Прикладные задачи математической физики

Министерство высшего и среднего специального
образования Латвийской ССР
Латвийский ордена Трудового Красного Знамени
государственный университет им. П.Стучки

Вычислительный центр

ПРИКЛАДНЫЕ ЗАДАЧИ
МАТЕМАТИЧЕСКОЙ ФИЗИКИ

СБОРНИК НАУЧНЫХ ТРУДОВ

Латвийский государственный университет им. П.Стучки
Рига 1987

ПРИКЛАДНЫЕ ЗАДАЧИ МАТЕМАТИЧЕСКОЙ ФИЗИКИ

Прикладные задачи математической физики: Сборник научных трудов/ Под ред. Н.А.Авдонина. - Рига: ЛГУ им. П.Стучки, 1987. - 164 с.

Сборник "Прикладные задачи математической физики" содержит работы, посвященные числительному моделированию различных физических и технологических процессов. В большинстве работ рассматриваются технологические аспекты получения полупроводниковых материалов, интегральных схем и задачи фильтрации жидкости.

Сборник предназначен для научных работников, аспирантов и студентов механико-математических специальностей.

П $\frac{20400-052y}{M812(11)-87}$ 31.87.1704000000

ВВЕДЕНИЕ

В сборнике "Прикладные задачи математической физики" включены работы, посвященные, в основном, численному решению задач математической физики, моделирующих различные физические и технологические процессы. Основная часть работ связана с моделированием технологических процессов получения полупроводниковых материалов или интегральных схем, а также с изучением процессов в полупроводниковых приборах. Изучаются тепловые процессы, происходящие при кристаллизации материалов в различных условиях, термоупругие напряжения, возникающие при выращивании кристаллов и при изготовлении интегральных схем, гидродинамика расплава, в том числе и при положении внешнего магнитного поля, процессы переноса заряда в полупроводниковых приборах. Все перечисленные явления описываются системами нелинейных уравнений в частных производных. Зачастую, в силу особенностей задач, требуется разработка специальных численных методов для их решения. Весьма сложным, в частности, является расчет гидродинамических течений при моделировании процессов выращивания кристаллов. Ряд статей в сборнике посвящены изучению разностных схем для уравнений гидродинамики и решению уравнений конвекции методом Галеркина.

В сборнике широко представлены также работы, посвященные моделированию процессов фильтрации. В этих работах обсуждаются как постановки задач, так и специфические численные алгоритмы, используемые для их решения.

Работы, включенные в сборник, могут быть полезны широкому кругу специалистов, занимающихся математическим моделированием задач математической физики.

УДК 536.421

Н.А.Авдонин, М.Л.Гулбе
ВЦ ЛГУ им.П.Стучки,Рига

ЧИСЛЕННЫЙ АНАЛИЗ КРИСТАЛЛИЗАЦИИ МОНОКРИСТАЛЛИЧЕСКОГО СЛИТКА, ОХЛАЖДАЕМОГО С ПОВЕРХНОСТИ

Данная статья посвящена анализу случаев решения задачи о фазовом переходе (задачи Стефана) как в классической, так и в обобщенной постановке.

В работе /I/ сформулировано положение: при кристаллизации чистого (однокомпонентного) расплава, охлаждаемого с поверхности, дендриты растут лишь вдоль поверхности образца, не проникая вглубь расплава. Показать в расчете, что вдоль поверхности образца растет дендрит вытянутой формы, и что переохлаждение не проникает вглубь расплава, весьма трудно. Для приближенного построения границы раздела фаз, т.е. определения формы дендрита, в /I/ использовано решение одномерной задачи. Таким же образом задача решалась и в /2,3/. Температура в слитке $T(r,z,t)$ осреднялась по радиусу: $\tilde{T}=\frac{2}{R^2}\int\limits_0^R T(r,z,t)\,r\,dr$, и вводилась еще одна неизвестная функция $\eta\,(z,t)$ -доля твердой фазы в сечении слитка. Форма фронта кристаллизации восстанавливалась по найденным значениям функции $\eta(z)$, которая выражается через координату $\rho(z)$ границы раздела фаз $\eta(z)=\frac{\pi R^2-\pi\rho^2(z)}{\pi R^2}$, $\rho(z)=R\sqrt{1-\eta(z)}$ и тем самым восстанавливается конфигурация границы раздела фаз в двумерной задаче. Однако удовлетворительное определение формы раздела фаз можно ожидать лишь при малых значениях радиуса слитка R. Следует отметить, что граница раздела фаз в рассматриваемом случае имеет сложную форму. Производная $\rho'(z)$ меняется почти от нуля, вблизи поверхности слитка, до бесконечности. Это обстоятельство делает численный расчет особо трудным, как это и отмечено в /I/. Для решения задачи в обобщенной постановке также использовался метод сглаживания /4,5,6/, "размазывания" скрытой теплоты по температурному интервалу. В

/3/ проведено сравнение результатов полученных методом сглаживания с аналитическим решением осредненной одномерной задачи. Как отмечено в /3/, в целом форма фронта кристаллизации согласуется с формой восстановленной из одномерного аналитического решения, однако, у боковой поверхности слитка наблюдается качественное отличие или двух - фазная область. В /3/ также отмечается особая трудность расчетов методом сглаживания коэффициентов в интервале температур, возникающей из-за наличия обширной области с температурой, близкой к T_n .

Целью настоящей работы является разработка численного алгоритма и расчет модельного примера, показывающий в двумерном случае рост дендрита вдоль поверхности образца. В работе используется метод введения параметра β , для двухфазной зоны определяющего скорость объемной кристаллизации /I/. Таким образом рассматривается следующая математическая модель двумерной задачи о кристаллизации слитка.

Температурное поле в слитке $T\ (r,z,t)$ и граница раздела фаз $z=\varphi(r,t)$ описываются следующим уравнением и условиями:

$$div(\lambda(T)\, grad\, T) = c(T)\rho(T)\left(\frac{\partial T}{\partial t} + v_0\frac{\partial T}{\partial z}\right) \qquad (I)$$

$$t>0,\quad 0\leqslant r\leqslant R,\quad 0\leqslant z\leqslant \ell$$

$$\left.\frac{\partial T}{\partial r}\right|_{r=0} = 0 \qquad (2)$$

$$\lambda(T)\left.\frac{\partial T}{\partial r}\right|_{r=R} = -\varepsilon\sigma_0\left(T^4 - T_н^4\right) \qquad (3)$$

$$\lambda(T)\frac{\partial T}{\partial z}\Big|_{z=0} = \varepsilon\sigma_0\left(T^4 - T_н^4\right) \tag{4}$$

$$\lambda(T)\frac{\partial T}{\partial z}\Big|_{z=\ell} = -\varepsilon\sigma_0\left(T^4 - T_н^4\right) \tag{5}$$

$$T(r, z, 0) = T_0(z) \tag{6}$$

$$\gamma\rho\frac{\partial\varphi}{\partial t} = \left[\lambda(T)\frac{\partial T}{\partial n}\right]_{\varphi(r,t)}, \quad T = T_n, \quad z = \varphi(r,t), \tag{7}$$

где $\lambda(T)$ - коэффициент теплопроводности,

$$\lambda(T) = \begin{cases} \lambda_1, & T < T_n \\ \lambda_2, & T > T_n \end{cases} \tag{8}$$

T_n - температура плавления,
$C(T)$ - удельная теплоемкость,

$$c(T) = \begin{cases} c_1, & T < T_n \\ c_2, & T > T_n \end{cases}$$

$\rho(T)$- плотность,

$$\rho(T) = \begin{cases} \rho_1, & T < T_n \\ \rho_2, & T > T_n \end{cases}$$

v_0 - стационарная скорость кристаллизации,
γ - удельная скрытая теплота фазового перехода,
$T_н$ - температура окружающей среды,

$$T_н(z) = \begin{cases} T_1, & 0 \leqslant z \leqslant z_1 \\ T_2, & z_1 < z \leqslant z_2 \\ T_3, & z_2 < z \leqslant \ell, \end{cases} \tag{9}$$

ε - степень черноты,

σ_0 - постоянная Стефана-Больцмана.

Далее осуществляется замена переменных

$$u(T) = \int_0^T \frac{\lambda(\xi)}{\lambda_1} d\xi \,. \qquad (10)$$

Для учета условия Стефана (7) вводится функция $\eta(T,z,t)$ - доля твердой фазы

$$\eta(T,z,t) = \begin{cases} 1, & T < T_n \\ \bar{\eta}(z,t), & T \equiv T_n \\ 0, & T > T_n \end{cases} \qquad (11)$$

$$0 \leq \eta(T,z,t) \leq 1 \,, \quad 0 < \bar{\eta}(z,t) < 1 \,.$$

Учитывая замену переменных (10) и введенную функцию η (11) уравнение (1) в обобщенной записи /1/ принимает вид

$$\frac{c\rho}{\lambda(u)}\left(\frac{\partial u}{\partial t} + v_0 \frac{\partial u}{\partial z}\right) = \frac{\partial^2 u}{\partial z^2} + \frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}\left(r\frac{\partial u}{\partial r}\right) + \gamma\rho \frac{\partial \eta}{\partial t} \,. \qquad (12)$$

Если мы ищем классическое решение задачи (1)-(7), то $\frac{\partial \eta}{\partial t} \neq 0$ только на границе раздела фаз. Полагаем на границе раздела фаз, что скорость объемной кристаллизации

$$\frac{\partial \eta}{\partial t} = \beta \cdot \Delta u \cdot \theta(\Delta u) \cdot \theta(1-\eta) \cdot \theta_1(\eta_{+1} - 1) \,, \qquad (13)$$

где $\Delta u = u_n - u$,

β - параметр, определяющий эту скорость,

$$\theta(s) = \begin{cases} 0, & s \leq 0 \\ 1, & s > 0 \,, \end{cases} \qquad \theta_1(s) = \begin{cases} 0, & s < 0 \\ 1, & s \geq 0 \,, \end{cases} \qquad (14)$$

η_{+1} - значение функции $\eta(z,t)$ в точке соседней с рассматриваемой в направлении, перпендикулярном направлению скорости v_0 к поверхности образца. С учетом (13) уравнение (12) переходит в уравнение

$$a(u)\left(\frac{\partial u}{\partial t}+v_0\frac{\partial u}{\partial z}\right)=\frac{\partial^2 u}{\partial z^2}+\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}\left(r\frac{\partial u}{\partial r}\right)+$$

$$+\beta\cdot\Delta u\cdot\theta(\Delta u)\cdot\theta(1-\eta)\cdot\theta_1(\eta_{+1}-1)\ , \qquad (15)$$

где $a(u)=\dfrac{c(u)\cdot\rho(u)}{\lambda(u)}$

$$c(u)=c_1\cdot\eta+c_2(1-\eta),$$
$$\rho(u)=\rho_1\cdot\eta+\rho_2(1-\eta),$$
$$\lambda(u)=\lambda_1\cdot\eta+\lambda_2(1-\eta).$$

В /I/ доказана сходимость приближенных решений u_β задачи (I5), (2)-(6) к точному решению исходной задачи (I)-(7) при $\beta\to\infty$. Задача (I2), (I3), (2)-(6) рассматривается как в классической, так и обобщенной постановке. Классическая постановка задачи требует существования гладкой границы раздела фаз и выполнения условия(7) только на этой гладкой границе $z=\varphi(r,t)$. В численном алгоритме это условие реализуется через уравнение (I3). При этом рассматриваются два случая. Случай А: уравнение (I3) берем в форме

$$\frac{\partial\eta}{\partial t}=\beta\cdot\Delta u\cdot\theta(\Delta u)\cdot\theta(1-\eta), \qquad (16)$$

т.е. в пространстве мы допускаем движение границы раздела фаз только в направлении скорости v_0.

