot 10^{-12} \frac{\text{Вт}}{\text{см}^2 K^4}$ - постоянная Стефана-Больцмана, U_∞ - температура окружающей среды. Если это соотношение записать в линейном приближении

$$\frac{\partial U}{\partial r} = \frac{\delta \sigma}{K_1} U^3 \left(-U + \frac{U_\infty^4}{U^3}\right),$$

вместо U^3 используя среднюю по стержню температуру U_*^3 (950K)^3, и взять $\delta = 0{,}1$, а $K_1 = 0{,}03$ Вт/см·К, то получим H 150 см$^{-1}$.

Далее: взяв слиток с размерами R =2,3 см ℓ =2,4 см, можно посчитать значения $\vartheta(r;z)$. На рис.1 показаны изолинии этой функции, причем $\vartheta_{max} \approx 2{,}2 \cdot 10^{-3}$. Это дает основание считать, что влияние анизотропии на температурное поле в этом случае ничтожно мало, если еще учесть, что для реального материала K_1 и K_3 не могут отличаться на несколько порядков.

Однако, в случае, если H=0, т.е. на поверхности имеется условие теплоизоляции, которое обычно налагается при прозрачном кристалле, то значение $\vartheta_{max} \approx 0{,}3$. Изолинии $\vartheta(r;z)$ для этого случая изображены на рис.2. Ввиду относительно большого значения ϑ_{max}, можно заключить, что проявления тепловой анизотропии может оказаться существенным.

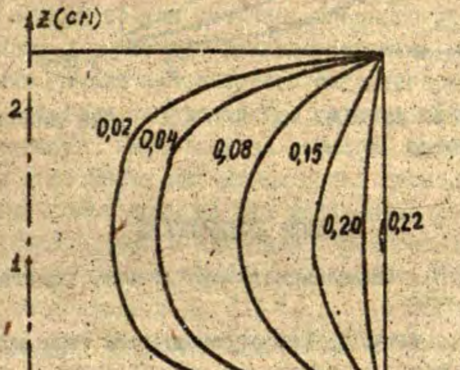

Рис.1. Изолинии функции $\vartheta(r;z)\cdot 10^2$ при значении параметра H =150 см$^{-1}$.

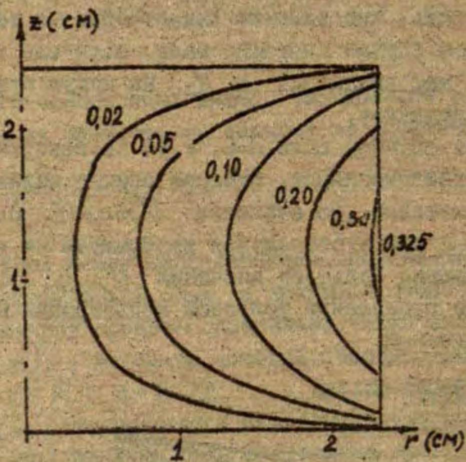

Рис.2. Изолинии функции $V(r;z)$ при значении параметра H =0.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Сиротин Ю.И., Шаскольская М.П. Основы кристаллофизики. М., 1975.- 680 с.
2. Карслоу Г., Егер Д. Теплопроводность твердых тел. М., 1964.- 487 с.

УДК 537.84; 548

ВЛИЯНИЕ ПРОДОЛЬНОГО МАГНИТНОГО ПОЛЯ НА ЕСТЕСТВЕННУЮ КОНВЕКЦИЮ В МОДЕЛИ ПРОЦЕССА ЧОХРАЛЬСКОГО

Ю.М.Гельфгат, Л.А. Горбунов (Институт физики АН Латвийской ССР), И.В. Старшинова, В.А.Смирнов (ГИРЕДМЕТ), И.В. Фрязинов (ИПМ им. М.В. Келдыша АН СССР)

При выращивании объемных монокристаллов из расплавов интенсивность, конфигурация и устойчивость конвективных потоков в значительной степени определяют качество и процент выхода годного материала. Поскольку в большинстве случаев расплавы исходных компонентов обладают электропроводностью металлов, для целенаправленного управления гидродинамическими характеристиками указанных потоков в последнее время начали использовать магнитогидродинамические методы воздействия на проводящую жидкость [I].

В частности, наложение на расплавы полупроводниковых материалов постоянных магнитных полей приводило к повышению качества получаемых из них монокристаллов за счет снижения неоднородностей и микронеоднородностей распределения легирующих и фоновых примесей, уменьшения полосчатости, плотности дислокаций и др. [2-5].

Однако все исследования ограничивались получением конкретных опытных данных без попыток физического и численного анализа закономерностей взаимодействия магнитного поля с конвективными потоками. Поэтому очевидно, что для определения рациональных режимов выращивания монокристаллов с МГД-воздействием на расплав необходима разработка теоретической модели такого рода процессов и методики численных оценок требуемых параметров магнитного поля.

Цель настоящей работы заключалась в создании методики численного расчета влияния постоянного продольного (по отношению к оси растущего кристалла) магнитного поля на естественную конвекцию в модели процесса Чохральского, сравнении теоретических данных с результатами критериальных оценок, получаемых на основе теории подобия, и их сопоставлении с экспериментом.

На рис. I представлена схема расчетной модели. Здесь $R_к$ - радиус монокристалла, $R_т$ - радиус тигля, H_p - высота расплава в тигле, B_z - индукция однородного продольного магнитного поля.

Для описания процессов, происходящих в расплаве, используется система нестационарных уравнений Навье-Стокса в переменных функциях тока ψ - вихрь ω в сочетании с уравнением конвективной теплопроводности, записанных в цилиндрической системе координат (r, φ, z):

$$\frac{\partial \omega}{\partial t} + \frac{1}{r}\left[\frac{\partial}{\partial r}(u'\omega) + \frac{\partial}{\partial z}(w'\omega)\right] = \frac{1}{r}\left[\frac{\partial}{\partial r}\left(\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}(r^2\omega) + \frac{\partial}{\partial z}\left(\frac{1}{r} + \frac{\partial}{\partial z}(r^2\omega)\right)\right)\right] + \frac{Gr}{r}\frac{\partial T}{\partial r} - Ha^2\left(\frac{1}{r}\frac{\partial^2\psi}{\partial z^2}\right);$$

$$\omega = -\frac{1}{r}\left[\frac{\partial}{\partial r}\left(\frac{1}{r}\frac{\partial \psi}{\partial r}\right) + \frac{\partial}{\partial z}\left(\frac{1}{r}\frac{\partial \psi}{\partial z}\right)\right]; \qquad (1)$$

$$\frac{\partial T}{\partial t} + \frac{1}{r}\left[\frac{\partial}{\partial r}(u'T) + \frac{\partial}{\partial z}(w'T)\right] = \frac{1}{Pe\, r}\left[\frac{\partial}{\partial r}\left(r\frac{\partial T}{\partial r} + \frac{\partial}{\partial z}\left(r\frac{\partial T}{\partial z}\right)\right)\right];$$

$$u' = \frac{\partial \psi}{\partial z}\frac{1}{r}; \qquad w' = \frac{\partial \psi}{\partial r}\cdot\frac{1}{r}.$$

Здесь: $Gr = \frac{\beta g \Delta T R_K^3}{\rho \nu}$ - число Грасгофа; $Pe = \sqrt{Gr}\, Pr$ - число Пекле; $Pr = a/\nu$ - число Прандтля; $Ha = B_z R_K \sqrt{\sigma/\rho\nu}$ - - число Гартмана. Соответственно, ρ , ν , σ , β , a - плотность, кинематическая вязкость, электропроводность, коэффициент объемного расширения и коэффициент температуропроводности расплава. ΔT - характерный перепад температур в расплаве, B_z - индукция внешнего магнитного поля.

При решении задачи использовались следующие краевые

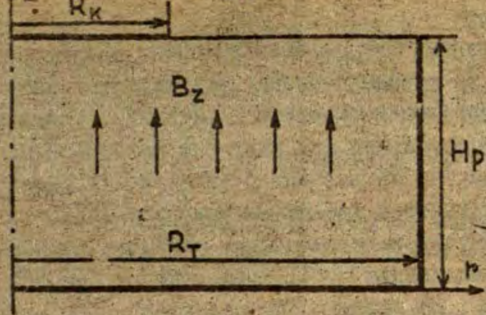

Рис. I. Схема расчетной модели.

Рис. 2. Картины течения жидкости в тигле при различных значениях индукции магнитного поля. а) B_z =0,6 Т; б) B_z =0,4 Т; в) B_z =0,2 Т; г) B_z =0.

условия. Функция тока на всех границах исследуемой области равна нулю. На твердых стенках для вертикальной и горизонтальной составляющих скорости справедливо условие прилипания. Граничное условие для вихря на свободной поверхности расплава получено из условия равенства нулю касательных составляющих вектора вязких напряжений. Тепловые граничные условия сформулированы следующим образом: температура на фронте кристаллизации $T_K = T_1$, температура боковой стенки тигля $T_T = T_2$, на поверхности расплава и дне тигля тепловой поток равен нулю. На оси тигля граничные условия для всех функций ставились из осевой симметрии задачи. Все величины нормировались, и задача решалась в безразмерном виде.

При численном решении задачи особое внимание было уделено консервативности используемых разностных схем. Наилучшей оказалась схема, которая не давала вклада в баланс энергии при введении переменной математической вязкости в сеточные уравнения [6,7]. Эта схема и была использована для решения задачи. Построение схемы осуществлено методом баланса /интегро-интерполяционным методом/. Для решения разностной задачи использован метод переменных направлений.

Расчетная область разбивалась неравномерной сеткой /41х41/. У твердых границ сетки строились так, чтобы в гидродинамический пограничный слой попадало 3-5 узлов сетки.

Для выбранной разностной схемы всегда выполняется условие принципа максимума.

Расчеты проводились с аппроксимациями краевых условий для вихря на твердых стенках по формулам Тома. Уравнение для функции тока на каждом временном шаге решалось итерационным методом переменных направлений с выбором оптимальных параметров по Жордану [6].

В расчете использовались следующие физические константы и геометрические размеры расчетной области: кинематическая вязкость $\nu = 3{,}1 \cdot 10^{-7}$ м^2/сек; температура кристаллизации $T_к = 10{,}5^\circ$C; коэффициент температурного расширения $\beta = 2{,}37.10^{-4}$ I/град; плотность $\rho = 6397$ кг/м^3; электропроводность $\sigma = 3{,}25.10^6$ I/ом.м; радиус кристалла $R_к = 0{,}015$ м; радиус тигля $R_т = 0{,}032$ м; высота расплава $H_р = 0{,}059$ м; $T_1 = 20°C$, $T_2 = 30°C$, $\Delta T = 10°C$.

Значения критериев были следующими: $Pe = 2{,}26.10^{-2}$; $Gr = 8{,}08.10^5$.

Расчеты проводились для различных значений величин индукции продольного магнитного поля B_z в интервале $0 \leq B_z \leq 0{,}6$.

На рис. 2 представлены полученные поля функции тока (картины течения расплава) в жидкости, на рис. 3 - поля температур для соответственно значений: а) $B_z = 0{,}6$ Т, б) $B_z = 0{,}4$ Т, в) $B_z = 0{,}2$ Т и г) $B_z = 0$.

Видно, что интенсивность течения расплава, вызванного естественной конвекцией, падает с увеличением индукции магнитного поля с $\psi_{max} = 1{,}4.10^{-6}$ м^3/сек при $B_z = 0$ до $\psi_{max} = 3{,}6.10^{-9}$ м^3/сек при $B_z = 0{,}6$ Т. Особенно резкое изменение интенсивности течения наблюдается в диапазоне изменения B_z от 0 до 0,2 Т.

Существенно влияет магнитное поле и на распределение температур в расплаве - рис. 3. Расчеты показывают, что при индукции магнитного поля $B_z \approx 0{,}4 \div 0{,}6$ Т конвективный теплоперенос уже сравним с молекулярным.

На рис. 4 представлена безразмерная зависимость горизонтальной составляющей скорости под кромкой кристалла от критерия Ha. Здесь u -скорость при $B_z = 0$, u_B - при $B_z \neq 0$. Наибольшее изменение скорости течения жидкости наблюдается на участке $0 < Ha < 100$, что свидетельствует об асимптотическом характере эффекта действия магнитного поля.

Экспериментальная проверка полученных результатов проводилась на специально созданной для этой цели установке рабочей жидкостью, которой служил эвтектический сплав индий-галлий-олово. (Физические параметры этого сплава соответствуют приведенным данным). Термод, моделирующий фронт кристаллизации, был изготовлен из меди и охлаждался до требуемой температуры термостатированной водой.

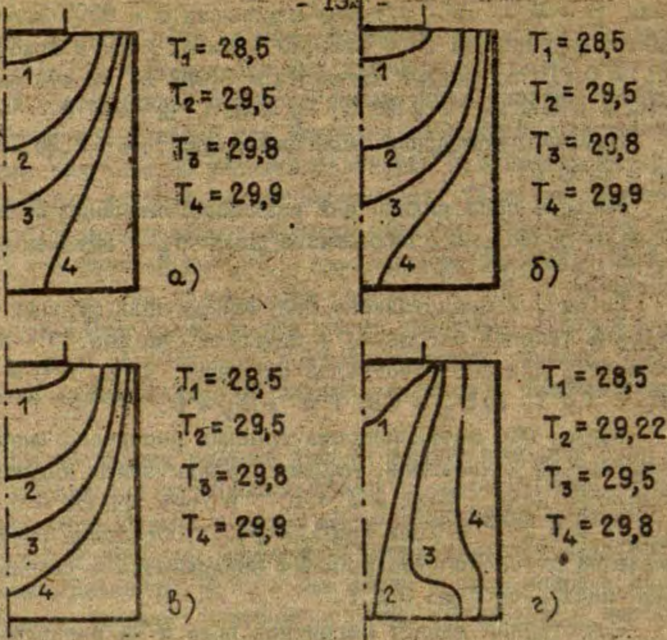

Рис. 3. Температурные поля в жидкости (T^oC) при различных значениях индукции магнитного поля.
а) B_z =0,6 Т; б) B_z =0,4 Т; в) B_z =0,2 Т; г) B_z =0.

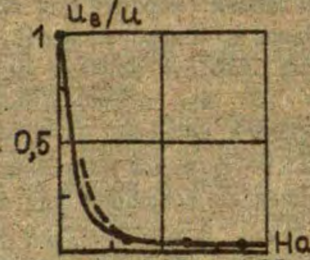

Рис. 4. Зависимость безразмерной горизонтальной составляющей скорости в точке (r =15 мм, z = =58 мм) от числа Гартмана .

Нагрев боковых стенок модели осуществлялся нихромовым нагревателем. Дно и поверхность расплава были теплоизолированными.

Сравнение расчетных и экспериментальных результатов проводилось путем сопоставления теоретических и полученных в опытах температурных полей. Вполне удовлетворительное совпадение данных имело место при $B_z \geqslant 0{,}4$ Т. В частности, при $B_z = 0{,}6$ Т экспериментально замеренное распределение температур соответствует рис. 3а. Таким образом, можно считать, что рассмотренная теоретическая модель достаточно адекватно описывает реальный процесс и может быть использована при создании более общей математической модели процесса Чохральского в магнитном поле.

Сопоставим далее результаты численного расчета с данными простых количественных оценок, выполненных на основе критериального анализа рассматриваемого процесса. В работе [8] показано, что влияние постоянного магнитного поля на изменение скорости конвективных течений может быть учтено с помощью следующего критериального выражения:

$$\frac{u}{u_B} = \frac{Ha^2}{Re} = \frac{Ha^2}{\sqrt{Gr}} = N, \qquad (2)$$

где $N = \sigma B^2 R_T / \rho u$ параметр МГД-взаимодействия, $Re = u R_T / \nu$ - - число Рейнольдса.

Значения скоростей, рассчитанные по (2), нанесены на рис. 4 штриховой линией. Ход зависимостей $u_B / u = f(Ha)$ свидетельствует, что при $Ha \geqslant 50$ и $N \geqslant 2{,}8$ результаты численного расчета и критериальных оценок достаточно хорошо согласуются между собой. Это означает, что использование такого рода оценок для приближенных расчетов вполне правомерно и, начиная с $Ha > 50$ может дать правдоподобные результаты.

Отметим, что подавление магнитным полем естественной конвекции приводит расплав, из которого выращивается монокристалл, к состоянию, характерному для условий невесомости, когда ускорение силы тяжести стремится к нулю. Поэтому полученные ранее результаты могут представлять интерес для анализа процессов космической технологии.

При этом очевидно, что анализ всех особенностей процесса Чохральского (вынужденной и термокапиллярной конвекций, массопереноса легирующих и фоновых примесей и др.), требует постановки и решения полной задачи с учетом влияния на эти явления магнитного поля.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Гельфгат Ю.М., Лиелаусис О.А., Щербинин Э.В. Жидкий металл под действием электромагнитных сил. - Рига, 1976. - 248 с.
2. Hoshikawa K. Czochralski Silicon Crystal Growth in the Vertical Magnetic Field. - Jap.J.Appl.Phys., 1982, v. 21, №9, p.L545-L547.
3. Fiegl G. Recent Advances and Future Directions in CZ-Silicon Crystal Growth Technology. - Solid State Technol., 1983, v.26, N .8, p.121-131.
4. Hoshikawa K., Kohda H., Hurata H. Homogeneous Dopant Distribution of Silicon Crystal Grown by Vertical Magnetic Field - Applied Czochralski Method. - Jap.J.Appl. Phys., 1984, v.23, N .1, p.L37-L39.
5. Terashima K., Fukuda T. A new magnetic-field applied pulling apparatus for LEC GaAs single crystal growth. J.Crystal Growth, 1983, v.63, №3, p.423-425.
6. Старшинова И.В., Фрязинов И.В. Численное исследование гидродинамических и тепловых процессов получения монокристаллов по методу Чохральского. - Препринт ИПМ им. М.В.Келдыша АН СССР, М., 1982, № 52. - 21 с.
7. Бакирова М.И., Старшинова И.В., Фрязинов И.В. Консервативные монотонные разностные схемы для уравнений Навье-Стокса. - Дифференциальные уравнения, 1982, т.XVIII, № 7, с.1144-1150.
8. Гельфгат Ю.М., Горбунов Л.А., Соркин М.З. О магнитогидродинамическом воздействии на расплав полупроводниковых материалов в процессах получения монокристаллов по Чохральскому. - В кн.: XI-е Рижское совещание по магнитной гидродинамике. Саласпилс, 1984, т.2, с. 135-138.

УДК 536.421.I+536.421.4+536.24

ЧИСЛЕННОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ТЕМПЕРАТУРНОГО ПОЛЯ ПРИ МОДЕЛИРОВАНИИ ПРОЦЕССА ЗОННОЙ ПЛАВКИ В АМПУЛЕ

М.Л.Гулбе, Э.Н.Мартузане (ВЦ ЛГУ им.П.Стучки),
Э.С.Копелиович, В.В.Раков (ГИРЕДМЕТ, Москва)

Исследованию процессов при зонной плавке в последние годы уделяется большое внимание, в особенности для нужд космической технологии.

Настоящая работа посвящена изучению тепловых явлений в случае зонной плавки, когда слиток помещается в кварцевую ампулу, вдоль которой движется муфель с резистивным нагревателем. Кроме того, слиток может находиться в кварцевой лодочке. Торцы слитка закрепляются в графитовом держателе, форма которого может иметь, например, различного рода рифления в виде пазов для варьирования условий теплоотвода (Рис.I).

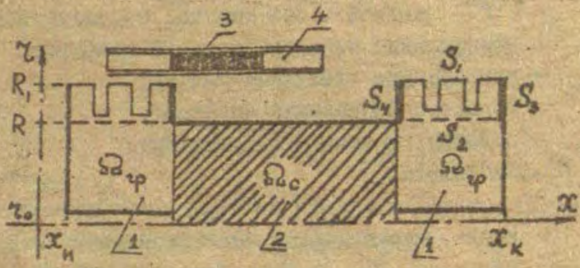

Рис.I. Схема расчетной области при зонной плавке в ампуле.

I - графитовые держатели
2 - слиток
3 - нагреватель
4 - экран.

Для определения температурного поля $T(x,r,t)$ в зависимости от положения и температуры нагревателя, формы и размеров слитка и графитовых держателей с учетом скрытой теплоты фазового перехода предлагается следующая математическая постановка.

Функция $T(x,r,t)$ удовлетворяет уравнению теплопроводности в цилиндрической системе координат, связанной со слитком, с учетом осевой симметрии. В обобщенной записи с учетом условия Стефана уравнение теплопроводности имеет вид:

$$div(\lambda(x,T)\, grad\, T) = \rho(x,T)\, c^*(x,T) \frac{\partial T}{\partial t}, \quad (I)$$

$$t>0, \quad 0 \le r < \Gamma(x), \quad x_н < x < x_к,$$

где

$$\lambda(x,T) = \begin{cases} \lambda_{тв}, & T < T_{пл}, \ x \in \Omega_c \\ \lambda_{ж}, & T > T_{пл}, \ x \in \Omega_c \\ \lambda_{гр}, & x \in \Omega_{гр}, \end{cases}$$

$\lambda_{тв}$, $\lambda_{ж}$ - коэффициенты теплопроводности твердой и жидкой части слитка, соответственно;

$\lambda_{гр}$ - коэффициент теплопроводности графита;

$T_{пл}$ - температура плавления слитка;

Ω_c - область, занимаемая слитком;

$\Omega_{гр}$ - область, занимаемая графитом;

$\rho(x,T)$ - плотность;

$c^*(x,T) = c(x,T) + \mathcal{L}\,\delta(T-T_{пл})$ - обобщенная теплоемкость, включающая в себя скрытую теплоту фазового перехода $\mathcal{L}$ в виде теплоемкости, сосредоточенной на границе раздела фаз [I];

$\delta(T-T_{пл})$ - дельта-функция Дирака;

$\Gamma(x)$ - боковая поверхность $\Omega_c \cup \Omega_{гр}$

$x_н$, $x_к$ - длина $\Omega_c \cup \Omega_{гр}$.

При расчетах используется сглаживание коэффициента, содержащего δ-функцию в интервале температур $(-\Delta_1, \Delta_2)$.

Условие на боковой поверхности $\Gamma(x)$, учитывающее теплообмен излучением по закону Стефана-Больцмана слитка, муфеля, резистивного нагревателя и окружающей среды, записывается следующим образом:

$$-\lambda(x,T)\frac{\partial T}{\partial n}\bigg|_{\Gamma(x)} = \varepsilon(x,T)\sigma_0\left[T^4(x,r,t)-T^4_{вн}(x,r,t)\right], \quad (3)$$

где

$\varepsilon(x,T)$ - степень черноты;

σ_0 - постоянная Стефана-Больцмана;

v - скорость поступательного движения нагревателя;

$T_{вн}(x,T)$ - температура муфеля, нагревателя и окружающей среды.

На торцах графитовых держателей задаются условия, учитывающие излучение по закону Стефана-Больцмана:

$$\lambda_{гр}\frac{\partial T}{\partial x}\bigg|_{x=x_н} = \varepsilon_{гр}\sigma_0\left[T^4(x_н,r,t)-T^4_{нар}\right], \quad (4)$$

$$-\lambda_{гр}\frac{\partial T}{\partial x}\bigg|_{x=x_к} = \varepsilon_{гр}\sigma_0\left[T^4(x_к,r,t)-T^4_{нар}\right], \quad (5)$$

где $T_{нар}$ - температура окружающей среды.

На внутренней полости радиуса r_0 в графитовом держателе на внутренней поверхности ставится условие:

$$\frac{\partial T}{\partial r} = 0 \quad \text{при} \quad r = r_0, \; x \in \Omega_{гр}. \quad (6)$$

Такое же условие ставится на оси, если $r_0 = 0$. В качестве начального приближения берется температура окружающей среды:

$$T\big|_{t=0} = T_{нар}. \quad (7)$$

Для решения этой двумерной задачи осуществляется замена переменных

$$u(T) = \int_0^T \frac{\lambda(\xi)}{\lambda_{тв}} d\xi, \qquad (8)$$

а также переход к переменным, сводящим область в цилиндрическую. В результате уравнение (I) переходит в уравнение, содержащее смешанную производную, для решения которого используется схема аппроксимационной поправки Н.Н.Яненко для параболических уравнений, содержащих смешанную производную [2] . Подробно методика численного решения подобных задач изложена в работе [3].

Для качественного исследования температурного поля решается одномерная задача, полученная осреднением по радиусу уравнения (I) в области слитка:

$$u = \frac{2}{R} \int_0^R \rho T(\rho) d\rho, \qquad (9)$$

где R - радиус слитка.

Для моделирования процесса зонной плавки, при котором графитовые держатели имеют внутреннюю полость радиуса r_0 , в области графита осреднение проводилось следующим образом:

$$u = \frac{2R_1}{R_1^2 - r_0^2} \int_{r_0}^{R} \rho T(\rho) d\rho, \qquad (10)$$

где R_1 - радиус графита.

После осреднения уравнения (I), с учетом краевого условия (3), получаются следующие одномерные уравнения для определения поля температуры $u(x,t)$ в слитке и графите, соответственно:

$$\frac{\partial}{\partial x}\left[\lambda(x,T)\frac{\partial u}{\partial x}\right]-\frac{2\varepsilon(x,T)\sigma_0}{R}\left[u^4-T_{вн}^4(x-vt)\right]=c\rho\frac{\partial u}{\partial t}, \qquad (11)$$

$$x\in\Omega_c,$$

$$\frac{\partial}{\partial x}\left[\lambda(x,T)\frac{\partial u}{\partial x}\right]-\frac{2R_1\lambda(x,T)}{R_1^2-r_0^2}\left.\frac{\partial T}{\partial n}\right|_{\Gamma(x)}=c\rho\frac{\partial u}{\partial t}, \qquad (12)$$

$$x\in\Omega_{гр}$$

Для графитовых держателей цилиндрической формы радиуса R_1 без рифления с учетом условия излучения (3) уравнение (12) принимает вид:

$$\frac{\partial}{\partial x}\left[\lambda(x,T)\frac{\partial u}{\partial x}\right]-\frac{2R_1}{R_1^2-r_0^2}\varepsilon_{гр}\sigma_0\left[u^4-T_{вн}^4(x-vt)\right]=c\rho\frac{\partial u}{\partial t}. \qquad (13)$$

В случае рифленого графита поток $\lambda\frac{\partial T}{\partial n}$ можно приближенно определить через потоки на поверхностях S_1, S_2, S_3, S_4 (Рис.1), используя теорему Гаусса-Остроградского:

$$\iiint\limits_{\mathcal{D}} div(\lambda\, grad\, T)\,dv=\iint\limits_{S}\lambda\frac{\partial T}{\partial n}\,ds=0, \qquad (14)$$

где $S=S_1+S_2+S_3+S_4$,

$\mathcal{D}$ - область, ограниченная поверхностью S;

n - направление внешней нормали к поверхности S;

Для области $\mathcal{D}$, с учетом излучения (3), из (14) можно получить следующее выражение:

$$- \varepsilon_{гр} \sigma_0 (T^4 - T_{вн}^4) S_1 - \varepsilon_{гр} \sigma_0 (T^4 - T_{вн}^4) S_3 -$$

$$- \varepsilon_{гр} \sigma_0 (T^4 - T_{вн}^4) S_4 - \lambda \frac{\partial T}{\partial r} S_2 = 0, \quad (15)$$

где

$$S_1 = 2\pi R_1 \sum_{i=1}^{m+1} \Delta x_i + 2\pi R \sum_{j=1}^{m} \Delta x_j + \pi (R_1^2 - R^2) \cdot 2n,$$

$$S_2 = 2\pi R l_{гр},$$

$$S_3 = S_4 = \pi (R_1^2 - R^2),$$

где R_1 - максимальный радиус графита;

Δx_i - ширина выступа;

Δx_j - ширина паза;

m - число рифлений;

$l_{гр}$ - длина графитового держателя.

Предполагая, что значение температуры T на поверхности равно средней температуре u, из равенства (15) получаем следующее выражение для потока:

$$-\lambda \frac{\partial u}{\partial r} = \varepsilon_{гр} \sigma_0 \left[u^4 - T_{вн}^4 (x - vt, t) \right] (S_1 + S_3 \cdot S_4) \cdot S_2^{-1}. \quad (16)$$

Учитывая, что направление нормали n к поверхности S_2 совпадает с направлением r, выражение (16) можно подставить в уравнение (12).

Для решения одномерной задачи осуществлялась конечно-разностная аппроксимация, и применялся метод прогонки [2].

Нелинейные члены линеаризовались таким образом, что T^4 заменялось на $T^3 \cdot T$, и на каждом шаге по времени проводились итерации по нелинейности, причем T^3 считался известным с предыдущей итерации. При первой итерации T бралось с предыдущего временного слоя. Итерации продолжались до тех пор, пока получаемая при этом невязка не становилась меньше наперед заданного ε_T.

Распределение температурного поля определялось для слитка германия и графитовых держателей при следующих значениях физических констант для германия:

c =0,34 вт·с/(г·град); ρ =5,6 г/см^3;

$\lambda_{тв}$=0,173 вт/(см·град); $\lambda_{ж}$ =0,412 вт/(см·град);

$T_{пл}$= 1210°К; $\varepsilon_{тв}$ =0.6; $\varepsilon_{ж}$ =0,18;

σ_0 =5,67·10^{-12} вт/(см^2.град^4);

для графита:

$c_{гр}$ =1,956 вт·с/(г·град); $\rho_{гр}$ =2,26 г/см^3;

$\lambda_{гр}$ =0,39 вт/(см·град); $\varepsilon_{гр}$ =0,8.

Рассмотрен образец германия, относительные размеры которого были следующими: радиус - 1, длина - 12,8. Он был помещен между графитовыми полыми держателями, длина каждого из которых - 7,6, наружный радиус - 1,73, а внутренний - 0,53. Эти держатели могут иметь пазы, глубина которых равна 0,73.

Резистивный нагреватель длиной 5,3, расположенный в муфеле длины 13,3, продвигается вдоль слитка с заданной скоростью v . Температура нагревателя и муфеля неизвестны. Они подбирались путем проведения серии расчетов с целью получения ширины зоны расплава и максимального перепада температуры в ней, совпадающих с экспериментально заданными.

Для подобранного теплового режима было проведено численное исследование квазистационарного теплового поля в двумерной и одномерной постановках задачи при различных фиксированных положениях нагревателя относительно слитка. Кроме того, исследовалось нестационарное тепловое поле в одномерной постановке, когда нагреватель перемещался вдоль слитка с заданной скоростью v .

Таблица I

Изменение ширины зоны и перегрева расплава в процессе зонной плавки

Положение нагревателя	Цилиндрический графит				Рифленый графит			
	квазистац. задача		нестац. задача		квазистац. задача		нестац. задача	
	ℓ	ΔT	ℓ	ΔT	ℓ	ΔT	ℓ	ΔT
8	3.29	I3.9	3.0I	I2.2	2.80	I0.7	2.83	II.4
9.3	3.27	I3.7	3.2I	I3.7	3.0I	I2.3	3.09	I2.8
I0.7	3.25	I3.6	3.27	I4.5	3.I3	I3.I	3.08	I2.3
I2.	2.84	I2.3	3.I7	I3.6	3.09	I3.0	3.09	I3.0
I3.3	3.27	I3.6	3.I6	I3.2	3.04	I2.6	3.08	I2.7
I4.7	3.33	I4.0	3.I8	I3.6	2.83	I0.9	2.8I	I5.5

В таблице I приводятся результаты расчетов квазистационарной и нестационарной задач в одномерной постановке без рифления и с рифлением графитовых держателей. Температурное поле определялось при различных положениях нагревателя относительно слитка. В таблице указываются ширина зоны расплава и максимальный температурный перепад в ней.

Удовлетворительное совпадение этих результатов позволяет заменить решение нестационарной задачи, когда муфель с нагревателем продвигается вдоль слитка со скоростью в несколько миллиметров в час, решением квазистационарной задачи для конкретно заданных положений нагревателя относительно слитка. Это позволяет значительно сократить затраты машинного времени.

На рис.2 приводятся характерные профили температуры вдоль длины слитка при различных положениях нагревателя относительно левого торца графитового держателя.

В течение всего процесса зонной плавки ширина зоны меняется незначительно; для графита цилиндрической формы максимальное изменение ширины зоны составляет 0.5, для графита с рифлениями 0.33. Перегрев также меняется мало и составляет примерно II-I5°.

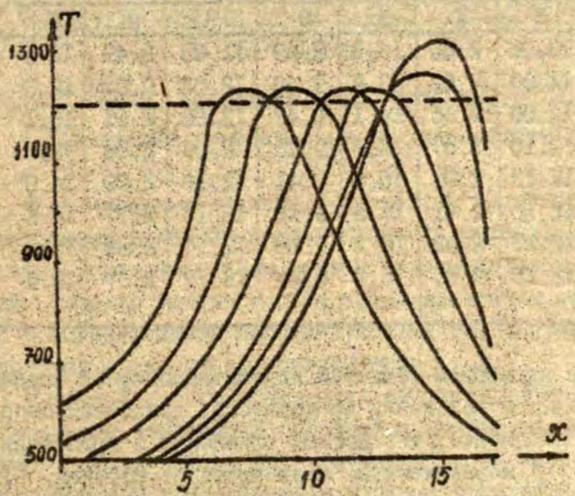

Рис.2. Характерное осевое распределение температуры в слитке при различных положениях нагревателя.

Таблица 2

Изменение ширины зоны и перегрева расплава в радиальном направлении в процессе зонной плавки

Координаты по радиусу	Цилиндрический графит				Рифленый графит			
	изотермы				изотермы			
	плавл. z_1	кристал. z_2	l	ΔT	плавл z_1	кристал. z_2	l	ΔT
I	2	3	4	5	6	7	8	9
0	9.49	I2.04	2.55	I3.2	9.49	II.94	2.44	I2.2
0.I	9.49	I2.05	2.56	I3.2	9.49	II.94	2.45	I2.2
0.2	9.48	I2.07	2.59	I3.3	9.49	II.96	2.47	I2.3

Продолжение таблицы 2

I	2	3	4	5	6	7	8	9
0.3	9.48	I2.08	2.60	I3,5	9.49	II.98	2.49	I2.5
0.4	9.47	I2.09	2.62	I3.8	9.49	I2.02	2.53	I2.8
0.5	9.44	I2.09	2.65	I4.I	9.47	I2.08	2.6I	I3.I
0.6	9.43	I2.I0	2.67	I4.5	9.45	I2.09	2.64	I3.5
0.7	9.40	I2.I3	2.73	I5.0	9.4I	I2.I0	2.69	I4.0
0.8	9.35	I2.I6	2.8I	I5.5	9.36	I2.I3	2.77	I4.6
0.9	9.28	I2.2I	2.92	I6.2	9.28	I2.I7	2.89	I5.2
I.0	9.20	I2.25	3.05	I6.9	9.20	I2.27	2.07	I5.9

Решение двумерной тепловой квазистационарной задачи при фиксированном положении нагревателя, представленное в таблице 2, показывает, что фронты плавления и кристаллизации (z_1, z_2) незначительно отличаются от плоских. Отклонения по радиусу составляют I0-20%. Это позволяет проводить качественное исследование тепловых полей в одномерном приближении. Кроме того, из таблицы 2 видно, что рифленость графита приводит к уменьшению ширины зоны расплава и перепада температуры в зоне.

Авторы благодарят Н.А.Авдонина за внимание к работе.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

I. Олейник О.А. Об одном методе решения общей задачи Стефана. - ДАН, I960, т.I35, № 5, с.5-8.

2. Яненко Н.Н. Метод дробных шагов решения многомерных задач математической физики. - Новосибирск, I967.- 88 с.

3. Добровольская В.И., Мартузан Б.Я., Мартузане Э.Н., Ратников Д.Г. Исследование тепловых полей в процессе бестигельной зонной плавки с учетом работы индуктора и сложной поверхности жидкой зоны. - Физика и химия обработки материалов, I973, № 6, с.42-46.

УДК 532.546:517.97

ЧИСЛЕННОЕ РЕШЕНИЕ ОДНОЙ ЗАДАЧИ ОПТИМАЛЬНОГО УПРАВЛЕНИЯ

Е.С.Вакал, С.Л.Кивва, Г.Е.Мистецкий, О.Б.Стеля
(Киевский государственный университет)

Моделирование различных процессов массопереноса в почвогрунтах приводит к необходимости решения задач оптимального управления размещением гидромелиоративных сооружений. Решение такого класса оптимизационных задач сопряжено с определенными математическими трудностями, главной из которых является их нелинейность [1,2].

В данной работе приводится алгоритм решения задачи оптимального управления системой с распределенными параметрами, состояние которой описывается совокупностью двух дифференциальных уравнений в частных производных. При этом коэффициенты одного из уравнений зависят от градиента решения другого. Разработанный алгоритм апробирован на тестовом примере.

1. Постановка задачи. Требуется минимизировать функционал

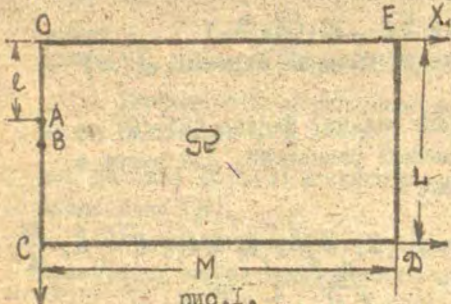

рис.1.

$$J(l)=\int_{\Omega} d(x)\left[C(x,T)-C_3(x)\right]^2 dx \tag{1}$$

на множестве $0\le l\le L$ (см.рис.) при условии

$$\operatorname{div}(k(x)\operatorname{grad}H(x))=0, \qquad x\in\Omega \tag{2}$$

$$H(x)=H_1(x), \qquad x\in OE, \tag{3}$$

$$H(x)=H_2(x) \quad , x\in AB; \tag{4}$$

$$\sum_{i,j=1}^{2} \frac{\partial H}{\partial x_j}\cos(\nu,x_i)=0, \qquad x\in\partial\Omega\setminus(AB\cup OE), \tag{5}$$

$$\frac{\partial(mC)}{\partial t}=div\left(D(x,v)\,grad C - vC\right), \ (x,t)\in Q=\Omega\times(0,T], \tag{6}$$

$$C(x,0)=C_0(x), \quad x\in\Omega, \tag{7}$$

$$C(x,t)=C_b(x,t), \ (x,t)\in OE\times[0,T], \tag{8}$$

$$\sum_{i,j=1}^{2} \frac{\partial C}{\partial x_j}\cos(\nu,x_i)=0, \ (x,t)\in(\partial\Omega\setminus OE)\times[0,T], \tag{9}$$

$$v=-k(x)\,grad H, \quad x\in\Omega,$$

где $\partial\Omega$ - граница области Ω , $x=(x_1,x_2)$ - точка области Ω , ν - направление внешней нормали, $\alpha(x)$ - весовой коэффициент.

2. Построение разностной задачи. Задача (2)-(9) решается с помощью метода конечных разностей. Для этого в Q вводится разностная сетка

$$\overline{\omega}_{h_1 h_2 \tau}=\Big\{(x_{1i},x_{2j},t_k): x_{1i}=ih_1, x_{2j}=jh_2, t_k=\tau k, i=\overline{0,N_1}, h_1=\frac{M}{N_1},$$
$$j=\overline{0,N_2},\ h_2=\frac{L}{N_2},\ k=\overline{0,N_3},\ \tau=\frac{T}{N_3}\Big\}.$$

Функционал (I) заменяется его разностным аналогом

$$\mathcal{Y}_h(\ell) = h_1 h_2 \Big\{ \frac{1}{4}(f_{00} + f_{0N_2} + f_{N_1 0} + f_{N_1 N_2}) + \frac{1}{2}\Big[\sum_{i=1}^{N_1-1}(f_{i0} + f_{iN_2}) +$$

$$+ \sum_{j=1}^{N_2-1}(f_{0j} + f_{N_1 j})\Big] + \sum_{i=1}^{N_1-1}\sum_{j=1}^{N_2-1} f_{ij} \Big\}, \qquad (10)$$

где $f_{ij} = f(x_{1i}, x_{2j}) = \alpha(x_{1i}, x_{2j})\left[C(x_{1i}, x_{2j}, T) - C_3(x_{1i}, x_{2j})\right]^2$.

С помощью интегро-интерполяционного метода [3] строится разностная схема для уравнения (2)

$$\sum_{\alpha=1}^{2} (a_\alpha y_{\bar{x}_\alpha})_{x_\alpha, ij} = 0 \ . \qquad (11)$$

Для аппроксимации уравнения (6) используется неявная монотонная схема А.А.Самарского [3]

$$(m\hat{z})_{t,ij} = \Big(\sum_{\alpha=1}^{2} \varkappa_\alpha (d_\alpha \hat{z}_{\bar{x}_\alpha})_{x_\alpha} + \frac{\tilde{v}_\alpha}{a_\alpha} d_{\alpha,+0.5} + \frac{\tilde{v}}{a_\alpha} d_{\alpha,-0.5}\Big)_{ij}, \qquad (12)$$

здесь $d_{\alpha\pm 0.5} = d(x_\alpha \pm 0.5 h_\alpha)$.