Случай В: уравнение (I3) используем в несокращенной форме, т.е. считаем границу раздела фаз движущейся в пространстве как в направлении скорости v_0, так и в направлении перпендикулярному ей к поверхности образца.

Далее рассмотрим алгоритм реализации численного расчета задачи в обобщенной постановке. Условие Стефана (7) в обобщенной постановке задачи формулируется следующим образом /I/: граница раздела фаз отыскивается как множество точек, в которых $T=T_n$, причем на этом множестве выполняется условие (7). Следуя этой формулировке для учета условия Стефана, берем уравнение (I3) в виде

$$\frac{\partial \eta}{\partial t} = \beta \cdot \Delta u \cdot \theta(\Delta u). \qquad (I7)$$

Для решения задачи (I2), (I3), (2)-(6) осуществлялась конечно-разностная аппроксимация. Для расчетов применялся полуявный метод аппроксимационной поправки Яненко /7/. Нелинейные условия (3)-(5) линеаризовывались заменой T^4 на $T^3 \cdot T$, и на каждом временном шаге проводились итерации по нелинейности, причем T^3 считалось известным с предыдущей итерации. При первой итерации T^3 бралось с предыдущего временного слоя. Итерации продолжались до тех пор, пока получаемая при этом невязка не становилась меньше наперед заданного ε_H.

Численная реализация обобщенной постановки соответствует случаю роста монокристалла в ампуле или контейнере, охлаждаемого с поверхности. Приведем основные результаты этого случая. На рис.I и 2 отображены результаты решения задачи (I)-(7) в обобщенной постановке, т.е. решения уравнений (I2), (I7) с условиями (2)-(6). Форма границы раздела фаз (рис.I), полученная при разных значениях параметра β, показывает, что вдоль поверхности образца растет дендрит вытянутой формы. Из вида температурного поля, представленного на рис.2, следует, что переохлаждение вглубь расплава не проникает.

Реализация классического решения задачи Стефана соответствует случаю кристаллизации слитка со свободной поверхностью, т.е. случаю отсутствия на боковой поверхности подложки или затравки. Этот случай представляет особый интерес, так как при интенсивном охлаждении с боковой поверхности априори неизвестно, будет ли переохлаждение проникать вглубь расплава или рост поверхностного дендрита будет опережающим и переохлаждение в объеме расплава будет отсутствовать. Анализ случая реализации классического решения поставленной задачи представлен на рис.3,4,5. Формы границы раздела фаз (рис.3), полученные

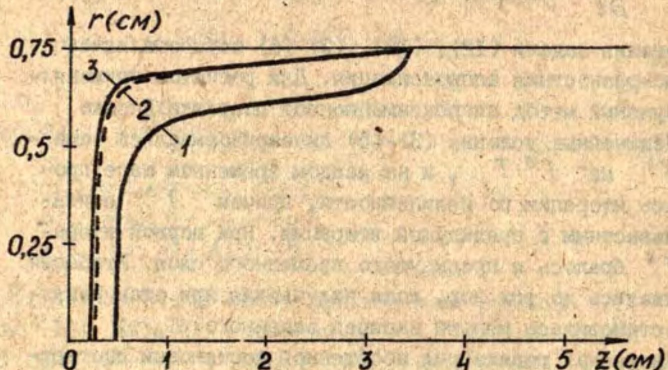

Рис.1. Граница раздела фаз. 1-β=0,5; 2 -β=2; 3 -β=3.

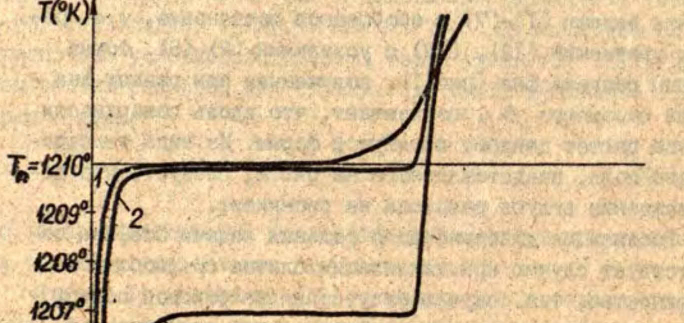

Рис.2. Осевое распределение температуры. 1 -r=0,0; 2 -r=0,675; 3 -r=R=0,75; β =0,5.

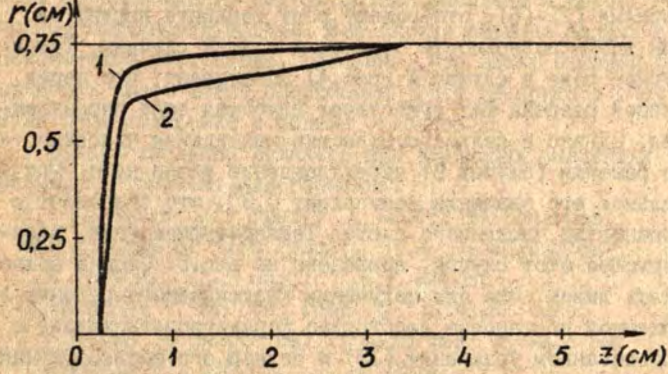

Рис.3. Граница раздела фаз. I - случай A, 2 - случай B; β =0,5.

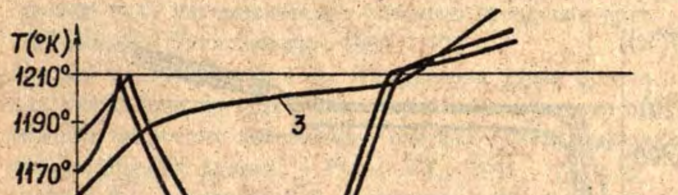

Рис.4. Осевое распределение температуры, случай A. I-r=0,0; 2-r=0,675; 3-r=R=0,75; β =0.5.

как при решении задачи в случае А, т.е. решения уравнений (I2), (I6) с условиями (2)-(6), так и при решении задачи в случае В, т.е. решения уравнений (I2), (I3) с условиями (2)-(6), отображают рост дендрита вытянутой формы вдоль поверхности образца и в этих случаях. Температурное поле в случае А (рис.4) показывает, что перед границей раздела фаз существует глубокая зона переохлаждения. Однако в полной постановке нахождения классического решения (случай В) переохлаждение равно нулю. Максимальное его значение составляет 0,3^{0}, что совпадает с погрешностью численного счета. Температурное поле, иллюстрирующее этот случай, приведено на рис.5. Отсюда можно сделать вывод, что для получения классического решения в обобщенной постановке необходимо формулировать задачу с использованием уравнения (I3) в полной его форме. Случай А, по-видимому, не соответствует реальному процессу. Это свидетельствует о неполноте формулировки в случае А.

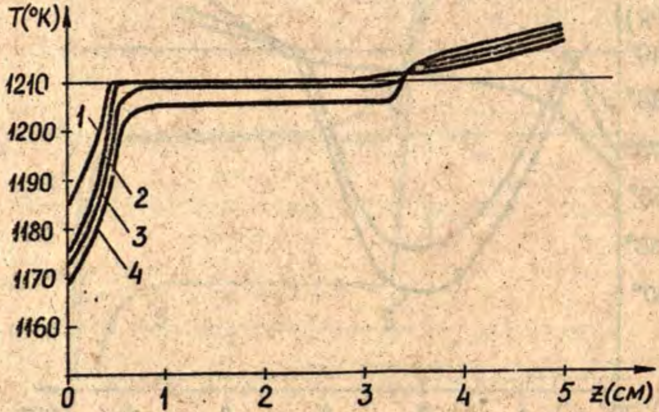

Рис.5. Осевое распределение температуры, случай В.
I -r=0,0; 2-r=0,6; 3-r=0,675; 4-r=R=0,75; β =0,5.

Таким образом, проведенные расчеты для случая кристаллизации в ампуле подтвердили положение /1/ о невозможности переохлаждения внутри объема расплава в случае обобщенной постановки задачи. Для случая решения задачи в классической постановке, показано, что вдоль боковой поверхности имеет место опережающий рост дендрита и отсутствие переохлаждения в объеме расплава.

Задача численно решалась при следующих значениях физических констант для германия:

$\lambda_1 = 0{,}173$ вт с/(г град); $\lambda_2 = 0{,}412$ вт/(см град);
$c_1 = c_2 = 0{,}34$ вт с/(г град); $\rho_1 = \rho_2 = 5{,}6$ г/см^3;
$T_n = 1210^0$К; $\varepsilon_{тв.} = 0{,}6$; $\varepsilon_{ж.} = 0{,}18$;
$\sigma_0 = 5{,}67 \cdot 10^{-12}$ вт/(см^2 град^4); $v_0 = 0{,}02$ см/с;
$\ell = 5$ см; $R = 0{,}75$ см; $z_1 = 0{,}5$ см; $z_2 = 3{,}5$ см;
$T_1 = 300^0$К; $T_2 = 600^0$К; $T_3 = 1300^0$К.

Список литературы

1. Авдонин Н.А. Математическое описание процессов кристаллизации.- Рига:Зинатне, 1980.- 175 с.
2. Авдонин Н.А., Иванова Г.Ф. Определение формы фронта кристаллизации из одномерного приближения задачи при больших скоростях вытягивания слитка//Прикладные задачи математической физики. - Рига: ЛГУ, 1983.- С.13-22.
3. Авдонин Н.А., Иванова Г.Ф. Численное исследование влияния способов аппроксимации на качественное поведение решения задачи Стефана при больших скоростях кристаллизации//Математическое моделирование.Получение монокристаллов и полупроводниковых структур.-М.:Наука,1986.- С.31-39.
4. Самарский А.А., Моисеенко Б.Д.Экономичная схема сквозного счета для многомерной задачи Стефана. Журн.вычисл.мат. и мат.физики. - 1965. - Т.5. - С.816-827.
5. Авдонин Н.А., Мартузан Б.Я., Пыленкова Э.Н. и др. Решение тепловой задачи, связанной с процессом направленной кристаллизации слитков//Латв.мат.ежегодник. - Рига:Зинатне, 1970. - Вып.7. - С.3-15.

6. Олейник О.А. Об одном методе решения общей задачи Стефана//Доклады АН СССР. - 1960. -Т.135. - № 5. - С.1054-1057.
7. Яненко Н.Н. Метод дробных шагов решения многомерных задач математической физики. - Новосибирск, 1967. - 88 с.