Погрешность аппроксимации схем (11),(12) соответственно равняется $O(h_1^2 + h_2^2)$ и $O(\tau + h_1^2 + h_2^2)$. Краевые условия (5),(9) аппроксимируются со вторым порядком аналогично [4].

3. Метод решения. Для решения задачи (10)-(12) используется метод градиентного спуска [5]

$$\ell^{p+1} = \mathcal{P}(\ell^p - \beta_p \operatorname{grad} \mathcal{Y}_h(\ell^p)),$$

где $\mathcal{P}$ - оператор проектирования на множество $[0, L]$.

Критерием окончания итерационного процесса является выполнение условия

$$\left| l^{p+1} - l^{p} \right| < \varepsilon.$$

Для вычисления $grad\ J_h(l^p)$ решаются задачи (II),(I2) с соответствующими краевыми и начальными условиями. Разностные схемы записываются в виде операторного уравнения

$$AU = g, \tag{I3}$$

где U содержит решения разностных задач (II),(I2). Матрица A представляется в виде суммы диагональной, нижней треугольной и верхней треугольной матрицы

$$A = D + L + U.$$

Тогда итерационный метод верхней релаксации для уравнения (I3) записывается следующим образом [6] :

$$(D + \omega L)\frac{U^{s+1} - U^{s}}{\omega} + AU^{s} = g, \qquad s = 0, 1, \ldots$$

В качестве U^{0} выбирается начальное условие задачи.

4. Тестовый пример. Численный расчет проводи ся для задачи оптимального расположения дренажа при промывке рисовых чеков при следующих значениях параметр в задачи:

$L=8, M=25, k(x)=0.5,$

$H_1(x)=0.2, H_2(x)=-x_2, C_0=20, C_b=.1, h_1=.1, h_2=.2, \tau=0.1, T=3,$

$D(x,v)=5\cdot 10^{-6}+0.1\cdot|v|, \alpha(1,0.2)=1, \alpha(22,0.2)=1, \alpha(12,0.4)=1,$

$\alpha(x_1,x_2)=0$ в других увлах области, $C_3(1,0.2)=$

$=6.09,\ C_3(22,0.2)=16.78,\ C_3(12,0.4)=15.11,\ l^0=2.4,\ \omega\in(0,2)$

В результате решения задачи было получено оптимальное значение l , равное I.2.

Замечание. Приведенный алгоритм позволяет находить решение задачи оптимального управления, если вместо уравнения (2) рассматривается неоднородное уравнение параболического типа.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

I. Лионс Ж.-Л. Оптимальное управление системами, описываемыми уравнениями с частными производными. М., 1972.- 4I4 с.
2. Васильев Ф.П. Методы решения экстремальных задач. - М., I98I. - 400 с.
3. Самарский А.А. Теория разностных схем. М., I983.- 6I6 с.
4. Гладкий А.В., Ляшко И.И., Мистецкий Г.Е. Алгоритмизация и численный расчет фильтрационных схем. Киев, I98I.- 288 с.
5. Беленький З., Волконский В.А. Итеративные методы в теории игр и программирования. М., I974.- 240 с.
6. Самарский А.А., Николаев Е.С. Методы решения сеточных уравнений. М., I978.- 592 с.

УДК 539.319

РАСЧЕТ НАПРЯЖЕННОГО СОСТОЯНИЯ КРИСТАЛЛОВ КРЕМНИЯ В ОХЛАЖДАЕМОЙ КАМЕРЕ

С.С.Вахрамеев, Н.В.Козельская (ВЦ ЛГУ им. П.Стучки), Ю.М.Шашков (ГИРЕДМЕТ, Москва)

При производстве монокристаллов полупроводниковых материалов после их выращивания из расплава кристаллы помещают в специальную охлаждаемую камеру. Для ускорения процесса охлаждения кристаллов до комнатной температуры в камеру помещают инертный газ под высоким давлением. Однако при интенсивном охлаждении может произойти растрескивание кристалла из-за высоких температурных напряжений, возникающих в кристалле в процессе его охлаждения. Для определения максимального уровня напряжений, возникающих в кристалле ниже дается решение задачи термоупругости в постановке несвязанной квазистатической теории. В первом разделе приводится постановка и метод решения задачи определения температурного поля в кристалле. Далее (раздел 2) приводится метод решения задачи упругости. Приводятся результаты расчетов полей термоупругих напряжений в процессе охлаждения кристаллов, дается анализ максимальных напряжений в кристалле.

I. Осесимметрический слиток радиуса R и высоты H помещены в камеру с температурой стенок $T_I=T_{вн}$, в которой находится инертный газ с температурой $T_2=T_{газ}$. Температура внутри слитка описывается уравнением

$$c\rho\frac{\partial T}{\partial t}=\lambda\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}\left(r\frac{\partial T}{\partial r}\right)+\lambda\frac{\partial^2 T}{\partial x^2}, \quad \begin{matrix}0<r<R,\\ 0<x<H\end{matrix} \qquad (I)$$

с краевыми условиями

$$\lambda \frac{\partial T}{\partial r}\Big|_{r=R} = -\varepsilon\sigma\left(T^4 - T_1^4\right) - \alpha_k\left(T - T_2\right), \quad (2)$$

$$\lambda \frac{\partial T}{\partial x}\Big|_{x=H} = -\varepsilon\sigma\left(T^4 - T_1^4\right) - \alpha_k\left(T - T_2\right), \quad (3)$$

$$\lambda \frac{\partial T}{\partial x}\Big|_{x=0} = \varepsilon\sigma\left(T^4 - T_1^4\right) + \alpha_k\left(T - T_2\right), \quad (4)$$

с условием симметрии

$$\frac{\partial T}{\partial r}\Big|_{r=0} = 0 \quad (5)$$

и начальным условием

$$T\Big|_{t=0} = T_{нач}(x; r), \quad (6)$$

где C - удельная теплоемкость, ρ - плотность, λ - теплопроводность, Т - температура, σ - постоянная Стефана-Больцмана, ε - степень черноты.

Первое слагаемое правой части краевого условия определяет отвод тепла от слитка за счет излучения, второе слагаемое характеризует отвод тепла за счет теплообмена с подаваемым в камеру газом.

Коэффициент α_k был получен на основе эксперимен - тальных данных и решения одномерной задачи охлаждения слитка [1]. За начальное состояние бралась температура в кристалле в момент его отрыва или заданная постоянная температура.

Для решения данной задачи разностным методом введем разбиение от i =1 до $i = N$ по высоте слитка и от j =1 до $j = M$ по радиусу. Шаг разбиения по $r - h$, шаг разбиения по $x - q$. Введем обозначения:

$$r_j = j \cdot h; \quad r_{j+1/2} = (j + 1/2)h; \quad r_{j-1/2} = (j - \tfrac{1}{2})h.$$

Значение сеточной функции в некотором узле сетки (q_i, r_j) будем обозначать T_{ij}. Аналогично разностной сетке в пространстве определим сетку по временной переменной с постоянным шагом:

$$\omega_\tau = \{ t_k , \ k = 0, 1, 2, \ldots \}$$

$$t_{k+1} = t_k + \tau .$$

Будем рассматривать полуцелые слои, отвечающие значению

$$t_{k+1/2} = t_k + \frac{1}{2}\tau .$$

Теперь задачу (I)-(6) в дифференциальном виде заменим разностными уравнениями:

$$\frac{T_{ij}^{k+1/2} - T_{ij}^{k}}{\tau} = \frac{\lambda}{c\rho}\left[\frac{1}{h}\frac{1}{r_j}\left(r_{j+1/2}\frac{T_{ij+1}^{k+1/2} - T_{ij}^{k+1/2}}{h} - r_{j-1/2}\frac{T_{ij}^{k+1/2} - T_{ij-1}^{k+1/2}}{h}\right)\right] +$$

$$+ \frac{\lambda}{c\rho}\ \frac{T_{i+1j}^{k} - 2T_{ij}^{k} + T_{i-1j}^{k}}{q^2} , \qquad (7)$$

$$\frac{T_{ij}^{k+1} - T_{ij}^{k+1/2}}{\tau} = \frac{\lambda}{c\rho}\left[\frac{1}{h}\frac{1}{r_j}\left(r_{j+1/2}\frac{T_{ij+1}^{k+1/2} - T_{ij}^{k+1/2}}{h} - r_{j-1/2}\frac{T_{ij}^{k+1/2} - T_{ij-1}^{k+1/2}}{h}\right)\right] +$$

$$+ \frac{\lambda}{c\rho}\ \frac{T_{i+1j}^{k+1} - 2T_{ij}^{k+1} + T_{i-1j}^{k+1}}{q^2} . \qquad (8)$$

Условие (2) на боковой поверхности кристалла запишется

$$\lambda\left(\frac{T_{iM}^{k+1/2} - T_{iM-1}^{k+1/2}}{h}\right) = -\varepsilon\sigma\left(T_{iM}^{k+1/2\,4} - T_1^4\right) - \alpha_k\left(T_{iM}^{k+1/2} - T_2\right). \qquad (9)$$

$T_{iM}^{k+1/2\,4}$ можем линеаризовать и представить как

$$T_{iM}^{k+1/2} \approx 4\, T_{iM}^{k^3} \cdot T_{iM}^{k+1/2} - 3\, T_{iM}^{k^4} . \qquad (10)$$

Условие (3) на холодном торце кристалла с учетом (10) преобразуется к следующему виду:

$$\lambda \frac{T_{Nj}^{k+1} - T_{N-1j}^{k+1}}{q} = -\varepsilon\sigma\left(4 T_{Nj}^{k+1/2^3} T_{Nj}^{k+1} - 3 T_{Nj}^{k+1/2^4} - T_1^4\right) -$$

$$- \alpha_k \left(T_{Nj}^{k+1} - T_2\right). \qquad (11)$$

Условие (4) на горячем торце с учетом (10) будет выглядеть следующим образом:

$$\lambda \frac{T_{2j}^{k+1} - T_{1j}^{k+1}}{q} = \varepsilon\sigma\left(4 T_{1j}^{k+1/2^3} T_{1j}^{k+1} - 3 T_{1j}^{k+1/2^4} - T_1^4\right) -$$

$$- \alpha_k \left(T_{1j}^{k+1} - T_2\right). \qquad (12)$$

А условие симметрии слитка (5) на слое j =1 приведет к решению уравнения

$$c\rho \frac{\partial T}{\partial t} = \lambda \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + 2\lambda \frac{\partial^2 T}{\partial r^2}, \qquad (13)$$

которое в разностном виде с учетом $T_{i0} = T_{i2}$ запишем как

$$\frac{T_{i1}^{k+1/2} - T_{i1}^{k}}{\tau} = \frac{2\lambda}{c\rho} \frac{T_{i2}^{k+1/2} - T_{i1}^{k+1/2}}{h^2} + \frac{\lambda}{c\rho} \frac{T_{i+1\,1}^{k} - 2T_{i1}^{k} + T_{i-1\,1}^{k}}{q^2}. \qquad (14)$$

Систему уравнений (7),(8) с условиями (9),(11),(12),(14) будем решать итерационным методом переменных направления [2].

Расчеты температурных полей проводились для различных режимов охлаждения (при разных значениях $\alpha_к$) на каждом временном слое. Надо отметить, что с началом процесса охлаждения температурные градиенты, особенно в районе фронта кристаллизации, возрастают (максимум приходится на время 6- 15 сек), затем, примерно через 30 сек-60 сек, уменьшаются и выравниваются по всему слитку.

Настоящий раздел посвящен методике численного расчета термоупругих напряжений в охлаждаемом кристалле. Задача термоупругости решается в постановке несвязанной квазистатической задачи, а температурное поле в этом случае предзадано и рассчитывается по методике, изложенной в предыдущем разделе.

Рассматривается кристалл цилиндрической формы радиуса R и высотой H в системе координат (r, z). Область $\mathcal{D}$, занимаемая кристаллом, является следующей:

$$\mathcal{D} = [0 \le r \le R; \quad 0 \le z \le H].$$

Уравнения равновесия в рассматриваемой области $\mathcal{D}$ имеют вид 3

$$\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}(r\sigma_r) + \frac{\partial}{\partial z}\sigma_{rz} = \frac{1}{r}\sigma_\varphi,$$

$$\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}(r\sigma_{rz}) + \frac{\partial}{\partial z}\sigma_z = 0. \tag{15}$$

где σ_r, σ_φ, σ_z, σ_{rz} - компоненты тензора напряжений связаны законом Гука для изотропного тела с деформациями следующим образом:

$$\sigma_r = Ga[\varepsilon_r + k(\varepsilon_\varphi + \varepsilon_z) - cT],$$

$$\sigma_\varphi = Ga[\varepsilon_\varphi + k(\varepsilon_r + \varepsilon_z) - cT],$$

$$\sigma_z = Ga[\varepsilon_z + k(\varepsilon_r + \varepsilon_\varphi) - cT],$$

$$\sigma_{rz} = 2G\varepsilon_{rz}.$$

(16)

$T(r,z,t)$ - заданное температурное поле,

G - модуль сдвига,

$$a = 2\frac{1-\mu}{1-2\mu}, \quad k = \frac{\mu}{1-\mu}, \quad c = \frac{1+\mu}{1-\mu}\alpha,$$

μ, α - коэффициенты Пуассона и термического расширения, компоненты тензора деформаций ε_r, ε_φ, ε_z, ε_{rz} связаны с перемещениями U и W геометрическими соотношениями

$$\varepsilon_r = \frac{\partial U}{\partial r}, \quad \varepsilon_\varphi = \frac{U}{r}, \quad \varepsilon_z = \frac{\partial W}{\partial z},$$

$$\varepsilon_{rz} = \frac{1}{2}\left(\frac{\partial U}{\partial z} + \frac{\partial W}{\partial r}\right). \tag{17}$$

Задача термоупругости решается в перемещениях. Подставляя соотношения (16) в уравнения (15) с учетом соотношений (17), получим уравнения упругого равновесия в перемещениях:

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

$$\frac{\partial^2 W}{\partial r^2} + \frac{1}{r}\frac{\partial W}{\partial r} + a\frac{\partial^2 W}{\partial z^2} + b\left(\frac{1}{r}\frac{\partial U}{\partial z} + \frac{\partial^2 U}{\partial r \partial z}\right) = d\frac{\partial T}{\partial z}. \tag{18}$$

Граничные условия в случае свободной от внешних сил поверхности кристалла задаются следующим образом:

$$\begin{aligned} \sigma_r n_r + \sigma_{rz} n_z &= 0, \\ \sigma_{rz} n_r + \sigma_z n_z &= 0, \end{aligned} \tag{19}$$

где n_r, n_z - направляющие косинусы внешней нормали к граничной поверхности Γ области $\mathcal{D}$.

Подставляя в условия (19) выражения для компонент σ_r, σ_z, σ_{rz} из (16), получим граничные условия в перемещениях U, W. Таким образом, уравнения (18) с условиями (19) представляют собой исходную задачу термоупругости, решив которую, компоненты тензора напряжений находим из соотношений (17),(16).

Задача (18), (19), (17), 16) решается методом конечных разностей. Для этого в исходной области $\mathcal{D}$ вводится сеточная область

$$\mathcal{D}^h = [r_i = i h_1,\ i = 0,1,\dots,N;\ z_j = j h_2,\ j = 0,1,\dots,M]$$

с шагами по пространству

$$h_1 = R/N, \qquad h_2 = H/M.$$

В нашем случае особо важно, чтобы разностная схема была консервативной, так как граничные условия заданы в напряжениях. Нарушение консервативности приводит к дополнительной погрешности в определении напряжений, при этом нарушается баланс сил. Для вывода разностных уравнений используется интегро-интерполяционный метод [2]. Построение разностной консервативной схемы подробно изложено в работе [4].

Опуская этот вывод, запишем уравнения равновесия в перемещениях в разностном виде для внутренних точек области $\mathcal{D}^h$:

$$a\left(\frac{1}{r}(rU)_{\bar{r}}\right)_r + U_{\bar{z}z} + b\,W_{\bar{r}z} = d\,T_{\bar{r}},$$

$$\frac{1}{r}(r\,W_{\bar{r}})_r + a\,W_{\bar{z}z} + b\left(\frac{1}{r}(rU)_{\mathring{r}}\right)_{\bar{z}} = d\,T_{\mathring{z}} \tag{20}$$

Аппроксимация граничных условий следующая: на боковой поверхности кристалла, при $i = N$

$$(U_{\bar{r}})_{N,j} + \frac{K}{2}\left[\frac{U_N}{R} + \frac{U_{N-1}}{R-h_1} + (W_N + W_{N-1})_{\bar{z}}\right]_j = \frac{c}{2}\left[T_N + T_{N-1}\right]$$

$$(W_{\bar{r}})_{N,j} + \frac{1}{2}(U_N + U_{N-1})_{\bar{z},j} = 0,\quad j = 1,2,\dots,M-1; \tag{21}$$

на торцах, при $j=0$

$$(W_{\bar{z}})_{i,0}+\frac{k}{2}\left[\frac{U_1+U_0}{r}+(U_1+U_0)_{\overset{\circ}{r}}\right]_i=\frac{c}{2}\left[T_1+T_0\right]$$

$$(U_{\bar{z}})_{i,0}+\frac{1}{2}\left[W_1+W_0\right]_{\overset{\circ}{r},i}=0, \quad i=1,2,\ldots,N-1; \qquad (22)$$

и аналогичные условия при $j=M$.

Из равенств (21) и (22) видно, что граничные условия аппроксимируются на шеститочечном шаблоне, это следует из консервативности построения разностной схемы.

На оси цилиндра, при $i=0$, выполняются условия симметрии

$$U_{0,j}=0, \qquad (W_{\overset{\circ}{r}})_{0,j}=0, \qquad (23)$$

а для записи условий в угловых точках $(N,?)$, (N,M) используются соотношения

$$\frac{\partial U}{\partial r}-\frac{\partial W}{\partial z}=0,$$

$$\frac{\partial U}{\partial z}+\frac{\partial W}{\partial r}=0, \qquad (24)$$

которые аппроксимируются на четырехточечном шаблоне.

В равенствах (20)-(23) использованы стандартные обозначения разностных производных в сеточной области [2]. Разностные соотношения (20) аппроксимируют исходные уравнения равновесия (18) с порядком $O(h^2)$, где $h=max(h_1, h_2)$, граничные условия имеют порядок аппроксимации $O(h)$.

Разностная задача (20)-(24) решается итерационным методом переменных направлений, который в данном случае заключается в следующем.

Вводятся разностные векторы перемещений $\vec{V}(U,W)$, объемных сил $\vec{F}(\alpha T_{\overset{\circ}{r}}, \alpha T_{\overset{\circ}{z}})$ и разностные матрицы-операторы:

$$A_1\vec{V} = \begin{pmatrix} a\left(\frac{1}{r}(rU)_{\bar{r}}\right)_r & bW_{\overset{\circ}{r}\overset{\circ}{z}} \\ 0 & aW_{\bar{z}z} \end{pmatrix},$$

$$A_2\vec{V} = \begin{pmatrix} U_{\bar{z}z} & 0 \\ b\left(\frac{1}{r}(rU)_{\overset{\circ}{r}}\right)_{\overset{\circ}{z}} & \frac{1}{r}(rW_{\bar{r}})_r \end{pmatrix}.$$

и система разностных уравнений (20) записывается в следующей форме:

$$(A_1 + A_2)\,\vec{V} = \vec{F}. \tag{25}$$

Итерационный процесс строится на основе метода установления. Для этого в уравнения вводится нестационарный член $\partial\vec{V}\,/\,\partial t$, и система (25) становится следующей:

$$(A_1 + A_2)\vec{V}^{\,k+1} = \vec{F} + \frac{\vec{V}^{\,k+1} - \vec{V}^{\,k}}{\tau}, \tag{26}$$

при начальном условии $\vec{V}^{\,0} = 0$.

τ - итерационный шаг по времени,

k - номер итерации ($k = 0, 1, 2, \ldots$).

Далее записывается известным образом схема переменных направлений; компоненты вектора перемещений $\vec{V}^{\,k}$ определяются при помощи последовательных прогонок. Итерационный счет ведется до выхода на стационар, что контролируется по величине

$$\max\left|\frac{\vec{V}^{\,k+1} - \vec{V}^{\,k}}{\tau}\right| < \varepsilon, \tag{27}$$

где ε принималось равным 10^{-3}. Это обеспечивает нужную (порядка 3%) точность расчета компонент напряжений, что проверялось на модельных примерах [4].

Выше уже отмечалось, что исходное температурное поле $T(r, z, t)$ является нестационарным. Компоненты тензора напряжений в данном случае рассчитываются в предположении "смены стационарных состояний", т.е. температурное поле рассчитывается на любой заданный момент времени, и на этот момент времени рассчитывается стационарное поле упругих напряжений. При этом имеется в виду, что напряжения успевают подстраиваться под заданное состояние температурного поля, полученного на момент времени t. Таким образом была рассчитана серия вариантов полей напряжений на различные моменты времени.

Далее, по рассчитанным компонентам тензора напряжений σ_r, σ_φ, σ_z, σ_{rz} определялись осредненные по системам скольжения для направления выращивания [111] среднеквадратичные касательные напряжения τ_1, τ_2, τ_3.

$$\tau_1 = \frac{1}{3\sqrt{2}}\sqrt{(\sigma_r-\sigma_\varphi)^2 + \frac{4}{3}(\sigma_z-\sigma_\varphi)(\sigma_z-\sigma_r) + \frac{13}{3}\sigma_{rz}^2}$$

$$\tau_2 = \frac{1}{3}\sqrt{(\sigma_r-\sigma_\varphi)^2 + \frac{1}{2}\sigma_{rz}^2}$$

$$\tau_3 = \sqrt{\frac{2}{3}\tau_1^2 + \frac{1}{3}\tau_2^2}. \qquad (28)$$

Эти формулы являются удобным средством для оценки величины действующих по плоскостям скольжения сдвиговых напряжений.

Рассмотрим некоторые результаты расчетов, которые приведены на рис.1-3.

На рис.1 даны максимальные значения величины τ_3 в кристалле в зависимости от времени охлаждения при разных режимах охлаждения (α_k^1 - нижний и α_k^2 - верхний графики). В начальный момент времени сдвиговые напряжения

$\tau_з$ невелики $(0,1-0,2\cdot10^7$ Па), так как градиенты температуры малы; они соответствуют градиентам температуры в кристалле в процессе его выращивания из расплава. Далее кристалл, помещенный в камеру, интенсивно охлаждается, температурные градиенты резко возрастают, и максимальные сдвиговые напряжения сильно увеличиваются и достигают величины $3\cdot10^7$ Па при $t \approx 12$ сек и $\alpha_к^2 = 1,5\cdot10^{-2}$ вт/см^{2}град (см.рис.I). Если $\alpha'_к = 10^{-3}$ вт/см^{2}град, то максимальное $\tau_з$ в кристалле равно $\sim 2\cdot10^7$ Па, что свидетельствует о влиянии режима охлаждения кристалла.

При увеличении времени охлаждения максимальные сдвиговые напряжения заметно убывают; так, при $t > 35$ сек, $\tau_з < 2\cdot10^7$ Па при $\alpha_к = \alpha_к^2$ и $\tau_з < 1,2\cdot10^7$ Па при $\alpha_к = \alpha'_к$.

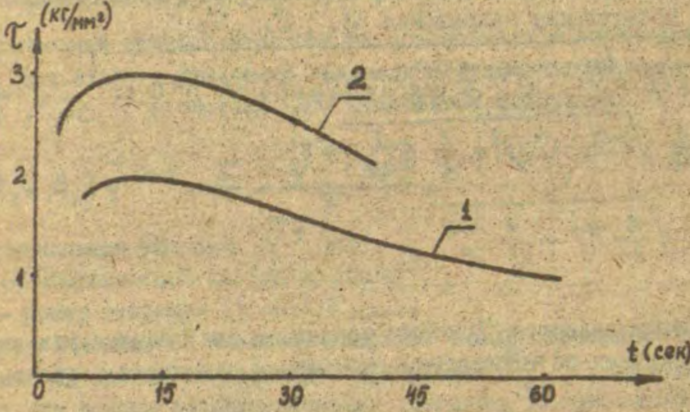

Рис.I. Величина максимальных сдвиговых напряжений в кристалле в зависимости от времени охлаждения t и режимов охлаждения $\alpha'_к$ (график I), $\alpha_к^2$ (график 2).

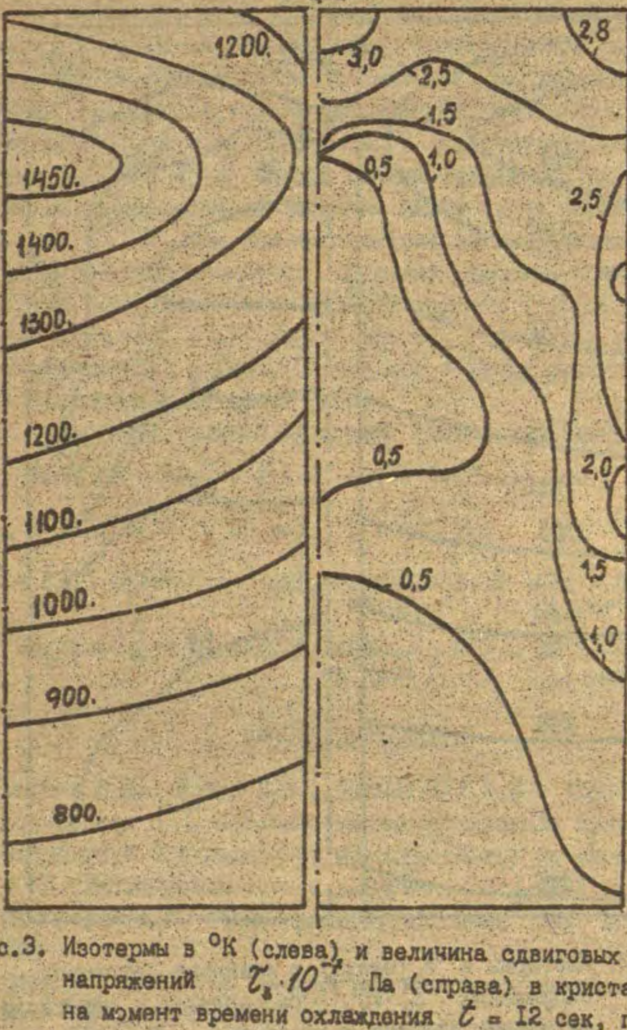

Рис.3. Изотермы в $^{\circ}$K (слева) и величина сдвиговых напряжений $\tau_{s} \cdot 10^{-4}$ Па (справа) в кристалле на момент времени охлаждения t = 12 сек, при $\alpha_{к} = 1,5 \cdot 10^{-2}$ $\frac{вт}{см^2\ град}$.

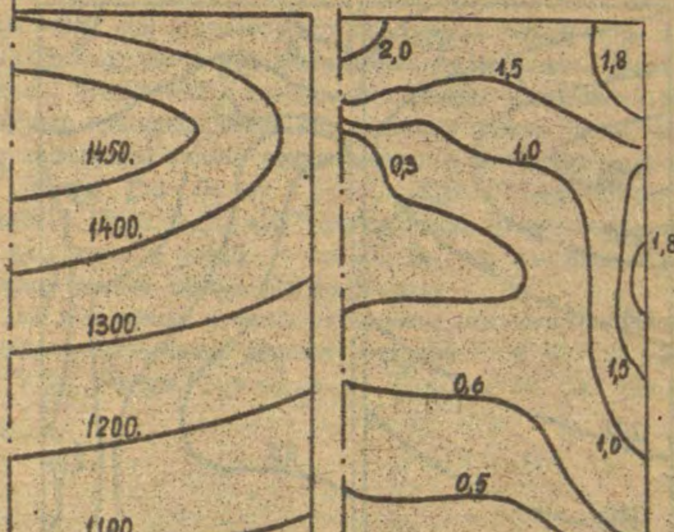

Рис.2. Изотермы в °К (слева) и величина сдвиговых напряжений $\tau_s \cdot 10^{-7}$ Па (справа) в кристалле на момент времени охлаждения t = 12 сек при $\alpha_к = 10^{-3} \frac{вт}{см^2 град}$.

На следующих двух рисунках дано распределение температуры и напряжений $\tau_з$ по всему кристаллу при различных $\alpha_к$ на момент охлаждения t =12 сек. Из рисунков видно наличие больших градиентов температуры, особенно в высокотемпературной области кристалла. В этой области на рис.2 $max\ \tau_з = 2\cdot 10^7$ Па при режиме охлаждения $\alpha_к^1$. На рис.3 наблюдается аналогичная картина, но максимальное $\tau_з = 3\cdot 10^7$ Па, так как интенсивный режим охлаждения $\alpha_к^2$. Подобные расчеты позволяют определить уровень максимальных сдвиговых напряжений и их местонахождение в процессе охлаждения слитков в различных тепловых условиях и таким образом определить режимы, безопасные с точки зрения возможного растрескивания кристаллов.

В расчетах приняты следующие физические константы:

$G = 5100\cdot 10^7$ Па; $\mu = \frac{1}{3}$; $\alpha = 0{,}48\cdot 10^{-5}\ \frac{1}{\text{град}}$;

$T_{пл} = 1410^\circ C$; $D = 80$ мм; $H = 120$ мм;

$\rho = 2300$ кг/м^3; $\lambda = 21{,}6\ \frac{\text{вт}}{\text{м}\cdot\text{град}}$; $C = 981\ \frac{\text{дж}}{\text{кг}\cdot\text{град}}$;

$\varepsilon = 0{,}7$; $\alpha_к^2 = 1{,}5\cdot 10^{-2}\ \frac{\text{вт}}{\text{см}^2\text{град}}$; $\alpha_к^1 = 10^{-3}\ \frac{\text{вт}}{\text{см}^2\text{град}}$.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Шашков Ю.М., Ионов В.И., Вишневская И.П., Аздонин Н.А., Козельская Н.В. Возможность интенсификации процессов охлаждения и выращивания монокристаллов из расплава. - В кн.:Теплопроводность и диффузия. Рига,1985,с.30-41.
2. Самарский А.А. Теория разностных схем. М., 1977. - 654 с.
3. Боли Б., Уэйнер Д. Теория температурных напряжений. М., 1964, - 518 с.
4. Вахрамеев С.С. Расчет термических напряжений в кристаллах,выращиваемых из расплава. - В кн.:Вопросы теории кристаллизации. Рига, 1976, с.101-122.

УДК 532.72

МЕТОД ОПРЕДЕЛЕНИЯ ХАРАКТЕРА КОНЦЕНТРАЦИОННОЙ ЗАВИСИМОСТИ КОЭФФИЦИЕНТА ДИФФУЗИИ ПО КИНЕТИКЕ СОРБЦИИ

А.Я.Аболтиньш (ЛГУ им.П.Стучки),
И.И.Яунроманс (ВНИИводполимер, г.Елгава)

Изучение долговечности полимерных изделий тесно связано с исследованием проникновения в них низкомолекулярных веществ (НМВ) окружающей среды. В случае, когда не имеет место химическая реакция или сильное взаимодействие НМВ с полимером, для математического описания процессов в изотропной среде используются I и II закон Фика [I]:

$$\vec{J} = -D \operatorname{grad} \tilde{c} \;, \tag{1}$$

$$\frac{\partial \tilde{c}}{\partial t} = \operatorname{div} D \operatorname{grad} \tilde{c} \,, \tag{2}$$

где $\vec{J}$ - поток НМВ, D - коэффициент диффузии, $\tilde{c}=\tilde{c}(x,y,z,t)$ - концентрация диффундирующего НМВ, t - время.

Для мембран, пленок справедливо условие $r_y, r_z \gg r_x$ (r_x, r_y, r_z - размеры образца в направлениях координат x, y, z, соответственно). Тогда вместо (I), (2) можно рассмотреть уравнения

$$J = -D \frac{\partial \tilde{c}}{\partial x} \,, \tag{3}$$

$$\frac{\partial \tilde{c}}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x}\left(D \frac{\partial \tilde{c}}{\partial x}\right). \tag{4}$$

Если известны коэффициент D и начальное распределение НМВ в образце, то решая уравнение (4) с граничными условиями, соответствующими реальному протеканию процесса, можно изучить кинетику изменения распределения диффундирующего НМВ.

Не менее важной задачей является определение D по кинетике изменения концентрации НМВ в образце, так как именно коэффициентом диффузии характеризуется влияние физико-химических свойств системы на скорость массопереноса. Надо отметить, что в эксперименте сорбции-десорбции фиксируется изменения усредненной по объему концентрации НМВ $\bar{\tilde{c}}_э(t)$. Отметим, что $\bar{\tilde{c}}_э(t)$ лишь при достижении равновесного значения c_p совпадает с локальной концентрацией $\tilde{c}(x,t)=c_p$ гомогенного образца.

В наиболее простых случаях можно считать $D=const$ и для описания сорбционно-десорбционного процесса в изотропной мембране решать задачу

$$\frac{\partial \tilde{c}}{\partial t} = D\frac{\partial^2 \tilde{c}}{\partial x^2} \quad, t>0\,,\ -l<x<l\,, \tag{5}$$

$$\tilde{c}\big|_{t=0} = c_н\,, \tag{6}$$

$$\tilde{c}(t,l) = \tilde{c}(t,-l) = c_p\,, \tag{7}$$

где $2l$ - толщина образца, $c_н$ - начальная концентрация НМВ в образце. Введем нормированную концентрацию $c(x,t)$ соотношением

$$c(x,t) = \frac{\tilde{c}(x,t)-c_н}{c_p-c_н}\,. \tag{8}$$

Тогда из решения задачи (5)-(7) получаем для усредненной нормированной концентрации $\bar{c}(t)$ выражение [2]:

$$\bar{c}(t) = 4\left(\frac{Dt}{4l^2}\right)^{1/2}\left(\frac{1}{\pi^{1/2}} + 2\sum_{k=0}^{\infty}(-1)^k\left[\frac{1}{\pi^{1/2}}\exp\left(\frac{-k^2l^2}{Dt}\right) - \frac{kl}{(Dt)^{1/2}}\,\mathrm{erfc}\frac{kl}{(Dt)^{1/2}}\right]\right) \tag{9}$$

или $$\bar{c}(t) = 1-\frac{8}{\pi^2}\sum_{m=0}^{\infty}\frac{1}{(2m+1)^2}\exp\left[-\frac{D(2m+1)^2\pi^2 t}{4l^2}\right]\,. \tag{9'}$$

Для ряда случаев коэффициент диффузии D практически не зависит от концентрации, однако на поверхности равновесная концентрация мгновенно не устанавливается. Тогда адекватное описание можно получить использованием граничных условий II или III рода [1,2,3,4]. Однако при рассмотрении диффузии НМВ в полимерных материалах D часто является функцией от локальной концентрации продиффундировавшего НМВ. В таких случаях решение обратной задачи - определение зависимости $D=D(c)$ - затруднено из-за отсутствия аналитического выражения для $c(x,t)$.

Обычно зависимость $D(c)$ определяется приближением, позволяющим использовать (5)-(7) путем введения интегрального коэффициента диффузии D_i соотношением

$$D_i=\int_0^{c_i} D(c)\,dc \Big/ \int_0^{c_i} dc\,, \qquad (10)$$

что позволяет использовать его в решениях кинетических уравнений в качестве постоянной величины [5]. Определив ряд экспериментальных значений D_i для выбранных значений c_i, можно путем дифференцирования $D_i(c)\big|_{c=c_i}$ по c получить величины $D(c_i)$. Такой метод требует проведения экспериментов для достаточного количества различных c_i. Очевидно, что при низких сорбционных емкостях материала (напр., для системы полиэтилен-вода) применение такого подхода затруднено, так как чувствительность аппаратуры не позволяет выбрать достаточно большое число различных c_i.

Другим подходом, позволяющим исследовать, в частности, концентрационную зависимость $D(c)$ и в случае малых сорбционных емкостей, является применение приближенных методов расчета и машинное моделирование эксперимента [6,7].

Нами б л разработан метод вычисления зависящего от концентрации коэффициента диффузии с использованием аппроксимации задачи (5)-(7) неявной разностной схемой и решением ее методом прогонки [8]. Эффективность метода зависит от задания исходной информации: приблизительной функциональной зависимости $D(c)$ и пределов изменеия коэффициентов $D_н$ и $D_р$. Здесь предлагается и один из вариантов приближенного определения величин $D_н$, $D_р$ и характера изменения $D(c)$.

Переменный коэффициент диффузии будем аппроксимировать кусочно-постоянной величиной, а в каждом интервале времени Δt_k, в котором D принимается постоянным, воспользуемся аналитическими выражениями (9) и (9') для средней концентрации $\bar{c}(t)$. Для расчетов ограничимся первым членом ряда (9):

$$\bar{c}(t) = 4\left(\frac{Dt}{4l^2}\right)^{1/2} \cdot \frac{1}{\pi^{1/2}} . \qquad (11)$$

Погрешность, связанная с аппроксимацией ряда (9) первым членом, при $\bar{c}(t) < 0{,}5$ не превышает 0,05% [3,4]. При $\bar{c}(t) > 0{,}5$ погрешность увеличивается (при $\bar{c}(t) = 0{,}8$ - 6%), и для расчета приближенных значений коэффициента диффузии при концентрациях, близких к равновесным, следует использовать первые два члена ряда (9').

Длина к-ого интервала, на котором приближенно можно заменить $D(c)$ постоянной величиной $D_к$, определяется условием

$$\left|\bar{c}_т^{(i)} - \bar{c}_э^{(i)}\right| < \delta , \qquad (12)$$

где $\bar{c}_т^{(i)}$, $\bar{c}_э^{(i)}$ - средняя концентрация для момента времени t_i, полученная из расчетов, соответственно, эксперимента, а δ - задаваемый допустимый предел погрешности. Коэффициент диффузии для (к+1)-ого интервала вычисляется по формуле, получаемой из (11):

$$D_{к+1} = D_к \left[\frac{\bar{c}_э^{(i+1)} + \bar{c}_э^{(i)}}{\bar{c}_т^{(i+1)} + \bar{c}_т^{(i)}}\right]^2 . \qquad (13)$$

Сумма в скобках помогает уменьшить влияние экспериментальной точки с большой погрешностью.

Для соблюдения баланса массы необходимо проводить коррекцию времени Δt, связанную с изменением скорости диффузии НМВ. Из (11) следует

$$\Delta t = t_i\left(\frac{D_к}{D_{к+1}} - 1\right) , \qquad (14)$$

или, используя соотношение (13),

$$\Delta t = t_i\left(\left[\frac{\bar{c}_т^{(i+1)} + \bar{c}_т^{(i)}}{\bar{c}_э^{(i+1)} + \bar{c}_э^{(i)}}\right]^2 - 1\right) . \qquad (15)$$

Отсчет времени для нового коэффициента диффузии начинается с $t_i^* = t_i + \Delta t$, ибо при таком t_i^* было бы достигнуто $\bar{c}_т^{(i)} = \bar{c}_э(t_i^*)$.

Из полученной таким образом совокупности коэффициентов диффузии $D_к$ с соответствующими концентрациями $\bar{c}_э^{(i)}$ можно судить лишь о возрастании или убывании значений D с изменением концентрации и о пределах изменения коэффициента диффузии $D(c)$. Понятно, что наиболее близкие к значениям $D_н$ и $D_р$ будут значения, рассчитанные по первому и последнему (K-ому) интервалу. Поэтому в качестве приближения $D_р$ можно взять коэффициент диффузии, рассчитанный по последнему интервалу на конечной стадии процесса. Если снимается полная кривая сорбции-десорбции, в качестве $D_н$ десорбционного процесса можно взять $D_р$ сорбционного процесса и наоборот. Значения $D_н$ и $D_1 = D_к$ при $к = 1$ должны различаться существеннее, так как на начальной стадии значение локальной концентрации вдоль оси x меняется от $c_н$ до $c_р$. Как показали расчеты, предел изменения $D(c)$ примерно на 20% больше по сравнению с разностью $|D_1 - D_K|$, определенной по расчетам из усредненных значений $\bar{c}(t)$.