УДК 532.516.5

А.Ю.Гельфгат
ВЦ ЛГУ им.П.Стучки,Рига

ВАРИАЦИОННЫЙ МЕТОД РЕШЕНИЯ ЗАДАЧ ДИНАМИКИ ВЯЗКОЙ НЕСЖИМАЕМОЙ ЖИДКОСТИ В ПРЯМОУГОЛЬНЫХ ОБЛАСТЯХ

I. В последнее время для решения нестационарных гидродинамических задач активно используются различные вариационные методы, являющиеся разновидностями метода взвешенных невязок /I,2,3/. При этом неизвестные функции ищутся в виде ряда по некоторой полной системе функций, которую обычно называют координатной. Коэффициенты ряда,зависящие от времени, определяются из требований ортогональности невязки тем же или другим функциям, также образующим полную систему, называемую проекционной. Наибольшие трудности при численной реализации вариационных методов вызывают вычисление скалярных произведений и выполнение всех граничных условий. Эти трудности сравнительно легко преодолеваются при использовании метода коллокаций /3-5/ и тау-метода /3/, которые и являются наиболее распространенными на практике. В методе коллокаций невязка приравнивается нулю в некотором дискретном множестве точек,т.е. проекционная система представляет собой набор δ-функций Дирака. Для достижения достаточно высокой точности коллокационные методы требуют большого числа точек, что затрудняет исследование получающихся динамических систем. Идея тау-метода заключается в том, что часть уравнений, из которых определяются коэффициенты ряда, используется для удовлетворения граничных условий. Это позволяет применить простые в численной реализации системы функций, но понижает порядок аппроксимации решения. Применить метод взвешенных невязок с непрерывными проекционными функциями в "чистом" виде удается лишь при граничных условиях специального вида /6-8/, в частности, условиях симметрии.

В излагаемой работе предлагается способ построения неортогональных коондинатной и проекционной систем в виде линейных комбинаций некоторых функций, образующих полную систему, так, чтобы удовлетворить всем однородным граничным условиям и уравнению неразрывности. Это позволяет искать решение в пространстве функций, удовлетворяющих всем линейным граничным условиям и, кроме того, исключить давление из уравнения Навье-Стокса. Метод излагается на примере решения задачи о термогравитационной и термокапиллярной конвекции в прямоугольной полости, но может быть использован и для других задач. Факторами, ограничивающими применение метода, являются геометрия области и нелинейность граничных условий.

2. Рассмотрим систему уравнений конвекции в прямоугольной полости $0 \leqslant x \leqslant 1$, $0 \leqslant y \leqslant a$

$$\frac{\partial \vec{v}}{\partial t} + (\vec{v}\nabla)\vec{v} = -\nabla p + \Delta\vec{v} + Gr\,\theta\vec{e}_y + \vec{F}(x,y,\theta,\vec{v}), \qquad (1)$$

$$div\ \vec{v} = 0, \qquad (2)$$

$$\frac{\partial \theta}{\partial t} + (\vec{v}\nabla)\theta = \frac{1}{Pr}\Delta\theta + Q(x,y,\theta,\vec{v}), \qquad (3)$$

$\vec{v}$ - скорость жидкости, θ - температура, $Q, \vec{F}$ описывают плотность тепловых источников и массовых сил, - число Грасгофа, Pr - число Прандтля. Пусть на границах $x=0,1$ и $y=0$ заданы условия прилипания, а на границе -термокапиллярная сила:

$$\vec{v}\big|_{x=0,1} = \vec{v}\big|_{y=0} = 0, \qquad (4)$$

$$v_y\big|_{y=a}=0, \quad \frac{\partial v_x}{\partial y}\Big|_{y=a}=-Ma\,\frac{\partial \theta}{\partial x}\Big|_{y=a}, \tag{5}$$

Ma - число Марангони.

Для температуры на всех границах заданы условия вида

$$\Big(\alpha_1\theta+\beta_1\frac{\partial\theta}{\partial x}\Big)\Big|_{x=0}=f_1(y), \quad \Big(\alpha_2\theta+\beta_2\frac{\partial\theta}{\partial x}\Big)\Big|_{x=1}=f_2(y), \tag{6}$$

$$\Big(a_1\theta+b_1\frac{\partial\theta}{\partial y}\Big)\Big|_{y=0}=g_1(x), \quad \Big(a_2\theta+b_2\frac{\partial\theta}{\partial y}\Big)\Big|_{y=a}=g_2(x). \tag{7}$$

Функцию θ будем искать в виде суммы

$$\theta(x,y)=G(x,y)+\tilde{\theta}(x,y), \tag{8}$$

где $G(x,y)$ удовлетворяет условиям (6-7), а $\tilde{\theta}$ - новая неизвестная функция. Функция G может быть, например, решением уравнения Лапласа $\Delta G=0$ с граничными условиями (6-7). Уравнение (3) принимает вид

$$\frac{\partial\tilde{\theta}}{\partial t}+(\vec{v}\nabla)\tilde{\theta}=\frac{1}{Pr}\Delta\tilde{\theta}+\tilde{Q}(x,y,\theta,\vec{v},G), \tag{9}$$

где $\tilde{\theta}=Q-(\vec{v}\nabla)G+\frac{1}{Pr}\Delta G$.

Граничные условия для функции $\tilde{\theta}$ однородны:

$$\Big(\alpha_1\tilde{\theta}+\beta_1\frac{\partial\tilde{\theta}}{\partial x}\Big)\Big|_{x=0}=0, \quad \Big(\alpha_2\tilde{\theta}+\beta_2\frac{\partial\tilde{\theta}}{\partial x}\Big)\Big|_{x=1}=0, \tag{I0}$$

$$\Big(a_1\tilde{\theta}+b_1\frac{\partial\tilde{\theta}}{\partial y}\Big)\Big|_{y=0}=0, \quad \Big(a_2\tilde{\theta}+b_2\frac{\partial\tilde{\theta}}{\partial y}\Big)\Big|_{y=a}=0. \tag{II}$$

Будем искать функцию $\tilde{\theta}$ в виде ряда

$$\tilde{\theta}=\sum_{i,j=0}^{\infty} d_{ij}(t,\ \eta_i(x)\,g_j(y/a), \tag{I2}$$

где $\{g_i(x)\}_0^\infty$ - полная система функций в пространстве $C^\infty([0;1]$, а $d_{ij}(t)$ - неизвестные коэффициенты,зависящие от времени. Удобнее, однако, вместо функций $g_i(x)$ и $g_j(y/a)$ работать с функциями, удовлетворяющими условиям (10-11), т.е. искать решение в подпространстве функций, удовлетворяющих граничным условиям. Базис в этом подпространстве построим в виде $\{r_i(x)q_j(y/a)\}_{i,j=0}^\infty$ из линейных комбинаций функции g_j

$$r_i(x)=\sum_{l=0}^{2}\gamma_{li}\,g_{l+i}(x), \tag{13}$$

$$q_j(y/a)=\sum_{l=0}^{2}\delta_{lj}\,g_{j+l}(y/a), \tag{14}$$

где γ_{li} и δ_{lj} определяются из соотношений

$$\gamma_{oi}=\delta_{0j}=1, \tag{15}$$

$$\sum_{l=0}^{2}\gamma_{li}[\alpha_1 g_{i+l}(0)+\beta_1 g'_{i+l}(0)]=0, \tag{16}$$

$$\sum_{l=0}^{2}\gamma_{li}[\alpha_2 g_{i+l}(1)+\beta_2 g'_{i+l}(1)]=0, \tag{17}$$

$$\sum_{l=0}^{2}\delta_{lj}[a_1 g_{j+l}(0)+b_1 g'_{j+l}(1)]=0, \tag{18}$$

$$\sum_{l=0}^{2}\delta_{lj}[a_2 g_{j+l}(1)+b_2 g'_{j+l}(1)]=0. \tag{19}$$

Очевидно, что из (15-19) γ_{li} и δ_{lj} определяются однозначно для любых i, j. Кроме того, очевидно, что системы функций $\{r_i(x)\}$ и $\{q_j(y)\}$ являются базисами в пространствах бесконечно дифференцируемых функций, удовлетворяющих, соответственно, условиям (10) и (11) и определенных на отрезках [0,1]. Вместо (12) теперь имеем

$$\tilde{\theta}=\sum_{i,j=0}^{\infty} d_{ij}(t)\, r_i(x)\, q_j(y/a). \tag{20}$$

В общем случае для функции $F(x)$, удовлетворяющей граничным условиям вида

$$\sum_{i=0}^{n} f_{il} F^{(i)}(x_l)=0, \quad l=1,2,\dots,M, \tag{21}$$

где (i) означает номер производной, систему координатных функций можно построить в виде

$$\tilde{r}_j(x)=\sum_{i=j}^{j+M} \tilde{f}_{ji}\, g_i(x). \tag{22}$$

Коэффициенты $\tilde{f}_{ji}$ выбираем так, чтобы выполнялись условия (21).

Далее, пусть $\{\vec{\varphi}_i(x,y)\}_0^{\infty}$ - базис в пространстве бесконечно-дифференцируемых соленоидальных векторов ($div\,\vec{\varphi}_i=0$). Аналогично предыдущему, из линейных комбинаций функций $\vec{\varphi}_i$ можно построить систему соленоидальных функций, удовлетворяющих всем однородным граничным условиям. Неудобство вызывает лишь второе из условий (5). Этому условию можно удовлетворить, например, при помощи тау-метода. Однако, более рациональным на наш взгляд, оказывается подход, основанный на замене переменных вида

$$\vec{v}=\vec{w}+Ma\,\vec{u}, \tag{23}$$

где $\vec{w}$ - новая неизвестная функция, а $\vec{u}$ определяется из условий

$$\begin{gathered} div\,\vec{u}=0, \quad \left.\frac{\partial u_x}{\partial y}\right|_{y=a}=-\left.\frac{\partial \theta}{\partial x}\right|_{y=a}, \\ \left.\vec{u}\right|_{x=0,1}=\left.\vec{u}\right|_{y=0}=0, \quad \left.u_y\right|_{y=a}=0. \end{gathered} \tag{24}$$

Задача для $\vec{w}$ и $\tilde{\theta}$ имеет вид

$$\begin{aligned} \frac{\partial \vec{w}}{\partial t}+(\vec{v}\nabla)\vec{w}=-\nabla p+\Delta\vec{w}+Gr(\tilde{\theta}+G)\vec{e}_y+ \\ +\vec{F}_1(x,y,\tilde{\theta},G,\vec{w},\vec{u}), \end{aligned} \tag{25}$$

$$div\,\vec{w}=0, \tag{26}$$

$$\frac{\partial\tilde{\theta}}{\partial t}+(\vec{w}\nabla)\tilde{\theta}=\frac{1}{Pr}\Delta\tilde{\theta}+Q_1(x,y,\tilde{\theta},G,\vec{w},\vec{u}) \tag{27}$$

с граничными условиями (I0-II) и

$$\vec{w}\big|_{x=0,1}=\vec{w}\big|_{y=a}=0, \tag{28}$$

$$w_y\big|_{y=a}=0, \qquad \frac{\partial w_x}{\partial y}\Big|_{y=a}=0, \tag{29}$$

где

$$\vec{F}_1=\vec{F}-Ma[(\vec{w}\nabla)\vec{u}+(\vec{u}\nabla)\vec{w}+\frac{\partial\vec{u}}{\partial t}-\Delta\vec{u}]-Ma^2(\vec{u}\nabla)\vec{u} \tag{30}$$

$$Q_1=Q-(\vec{w}\nabla)G+\frac{1}{Pr}\Delta G-Ma[(\vec{u}\nabla)G+(\vec{u}\nabla)\tilde{\theta}]. \tag{31}$$

Таким образом, все условия для функции $\vec{w}$ однородные и могут быть удовлетворены путем соответствующего построения координатных функций. Функция $\vec{u}$ может быть определена из (24) аналогичным методом.

Проекционные системы для невязок уравнений (25) и (27) могут совпадать с координатными или строиться из линейных комбинаций функций g_i и $\vec{\varphi}_i$.