Рассмотрим величину $\int_0^1 D^\alpha d\bar{c}$, где в качестве D^α используем зависимость коэффициента диффузии, определенную описанным ранее методом. Тогда

$$\int_0^1 D^\alpha d\bar{c} = \int_0^{\bar{c}_1} D_1 d\bar{c} + \int_{\bar{c}_1}^{\bar{c}_2} D_2 d\bar{c} + \ldots + \int_{\bar{c}_{K-1}}^1 D_K d\bar{c}, \qquad (17)$$

где K – число интервалов, использованных для аппроксимации постоянными коэффициентами D_i. Предположим, что интервалы, в пределах которых кинетика процесса аппроксимируется отрезком кинетики, соответствующей $D_i = const$, одинаковы, т.е. $\bar{c}_i - \bar{c}_{i-1} = \Delta\bar{c}_i = \Delta\bar{c}$ для $i = \overline{1,K}$.

Тогда вместо (17) можно писать

$$\int_0^1 D^\alpha d\bar{c} = \sum_{i=1}^{K} D_i \Delta\bar{c}. \qquad (18)$$

С учетом (11)

$$\int_0^1 D^\alpha d\bar{c} = D_1 \Delta\bar{c} + \frac{\pi l^2}{4} \Delta\bar{c}^3 \sum_{i=2}^{K} \frac{i^2}{t_i^*}. \qquad (19)$$

Учитывая (15), можно показать, что в случае выпуклой кверху зависимости $D(c)$ время t_i^* меньше, чем для вогнутой или линейной зависимости, если пределы изменения коэффициента диффузии одинаковы. Тогда (19) для выпуклой зависимости будет больше соответствующих интервалов для линейной $D(c_л)$ или вогнутой зависимости $D(c)$, т.е. в случае выпуклой зависимости $D(c)$ кривая $D^{\alpha}(\bar{c})$ пройдет выше $D^{\alpha}(c_л)$ для линейной зависимости, а в случае вогнутой - ниже.

Основываясь на вышесказанном, можем предложить следующий алгоритм для определения выпуклости или вогнутости кривой $D(c)$:

I. По данной методике из экспериментальной кривой сорбции (десорбции) $\bar{c}(t)$ найти совокупность $\{D_к\}$ и определить $D_н$ и $D_р$.

2. Методом прогонки с итерациями рассчитать кинетику $\bar{c}_л(t)$, используя линейную зависимость

$$D(c) = D_н + (D_р - D_н)c. \quad (20)$$

3. По данной методике обработать полученную кинетику $\bar{c}_л(t)$.

4. Сравнить полученные зависимости $D^{\alpha}(\bar{c})$ и $D^{\alpha}(\bar{c}_л)$. Если кривая $D^{\alpha}(\bar{c})$ проходит над кривой $D^{\alpha}(\bar{c}_л)$ $\left(\sum_{i=1}^{K} D_i \Delta\bar{c}_i > \sum_{i=1}^{N} D_i \Delta\bar{c}_{лi}\right)$, зависимость $D(c)$ имеет выпуклый кверху характер. Если $D^{\alpha}(\bar{c})$ проходит ниже $D^{\alpha}(\bar{c}_л)$ $\left(\sum_{i=1}^{\alpha} D_i \Delta c_i < \sum_{i=1}^{N} D_i \Delta\bar{c}_{лi}\right)$, - вогнутый характер.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

I. Crank J. The mathematics of diffusion. - Oxford: Clarendon press, 1979.-414 p.

2. Карслоу Г., Егер Д. Теплопроводность твердых тел. М.,1964.- 488 с.

3. Буйкис А.А., Метра А.Я., Яунроманс И.И. Об обработке данных сорбционных экспериментов при помощи ЭВМ на основе линейной теории диффузии.- В кн.: Применение модифицированных полимерных материалов в конструкциях мелиоративных систем. Елгава, 1983, с.47-53.

4. Аболтиньш А.Я. Математическое описание процесса сорбции.- В кн.: Прикладные задачи математической физики. Рига, 1983, с.3-12

5. Заиков Г.Е., Иорданский А.Л., Маркин В.С. Диффузия электролитов в полимерах. М.,1984, с.19-22

6. Самарский А.А. Теория разностных схем. М., 1977.-656 с.

7. Самарский А.А. Вычислительный эксперимент в задачах технологии.- Вестник АН СССР, 1984, № 3, с.77-88.

8. Аболтиньш А.Я., Буйкис А.А., Яунроманс И.И. Методика вычисления зависящего от концентрации коэффициента диффузии паров воды в полимерах.- В кн.: Физика и механика композиционных материалов на основе полимеров: Тезисы докладов XIII областной научно-технической конференции молодых ученых и специалистов. Гомель, 1984. с.16-17.

УДК 518.5:678.029

РАСЧЕТ ПРОЦЕССА ОБРАЗОВАНИЯ КОМПОЗИТНОГО ПОЛИМЕРНОГО МАТЕРИАЛА СПОСОБОМ ПРЕССОВАНИЯ ПРИ НАЛИЧИИ ГРАДИЕНТА ТЕМПЕРАТУРЫ

А.А.Буйкис, М.З.Шмите (ЛГУ им.П.Стучки, г.Рига),
Я.Я.Техтс (ВНИИводополимер, г.Елгава)

На современном этапе развития народного хозяйства требуется усовершенствование существующих и создание новых фильтрационных материалов. Хорошими фильтрационными свойствами обладают нетканые материалы. Однако их необходимо упрочнять, что может быть сделано при помощи полимерного каркаса в виде сетки. Единственным эффективным техническим решением соединения этих двух материалов, на наш взгляд, является использование перепада температуры при прессовании.

Цель настоящей работы состояла в создании математической модели, правильно описывающей основные факторы, которые формируют распределение температуры и динамику проникновения одного материала внутрь другого в композитной системе, состоящей из полиэтиленовой (ПЭ) сетки и нетканого холста из полиакрилонитрильных волокон (ПАН). Модель должна была дополнить результаты физического эксперимента в линейном прессе, который проводился так: образец нетканого холста из ПАНа с наложенной на него сеткой из ПЭ помещался в пресс, где он фиксированное время поддерживался под заданным давлением с воздействием температурного градиента (внешняя сторона пластины пресса, соприкасающаяся с холстом ПАНа поддерживалась при температуре нагревания T_3, вторая пластина поддерживалась при температуре охлаждения T_4). В сериях экспериментов варьировалось давление прессования, температура T_3 и длительность термоконтактирования. После каждого эксперимента определялась прочность образца Г, которая пропорциональна объему скрепления обоих материалов. Выяснилось, что при фиксированной T_3 происходит возрастание во времени прочности материала до предельной величины $Г_{пр}$. (Технические условия эксперимента позволяли находить величину прочности лишь для отдельных моментов времени.)

Изменение давления прессования изменяет лишь время достижения той же предельной величины прочности Гпр. Было установлено также, что увеличение $T_з$ приводит к пропорциональному увеличению Гпр.

Математическая модель процесса была сведена к чисто тепловой задаче путем введения "критической" температуры $T_к$, которая позволила учесть влияние давления прессования. Температура $T_к$ характеризует теплостойкость ПЭ: при нагреве его выше $T_к$ начинается проникновение волокон ПАНа внутрь ПЭ (было установлено экспериментально, что с ростом давления прессования происходит уменьшение $T_к$ по линейному закону). Была рассмотрена пространственно одномерная задача с координатной осью x по толщине материала с началом координат в точке соприкосновения ПАНа с нагревательной пластиной. Это оправдано, поскольку толщина материала мала по сравнению с другими размерами и температурный градиент от пластины направлен по оси x.

Рассмотрим сперва вопрос об уравнении распространения тепла внутри холста из ПАНа, который представляет собой пористое тело с пористостью m. Так как температуропроводность воздуха, находящегося в порах, приблизительно в 10^3 раз больше температуропроводности ПАНа, была рассмотрена сперва постановка, в которой эта зона рассматривалась как гетерогенная среда без локального термодинамического равновесия. Основываясь на работах [1],[2] по исследованию температурных полей в нефтяных пластах, выпишем систему уравнений для каждой из фаз, содержащих слагаемые с коэффициентом межфазного теплообмена α_{02}, отнесенным к единице объема:

$$\begin{cases} m c_0 \rho_0 \dfrac{\partial T_0}{\partial t} = m k_0 \dfrac{\partial^2 T_0}{\partial x^2} + \alpha_{02}(T_2 - T_0), \\ (1-m) c_2 \rho_2 \dfrac{\partial T_2}{\partial t} = (1-m) k_2 \dfrac{\partial^2 T_2}{\partial x^2} + \alpha_{02}(T_0 - T_2). \end{cases} \qquad (1)$$

Нижний индекс "0" всегда будет относиться к воздуху, "1" - к ПЭ, "2" - к ПАНу, c_i, ρ_i, k_i - теплоемкость, плотность и теплопроводность "i"-ой фазы. Для простоты мы здесь пренебрегаем зависимостью коэффициентов от температуры. Пренебрегаем также зоной ПЭ, считая, что зона ПАНа неограничена. Тогда к (1) добавляются условия:

$$T_i\big|_{t=0} = T^0;\ T_i\big|_{x=0} = T^1;\ T_i\big|_{x\to\infty} \to T^0,\ i = 0,2. \qquad (2)$$

Воспользуемся работой [I], в которой даны результаты экспериментального и теоретического анализа по определению α_{02} в искусственной пористой среде, составленной из пластинок или шариков. В [I] дана следующая формула для осредненной по времени величины α_{02} в среде, составленной из шариков радиуса r :

$$\alpha_{02} = 15\,\frac{K_2}{r^2}. \qquad (3)$$

Волокна ПАНа близки к цилиндрам с радиусом r =0.94 10^{-4}см и K_2 =0,83 10^{-4} кал/см с °С. Тогда для α_{02} получаем оценку α_{02} =1,5 10^5 кал/см с °С. Такую же по порядку величину для α_{02} дает автор монографии [3]. Но в [I] -[3] рассматривается поток жидкости в пористой среде. Поэтому оценим еще α_{02} , исходя из задачи о свободной конвекции газа около бесконечного цилиндра. Согласно [4], [5] имеем

$$\alpha_{02} = \frac{K_2}{r}\,Nu\cdot S, \qquad (4)$$

где Nu - число Нуссельта, S - удельная поверхность. При рассматриваемом нами перепаде температур порядка 100°С и атмосферном давлении имеем Nu =0,5. Так как S =1,2 10^4 1/см, то получаем из (4), что α_{02} =0,56 10^4 кал/см³ с °С, т.е. обе оценки α_{02} отличаются около 24 раз. Однако автор [I] указывает, что формула (3) дает завышенную оценку, так как:

1) реально нет принятого в [I] идеального теплового контакта между фазами;

2) тепловой контакт происходит не по всей полной поверхности.

Наконец, удельная поверхность цилиндра меньше удельной поверхности шара. Для дальнейшего возьмем меньшее α_{02} = = 0,56 10^4: это дает завышение времени выравнивания локальных температур фаз. С учетом большой величины α_{02} мы можем пренебречь членами теплопроводности в (I). Это позволяет от (I), (2) перейти к задаче по отношению к

$$\theta(t)=T_0(t)-T_2(t):\quad \frac{d\theta}{dt}+\beta\theta=0,\ \theta|_{t=0}=\Delta T,$$

где

$$\Delta T=T^1-T^0,\ \beta=\beta_0+\beta_2=\alpha_{02}\left(\frac{1}{m c_0\rho_0}+\frac{1}{(1-m)c_2\rho_2}\right).$$

Решение ее имеет вид $\theta(t)=\Delta T\exp(-\beta t)$. Если в качестве характерной температуры возьмем 100°С, то по [5] получаем $\beta_0=7{,}3\ 10^7$ 1/С, а $\beta_2=2\ 10^4$ 1/С. Если принять за время выравнивания температур момент t^*, когда $\theta(t^*)=10^{-2}\Delta T$, то получим, что $t^*\lesssim 2\ 10^{-7}$с. Отсюда следует, что можно зону ПАНа рассматривать как однофазную, со следующими осредненными теплофизическими свойствами:

$$K=mK_0+(1-m)K_2,\qquad c\rho=mc_0\rho_0+(1-m)c_2\rho_2. \tag{5}$$

Этот результат о возможности осреднения теплофизических свойств в зоне ПАНа фактически очевиден из-за тонкости волокон ПАНа. Мы остановились на этом вопросе потому, что предлагаемая нами модель может быть применена для моделирования других композитных систем, в которых возможность или невозможность осреднения требует внимательного рассмотрения.

Математическая модель для описания температурного поля в композитном материале окончательно была взята в виде квазилинейного уравнения теплопроводности, с коэффициентами $c(T)$, $\rho(T)$, $K(T)$:

$$c\rho\frac{\partial T}{\partial t}=\frac{\partial}{\partial x}\left(K\frac{\partial T}{\partial x}\right),\qquad 0<x<l(t),\quad t>0 \tag{6}$$

вместе с начальным условием

$$T|_{t=0}=T^* \tag{7}$$

и граничными условиями, о которых будет сказано далее. Толщина материала $l(t)$ является переменной, причем невозрастающей величиной. Имеем, очевидно: $l(0)=l_1+l_2$, где l_1 - длина зоны ПЭ, l_2 - длина зоны ПАНа. В дальнейшем вся область $x\in[0,\ l(t)]$ состоит из двух или трех зон: I) Зона ПАНа с воздухом в порах: $0 \le x \le \ell_0(t)$, где $\ell_0(t) \ge 0$ – невозрастающая функция с условием $\ell_0(0) = \ell_2$ ($\ell_0(t)$ убывает по мере проникновения ПЭ в поры ПАНа); 2) зона смешения ПАНа с ПЭ. $\ell_0(t) \le x \le \ell_2$, причем в начальный период времени эта зона отсутствует; 3) зона чистого ПЭ: $\ell_2 \le x \le \ell(t)$ (считается, на основе данных эксперимента, что $\ell(t) \ge \ell_2 + \Delta\ell$, $\Delta\ell > 0$). Коэффициент теплопроводности для каждой из зон вычисляется так:

$$K = \begin{cases} mK_0 + (1-m)K_2, & 0 \le x \le \ell_0(t) - 0, \\ mK_1 + (1-m)K_2, & \ell_0(t) + 0 \le x \le \ell_2 - 0, \\ K_1, & \ell_2 + 0 \le x \le \ell(t), \end{cases}$$

аналогично вычисляется $c \cdot \rho$. В точках x^* разрыва коэффициентов (при $x = \ell_0(t)$ и $x = \ell_2$) вместо (6) выполняются условия сопряжения

$$T\big|_{x=x^*-0} = T\big|_{x=x^*+0}, \quad K\frac{\partial T}{\partial x}\Big|_{x=x^*-0} = K\frac{\partial T}{\partial x}\Big|_{x=x^*+0} \quad (8).$$

Выпишем теперь граничные условия для (6). При их выводе надо учесть, что коэффициент теплопроводности пластин K_3 в $\sim 10^3$ раз больше коэффициентов теплопроводности всех материалов композита. Поэтому можно для пластины пресса писать стационарное уравнение теплопроводности. Тогда условия сопряжения в точке $x = 0$ дают первое граничное условие:

$$\left[K\frac{\partial T}{\partial x} + \frac{K_3}{\ell_3}(T_3 - T)\right]_{x=+0} = 0, \qquad (9)$$

где ℓ_3 – расстояние от нагревательного элемента до поверхности материала. Аналогично вычисляется второе граничное условие

$$\left[K_1\frac{\partial T}{\partial x} - \frac{K_3}{\ell_4}(T_4 - T)\right]_{x=\ell(t)-0} = 0, \qquad (10)$$

где ℓ_4 – толщина охлаждающей пластины.

Остается решить вопрос о способе моделирования процесса пенетрации, происходящем при температуре $T_к$. При этой температуре для полимерных материалов не происходит выделение скрытой теплоты плавления, значит, нет необходимости ставить специальное условие типа Стефана. Поэтому можно поступить просто: при разностном решении задачи (6)-(10), после вычисления на очередном временном слое разностного решения проверяется выполнение условия

$$T|_{x=\ell_2+h} \geqslant T_K, \tag{11}$$

где h - шаг по x разностной сетки. При выполнении (11) все поле температуры вместе с границей зоны ПЭ сдвигается на единицу влево. Если новое поле удовлетворяет (11), сдвиг влево повторяется. Таким образом, при первом сдвиге влево возникает зона смешения ПЭ и ПАНа, которая постепенно увеличивается, соответственно уменьшая зону ПЭ и зону ПАНа с воздухом в порах. Расчет проводился до установления процесса.

Вычислительная сторона характеризуется следующим: задача (6)-(10) была аппроксимирована консервативной чисто неявной безитерационной схемой с постоянными шагами: шагом h и временным шагом τ с порядком аппроксимации $O(h^2+\tau)$ (схема а) по [6 гл.VIII]).

Была рассмотрена система с ℓ_1 =0,14, ℓ_2 =0.014, ℓ_3 =0,5, ℓ_4 =0,1 см, пористостью m =0,43. Свойства воздуха были взяты из [5], ПЭ - из [7] (из рис.1.36,1,38, 1.39). В памяти ЭВМ вводились таблицы величин c, ρ, K для опорных значений температуры; между ними проводилась линейная интерполяция. Свойства ПАНа принимались постоянными: K_2 =0,88 10^4 кал/см с °С, $c_2\rho_2$ =0,585 кал/см^3 °С. Далее, $T^0=T_4=50°C$, $T_3=120,150,180°C$; $T_K=70,80,90°C$. На основе методических расчетов было занято $h=10^{-3}$см, $\tau=5\ 10^{-3}$с.

На рис.1 дано изменение общей толщины материала по времени в зависимости от T_3. На рис.2. показано распределение температуры по толщине материала. Как следует из рис.I, имеется некоторый промежуток -"инкубационный" период, в течение которого происходит просто нагрев системы без изменения толщины ее. После начала пенетрации граница ПЭ продвигается к внешей стороне нагревающей пластинки и достигает ее. Но на этом не заканчивается процесс уменьшения $\ell(t)$. Физически это означает уход размягченного ПЭ в холст ПАНа в сторону от первоначального места расположения сетки ПЭ. Это приводит к увеличению объема ПАНа и ПЭ, т.е. к увеличению прочности материала и к пропорциональному уменьшению воздухопроницаемости композита (этот факт также был зафиксирован в экспериментах). На рис.2 видно весьма немонотонное изменение температуры на месте соприкосновения материала и нагревательной пластины. Это указывает на невозможность замены граничного условия (9) на более простое условие I-го рода: $T|_{x=0}=T_s$. Отметим, наконец, что из рис.2 видно, что после начала процесса пенетрации в точке $x=\ell_2\equiv\ell_к$ выполняется условие $T=T_к$.

Заметим, что изменением граничных условий можно описать и динамику производства композитного материала с помощью каландрирования, тем самым можно рассматривать вопросы оптимизации технологии их изготовления.

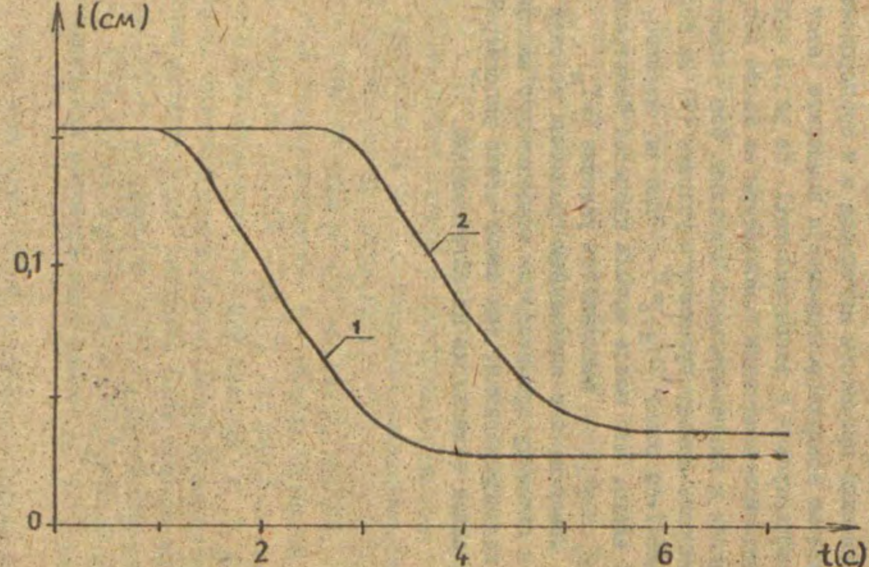

Рис.I. Изменение толщины материала $\ell(t)$ во времени при $T_к=70^oC$.
I - $T_з=150^oC$; 2 - $T_з=120^oC$.