Если проекционная система $\{\vec{\psi}_i\}$ для уравнения Навье-Стокса удовлетворяет условиям непротекания и соленоидальности, а скалярное произведение векторов-функций определяется следующим образом

$$(\vec{u},\vec{v})=\int\limits_V \vec{u}\cdot\vec{v}\,dV, \tag{32}$$

то после скалярного умножения члена с давлением из (25) на $\vec{\psi}_i$ получим

$$\int\limits_V \nabla p\cdot\vec{\psi}_i\,dV=\int\limits_V div(p\vec{\psi}_i)dV-\int\limits_V p\,div\vec{\psi}_i\,dV=\int\limits_S p\vec{\psi}_i\cdot\vec{n}\,ds=0, \tag{33}$$

где V - область, S - граница области, $\vec{n}$ - нормаль к границе. Таким образом, соответствующий выбор проекционной системы позволяет исключить давление из уравнения Навье-Стокса, что существенно упрощает поиск неизвестных коэффициентов.

Обозначим $X_i(t)$ искомые коэффициенты рядов. После проектирования невязок на N первых функций проекционных систем получим систему дифференциальных уравнений по времени вида

$$\sum_{j=1}^{M} C_{ij}\dot{X}_j=\sum_{j=1}^{M} a_{ij}X_j+\sum_{j,k=1}^{M} b_{ijk}X_jX_k+f_i\ , \quad i=1,2,\ldots,M;\ M=2N. \qquad (34)$$

Преимущество предлагаемого метода заключается в том, что все матрицы в (34) не зависят от времени и должны вычисляться только один раз. Благодаря этому становятся дешевыми шаг интегрирования по времени и вычисление матрицы Якоби. Кроме того, выделение матриц, соответствующих членам уравнений с безразмерными параметрами, существенно облегчает параметрические исследования. Основным недостатком на наш взгляд является необходимость хранения большого количества чисел (в трехмерной матрице b_{ijk} - $2N^3$ чисел), что накладывает большие ограничения на число N.

3. Изложенным методом была решена задача о естественной конвекции в квадратной полости с твердыми границами при подогреве сбоку. При этом в (I) и (3) $\vec{F}=0$ и $Q=0$, граничные условия имеют вид

$$\theta\big|_{x=1}=0, \quad \theta\big|_{x=0}=1, \quad \frac{\partial\theta}{\partial y}\Big|_{y=0,1}=0 \qquad (35)$$

$$\vec{v}\big|_{x=0,1}=\vec{v}\big|_{y=0,1}=0 \qquad (36)$$

и в (8) $G(x,y)=1-x$.

В качестве функций ϱ (см.(I2)) выбраны смещенные полиномы Чебышева I рода /9/. Координатные функции для температуры $r_i(x)$ и $q_j(y)$

$$r_i(x) = T_i(x) - T_{i+2}(x), \tag{37}$$

$$q_j(y) = T_j(y) - \frac{j^2}{(j+2)^2} T_{j+2}(y). \tag{38}$$

Координатные функции для скорости $\vec{\varphi}_{ij}$ строятся из линейных комбинаций функций

$$\vec{\Psi}_{ij} = \begin{pmatrix} \frac{1}{2i} T_i(x) U_j(y) \\ -\frac{1}{2(j+1)} U_{i-1}(x) T_{j+1}(y) \end{pmatrix}, \quad i \neq 0, \tag{39}$$

$$\vec{\Psi}_{0ij} = \begin{pmatrix} T_0(x)\, U_i(y) \\ U_j(x)\, T_0(y) \end{pmatrix}.$$

$U_j(x)$ - смещенные полиномы Чебышева 2 рода /9/. Из соотношения $T'_{i+1}(x) = 2(i+1) U_i(x)$ следует $div\, \vec{\Psi}_{ij} = 0$. Функции $\vec{\varphi}_{ij}$ имеют вид

$$\vec{\varphi}_{ij} = \begin{pmatrix} X_{ij} \\ y_{ij} \end{pmatrix}, \tag{40}$$

$$X_{ij} = \Big(\sum_{l=0}^{4} f_{li} T_{i+l}(x)\Big)\Big(\sum_{l=0}^{4} g_{lj} U_{j+l}(y)\Big), \tag{41}$$

$$y_{ij} = \Big(\sum_{l=0}^{4} f_{li} U_{i+l-1}(x)\Big)\Big(\sum_{l=0}^{4} g_{lj} T_{j+l+1}(y)\Big). \tag{42}$$

Коэффициенты f_{li} и g_{lj} определяются путем подстановки (40-42) в (36) с помощью аналитических выкладок на ЭВМ.

Выбор полиномов Чебышева объясняется существованием простых формул суммирования и представления производных полиномов в виде ряда по этим же полиномам /9/. Это позволяет сравнительно легко вычислять скалярные произведения линейных и нелинейных членов уравнений (25,27) и проекционных функций.

Скалярное произведение функций в этом случае определяется следующим образом:

$$(f,g)=\int_0^1\int_0^1 \rho(x)\rho(y)f(x,y)g(x,y)\,dx\,dy \tag{43}$$

$$(\vec{u},\vec{v})=(u_x,v_x)+(u_y,v_y), \tag{44}$$

где $\rho(x)=(x-x^2)^{-1/2}$. Сделав в интеграле (43) замену $x_1=\arcsin(2x-1)$, $y_1=\arcsin(2y-1)$, можно повторить вывод (33) и убедиться, что давление исключается из уравнения Навье-Стокса и в этом случае.

Пример расчета для 6 функций по каждому направлению показан на рис.I.

4. Изложенный метод можно легко обобщить на трехмерный случай. Например, в случае конвекции в кубе координатные функции для температуры строятся аналогично (37-38), а координатные функции для скорости можно строить из линейных комбинаций функций вида

$$\vec{\Psi}_{ijk}=\begin{pmatrix} \frac{1}{2i}T_i(x)U_j(y)U_k(z) \\ \frac{1}{2(j+1)}U_{i-1}(x)T_{j+1}(y)U_k(z) \\ -\frac{1}{k+1}U_{i-1}(x)U_j(y)T_{k+1}(z) \end{pmatrix}. \tag{45}$$

Метод может быть использован и для решения задач в криволинейных системах координат, если границы области лежат на координатных поверхностях.

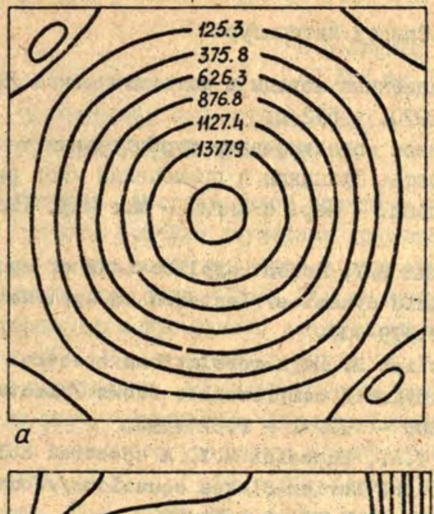

Рис.I. а - линии тока, б - изотермы.
$Gr = 10^7$, $Pr = 0,02$.

Список литературы

I. Михлин С.Г. Вариационные методы в математической физике. - М.:Наука, I970. - 5I2 с.

2. Орсег С.А. Численное моделирование турбулентных течений //Турбулентность. Принципы и применения /Под ред. У.Фроста, Т.Моулдена. - Пер. с англ. - М.: Мир, I980.- С.3II-347.

3. Zang T.A., Hussaini M.Y. Recent applications of spectral methods in fluid dynamics//Lecteres in Appl.Meth.- 1985. - V.22. - P.379-409.

4. Orszag S.A., Gottlieb D. High resolutions spectral calculations of inviscid compressible flows //Lecture Notes Math. - 1980. - V.771. - P.371-398.

5. Malik M.R., Zang T.A., Hussaini M.Y. A spectral collocation method for the Navier-Stokes equations//Journal Comput.Phys. - 1985. - V.61. - P.64-88.

6. Герценштейн С.Я., Родичев Е.Б., Сенин В.И., Шмидт В.М. О нелинейных конвективных движениях в средах с "двойной диффузией" //Доклады АН СССР. - I98I. - Т.257. - № 3. - С.350-354.

7. Curry J.H., Herring J.R., Loncaric J., Orszag S.A. Order and disorder in two-and three-dimensional Benard convections//Journal Fluid Mech. - 1984. - V.147. -P. 1-38.

8. Wilkie H. Zur numerischen Behandlung grenzflächendynamischer Probleme mitters Projektions - Iterationsverfahren //ZAMM. - 1980. - B.60. - S.437-442.

9. Пашковский С. Вычислительные применения многочленов и рядов Чебышева. - Пер. с польск. - М.:Наука, I983. - 384 с.

УДК 519.633.8

Е.Д.Люмкис
ВЦ ЛГУ им.П.Стучки,Рига

ПОЛУНЕЯВНЫЕ РАЗНОСТНЫЕ СХЕМЫ РЕШЕНИЯ УРАВНЕНИЙ КОНВЕКЦИИ

I. Обычно в вычислительной практике применяется следующий алгоритм решения двумерных уравнений Навье-Стокса для вязкой несжимаемой жидкости в переменных функция тока ψ - вихрь скорости ω /1,2/: а) используя значения ψ с предыдущего временного слоя, находятся компоненты скорости v_1 , v_2 и значение вихря ω_r на твердых стенках; для определения ω_r используется какая-либо из приближенных формул, например, формула Тома; в) из решения двумерного линейного уравнения эллиптического типа с коэффициентами ($-v_1$), ($-v_2$) при первых производных и значениями ω_r вихря на границе находится поле значений ω на верхнем временном слое; с) из решения уравнения Пуассона с правой частью ($-\omega$) определяется функция тока ψ на верхнем временном слое. Многочисленные расчеты показывают, что такая процедура решения системы уравнений приводит к сильному ограничению величины временного шага τ . Основные ограничения на τ обычно связывают со способом реализации краевых условий. В работе /3/ показано, что для подобной процедуры решения из-за краевых условий возникает ограничение на шаг по времени $\tau < \tau_0 = \frac{3}{2} R h^2$, где R - число Рейнольдса, h -шаг дискретизации по пространству вблизи границы. При увеличении числа R дополнительные ограничения на τ могут вызываться нелинейностью задачи.

Алгоритмы, снимающие эти ограничения, были предложены в работах /3,4/.

В случае уравнений конвекции к описанным выше этапам а)-с) добавляется еще один этап d): используя определенные через ψ значения v_1 , v_2 , находится значение температуры T на верхнем временном слое. Поскольку производная от температуры входит как источник в уравнение для вихря, поочередность решения уравнений для ω и T может вызывать дополнительные ограничения на величину τ. Обобщению алгоритмов /3,4/ на случай тепловой гравитационной конвекции и численному сравнению разностных схем посвящена настоящая работа.

2. Описание алгоритмов удобно начать с одномерной модельной задачи

$$\frac{\partial \omega}{\partial t}=\frac{1}{R}\omega'' , \quad \psi''=-\omega , \tag{I}$$

с однородными краевыми условиями

$$\psi(0,t)=\psi(1,t)=0; \quad \psi'(0,t)=\psi'(1,t)=0, \tag{2}$$

и начальным условием

$$\psi(x,0)=f(x), \quad \omega(x,0)=-f''(x), \quad 0\leqslant x\leqslant 1, \tag{3}$$

где $f(x)$ - произвольная функция. При $t\to\infty$ функция $\psi(x,t)\to 0$ для этой задачи.