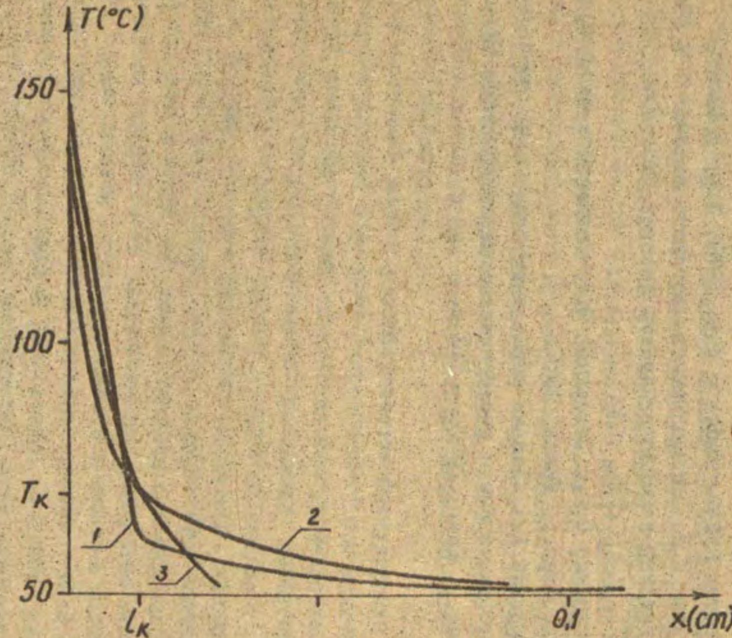

Рис.2. Распределение температуры по толщине материала при $T_к=70^{\circ}C$, $T_з=150^{\circ}C$.
I - t =0,5с, 2 - t =2с, 3 - t =4с.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Малофеев Г.Е. О коэффициенте теплоотдачи от теплоносителя блокам трещиноватого пласта. - Известия вузов. Нефть и газ, 1979, № 1, с.29-35.
2. Буйкис А.А. Тождественность задач определения температурных полей в однородном и трещиноватом пластах. - Известия вузов. Нефть и газ, 1979, № 3, с.49-52.
3. Чекалюк Э.Б. Термодинамика нефтяного пласта. - М.1965.
4. Физический энциклопедический словарь. М., 1960, т.1; 1963, т.3; 1965, т.4;
5. Мартыненко О.Г., Соковишин Ю.Л. Свободно конвективный теплообмен. Минск, 1982.
6. Самарский А.А. Теория разностных схем. - М.,1983.-616 с.
7. Теплофизические и реологические характеристики полимеров. - Киев, 1977. - 112 с.

УДК 517.949.8:532.546

ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ ФИЛЬТРАЦИОННОГО ПОТОКА С ВОДНЫМИ ГРАНИЦАМИ

В.Ф.Демченко (ИЭС им.Е.О.Патона АН УССР)
Л.И.Демченко (Киевский государственный университет)

Многочисленные прикладные задачи теории фильтрации связаны с исследованием взаимодействия фильтрационного потока с жидкостью, полностью или частично заполняющей некоторые объемы внутри фильтрационного пространства: каверны, трещины, скважины и т.п. Водные границы, встречающиеся на пути фильтрационного потока, могут оказывать решающее влияние на величину и направление скорости фильтрации за счет перехвата фильтрационного потока, аккумуляции воды во внутренних резервуарах, итенсификации переноса вдоль трещины и др.факторов.

В настоящей работе рассматриваются формулировки математических моделей подземной гидродинамики при наличии в пористой среде внутренних объемов жидкости, макроскопические масштабы которых значительно превосходят характерные геометрические параметры пустот в пористой среде.

I. Модели. Основное физическое допущение, используемое при построении модели, связано с характером движения жидкости, заполняющей внутренние пустоты больших макроскопических масштабов (в дальнейшем они именуются кавернами). Будем считать движение жидкости в каверне достаточно медленным, так что в каждый момент времени в жидкости сохраняется гидростатическое равновесие. Подобное приближение, как правило, хорошо выполняется, если движение жидкости в каверне обусловлено воздействием лишь фильтрационного потока.

Рассмотрим в фильтрационном пространстве D каверну D_v переменного сечения с границей Γ_v (рис.I). В области фильтрации $D_\varphi = D \setminus D_v$ будем считать выполненным уравнение

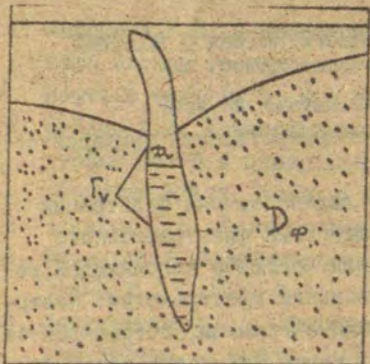

Рис.I. Схема к математическому описанию задачи

$$div(k\,grad\,h) = f, \quad (I)$$

где h - пьезометрический напор, k - коэффициент фильтрации f - производительность объемных источников жидкости.

Пусть каверна D_V полностью заполнена жидкостью, фильтрующейся из пористой среды. Тогда для несжимаемой жидкости имеет место следующее балансное соотношение:

$$\int_{\Gamma_V} W_n\, ds = 0, \quad (2)$$

где $W_n = -k(grad h)_n$ - проекция скорости фильтрации на направление нормали $\vec{n}$ к границе Γ_V. Обозначим через h_V пьезометрический напор жидкости в каверне. В силу принятых предположений о гидростатическом равновесии жидкости в каверне имеем:

$$h_V = const \quad \text{для} \quad \bar{x} \in D_V.$$

Условия сопряжения напоров на границе Γ_V запишем в виде:

$$h|_{\bar{x}\in\Gamma_V} = h_V, \quad (3)$$

В том случае, когда на границе Γ_V действует сосредоточенное гидравлическое сопротивление, вместо (3) будем писать:

$$\kappa (\mathrm{grad}\, h)_n \big|_{\bar{x} \in \Gamma_v} = \alpha (h_v - h\big|_{\bar{x} \in \Gamma_v}) . \tag{4}$$

Здесь $\alpha = R^{-1}$, R - характеризует удельную величину поверхностного гидравлического сопротивления.

Будем считать, что на внешней границе S области D заданы некоторые граничные условия, которые совместно с условиями (2), (3) или (2), (4) определяют единственное решение уравнения (I) в области $D_ф$. Характерной особенностью рассматриваемой задачи является граничное условие (3), которое по своему типу относится к граничному условию первого рода, однако содержит подлежащий определению параметр - пьезометрический напор h_v жидкости в каверне. Интегральное соотношение (2) является тем дополнительным уравнением, которое привлекается для нахождения этого параметра.

Рассмотрим случай каверны, частично заполненной жидкостью. Обозначим через D_v^L водную часть каверны, $\Gamma_{v,L}$ - ее поверхность. Составим уравнение массового баланса жидкости в каверне

$$\frac{dm_v}{dt} = \rho \int\limits_{\Gamma_{v,s}} \kappa (\mathrm{grad}\, h)_n \, ds . \tag{5}$$

где m_v - массосодержание каверны, ρ - плотность жидкости, а интегрирование в правой части (5) распространяется по контуру $\Gamma_{v,s}$, охватывающему водную часть поверхности Γ_v, включая и промежуток высачивания.

Для несжимаемой жидкости имеем: $m_v = \rho V(t)$, где $V(t)$ - объем жидкости в каверне в момент времени t. В общем случае переменного во времени объема D_v^L справедливо соотношение

$$\frac{dV}{dt} = \frac{d}{dt} \int\limits_{D_v^L} dV = \int\limits_{\Gamma_{v,L}} v_n \, ds,$$

где $v_n = (\vec{v}, \vec{n})$ - проекция вектора скорости $\vec{v}$ перемещения границы $\Gamma_{v,L}$ на направление нормали $\vec{n}$ к ней. Так как изменяемым элементом границы $\Gamma_{v,L}$ будет в этом случае свободная поверхность жидкости, то $dV/dt = S(t)v_z(t)$.

Здесь $S(t)$ - площадь свободной поверхности, $v_z(t)$ - скорость ее перемещения. Уровень $\ell(t)$ свободной поверхности, отсчитываемый от некоторого горизонтального водоупора, связан с давлением P в газовой полости каверны и пьезометрическим напором при помощи соотношения

$$\ell(t) = h_v - \frac{P}{\rho}. \tag{6}$$

Дифференцируя (6) по t, получим

$$v_z = \frac{dh_v}{dt} - \frac{1}{\rho}\frac{dP}{dt}.$$

Тогда уравнение массового баланса (5) можно представить в виде

$$S(t)\left(\frac{dh_v}{dt} - \frac{1}{\rho}\frac{dP}{dt}\right) = \int_{\Gamma_{v,S}} k(\operatorname{grad} h)_n \, dS. \tag{7}$$

Во многих случаях давление в газовой полости можно считать постоянным. Тогда $dP/dt = 0$, и условие (7), так же, как и (2), замыкает математическую модель взаимодействия фильтрационного потока с водной границей каверны в смысле определения искомого пьезометрического напора h_v, а следовательно, и уровня свободной поверхности. Соотношение (7) требует задания начального условия для h_v, которое находится из (6) по исходному уровню свободной поверхности $\ell_0 = \ell(0)$ в момент времени $t=0$,

$$h_v(0) = \ell_0 - \frac{P}{\rho}.$$

Заметим, что в случае каверны переменного сечения условие (7) является нелинейным, т.к. $S(t)=S(h_v)$.

Таким образом, при решении задачи фильтрации в пористой среде с полостями, полностью или частично заполненными жидкостью, на водной границе полости задаются граничные условия первого (3) или третьего рода (4), в которых параметр h_v остается неизвестным и подлежит определению из интегрального соотношения (2) или (7), связывающего удельные расходы жидкости на водной границе полости. По своему типу условие (7) является многомерным аналогом условий типа сосредоточенной теплоемкости. Дальнейшее уточнение рассматриваемой модели взаимодействия фильтрационного потока с водными границами может быть связано с отказом от предположения $P=const$. В этом случае в газовой полости D_v^b следует по типу (7) выписать уравнение массового баланса газа и дополнить его уравнением состояния. Для определения расхода газа через границу Γ_v^b требуется, кроме того, решать уравнение фильтрации газа в пористой среде.

Рассмотренные модели остаются в силе, если вместо (I) динамика движения грунтовых вод описывается уравнением параболического типа.

Обобщим постановку задачи напорной фильтрации на случай взаимодействия фильтрационного потока с M полостями, полностью заполненными жидкостью. Рассмотрим многосвязную область $D=D_0 \cup (\bigcup_{m=1}^{M} D_m)$, где D_0 - область фильтрации, D_m - каверны. Введем обозначения: S - граница D, Γ_m - границы областей D_m, и примем, что Γ_m не пересекаются с S. В D_0 будем считать выполненным уравнение фильтрации

$$div(k\,grad\,h)=f, \quad \bar{x}\in D_0 \tag{8}$$

с граничными условиями первого рода на внешней границе

$$h(\bar{x})=H(\bar{x}), \quad \bar{x}\in S, \tag{9}$$

где $H(\bar{x})$ - задано. На границе Γ_m в соответствии с (2), (4) запишем условия в виде

$$K(\operatorname{grad} h)_n|_{\bar{x}\in\Gamma_m} = \alpha_m(h_v^{(m)} - h|_{\bar{x}\in\Gamma_m}), \tag{I0}$$

$$\int\limits_{\Gamma_m} K(\operatorname{grad} h)_n\, ds = 0, \quad m=\overline{1,M}. \tag{II}$$

В задаче (8)-(II) требуется определить функцию $h(\bar{x})$ и параметры $h_v^{(m)}$. Наличие интегральных условий (II) усложняет численное решение сформулированной задачи, т.к. приводит к необходимости решения системы сеточных уравнений с матрицей сложной структуры. Покажем, что задача (8)-(II) может быть сведена к решению $M+1$ -ой задачи для уравнения вида (8) со смешанными граничными условиями, числовые параметры в которых известны.

2. <u>Метод решения.</u> Представим решение $h(\bar{x})$ в виде

$$h(\bar{x}) = h_0(\bar{x}) + \sum_{i=1}^{M} h_v^{(i)} h_i(\bar{x}), \tag{I2}$$

где $h_0(\bar{x})$ и $h_i(\bar{x})$ являются решением следующих задач

$$\operatorname{div}(K \operatorname{grad} h_0) = f, \quad \bar{x}\in D_0; \tag{I3}$$

$$h_0|_{\bar{x}\in S} = H(\bar{x}), \quad K(\operatorname{grad} h_0)_n|_{\bar{x}\in\Gamma_m} = -\alpha h_0|_{\bar{x}\in\Gamma_m};$$

$$\operatorname{div}(K \operatorname{grad} h_i) = 0, \quad i=\overline{1,M}, \quad \bar{x}\in D_0,$$

$$h_i|_{\bar{x}\in S} = 0, \quad K(\operatorname{grad} h_i)_n|_{\bar{x}\in\Gamma_m} = \alpha(\delta_{i,m} - h_i|_{\bar{x}\in\Gamma_m}), \tag{I4}$$

где $\delta_{i,m}$ - символ Кронекера. Решая подходящим численным методом задачи (13), (14), определим искомые функции $h_i(\bar{x})$, $i=\overline{0,M}$ и вычислим потоки на границах Γ_m. Используем представление (12) в интегральных условиях (11). Имеем следующую систему линейных алгебраических уравнений для определения неизвестных пьезометрических напоров $h_v^{(i)}$ в полостях D_m.

$$\int\limits_{\Gamma_m} K(\operatorname{grad} h_0)_n\, ds + \sum_{i=1}^{M} h_v^{(i)} \int\limits_{\Gamma_m} K(\operatorname{grad} h_i)_n\, ds = 0, \quad i=\overline{1,M}. \tag{15}$$

После решения системы (15) искомая функция $h(\bar{x})$ находится из (12).

Аналогичный подход может быть развит для решения задачи (8)-(10) с интегральным условием (см.(7)) вида

$$g(h_v^{(m)}) \frac{dh_v^{(m)}}{dt}\Big|_{\bar{x}\in\Gamma_m} = \int\limits_{\Gamma_m} K(\operatorname{grad} h)_n\, ds + q. \tag{16}$$

Если каждая из полостей Γ_m имеет постоянное сечение, то $g(h_v^{(m)}) = const$ и условие (16) становится линейным. В этом случае решение задачи (6)-(10) может быть представлено в виде (12). В противном случае требуется линеаризация условия (16), которая может быть осуществлена путем вычисления $g(h_v^{(m)})$ на предыдущем временном слое или предыдущей итерации при организации итерационного процесса по нелинейности в условии (16).

3. Вычислительный эксперимент. Рассмотрим фильтрацию воды под зданием насосной станции в предположении, что под ее основанием в результате суффозии или осадочных явлений образовалась полость, по размеру совпадающая с основанием станции. Геометрический размер полости в вертикаль-

ном сечении считаем значительно меньше ее длины (рис.2), гидравлическим сопротивлением полости пренебрегаем. Способ задания граничных условий представлен на рис.2, коэффициент фильтрации задавался равным 0,25 м/сут. Задачи (13), (14) решались методом конечных разностей в сеточной области 50х50 узлов. Контурный интеграл в (11) рассчитывался по формуле трапеций с учетом потока лишь через лицевую (обращенную к пористой среде) сторону границы Γ_V . На рис.3 приведены линии равных напоров (штриховые линии) и распределение скоростей фильтрации для двух вариантов с учетом полости под зданием насосной станции (рис.3,а) и без него (рис.3,б). Обозначим $\vec{W} = (W_x, W_z)$ - вектор скорости фильтрации. Распределение скоростей в обоих рассматриваемых вариантах обладает следующей особенностью, которая вытекает из способа задания граничных условий:

$$W_x(X_0+X', Z) = W_x(X_0-X', Z), \quad W_z(X_0+X', Z) = -W_z(X_0-X', Z),$$

где $X = X_0$ - вертикальное сечение по линии симметрии станции, $0 < X' < X_0$. Это обуславливает такое распределение напора в области фильтрации, при котором линия симметрии $X = X_0$ является линией равного пьезометрического напора, причем величина напора на этой линии ($X = X_0$) равна среднеарифметическому напоров, создаваемых водохранилищами по обе стороны насосной станции. Естественно, что напор в каверне и напор на линии симметрии $X = X_0$ должны совпадать. Этот очевидный результат использовался нами в качестве теста для предлагаемой методики. Заметим, что достаточно каким-либо образом нарушить симметрию $W_x(X, Z)$ или антисимметрию $W_z(X, Z)$, чтобы величину h_v на Γ_V было невозможно предсказать из качественных соображений. Особенно заметное влияние оказывает внутренняя водная граница на распределение скоростей в фильтрационном потоке в непосредственной близости от основания станции. В области избыточного (по сравнению с h_v) напора фильтрационный поток устремляется в каверну (правая часть рис.3,а - под зданием станции) и лишь на достаточной глубине принимает естествен -

ное горизонтальное направление. Напротив, в зоне недостаточного $(h(x,z) < h_v)$ напора происходит отток воды из каверны (левая часть рис.3,а), вектор скорости на Γ_v направлен вниз. Указанные особенности в распределении фильтрационного потока влияют и на суточный расход Q воды под зданием станции: Q =0,5 м^2/сут, при наличии каверны и Q =0,37 м^2/сут-при ее отсутствии.

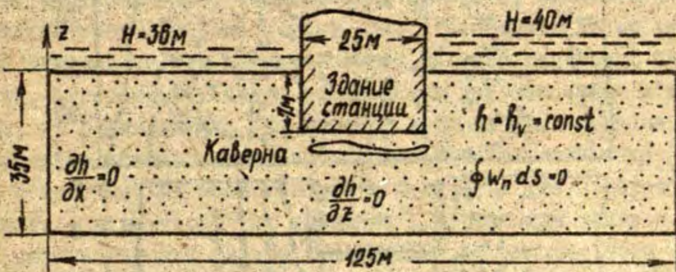

Рис.2. Задание граничных условий.

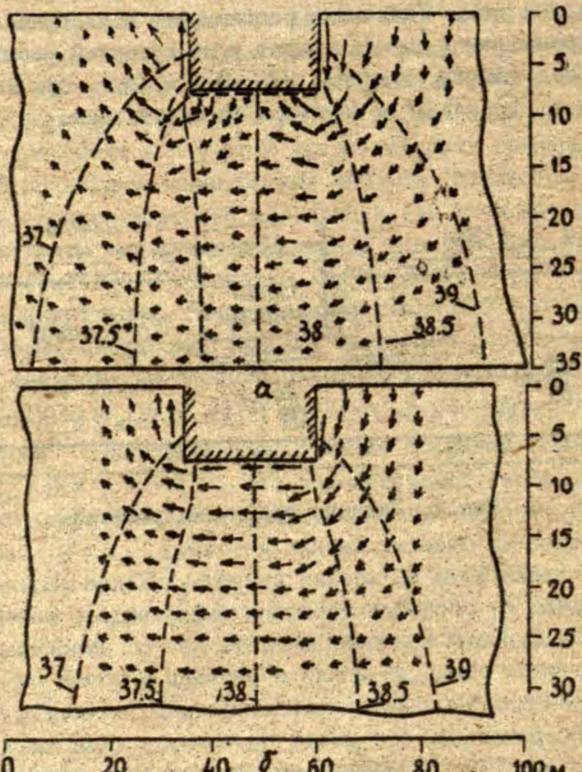

Рис.3. Движение подземных вод под зданием станции: ——→ - 4 см/сут; - - - - линии равных напоров.

УДК 519.6

О ПРОГРАММНОМ ОБЕСПЕЧЕНИИ ВЫЧИСЛИТЕЛЬНОГО ЭКСПЕРИМЕНТА В ЗАДАЧАХ НЕИЗОТЕРМИЧЕСКОЙ ДВУХФАЗНОЙ МНОГОКОМПОНЕНТНОЙ ФИЛЬТРАЦИИ

А.А.Буйкис, А.Б.Золотухин, В.Б.Таранчук
(ЛГУ им.П.Стучки, г.Рига; МИНХ и ГП им.И.М.Губкина, г.Москва; НИИ ПФП БГУ им.В.И.Ленина, г.Минск)

Интенсивная работа по решению задач разработки нефтяных месторождений, исследованию процессов фильтрации в пористой среде привела к тому, что в настоящее время имеется широкий спектр математических моделей изучаемых явлений, алгоритмов расчета возникающих краевых задач и программ, их реализующих. Это создает предпосылки организации и широкого использования вычислительного эксперимента [1] для теоретических исследований и получения результатов практического характера. Тем не менее развитая для решения задач математической физики методология вычислительного эксперимента не дала столь ощутимых результатов в теории неизотермической многофазной многокомпонентной фильтрации как, например, в динамике плазмы, гидроаэромеханике, тепломассопереносе. Объяснением этого являются объективные причины, обусловленные специфическими свойствами решений задач многофазной фильтрации [2]. Другим сдерживающим обстоятельством является, на наш взгляд, отсутствие должного внимания к проектированию, разработке, всестороннему тестированию и внедрению программ расчета задач совместной фильтрации воды и нефти применительно к условиям заводнения, а в особенности — вытеснения в сочетании с новыми методами повышения нефтеотдачи пластов.

В настоящей статье рассматриваются вопросы проектирования и разработки программного обеспечения численного моделирования процессов вытеснения нефти. Развивается подход, основанный на разработке комплекса программ, что связано с условиями их эксплуатации и создания. А именно, отдельные программы комплекса (например, для решения одномерных задач) предполагается использовать на универсальных ЭВМ, а при их отсутствии – на мини-ЭВМ. С другой стороны, разработка комплекса, а не пакета программ не предполагает овладение пользователем специальными входными языками: синтеза программ, управления заданиями и базами данных, и, соответственно, разработку сервисного программного обеспечения пакета. В рамках комплекса разработка новых программ, сопровождение и модернизация существующих могут проводиться специалистами, владеющими только языком ФОРТРАН, что значительно расширяет число возможных пользователей комплекса, но требует принятия и выполнения в его рамках определенных соглашений и разработки стандартов и правил комментирования модулей. Другим положительном аспектом проекта комплекса является возможность его систематического пополнения новыми программными средствами в различных организациях, которые используют для этой цели разную вычислительную технику и работают в разных операционных системах.

При последующем изложении материала не ставится цель дать всеобъемлющее описание правил и принципов разработки программ, а обсуждаются положения, которые способствуют ускоренному созданию программ с возможностью разностороннего обмена ими и использования разными организациями. По ограничениям технического характера не приводятся математические постановки, численные методы и результаты применения программ для расчета конкретных задач, но даны ссылки на соответствующие работы. В статье приведен модульный анализ вычислительного алгоритма, даны правила идентификации программ комплекса, их типовая структура.

I. <u>О математических моделях.</u> В настоящее время развиты различные модели процессов вытеснения нефти и новых методов повышения нефтеотдачи, основанных на сочетании заводнения с применением различных химических реагентов, теплоносителей и внутрипластового горения. Без ограничения возможностей тестирования и использования различных моделей, в настоящем комплексе все применяемые модели построены при следующих допущениях: крупномасштабное приближение, недеформируемый пористый пласт, фильтруются две несмешивающиеся несжимаемые фазы, сорбционные процессы равновесны, дроссельные эффекты отсутствуют.

При описании процессов вытеснения используются модели совместной фильтрации ньютоновских жидкостей, движение которых описывается обобщенным законом Дарси, или когда хотя бы одна из фаз является вязкопластической. Постановки возникающих краевых задач содержатся, например в [2,3]. Учет процессов, происходящих при применении физико-химических или тепловых методов повышения нефтеотдачи, производится с использованием моделей, описанных, например, в [2,4-6].

2. <u>О численных методах</u>. Возникающие краевые задачи представляют собой систему сложных нелинейных уравнений с частными производными, аналитическое исследование которых допустимо только в исключительных частных случаях. Решение задач, относительно полно описывающих пластовые системы, возможно, как правило, на основе применения численных методов. В настоящем комплексе в основном используются конечно-разностные методы, развитие и применение которых для расчета задач двухфазной фильтрации можно проследить по работам Вахитова Г.Г., Булыгина В.Я., Чудова Л.А., Шмидлера М.И., Коновалова А.Н., Пирмамедова В.Г., Желтова Ю.П. и их соавторов. При этом при построении разностных аппроксимаций и их численной реализации, с учетом специфики расчета задач двухфазной неизотермической многокомпонентной фильтрации, применяются следующие методы: расщепление по физическим процессам [7], расщепление по пространственным переменным, установления (например, [8,9]), фиктивных областей [10], секторного приближения [11], сосредоточенной емкости [12] и др. Благодаря применению этих методов решение каждой конкретной задачи может быть сведено к последовательному расчету простых задач, программная реализация которых есть библиотека базовых модулей настоящего комплекса. Представление решаемой задачи в виде последовательности прос-

тых задач и, соответственно, базовых модулей составляет суть модульного анализа, являющегося теоретической основой каждого проекта пакета или комплекса прикладных программ [13,14].

3. <u>Модульный анализ вычислительного алгоритма</u>. Модульный анализ разностных методов решения рассматриваемых задач подземной гидродинамики, проведенный с учетом обобщения алгоритмов расчета процессов вытеснения нефти водой [15-17], позволяет выделить следующие базовые модули: управляющий, ввода параметров моделируемого процесса, формирования и коррекции разностной сетки, расчета локальных значений фильтрационных характеристик и коэффициентов уравнений, контроля балансных соотношений, вычисления интегральных характеристик фильтрационного потока, запоминания, идентификации и вывода результатов вычислений, а также групп модулей расчета решений: давления, насыщенности, концентрации примесей и температуры.

Все программы, включенные в состав комплекса, представляют совокупность базовых моделей, последовательность функционирования которых определяется управляющим модулем MONITR.

Алгоритмический язык комплекса - ФОРТРАН. На этом языке написаны программы и подпрограммы, кроме нескольких сервисных.

Приведем краткое описание базовых модулей, понимая при этом, что каждый модуль используется не менее чем одной программой и, с другой стороны, перечисленные модули имеют в своей реализации различные версии для разных групп программ, что обеспечивает их эффективность.

Модуль начального ввода параметров моделируемого процесса ININPT обеспечивает вызов подпрограммы, с помощью которой информация, предварительно подготовленная пользователем в файле данных, передается модулем MONITR в нужные области памяти. Каждый файл данных содержит не менее одного набора параметров. Например, файл данных для расчета одномерных плоско-радиальных задач может включать наборы, требуемые для функционирования програмы методических расчетов решения по разным схемам и на разных сетках, моделирования вытеснения ньютоновской или вязкопластической нефти, расчета процесса вытеснения или довытеснения нефти водными растворами ПАВ или полимеров и других програмы. В этом же файле данных могут храниться наборы, используемые для контрольно-тестировочных расчетов соответствующих програмы. При обращении к подпрограмме в модуле управления указывается имя файла данных и перечень параметров, необходимых для работы програмы. При расчете некоторые наборы из файла данных могут пропускаться. Номера (или номер) требуемых наборов задаются непосредственно в файле данных. Результатом работы ININPT также является контроль введенных данных на корректность, предварительные вычисления констант, неоднократно используемых при реализации алгоритмов расчета, печать введенных и рассчитанных параметров.

В каждой програмые комплекса имеется модуль формирования и корректировки сетки GRIDFC. В нем осуществляется построение равномерных сеток в области фильтрации в одномерных линейных задачах, во "внешней" подобласти в плоско-радиальных и плоских задачах, а также — специальных неравномерных сеток во "внутренней" подобласти в окрестностях скважин [II]. Этим же модулем производится коррекция сетки при изменении временного шага, добавлении или исключении секторных направлений во "внутренних" подобластях.

Модуль расчета локальных значений фильтрационных характеристик и коэффициентов уравнений EQCOEF оформляется в виде подпрограммы или является составной частью програмы. В нем реализуются формулы расчета функций относительных проницаемостей, коэффициентов уравнений, компонент векторов скоростей фильтрации фаз, потоков тепла и др.

Алгоритм расчета интегральных характеристик фильтрационного потока реализуется модулями CHAINT, оформленными в виде подпрограм. В этих модулях рассчитываются, например, такие характеристики фильтрационного процесса, как объем закачанных и извлеченных вытесняемой и вытесняющей фаз, масса закачанных химических реагентов, текущие значения объемов фаз во всей или в определенных частях области фильтрации, общее количество введенного в среду теплоносителя и доля тепла, аккумулированного в продуктивном пласте.

В модуле контроля балансных соотношений ERRBAL по результатам расчета и анализа интегральных характеристик и условий устойчивости разностных схем для определенных моментов времени контролируется выполнение законов сохранения. По результатам работы данного модуля, кроме диагностических сообщений управляющим модулем, может быть изменен стандартный ход выполнения программы, например, произведена коррекция разностной сетки или прекращен расчет.

Модулем запоминания, идентификации и вывода DOUTPT производится проверка выполнения условий вывода и, когда это требуется пользователю, осуществляется запоминание и отображение результатов расчета. Для идентификации полученных данных они дополняются информационной строкой, где указывается имя программы, которой рассчитаны результаты, текущие дата и время, а также тип ЭВМ. Подпрограммы, реализующие получение данной информации, составлены на языках ФОРТРАН для СМ ЭВМ и АССЕМБЛЕР для ЭВМ ЕС, причем имеют различные версии для ДОС и ОС.

Остановимся на описании групп модулей расчета решений, состав которых приведем для двух характерных задач: 1) вытеснение нефти водным раствором с примесью в плоской горизонтальной области XOY со скважинами; 2) вытеснение нефти горячей водой в предположении одномерного линейного фильтрационного потока.

Опишем базовые модули для первой задачи. На основании метода расщепления по физическим процессам последовательно на каждом временном слое рассчитываются давление, насыщенность и концентрация.

Охарактеризуем группу модулей CALCP расчета давления, при определении которого используются методы установления, продольно-поперечной прогонки и секторное приближение. Управляющим модулем данной группы является MONPRE . Расчет граничных значений, прогоночных коэффициентов и решений на секторных направлениях во "внутренних" подобластях осуществляется с помощью модулей BPWPRK, WPPRK и PSOLW , соответственно. На этапах продольной (поперечной) прогонки во "внешней" подобласти используются модули: BPPRKX(BPPRKY) - расчет граничных значений прогоночных коэффициентов, PPRKX(PPRKY) - для расчета прогоночных коэффициентов по итерационным формулам прогонки, COMPX (COMPY) - расчет решения в узлах на границе "внутренней" и "внешней" подобластей; PSOLX (PSOLY) - для расчета решений во "внешней" подобласти. Контроль за выполнением условия установления осуществляется в модуле MONPRE с использованием результатов, полученных модулем ERRORP, в котором вычисляется максимальное значение невязки.

Управляющим модулем группы модулей расчета насыщенности CALCS является MONSAT . Базовые модули этой группы: SATXY и SATIN , SATPRO, которые используются для расчета распределений насыщенности в узлах сетки "внешней" и "внутренней" подобластей, причем SATIN применяется при расчете в окрестностях нагнетательных, а SATPRO - эксплуатационных скважин; ROOTS - подпрограмма, используемая для вычисления корня трансцендентного уравнения, возникающего при применении для расчета насыщенности неявных аппроксимаций.

Группа модулей расчета концентрации CALCC включает большее число единиц, так как при определении концентрации используются пересчетные схемы типа предиктор-корректор. Управляющим модулем является MONCON, аналогичные функции выполняются модулями CONIN , CONPRO, ROOTC . Модули CONXY1, CONXY2 используются для расчета концентрации в плоской двумерной задаче на этапах предиктора и корректора, ROOTCA - модуль, используемый для расчета трансцендентных уравнений, возникающих в случаях нелинейной изотермы адсорбции, при определении значений концентрации в узлах сетки на этапах предиктора и корректора.

Отметим особенности программной реализации второй задачи, решение которой также основывается на последовательном расчете на каждом временном слое давления, насыщенности и температуры. Так, для давления и насыщенности имеем одномерную линейную задачу, их расчет осуществляется с помощью группы модулей CALCP и CALCS с базовыми модулями PSOLX и SATX (одномерным аналогом SATXY). Для температуры имеем двумерную задачу в вертикальной плоскости XOZ , решение которой строится с использованием метода расщепления по пространственным переменным с помощью модулей BTPRKX(BTPRKZ) расчета граничных значений прогоночных коэффициентов на этапе продольной (поперечной) прогонки, TPRKX (TPRKZ) расчета прогоночных коэффициентов, BTSOLX(BTSOLZ) расчета граничных значений решения, TSOLX(TSOLZ) расчета значений температуры в узлах разностной сетки на этапах продольной (поперечной) прогонок.

Завершая описание модульной структуры программ комплекса, отметим, что изложенный подход позволяет при соответствующем системном обеспечении и относительно несложной корректировке некоторых управляющих и базовых модулей обеспечить функционирование программ в режиме параллельных вычислений [18].

4. Состав комплекса. Настоящий комплекс разработан в ЛГУ им.П.Стучки, МИНХ и ГП им.И.М.Губкина и НИИ прикладных физических проблем им.А.Н.Севченко Белгосуниверситета и включает более 80 программ и модулей, составленных в соответствии с описанной модульной структурой. В комплекс включены программы, разделяющиеся по своему назначению на две группы: методические и технологические. Методические программы используются для тестирования различных аппроксимаций рассматриваемых краевых задач, изучения точности приближенных численных решений, обоснования и исследования

принятых математических моделей процессов двухфазной многокомпонентной неизотермической фильтрации. Расчет технологических параметров, изучение количественных и качественных характеристик моделируемых процессов нефтеотдачи производится с использованием технологических программ.

Идентификация программ комплекса производится следующим образом: имя каждой программы составляется из 6 символов. Приведем принятые в комплексе значения символов имен программ:

1 символ идентифицирует принятую модель фильтрационного процесса и может быть равен:

N -когда рассматривается изотермическая фильтрация двух несмешивающихся несжимаемых ньютоновских жидкостей без примесей;

G - когда рассматривается изотермическая фильтрация двух несмешивающихся несжимаемых жидкостей без примесей, одна из фаз или обе могут обладать вязкопластическими свойствами;

A -когда рассматриваются процессы совместной изотермической фильтрации двух несмешивающихся несжимаемых ньютоновских жидкостей при наличии активной примеси;

R - когда рассматриваются процессы совместной изотермической фильтрации двух несмешивающихся несжимаемых жидкостей при наличии активной примеси, причем одна из фаз или обе могут обладать вязкопластическими свойствами;

T - когда рассматривается двухфазная неизотермическая фильтрация ньютоновских жидкостей без примесей;

H - когда рассматривается двухфазная неизотермическая фильтрация без примесей и хотя бы одна из фаз обладает вязкопластическими свойствами;

B - когда рассматривается двухфазная неизотермическая фильтрация ньютоновских жидкостей при наличии примесей;

Q - когда рассматривается двухфазная неизотермическая фильтрация неньютоновских жидкостей при наличии примесей.

2 символ характеризует геометрию моделируемого процесса вытеснения и может принимать значения:

X - при расчетах одномерных (квазиодномерных) плоских линейных задач;

R - при расчетах одномерных (квазиодномерных) плоско-радиальных задач;

У - при расчетах двумерных задач в горизонтальной плоскости, когда в области фильтрации нет скважин, заводнение и отбор производятся через галереи;

Z - при расчетах плоских двумерных задач в вертикальном разрезе с геометрией (x, z);

V - при расчетах плоских двумерных задач в вертикальном разрезе с геометрией (r, z);

S - при расчетах плоских двумерных задач, при наличии в области фильтрации скважин;

W - при расчетах трехмерных задач в области без скважин;

Q - при расчетах трехмерных задач в области со скважинами.

3 символ определяет, какие решения рассчитываются и может быть равен:

S - если рассчитывается только насыщенность;

P - если рассчитываются насыщенность и давление;

C - если рассчитываются насыщенность и концентрация;

T - если рассчитывается насыщенность и температура;

R - если рассчитывается насыщенность, концентрация и давление;

Q - если рассчитываются насыщенность, давление и температура;

A - если рассчитываются насыщенность, концентрация и температура;

F - если рассчитываются насыщенность, концентрация, давление и температура.

4 символ характеризует тип граничных условий на нагнетательной галерее или скважине и может принимать значения:

U - когда задается расход (насыщенность, концентрация и температура);

P - когда задается напор (насыщенность, концентрация и температура);

F - когда задаются смешанные граничные условия.

5 символ показывает назначение программы или тип системы растановки скважин, или номер программы и может быть равен:

M - если программа предназначена для методических расчетов;

F, C, N, S - при моделировании фильтрации в элементах симметрии фронтальной, шахматной, девяти- или семиточечной систем расстановки скважин;

цифра - порядковый номер.

6 символ показывает число скважин в рассматриваемом элементе симметрии, если 5-й символ равен F, C, N или S, в противном случае - пятый и шестой символы - номер программы.

Следует отметить, что предлагаемая классификация, обладая определенной полнотой, является в то же время открытой.

Состав комплекса и назначение включенных в него программ описаны в информационно-рекламных проспектах, которые можно получить в названных выше огранизациях - разработчиках или через ГосФАП.

5. Типовая структура, межмодульные связи, стандарты в программах комплекса. Архитектура и межмодульные связи определяются исходя из проведенного модульного анализа. Типовая структура программы приведена на рис.I. Стрелками показаны возможные переходы или межмодульные связи. Очевидно, что принятая архитектура программы позволяет без затруднений корректировать математическую модель или принятый разностный метод расчетов путем изменения соответствующих базовых модулей. С другой стороны, допустимо дополнение программ новыми группами модулей расчета решений, например, при необходимости определения концентрации нескольких примесей, учета фазовых переходов и т.д.

В программной реализации, как уже отмечалось выше, базовые модули оформлены в виде подпрограмм либо однотипных блоков. Использование в программах комплекса однотипных блоков (базовых модулей) требует введения стандартов.

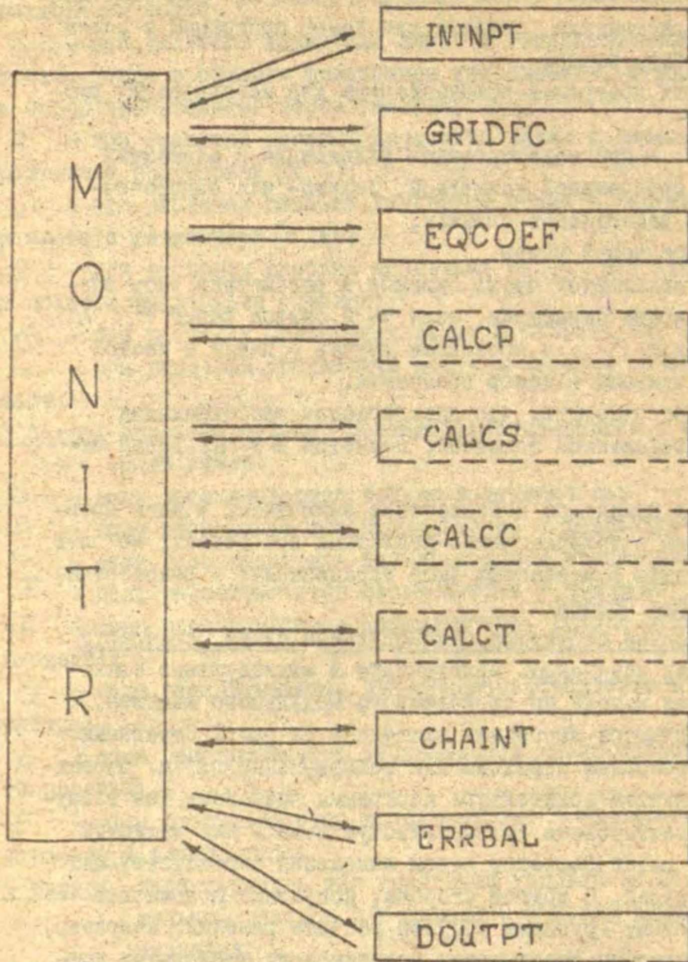

Рис.I.
Типовая структура программы комплекса.

В частности, определены и перечислены основные обозначения, установлены "разрешенные" в модулях метки, точки входа и выхода, требования комментирования. Принятые стандарты, практически не ограничивая разработчиков программ, позволяют синтезировать и модернизировать программы, не привлекая к этому составителей базовых модулей, включенных в библиотеку простых задач.

6. <u>О сервисных программных средствах</u>. Во всех программах комплекса используются стандартные и некоторые специально разработанные подпрограммы для вывода и запоминания результатов счета .

Вывод результатов может осуществляться в цифровой и графической форме. Для печати значений сеточных функций разработаны специальные подпрограммы вывода одномерных и двумерных массивов с управлением форматами вывода. Графическое отображение результатов расчетов при использовании ЭВМ ЕС может осуществляться с помощью модулей из библиотеки стандартных графических подпрограмм. Для СМ ЭВМ с этой целью разработаны подпрограммы машинной графики.