Введем разностную сетку узлов по пространству $\{x_i\}$ $i=0,\dots,N$, и равномерную сетку по времени $t^k=k\tau$. Обозначим $h_i=x_i-x_{i-1}$, $i=1,\dots,N$; $\hbar_i=(h_i+h_{i+1})/2$, $i=1,\dots,N-1$; $\hbar_0=h_1/2$, $\hbar_N=h_N/2$. Для разностных производных используем общепринятые обозначения /5/:

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

Обычная полунеявная схема для такой задачи имеет вид:

$$\frac{\omega^{k+1}-\omega^k}{\tau}=\frac{1}{R}\,\omega^{k+1}_{\bar{x}x}, \tag{4}$$

$$\psi_{\bar{x}x}^{k+1} = -\omega^{k+1}, \qquad 0 < x < 1. \tag{5}$$

$$\omega_0^{k+1} = -\frac{2}{h_1^2}\psi_1^k, \; \omega_N^{k+1} = -\frac{2}{h_N^2}\psi_{N-1}^k, \; \psi_0^k = \psi_N^k = 0, \; \psi^0 = f \tag{6}$$

Здесь верхний индекс k обозначает номер временного слоя. Схема (4)-(6) - одномерный аналог стандартной процедуры решения уравнений типа Навье-Стокса полунеявным методом, условия (6) для вихря - условия типа Тома на твердой стенке. В операторном виде уравнения (4)-(6) запишем в виде:

$$\frac{\hat{\omega} - \omega}{\tau} = \frac{1}{R} B_{1h}(\hat{\omega}, \omega_r); \qquad \hat{\psi}_{\bar{x}x} = -\hat{\omega}. \tag{7}$$

Здесь $\hat{\omega}$, $\hat{\psi}$ - значения функций ω, ψ на слое $k+1$, $B_{1h}(\omega, \omega_r) \equiv \frac{1}{R}\omega_{\bar{x}x}$. В определение B_{1h} включено ω_r - значения ω_0, ω_N, которые в этом алгоритме вычисляются по формулам (6), т.е. берутся с нижнего временного слоя.

В работе /3/ исследование устойчивости схемы (4)-(6) проведено методом гармоник с использованием признака Бабенко-Гельфанда для равномерной сетки с шагом h. Найдено, что алгоритм (4)-(6) теряет устойчивость, если

$$\tau > \tau_0 = \frac{3}{2} R h^2.$$

Вместо уравнений (I) рассмотрим эквивалентную систему уравнений:

$$\frac{\partial \psi''}{\partial t} = -\frac{1}{R}\omega'', \qquad \frac{\partial \omega}{\partial t} = \frac{1}{R}\omega''. \tag{8}$$

Уравнения (8) аппроксимируем разностной схемой

$$\frac{\psi_{\bar{x}x}^{k+1} + \omega^k}{\tau} = -\frac{1}{R} B_{1h}(\omega^k, \omega_r^{k+1}), \tag{9}$$

$$\frac{\omega^{\kappa+1}-\omega^{\kappa}}{\tau}=\frac{1}{R}B_{1h}(\omega^{\kappa+1},\omega_{\Gamma}^{\kappa+1}). \qquad (10)$$

В уравнение (9) ω_Γ входит с верхнего временного слоя. В индексном виде это уравнение при i =I на равномерной сетке имеет вид:

$$\frac{1}{h^2}\psi_2^{\kappa+1}-\left(\frac{2}{h^2}+\frac{2\tau}{Rh^2}\right)\psi_1^{\kappa+1}+\frac{1}{h^2}\psi_0^{\kappa+1}=-\omega_1^{\kappa}-\frac{\tau}{R}(\omega_2^{\kappa}-2\omega_1^{\kappa}), \qquad (11)$$

т.е. в приграничном разностном уравнении, за счет учета ω_Γ с верхнего временного слоя, усиливается диагональное преобладание по сравнению с обычной аппроксимацией оператора Лапласа. Таким образом, решение уравнения (9) не вызывает никаких затруднений.

В то же время, как показано в /3/, схема (9)-(10) является абсолютно устойчивой.

3. Описание разностных схем для уравнений Навье-Стокса будем проводить на примере известной задачи о течении жидкости в каверне квадратного сечения с движущейся верхней границей. Постановка дифференциальной задачи такова:

$$\frac{\partial\omega}{\partial t}+A_1(\psi,\omega)+A_2(\psi,\omega)=\frac{1}{R}\Delta\omega, \quad \Delta\psi=-\omega, \qquad (12)$$

$$A_\alpha(\psi,\omega)=\frac{\partial}{\partial x_\alpha}(v_\alpha\omega), \alpha=1,2, \quad v_1=\frac{\partial\psi}{\partial x_2}, \quad v_2=-\frac{\partial\psi}{\partial x_1}, \qquad (13)$$

$$(x_1,x_2)\in\Omega=\{0<x_\alpha<1\}, \quad \alpha=1,2, \quad t>0.$$

$$\frac{\partial\psi}{\partial x_1}(0,x_2,t)=\frac{\partial\psi}{\partial x_2}(x_1,0,t)=\frac{\partial\psi}{\partial x_1}(1,x_2,t)=0, \qquad (14)$$

$$\frac{\partial\psi}{\partial x_2}(x_1,1,t)=1; \ \psi(x_1,x_2,t)=0, \ (x_1,x_2)\in\partial\Omega=\Gamma, t>0.$$

Для простоты изложение будем вести для равномерной раз -

ностной сетки $\bar{\Omega}_h=\{x_{i_\alpha}=i_\alpha h_\alpha,\ h_\alpha=1/N_\alpha,\ i_\alpha=0,\dots,N_\alpha,\ \alpha=1,2\}$. Определим разностные операторы

$$A_{\alpha h}(\psi,\omega)=(v_\alpha\omega)_{\overset{\circ}{x}_\alpha},\ \alpha=1,2,\quad v_1=\psi_{\overset{\circ}{x}_2},\ v_2=-\psi_{\overset{\circ}{x}_1}. \tag{15}$$

Аппроксимация (15) конвективных членов, как известно, является энергетически нейтральной /6/.

Стандартная полунеявная схема решения уравнений гидродинамики, соответствующая полунеявной методике (7) решения одномерной задачи, имеет вид:

$$\frac{\omega^{k+1}-\omega^k}{\tau}+A_{1h}(\psi^k,\omega^{k+1})+A_{2h}(\psi^k,\omega^{k+1})=$$
$$=\frac{1}{R}\left[B_{1h}(\omega^{k+1},\omega_r^k)+B_{2h}(\omega^{k+1},\omega_r^k)\right],$$
$$\Delta_h\psi^{k+1}=-\omega^{k+1}. \tag{16}$$

Операторы B_{1h}, B_{2h} определены аналогично одномерному оператору в (7). Значения ω_r вычисляются по формулам типа Тома:

$$(\omega_r)^k_{0j_2}\equiv\omega^{k+1}_{0j_2}=-\frac{2}{h_1^2}\psi^k_{1j_2};\quad(\omega_r)^k_{N_1j_2}\equiv\omega^{k+1}_{N_1j_2}=-\frac{2}{h_1^2}\psi^k_{N_1-1j_2};$$
$$(\omega_r)^k_{j_10}\equiv\omega^{k+1}_{j_10}=-\frac{2}{h_1^2}\psi^k_{j_11};\quad(\omega_r)^k_{j_1N_2}\equiv\omega^{k+1}_{j_1N_2}=-\frac{2}{h_2}\left(1+\frac{\psi^k_{j_1N_2-1}}{h_2}\right). \tag{17}$$

Как видно из формул (17), тот факт, что в (16) входят ω_r с нижнего временного слоя k означает, что значения вихря на границе вычисляются по значениям ψ с предыдущего временного слоя. Введя обозначение

$$A_h(\psi,\omega,\omega_r)\equiv-A_{1h}(\psi,\omega)-A_{2h}(\psi,\omega)+\frac{1}{R}\left[B_{1h}(\omega,\omega_r)+B_{2h}(\omega,\omega_r)\right], \tag{18}$$

схему (16) (схему А) запишем в операторном виде:

$$\frac{\hat\omega-\omega}{\tau}=A_h(\psi,\hat\omega,\omega_r),\qquad\Delta_h\hat\psi=-\hat\omega. \tag{19}$$

Аналогично одномерной задаче, вместо системы (I2)-(I3) напишем эквивалентную систему дифференциальных уравнений

$$\frac{\partial \Delta\psi}{\partial t} - A_1(\psi,\omega) - A_2(\psi,\omega) = -\frac{1}{R}\Delta\omega,$$
$$\frac{\partial\omega}{\partial t} + A_1(\psi,\omega) + A_2(\psi,\omega) = \frac{1}{R}\Delta\omega. \qquad (20)$$

Как и в одномерной задаче, напишем разностную аппроксимацию уравнений (20), вынося значения вихря с границы на верхний временной слой:

$$\frac{(\Delta_h\psi)^{k+1}+\omega^k}{\tau} - A_{1h}(\psi^k,\omega^k) - A_{2h}(\psi^k,\omega^k) = -\frac{1}{R}\left[B_{1h}(\omega^k,\omega_r^{k+1}) + B_{2h}(\omega^k,\omega_r^{k+1})\right], \qquad (21)$$

$$\frac{\omega^{k+1}-\omega^k}{\tau} + A_{1h}(\psi^{k+1},\omega^{k+1}) + A_{2h}(\psi^{k+1},\omega^{k+1}) = \frac{1}{R}\left[B_{1h}(\omega^{k+1},\omega_r^{k+1}) + B_{2h}(\omega^{k+1},\omega_r^{k+1})\right]. \qquad (22)$$

Используя обозначения (I8), схему (2I)-(22) (схема В) запишем в виде:

$$\frac{\Delta_h\hat{\psi}+\omega}{\tau} = -A_h(\psi,\omega,\hat{\omega}_r), \qquad \frac{\hat{\omega}-\omega}{\tau} = A_h(\hat{\psi},\hat{\omega},\hat{\omega}_r). \qquad (23)$$

В этой схеме операторы $B_{\alpha h}(\omega_k, \omega_r^{k+1})$ определяются аналогично (II), поэтому для решения уравнения (22) необходимо обратить самосопряженный оператор, в котором, по сравнению с обычным оператором Лапласа, усилилось диагональное преобладание в приграничных узлах. Исходя из анализа одномерной задачи, а также численных результатов работ /3,4/, можно сделать вывод, что в схеме В, по сравнению со схемой А, снимаются ограничения на τ, связанные с реализацией краевых условий для вихря.

В уравнениях Навье-Стокса ограничения на τ вызываются также нелинейными членами, т.е., для разностных уравнений, операторами A_{1h}, A_{2h}. Будем в уравнении (2I) определять скорости через значение Ψ с верхнего временного слоя, т.е. запишем уравнение следующим образом:

$$\frac{\Delta_h\Psi+\omega}{\tau}-A_{1h}(\Psi^{k+1},\omega^k)-A_{2h}(\Psi^{k+1},\omega^k)= \\ =-\frac{1}{R}\left[B_{1h}(\omega^k,\omega_r^{k+1})+B_{2h}(\omega^k,\omega_r^{k+1})\right]. \tag{24}$$

Возьмем второе уравнение совпадающим с (22). Тогда схему (23), (22) (схему С) запишем в виде:

$$\frac{\Delta_h\hat{\Psi}+\omega}{\tau}=-A_h(\hat{\Psi},\omega,\hat{\omega}_r);\quad \frac{\hat{\omega}-\omega}{\tau}=A_h(\hat{\Psi},\hat{\omega},\hat{\omega}_r). \tag{25}$$

В /2/ показано, что для линеаризованной вблизи стационарного решения задачи схема С в бесконечной области является абсолютно устойчивой относительно малых возмущений. Учет влияния границы производится в схеме С так же, как и в схеме В. Численные результаты в /3/ показывают устойчивость схемы С в широком диапазоне параметров, в том числе и на неравномерной сетке.