В состав сервисных подпрограмм комплекса включены также модули, предназначенные для запоминания результатов вычислений и организации банка данных. Наличие таких подпрограмм позволяет производить расчеты поэтапно с промежуточным анализом получаемых данных, а также дает возможность использовать результаты расчетов по одной из программ в ряде других программ комплекса.

7. <u>Об использовании программ комплекса</u>. Как отмечалось выше, программы комплекса условно разделяются на две группы: методические и технологические. Ряд методических программ использовались в научных учреждениях при тестировании математических моделей изучаемых процессов вытеснения, оценке точности численных методов и быстродействия алгоритмов расчета и в учебном процессе в ЛГУ им.П.Стучки, МИНХ и ГП, БГУ. Технологические программы применялись при выполнении расчетов по прогнозированию разработки нефтяных месторождений в исследовательских и проектных организациях.

Материалы, изложенные в данной статье отражают настоящее состояние и являются обобщением опыта авторов по разработке программного обеспечения. Нам представляется, что они могут служить базой для дальнейших работ по совершенствованию и разработке средств вычислительного эксперимента в задачах подземной гидродинамики.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

I. Самарский А.А. Математическое моделирование и вычислительный эксперимент.-Вестн.АН СССР,1979,№5,с.38-49.
2. Баренблатт Г.И., Ентов В.М., Рыжик В.М. Движение жидкостей и газов в природных пластах.М.,1984.-208 с.
3. Бернадинер М.Г., Ентов В.М. Гидродинамическая теория фильтрации аномальных жидкостей.М.,1975.-200 с.
4. Ентов В.М. Физико-химическая гидродинамика процессов в пористых средах.(Математические модели процессов повышения нефтеотдачи пластов.) М.,1980 (Препринт/Институт проблем механики АН СССР, № I6I).- 60 с.
5. Пудовкин М.А., Волков И.К. Краевые задачи математической теории теплопроводности в приложении к расчетам температурных полей в нефтяных пластах при заводнении. Казань, 1978.- 188 с.
6. Внутрипластовое горение с заводнением при разработке нефтяных месторождений / А.А.Боксерман, Ю.П.Желтов, С.А.Жданов и др. М., 1974.- 168 с.
7. Данилов В.Л., Коновалов А.Н., Якуба С.И. Об уравнениях и краевых задачах теории двуфазных фильтрационных течений в пористой среде.- Докл. АН СССР, 1968,т.183, № 2, с. 307-3I0.
8. Самарский А.А. Теория разностных схем. М., 1983.- 616 с.
9. Яненко Н.Н. Метод дробных шагов решения многомерных задач математической физики. Новосибирск, 1967.- 196 с.
I0. Коновалов А.Н. Метод фиктивных областей в задачах фильтрации двуфазной несжимаемой жидкости с учетом капиллярных сил.- Численные методы механики сплошной среды. Новосибирск, 1972,т.3, № 5, с.52-67.

11. Таранчук В.Б., Чудов Л.А. Численный метод для решения некоторых задач плоской двуфазной фильтрации в области со скважинами.- Численные методы механики сплошной среды. Новосибирск, 1974, т. 5, № 4, с. 90-102.
12. Буйкис А.А. Об одном классе разностных схем и алгоритмах их решения для конвективно-диффузионных задач подземной термогидродинамики.- В кн.: Динамика многофазных сред. Новосибирск, 1981, с. 111-118.
13. Яненко Н.Н., Карначук В.И., Коновалов А.Н. Проблемы математической технологии.- Численные методы механики сплошной среды. Новосибирск, 1977, т.8, № 3, с. 129-157.
14. Карпов В.Я., Корягин Д.А., Самарский А.А. Принципы разработки пакетов прикладных программ для задач математической физики.- Журнал вычислительной математики и математической физики, 1978, т. 18, № 2, с. 458-467.
15. Коновалов А.Н. Модульный анализ вычислительного алгоритма в задаче планового вытеснения нефти водой.- В кн.: Комплексы программ математической физики. Новосибирск, 1975, с. 81-94.
16. Максимов М.М., Рыбицкая Л.П. О структуре пакета программ для решения задач разработки нефтяных месторождений.- В кн.: Динамика многофазных сред. Новосибирск, 1981, с. 230-235.
17. Дубсвик В.М., Ентов В.М., Клевченя А.А., Таранчук В.Б., Чудов Л.А. Комплексс программ для численного исследования процессов вытеснения нефти.- В кн.: Комплексы программ математической физики. Новосибирск, 1982, с. 221-227.
18. Яненко Н.Н. Вопросы модульного анализа и параллельных вычислений в задачах математической физики.- В кн.: Комплексы программ математической физики. Новосибирск, 1980, с. 3-13.

СОДЕРЖАНИЕ

ПРИКЛАДНЫЕ ЗАДАЧИ МАТЕМАТИЧЕСКОЙ ФИЗИКИ

Сборник научных трудов

Рецензенты: Я.Я. Лиелпетер, чл.-корр. АН ЛатвССР, зам. дир. Института физики АН ЛатвССР;
А.Г.Темкин, д-р. техн. наук, профессор РПИ им. А.Пельше;
У.Е.Райтум, канд. физ.-мат. наук, ст. науч. сотр. ВЦ ЛГУ им. П.Стучки.

Редакторы Н.Авдонин, Н.Сарамонова
Техн. ред. А.Яковлча
Корректор А.Гельфгат

Подписано к печати 20.08.85 . ЯТ 09159 Ф/б 60x84/16.
Бумага № 3. 14,0 физ.печ.л. 13,0 усл.печ.л. 10,0 уч.-изд.л.
Тираж 500 экз. Зак. № 1180 Цена 1р.60 к.

Латвийский государственный университет им. П.Стучки
226098 Рига, б. Райниса 19
Отпечатано в типографии,226050 Рига,ул.Вейденбаума,5
Латвийский государственный университет им. П.Стучки

I

РЕФЕРАТЫ

УДК 532.77.3+621.315.592

РАСЧЕТ РАСПРЕДЕЛЕНИЯ ЛЕГИРУЮЩЕЙ ПРИМЕСИ И КИСЛОРОДА В РАСПЛАВЕ ПРИ ВЫРАЩИВАНИИ КРИСТАЛЛОВ МЕТОДОМ ЧОХРАЛЬСКОГО.

Люмкис Е.Д.

Предложен численный метод расчета квазистационарного распределения легирующей примеси или кислорода в кристалле, выращенном методом Чохральского. Для нахождения распределения примеси в кристалле необходимо решить уравнение конвективной диффузии в расплаве, поле скоростей в котором считается известным. Приведены примеры расчетов, показывающие зависимость распределения кислорода в кристалле от входных данных и от интенсивности течения.

Ил. 5, библиогр. 13 назв.

УДК 519.632.4+519.624.2

АНАЛИЗ РАСПРЕДЕЛЕНИЯ СОДЕРЖАНИЯ КИСЛОРОДА И ЛЕГИРУЮЩЕЙ ПРИМЕСИ В РАСПЛАВЕ В ПРИБЛИЖЕНИИ ПАРАБОЛИЧЕСКОГО ПОГРАНСЛОЯ.

Авдонин Н.А., Решетникова И.Н.

В работе дается постановка задачи конвективной диффузии в приближении параболического погранслоя. Предложен метод численного решения. Анализируются результаты расчетов на конкретном примере распределения кислорода в расплаве кремния. Приводится приближенное аналитическое решение. Дается сравнение результатов расчета задачи в приближении параболического погранслоя с аналитическим решением и с решением задачи в полной постановке.

Ил.4, библиогр. 3 назв.

П

УДК 532.546:519.63

О РАЗРЕШИМОСТИ ОДНОГО НЕЛИНЕЙНОГО УРАВНЕНИЯ ПАРАБОЛИЧЕСКОГО ТИПА. Ляшко И.И., Вакал Е.С., Кивва С.Л., Стеля О.Б.

Исследуется вторая краевая задача для нелинейного дифференциального уравнения параболического типа. Подобные задачи возникают при моделировании процессов фильтрации и влагопереноса в насыщенно-ненасыщенных пористых средах.

Доказана однозначная разрешимость указанной задачи.

Библиогр. 3 назв.

УДК 519.633.8

ЧИСЛЕННОЕ СРАВНЕНИЕ РАЗНОСТНЫХ СХЕМ ДЛЯ ЗАДАЧИ О ТЕЧЕНИИ ЖИДКОСТИ МЕЖДУ БЕСКОНЕЧНЫМИ ВРАЩАЮЩИМИСЯ ДИСКАМИ. Козельская Н.В., Люмкис Е.Д., Юдов А.А.

На автомодельной задаче о течении жидкости между бесконечными вращающимися дисками проведено численное сравнение по точности известных из литературы разностных схем, используемых для расчета уравнений Навье-Стокса, и предложенной в работе экспоненциальной схемы. Показано, что экспоненциальная схема дает наилучшие результаты, особенно при больших числах Рейнольдса.

Ил.3, библиогр. 5 назв.

УДК 518.61

ПОСТРОЕНИЕ МОНОТОННОЙ РАЗНОСТНОЙ СХЕМЫ ДЛЯ РЕШЕНИЯ ЗАДАЧИ ОБ ОСЕСИММЕТРИЧНО-ВРАЩАТЕЛЬНЫХ КОНВЕКТИВНЫХ ТЕЧЕНИЯХ ВЯЗКОЙ НЕСЖИМАЕМОЙ ЖИДКОСТИ. Калис Х.Э.

Построены монотонные векторно-разностная и соответствующая скалярная схемы для решения начально-краевой задачи о конвективном осесимметрично-вращательном течении вязкой

несжимаемой жидкости в замкнутом цилиндрическом сосуде.
Библиогр. 6 назв.

УДК 517.947.43

ОПТИМИЗАЦИЯ ОДНОГО КЛАССА АСИМПТОТИЧЕСКИХ МЕТОДОВ ИНТЕГРИРОВАНИЯ ОДНОМЕРНОГО УРАВНЕНИЯ ТЕПЛОПРОВОДНОСТИ. Шихалиев С.

Рассматривается новый класс асимптотических методов интегрирования уравнения теплопроводности, в которых минимизируется чебышевская норма погрешности решения.
Библиогр. 4 назв., табл. 4

УДК 536.25

УСТОЙЧИВОСТЬ ТЕРМОКАПИЛЛЯРНОЙ КОНВЕКЦИИ В ЖИДКОМ ЦИЛИНДРЕ, СОЗДАВАЕМОЙ ВНЕШНИМ НАГРЕВАТЕЛЕМ С АКСИАЛЬНЫМ ГРАДИЕНТОМ ТЕМПЕРАТУРЫ. Гельфгат А.Ю., Мартузан Б.Я.

Исследуется устойчивость термокапиллярной конвекции в прямом круговом жидком цилиндре относительно трехмерных пространственно-периодических стационарных возмущений. Неоднородное распределение температуры на боковой поверхности обеспечивается нагревателем с постоянным аксиальным градиентом температуры.
Ил. 1, библиогр. 12 назв.

УДК 532.516

ИССЛЕДОВАНИЕ ПОТОКА ВЯЗКОЙ НЕСЖИМАЕМОЙ ЖИДКОСТИ МЕЖДУ БЕСКОНЕЧНЫМИ ОСЦИЛЛИРУЮЩИМ И НЕПОДВИЖНЫМ ДИСКАМИ. Мартузан Б.Я., Опманис М.Я.

В статье приводятся результаты расчетов квазистационарного течения жидкости между осциллирующим и неподвиж - ным бесконечными дисками. Изучается область существования качественно различающихся квазистационарных решений в плоскости значений числа Рейнольдса и длины периода осцилляции.

Ил.6, библиогр. 5 назв.

УДК 536.25

О НЕКОТОРЫХ ВОПРОСАХ КОНВЕКТИВНОЙ УСТОЙЧИВОСТИ ТРЕХКОМПОНЕНТНОЙ ЖИДКОСТИ. Герценштейн С.Я., Калейс А.Я.

В статье рассматриваются вопросы устойчивости конвективных движений трехкомпонентной жидкости в горизонтальном слое со свободными границами. Движение описывается трехмерными уравнениями Навье-Стокса в приближении Буссинеска. Приводятся результаты линейного анализа устойчивости. Проведен предварительный конечно-амплитудный анализ. Нелинейная задача решается методом Бубнова-Галеркина, приведены результаты методических расчетов.

Ил.3, библиогр. 10 назв.

УДК 519.6

О РАЗВИТИИ НЕУСТОЙЧИВОСТИ КАПЛИ МАГНИТНОЙ ЖИДКОСТИ ПРИ НАЛИЧИИ ОКРУЖАЮЩЕЙ ВЯЗКОЙ СРЕДЫ. Зомитис А.А., Цеберс А.О.

В статье дается математическая модель процесса развития неустойчивости капли магнитной жидкости при наличии вязкой окружающей среды. Разработан метод решения задачи, основанный на методе граничных интегральных уравнений. Приводятся результаты численных расчетов. Показано, что наличие окружающей внешней среды вызывает развитие таких возмущений, которые не имеют места в начальном состоянии.

Ил.2, библиогр. 7 назв.

у

УДК 538.4

ЧИСЛЕННОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ВЛИЯНИЯ БОКОВОГО ТОКООТВОДА В МОДЕЛИ ПЕЧИ ЭЛЕКТРОШЛАКОВОГО ПЕРЕПЛАВА. Луринс Г.Р., Чудновский А.Ю.

Численно исследуется влияние бокового токоотвода на растекание электрического тока, электровихревое течение и джоулевое тепловыделение в ртутной модели печи электрошлакового переплава.

Ил.3, библиогр. 2 назв.

УДК 536.21.548

ВЛИЯНИЕ АНИЗОТРОПИИ ТЕПЛОПРОВОДНОСТИ НА ТЕМПЕРАТУРНОЕ ПОЛЕ. Якушенок Р.А.

В работе проводится методика оценки влияния анизотропии теплопроводности на температурное поле применительно к выращиванию цилиндрических монокристаллов в случае, когда тензор теплопроводности в главных осях имеет только диагональные составляющие, из которых одна мало отличается от двух остальных, и направление выращивания не совпадает с главными осями тензора.

Ил.2, библиогр. 2 назв.

УI УДК 537.84:548

ВЛИЯНИЕ ПРОДОЛЬНОГО МАГНИТНОГО ПОЛЯ НА ЕСТЕСТВЕННУЮ КОНВЕКЦИЮ В МОДЕЛИ ПРОЦЕССА ЧОХРАЛЬСКОГО. Гельфгат Ю.М , Горбунов Л.А., Старшинова И.В., Смирнов В.А., Фрязинов И.В.

Разработана методика численного расчета влияния постоянного продольного (по отношению к оси растущего монокристалла) магнитного поля на естественную конвекцию в модели процесса Чохральского. Полученные данные сопоставлены с результатами критериальных оценок, полученных на основе теории подобия, и экспериментально замеренными температурными полями. Установлено удовлетворительное совпадение данных расчета с данными эксперимента и определены границы определяющих параметров, при которых возможно использования критериальных оценок.

Ил.4, библиогр. 8 назв.

УДК 536.421.1+536.421.4+536.24

ЧИСЛЕННОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ТЕМПЕРАТУРНОГО ПОЛЯ ПРИ МОДЕЛИРОВАНИИ ПРОЦЕССА ЗОННОЙ ПЛАВКИ В АМПУЛЕ. Гулбе М.Л., Мартузане Э.Н., Копелиович Э.С., Раков В.В.

В настоящей работе проведено численное исследование тепловых процессов, проходящих в слитке и графитовых держателях, в зависимости от условий нагрева, размеров и рифлености графитовых держателей. Тепловая задача решается как в квазистационарной, так и в нестационарной постановках. Для качественного исследования задача сводится к одномерной, что дает возможность анализа ширины жидкой зоны и перегрева в ней при варьировании параметров в широком диапазоне. В работе показано, что решение нестационарной задачи, получаемой при движении нагревателя вдоль слитка, можно заменить квазистационарным решением при фиксированных положениях нагревателя.

Ил.2, библиогр. 3 назв., табл.2

УП

УДК 532.546:517.97

ЧИСЛЕННОЕ РЕШЕНИЕ ОДНОЙ ЗАДАЧИ ОПТИМАЛЬНОГО УПРАВЛЕНИЯ. Вакал Е.С., Кивва С.Л., Мистецкий Г.Е., Стеля О.Б.

Разработан алгоритм решения задачи оптимального управления системой с распределенными параметрами. Состояние системы описывается совокупностью двух дифференциальных уравнений в частных производных.

Для нахождения приближенного решения задачи используется метод градиентного спуска. Вспомогательные краевые задачи решаются с помощью метода конечных разностей. Приводятся результаты численного расчета.

Задачи подобного типа возникают при проектировании и строительстве гидротехнических сооружений и мелиоративных систем.

Ил.1, библиогр. 6 назв.

УДК 539.319

РАСЧЕТ НАПРЯЖЕННОГО СОСТОЯНИЯ КРИСТАЛЛОВ КРЕМНИЯ В ОХЛАЖДАЕМОЙ КАМЕРЕ. Захрамеев С.С., Козельская Н.В., Шашков Ю.М.

В статье приводится методика и результаты расчетов температурных полей и полей термоупругих напряжений для разных режимов охлаждения монокристаллов. Получены значения среднеквадратичного касательного напряжения τ_s в зависимости от времени и интенсивности охлаждения. Показано, что максимум напряжений приходится на момент времени $t \approx 9 - 12$ сек.

Ил.3, библиогр. 4 назв.

УШ

УДК 532.72

МЕТОД ОПРЕДЕЛЕНИЯ ХАРАКТЕРА КОНЦЕНТРАЦИОННОЙ ЗАВИСИМОСТИ КОЭФФИЦИЕНТА ДИФФУЗИИ ПО КИНЕТИКЕ СОРБЦИИ. Аболтиньш А.Я., Яунроманс И.И.

Предлагается метод для определения характера концентрационной зависимости коэффициента диффузии. В качестве исходных данных используется кинетика сорбции (десорбции) низкомолекулярных веществ в полимере.

Библиогр. 8 назв.

УДК 518.5:678.029

РАСЧЕТ ПРОЦЕССА ОБРАЗОВАНИЯ КОМПОЗИТНОГО ПОЛИМЕРНОГО МАТЕРИАЛА СПОСОБОМ ПРЕССОВАНИЯ ПРИ НАЛИЧИИ ГРАДИЕНТА ТЕМПЕРАТУРЫ. Буйкис А.А., Шмите М.З., Техтс Я.Я.

В статье описывается физический эксперимент в линейном прессе, когда при наличии температурного перепада происходит проникновение полиакрилонитрильных волокон в сетку полиэтилена и образовывается композитный материал. Выводится математическая модель процесса и даются результаты расчетов.

Ил.2, библиогр. 8 назв.

УДК 517.949.8:532.546

ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ ФИЛЬТРАЦИОННОГО ПОТОКА С ВОДНЫМИ ГРАНИЦАМИ. Демченко В.Ф., Демченко Л.И.

Предлагаются математические модели взаимодействия фильтрационного потока с водными границами, образованными жидкостью, частично или полностью заполняющей полости в пористой среде: трещины, каверны, скважины и т.п.. Математическая постановка рассматриваемых задач сводится к реше-

IX

нию смешанных краевых задач для эллиптического или параболического уравнения в многосвязной области. Параметры в граничных условиях (пьезометрический напор) на границе с полостями остаются неизвестными и подлежат определению исходя из дополнительного интегрального условия баланса массовых расходов. Предлагается методика сведения сформулированной задачи к решению $M+1$ задачи (M - количество водных границ) для исходного уравнения фильтрации с граничными условиями, числовые параметры в которых известны. Приводится численное решение задачи напорной фильтрации под зданием насосной станции в предположении, что под его нижним основанием образована полость, полностью заполненная фильтрующейся жидкостью.

Ил.3.

УДК 519.6

О ПРОГРАММНОМ ОБЕСПЕЧЕНИИ ВЫЧИСЛИТЕЛЬНОГО ЭКСПЕРИМЕНТА В ЗАДАЧАХ НЕИЗОТЕРМИЧЕСКОЙ ДВУХФАЗНОЙ МНОГОКОМПОНЕНТНОЙ ФИЛЬТРАЦИИ. Буйкис А.А., Золотухин А.Б., Таранчук В.Б.

Дано краткое описание комплекса программ для расчета задач, возникающих при моделировании новых методов повышения нефтеотдачи.

Ил.I, библиогр. I8 назв.

ДЛЯ ЗАМЕТОК

ДЛЯ ЗАМЕТОК

80389

LU bibliotēka
958002010

475

1 р. 60 к.

A-85
939