4. Нетрудно теперь выписать схемы, аналогично схемам А,В,С, и для задач конвекции. Систему дифференциальных уравнений запишем в виде:

$$\frac{\partial\omega}{\partial t}+A_1(\Psi,\omega)+A_2(\Psi,\omega)=\Delta\omega+Gr\frac{\partial T}{\partial x}, \tag{26}$$

$$\Delta\Psi=-\omega, \tag{27}$$

$$\frac{\partial T}{\partial t}+A_1(\Psi,T)+A_2(\Psi,T)=\frac{1}{Pr}\Delta T, \tag{28}$$

где Gr, Pr - числа Грасгофа и Прандтля, T - температура. Будем рассматривать задачу в области $\Omega=\{0<x_\alpha<1,\ \alpha=1,2\}$. Краевые условия возьмем следующие: $\Psi|_{\partial\Omega}=0,\ \frac{\partial\Psi}{\partial n}\Big|_{\partial\Omega}=0,\ T|_{\partial\Omega}=x_1$.

Уравнение (28) аппроксимируем разностной схемой

$$T_t + A^*_{1h}(\Psi,T) + A^*_{2h}(\Psi,T) = \frac{1}{Pr}\Delta_h T,$$

где $A^*_{\alpha h}(\Psi,T)$ -энстропийно нейтральная аппроксимация членов переноса с монотонизацией /6/. Введем обозначение

$$A^*_h(\Psi,T) = -A^*_{1h}(\Psi,T) - A^*_{2h}(\Psi,T) + \frac{1}{Pr}\Delta T.$$

По сравнению с рассмотренной в разделе 3 системой уравнений гидродинамики, для задач конвекции могут возникнуть дополнительные ограничения на шаг по времени из-за температурного источника в уравнении (26). Численно сравнивались между собой следующие разностные схемы, аналогичные выписанным ранее разностным схемам для уравнений Навье-Стокса:

а) аналог обычной полунеявной схемы (схема AI):

$$\omega_t = A_h(\Psi,\hat{\omega},\omega_r,T); \quad \Delta_h\hat{\Psi} = -\hat{\omega}; \quad T_t = A^*_h(\hat{\Psi},\hat{T});$$

в) схема, аналогичная (23) (схема BI):

$$\frac{\Delta_h\hat{\Psi}+\omega}{\tau} = -A_h(\Psi,\omega,\hat{\omega}_r,T); \; T_t = A^*_h(\hat{\Psi},T); \; \omega_t = A_h(\hat{\Psi},\hat{\omega},\hat{\omega}_r,\hat{T});$$

с) схема, аналогичная (25) (схема CI):

$$\frac{\Delta_h\hat{\Psi}+\omega}{\tau} = -A_h(\hat{\Psi},\omega,\hat{\omega}_r,T); \; T_t = A^*_h(\hat{\Psi},\hat{T}); \; \omega_t = A_h(\hat{\Psi},\hat{\omega},\hat{\omega}_r,\hat{T}).$$

Численное сравнение разностных схем проводилось при значениях числа Грасгофа 10^4 и 10^5, числах Прандтля 10^{-2}, 1, 20. Расчеты проводились как на равномерной, так и на неравномерной сетках. Ниже приведены результаты для сетки 10x10, $h_{min} = h_1 = h_{10} = 0.04$, $h_2 = \ldots = h_9 = 0.115$. Контроль сходимости осуществлялся по относительному падению невязки $\|r_K\|_c / \|r_0\|_c < \varepsilon$, где $r_K = A_h(\Psi^K, -\Delta_h\Psi^K, \omega^K_r, T^K)$.

Положим $r_0 = Gr$, $\varepsilon = 10^{-3}$. Зависимости количества итераций K, необходимых для достижения сходимости, по

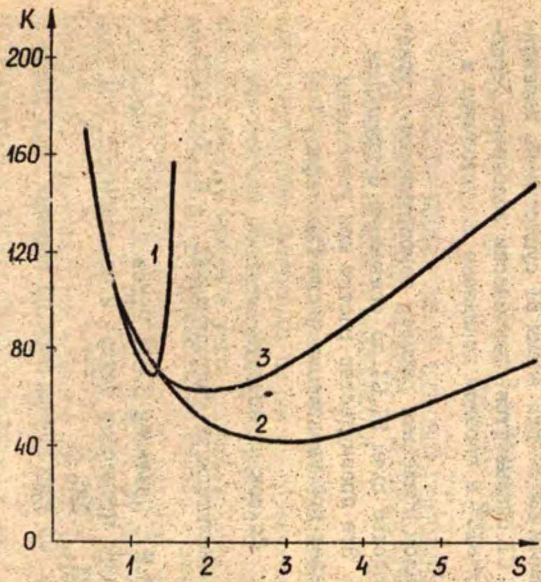

Рис.I. Зависимость количества итераций от приведенного шага по времени, $Gr = 10^5$, $Pr = 10^{-2}$.
I - схема AI, 2 - схема BI, 3 - схема CI.

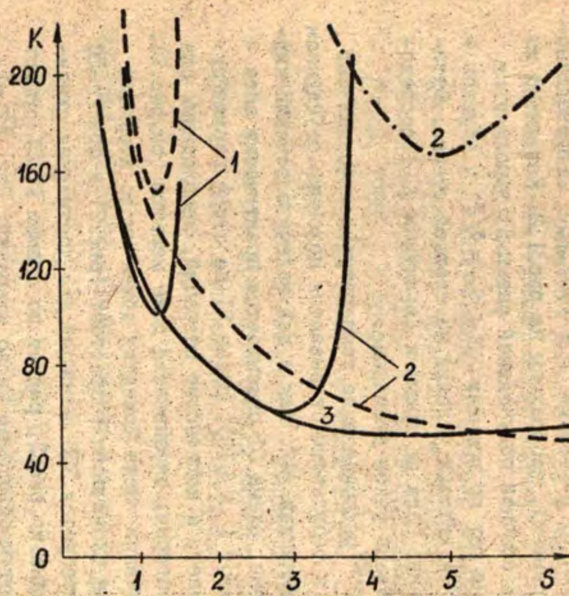

Рис.2. Зависимость количества итераций от приведенного шага по времени. Сплошные линии - $Gr=10^5$, $Pr = 1$, штриховые линии - $Gr=10^4$, $Pr = 1$, штрих-пунктирная линия - $Gr = 10^5$, $Pr=20$.
I - схема AI, 2 - схема BI, 3 - схема CI.

этому критерию, от параметра $s = \tau / h^2_{min}$ (приведенного шага по времени), изображены на рис.I,2. Как видно из рисунков, для обычной полунеявной схемы AI выполняется ограничение на шаг по времени $s < s_0 = 3/2$, обусловленное влиянием краевых условий на твердой стенке. Оптимальное значение шага по времени (величины s) сосредоточено в довольно узком диапазоне.

При Pr=I0^{-2} распределение температуры слабо зависит от скорости, и результаты оказываются похожими со случаем чистой гидродинамики /4/. Как и для задачи о течении жидкости в каверне, схема CI оказывается практически абсолютно устойчивой ($s > 10$), схема BI по этому параметру мало ей уступает, а количество итераций, необходимых для выполнения критерия, оказывается даже меньшим (см.рис.I).

При увеличении числа Прандтля общее число итераций для достижения сходимости возрастает (рис.2) и при Pr=20 по схеме AI требуется 350 итераций для достижения сходимости. Как видно из рис.2, расчет по схемам BI,CI существенно уменьшает необходимое число итераций. При Pr=I, Gr=I0^5 диапазон по s для схемы BI существенно расширяется, а схема CI оказывается практически абсолютно устойчивой. При Gr=I0^4 в широком диапазоне s устойчива и схема BI.

Таким образом численные расчеты демонстрируют существенное преимущество схем BI,CI по сравнению с традиционной схемой AI. Это преимущество растет при уменьшении h_{min}, и падает при увеличении числа Грасгофа.

Список литературы

I. Роуч П. Вычислительная гидродинамика. - М.:Мир,I980.- 6I6 с.

2. Пасконов В.М., Полежаев В.И., Чудов Л.А. Численное моделирование процессов тепло- и массообмена. - М.: Наука, I984. - 285 с.

3. Люмкис Е.Д. Об увеличении шага по времени при интег-

рировании уравнений Навье-Стокса в переменных вихрь-функция тока.//Дифференц.уравнения. - 1985 - т.XXI - № 7- с.1208-1217.
4. Люмкис Е.Д. Полунеявная устойчивая разностная схема решения уравнений Навье-Стокса //Проблемы динамики вязкой жидкости. Труды X Всесоюзной школы. - Новосибирск, 1985. - С.202-205.
5. Самарский А.А. Теория разностных схем. - М.:Наука, 1977. - 656 с.
6. Моисеенко Б.Д., Фрязинов И.В. Консервативные разностные схемы для уравнений вязкой жидкости в переменных Эйлера //Журнал вычисл.мат. и мат.физ. - 1981 - Т.21. - №5.- С.1180-1191.

УДК 536.421.1+536.421+536.24+532.516.5+621.315.692

М.Л.Гулбе, Э.Н.Мартузане
ВЦ ЛГУ им.П.Стучки, Рига
Ю.Л.Волков,Э.С.Копелиович,
В.В.Раков
ГИРЕДМЕТ, Москва

ЧИСЛЕННОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ТЕПЛОВЫХ,ГИДРОДИНАМИЧЕСКИХ И КОНЦЕНТРАЦИОННЫХ ПОТОКОВ В ПРОЦЕССЕ ЗОННОЙ АМПУЛЬНОЙ ПЛАВКИ В НЕВЕСОМОСТИ

Современная наука и техника широко используют монокристаллические материалы. Одним из перспективных методов выращивания монокристаллов из расплава является ампульная зонная плавка в условиях невесомости. Важный критерий качества полученного кристалла - это равномерность распределения примеси как по радиусу, так и по длине, что в большой степени зависит от поступления примеси в область расплава у фронта кристаллизации. Степень обогащения примесью этой области обусловлена процессами тепло-массопередачи, которые превалируют в непосредственной близости к фронту кристаллизации, и процессами гидродинамического переноса, обуславливающими распределение примеси в массе расплава.

При ампульной зонной плавке тепло, поступающее от резистивного нагревателя, обеспечивает образование зоны расплава и создает неоднородность распределения температуры по длине слитка. Тепло, кроме того, теряется путем излучения с поверхности кристалла. На фронте фазового перехода происходит выделение или поглощение скрытой теплоты. На теплоперенос влияет также движение нагревателя вдоль слитка. В зоне расплава тепло переносится как теплопроводностью, так и потоками расплава. В работе /I/ рассматривались тепловые явления в процессе ампульной зонной плавки, когда слиток, концы которого закреплены в графитовых держателях, помещен в кварцевую ампулу, вдоль котсрой движется муфель с резистивным нагревателем. Изучалось влияние расположения нагревателя относительно слитка и наличия рифлений графитовых держателей на ширину и перегрев зоны расплава путем решения уравнения теплопроводности.

Настоящая работа посвящена численному изучению тепловых, гидродинамических и диффузионных процессов, проходящих при ампульной зонной плавке германия, легированного сурьмой или галлием, поскольку в условиях невесомости получены некоторые экспериментальные данные о происходящих при выращивании монокристаллов германия процессах тепло-массопереноса.

Для определения температурных полей решается задача теплопроводности в двухфазной среде с учетом скрытой теплоты фазового перехода, условий излучения на внешней поверхности по закону Стефана-Больцмана как в квазистационарной, так и в нестационарной постановках. Исследуется также процесс образования зоны расплава во времени в начальный мсмент плавки, когда муфель с нагревателем остается неподвижным.

Математическая модель для описания тепловых процессов представлена в /I/ Для определения теплового поля

$T(z,y,t)$ в цилиндрической области $\Omega = \Omega_{сл} \cup \Omega_{гр}$, где $\Omega_{сл}$ - область, занимаемая слитком, а $\Omega_{гр}$ - область, занимаемая графитом, с боковой поверхностью $\Gamma(z) = \Omega_{сл} \cap \Omega_{гр}$, осуществляется введение в уравнение теплопроводности обобщенной теплоемкости, включающей скрытую теплоту фазового перехода в виде теплоемкости, сосредоточенной на границе раздела фаз /2/, и замена переменных

$$\varphi = \begin{cases} z = z \\ r = y/\Gamma(z) \\ t = t \end{cases} , \tag{I}$$

сводящая область Ω в цилиндрическую одинакового радиуса.

В результате преобразований температура $T(z,r,t)$ будет удовлетворять следующему уравнению:

$$\begin{aligned} \varphi^2 \alpha(T)\frac{\partial T}{\partial t} + \varphi^2 \alpha(T) v \frac{\partial T}{\partial z} = \\ = \varphi^2 \frac{\partial^2 T}{\partial z^2} - 2r\varphi\varphi' \frac{\partial^2 T}{\partial z \partial r} + (1+\varphi^2 r^2)\frac{\partial^2 T}{\partial r^2} + \\ + \left[\frac{1}{r} - r(\varphi''\varphi - 2\varphi'^2)\right]\frac{\partial T}{\partial r} , \end{aligned} \tag{2}$$

где φ', φ'' - первая и вторая производные функции φ по радиусу r , $\alpha(T)$ - сглаживающая функция в температурном интервале ($T_{пл} - \Delta_1$, $T_{пл} + \Delta_2$), v - скорость движения нагревателя, $T_{пл}$ - температура плавления. Для решения этой задачи использовался метод неполного LU - разложения /3/, реализованный А.Гончаровым /4/. По сравнению с используемой ранее схемой аппроксимационной поправки Н.Н.Яненко для параболических уравнений, содержащих смешанную производную /5/, метод LU -разложения дает приблизительно 30-кратное ускорение счета.

В зоне расплава, ширина которой найдена из решения тепловой задачи, определяются гидродинамические и концентрационные потоки в условиях невесомости, с учетом термокапиллярной конвекции, вызывающей движение расплава, в предположении, что поверхности раздела фаз близки к плоским.

Процессы тепло-массопереноса в расплаве рассматриваются на основе уравнений Навье-Стокса в приближении Буссинеска для несжимаемой жидкости и уравнений переноса тепла и диффузии. Расчеты проводились по методикам, описанным в /6-8/.

Зная распределение примеси в зоне расплава и, в частности, на фронте кристаллизации, можно судить о вхождении примеси в растущий из расплава кристалл.

В численных расчетах был рассмотрен образец германия, радиус которого 0,75 см, длина - 9,6 см. Он был помещен между графитовыми полыми держателями, длина каждого из которых 5,7 см, наружный радиус - I,3 см, а внутренний - 0,4 см. Резистивный нагреватель длиной в 4 см, расположенный в муфеле длиной в I0 см, продвигался вдоль слитка со скоростью v =I5 мм/час. Температура нагревателя бралась равной I500^{o}K, температура муфеля - 600^{o}K, температура окружающей среды - 3I3^{o}K.

Таблица I

Физические константы

	Германий	Графит
I	2	3
Плотность, ρ [г/см^3]	5,6	2,26
Температура плавления, $T_{пл}$ [^{o}K]	I2I0	
Удельная теплоемкость, С [втс/(г град)]	0,34	I,956
Теплопроводность, λ [вт/(см град)]		
($T > T_{пл}$)	0,4I2	
($T < T_{пл}$)	0,I73	0,39
Степень черноты,		
($T > T_{пл}$)	0,I8	

Продолжение таблицы

I	2	3
$(T<T_{пл})$	0,6	0,8
Кинематическая вязкость, ν [$см^2/с$]	$1,35\cdot10^{-3}$	
Коэффициент линейного расширения β [I/град]	$5\cdot10^{-4}$	
Равновесный коэффициент сегрегации, m		
сурьма Sb	0,06	
галлий Ga	0,087	
Коэффициент диффузии, $\mathcal{D}$ [см/с]		
сурьма Sb	$4\cdot10^{-5}$	
галлий Ga	$5\cdot10^{-5}$	
Скорость протягивания v[мм/час]	I5	

Характерные числа безразмерных параметров для зонной плавки германия в условиях невесомости будут следующие: число Прандтля $Pr=4,6\cdot10^{-3}$, число Марангони $Ma=1,8\times\times10^5\Delta T\ell$, число $M=\frac{Ma}{Pr}=3,91\cdot10^7\Delta T\ell$, число Шмидта $Sc=\frac{\nu}{\mathcal{D}}$. Здесь ΔT - перегрев в зоне расплава, ℓ - половина ширины зоны.

На рис.I приводятся результаты расчетов температурного поля путем решения двумерной квазистационарной тепловой задачи при фиксированном положении нагревателя. Здесь представлены положения фронтов плавления и кристаллизации и распределение температуры в зоне расплава. Кривые I - без учета выделения и поглощения стефановского тепла, кривые 2 - с учетом стефановского тепла.

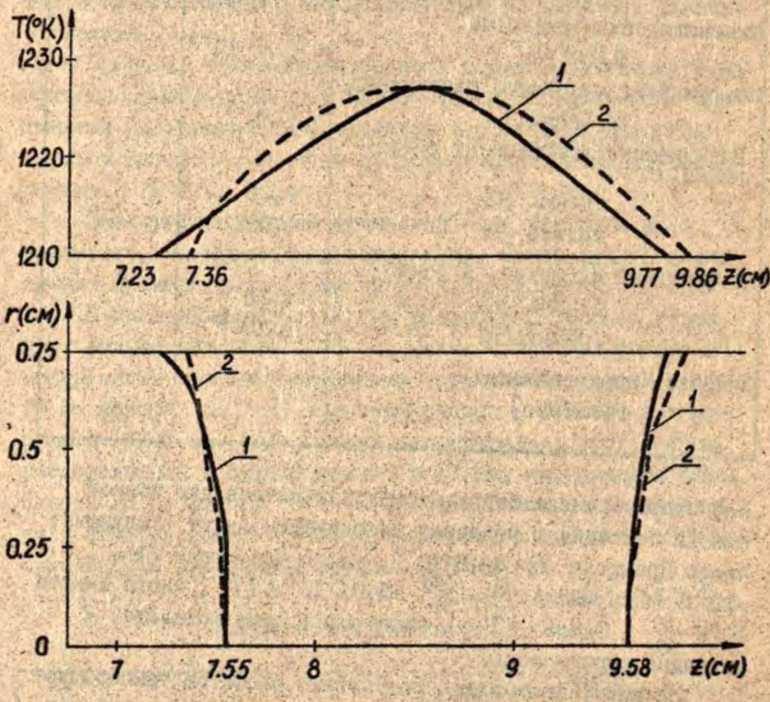

Рис.I. Распределение температуры в зоне расплава германия и положения фронтов фазового перехода в квазистационарном состоянии.
I - без учета стефановского тепла,
2 - с учетом стефановского тепла.

На рис.2 представлено решение по времени двумерной нестационарной тепловой задачи при неподвижном нагревателе в начальной стадии процесса, когда происходит образование зоны расплава. Здесь изображены положения фронтов фазового перехода для различных моментов времени до выхода на стационарное состояние. Время выхода - I час. 22 мин.

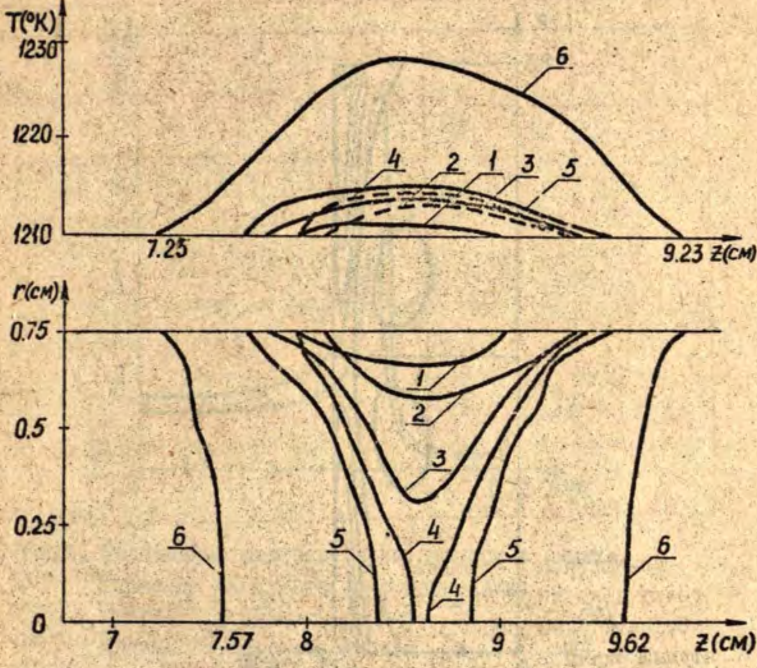

Рис.2. Распределение температуры в зоне расплава германия и положения фронтов фазового перехода по времени в процессе создания зоны расплава.
I - t = 31,5 мин; 2 - t = 37,7 мин; 3 - t = 40 мин; 4 - t = 41,1 мин; 5 - t = 42,2 мин; 6 - t = 1 ч.22 м.

На рис. 3 представлены изолинии функции тока в зоне расплава германия. Основное движение возникает под действием термокапиллярной силы, и образуются четыре тороидальных вихря, попарно расположенных друг над другом. Таким образом, у фронта кристаллизации имеются два вихря, циркулирующих в противоположных направлениях.

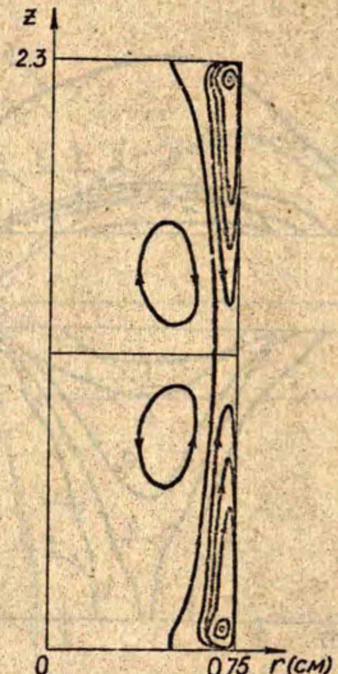

Рис.3. Изолинии функции тока в зоне расплава германия в условиях невесомости в процессе ампульной зонной плавки. $Pr = 4,6 \cdot 10^{-3}$, $Ma = 3,52 \cdot 10^{6}$, $M = 7,64 \cdot 10^{8}$, $\Delta T = 17^{\circ}$, $\ell = 1,15$.

На рис.4 даны радиальные распределения примеси сурьмы (кривая I) и галлия (кривая 2) в расплаве германия на фронте кристаллизации со стороны расплава. Для определения распределения примеси, входящей в кристалл, значения концентрации примеси со стороны расплава должны быть умножены на коэффициент сегрегации m . Точка встречи внешнего и внутреннего вихрей на поверхности кристаллизации, где поток направлен к этой поверхности, соответствует максимуму концентрации примеси.

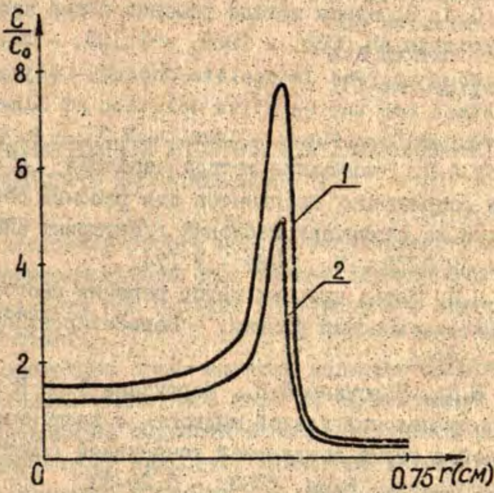

Рис.4. Радиальное распределение примеси в слитке германия на фронте кристаллизации; кривая I - примесь сурьмы Sb, Sc =27, кривая 2 - примесь галлия Ga, Sc =34.

Результаты расчетов сравнивались с полученными экспериментальными данными сотрудниками ГИРЕДМЕТа. Получено качественное совпадение. Проведенные исследования подтверждают, что при зонной плавке в условиях невесомости на движение расплава и вхождение примеси в растущий кристалл влияет термокапиллярная конвекция.

Список литературы

I. Гулбе М.Л., Мартузане Э.Н., Копелиович Э.С., Раков В.В. Численное исследование температурного поля при моделировании процесса зонной плавки в ампуле// Прикладные задачи математической физики.-Рига:ЛГУ им. П.Стучки, 1985.-С.135-144.

2. Олейник О.А. Об одном методе решения общей задачи Стефана //Доклады АН СССР. - 1960. - Т.135. - №5. - С.5-8.
3. David S.Kershaw. The Incomplete Chdesky-Conjugate Gradient Method for the Herative Solution of Linear Equations //J. of Comp.Phys. - 1978. - V.26 - P. 43-65.
4. Гончаров А.Л. Реализация метода неполной LU-декомпозиции сопряженных градиентов для решения сеточных уравнений на различных шаблонах //Препринт ИПМ им.М.В. Келдыша АН СССР - М., 1984 - № 174.
5. Яненко Н.Н. Метод дробных шагов решения многомерных задач математической физики. - Новосибирск:Наука, 1967. - 88 с.
6. Люмкис Е.Д., Мартузан Б.Я., Мартузане Э.Н. К численному расчету потоков вязкой жидкости с вращением, гравитационной и термокапиллярной конвекцией //Межведомственный сборник.- Рига, 1980. - С.20-33.
7. Люмкис Е.Д., Мартузане Э.Н. Численный метод расчета конвективной диффузии в зоне расплава //Вычислитель - ная техника и краевые задачи. Методы и спец. вычислительные средства. - Рига, 1981. - С.111-139.
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 //Сборник трудов II всесоюзного семинара по тепло-массообмену в невесомости.- Пермь, 1981. - С.32-33.

УДК 536.25+537.84

С.Я.Герценштейн
НИИ Механики МГУ,Москва
А.Я.Калейс
ЛГУ им.П.Стучки, Рига

О КОНВЕКТИВНОЙ УСТОЙЧИВОСТИ ДВУХКОМПОНЕНТНОЙ ЖИДКОСТИ В МАГНИТНОМ ПОЛЕ

В настоящей работе исследуется конвективная устойчивость горизонтального слоя вязкой двухкомпонентной проводящей жидкости при наличии вертикального однородного магнитного поля.

В настоящее время имеются довольно обширные исследования влияния магнитного поля на конвективную устойчивость проводящей жидкости и по конвективной устойчивости двухкомпонентной жидкости. Линейный анализ этих задач, который проведен в работе /I/, показал, что имеет место как монотонная, так и колебательная неустойчивость. В работе /2/ исследовано поведение решений этих задач вблизи точки пересечения границ монотонной и колебательной неустойчивости. Исследование поведения конечно амплитудных возмущений проведено в работе /3/; здесь обнаружено существование подкритических конечно-амплитудных движений. Результаты численных исследований двойной диффузии приведены в работах /5/ (метод Бубнова-Галеркина) и /6/ (метод конечных разностей). Задача о влиянии магнитного поля на конвективную устойчивость методом конечных разностей решалась в работе /7/. Анализ линейной задачи о влиянии магнитного поля на конвективную устойчивость двухкомпонентной жидкости проведен в работе /8/.

Рассмотрим постановку задачи о конвективных движениях двухкомпонентной проводящей жидкости в горизонтальном слое при наличии однородного вертикального магнитного поля. Пусть на границах слоя, находящегося в вертикальном магнитном поле с напряженностью $\bar{H}_0$ $(0,0,H_0)$, поддерживаются постоянными температура раствора T_Σ и концентрация тяжелой примеси S_Σ, причем поперек слоя задано линейное распределение температуры и концентрации, а на границах слоя выполняется

$$T_\Sigma(x,y,t)=T_0;\quad S_\Sigma(x,y,t)=S_0 \quad \text{при } z=0$$

и $$T_\Sigma(x,y,t)=T_0-\tilde{T};\ S_\Sigma(x,y,t)=S_0-\tilde{S} \quad \text{при } z=d.$$

Тогда при возникновении конвективного движения температуру и концентрацию можно представить в следующем виде:

$$T_\Sigma(x,y,z,t)=T_0-\tilde{T}z/d+T(x,y,z,t)$$
$$S_\Sigma(x,y,z,t)=S_0-\tilde{S}z/d+S(x,y,z,t). \qquad (\mathrm{I})$$

Плотность раствора ρ_Σ считаем линейно зависящей от температуры и концентрации:

$$\rho_\Sigma(x,y,z,t)=\rho_0(1-\tilde{\alpha}(T(x,y,z,t)-\tilde{T}z/d)+\tilde{\beta}(S(x,y,z,t)-\tilde{S}z/d)),$$

где $\tilde{\alpha}$, $\tilde{\beta}$ - соответствующие коэффициенты расширения при постоянных других параметрах, притом выбранные так, что они положительны, когда температура и концентрация увеличиваются. Уравнения конвективного движения будем писать в рамках приближения Буссинеска /I/. В уравнениях Навье-Стокса учтем воздействие магнитного поля на индуцированный в жидкости ток. Уравнения для напряженности магнитного поля получим из закона Ома и уравнений Максвелла в дифференциальной форме. Температура и концентрация примеси в растворе удовлетворяют, соответственно, уравнению теплопроводности и уравнению диффузии с учетом перекрестных эффектов термодиффузии (эффект Соре) и диффузионной теплопроводности (эффект Дюфора). Применяя к уравнениям движения оператор rot и переходя к безразмерным переменным с учетом соотношений:

$$[t]=d^2/\nu;\ [v]=\nu/d;\ [T]=\tilde{T};\ [S]=\tilde{S};\ [H]=H_0;\ [x]=[y]=[z]=d,$$

получим систему уравнений, описывающую конвективное движение, напряженность магнитного поля, температуру, концентрацию примеси:

$$
\left\{
\begin{aligned}
&\left(\frac{\partial v_x}{\partial z}-\frac{\partial v_z}{\partial x}\right)'_t=\frac{\partial}{\partial x}\left((\vec v\vec\nabla)v_z\right)-\frac{\partial}{\partial z}\left((\vec v\vec\nabla)v_x\right)+\left(-Gr_T\frac{\partial T}{\partial x}-Gr_s\frac{\partial S}{\partial x}\right)+\\
&\qquad+M\left(\frac{\partial}{\partial z}\left((\vec H\vec\nabla)H_x+\frac{\partial H_x}{\partial z}\right)-\frac{\partial}{\partial x}\left((\vec H\vec\nabla)H_z+\frac{\partial H_z}{\partial z}\right)\right)\\
&\left(\frac{\partial v_y}{\partial z}-\frac{\partial v_z}{\partial y}\right)'_t=\frac{\partial}{\partial y}\left((\vec v\vec\nabla)v_z\right)-\frac{\partial}{\partial z}\left((\vec v\vec\nabla)v_y\right)+\left(-Gr_T\frac{\partial T}{\partial y}+Gr_s\frac{\partial S}{\partial y}\right)+\\
&\qquad+M\left(\frac{\partial}{\partial z}\left((\vec H\vec\nabla)H_y+\frac{\partial H_y}{\partial z}\right)-\frac{\partial}{\partial y}\left((\vec H\vec\nabla)H_z+\frac{\partial H_z}{\partial z}\right)\right)\\
&\left(\frac{\partial v_x}{\partial y}-\frac{\partial v_y}{\partial x}\right)'_t=\frac{\partial}{\partial x}\left((\vec v\vec\nabla)v_y\right)-\frac{\partial}{\partial y}\left((\vec v\vec\nabla)v_x\right)+\\
&\qquad+M\left(\frac{\partial}{\partial y}\left((\vec H\vec\nabla)H_x+\frac{\partial H_x}{\partial z}\right)-\frac{\partial}{\partial x}\left((\vec H\vec\nabla)H_y+\frac{\partial H_y}{\partial z}\right)\right)\\
&(H_x)'_t=(\vec H\vec\nabla)v_x-(\vec v\vec\nabla)H_x+\frac{\partial v_x}{\partial z}+\frac{1}{Pm}\Delta H_x\\
&(H_y)'_t=(\vec H\vec\nabla)v_y-(\vec v\vec\nabla)H_y+\frac{\partial v_y}{\partial z}+\frac{1}{Pm}\Delta H_y\\
&(H_z)'_t=(\vec H\vec\nabla)v_z-(\vec v\vec\nabla)H_z+\frac{\partial v_z}{\partial z}+\frac{1}{Pm}\Delta H_z\\
&T'_t=v_z-(\vec v\vec\nabla)T+\frac{1}{Pr}\Delta T+C_{TS}\Delta S\\
&S'_t=v_z-(\vec v\vec\nabla)S-\frac{1}{Sc}\Delta S+C_{ST}\Delta T\ ,
\end{aligned}
\right.
\tag{3}
$$

где 1) Pr – число Прандтля, Sc – число Шмидта, Pm – магнитное число Прандтля – характеристики физических свойств среды; 2) Gr_T – тепловое число Грасгофа, Gr_S – диффузионное число Грасгофа, M – число Гартмана – характеристики внешнего воздействия; 3) C_{TS} и C_{ST} – характеристики перекрестных эффектов.

Для возмущений скорости, напряженности, температуры и концентрации потребуем выполнение следующих граничных условий при $z=0$ и $z=1$:

$$\frac{\partial v_x}{\partial z}=\frac{\partial v_y}{\partial z}=v_z=H_x=H_y=\frac{\partial H_z}{\partial z}=T=S=0. \tag{4}$$

Теперь рассмотрим решение двумерной линейной задачи. Вводим функции тока для скорости (ψ) и напряженности магнитного поля (φ):

$$\begin{cases} v_x=\dfrac{\partial\psi}{\partial z} \\ v_z=-\dfrac{\partial\psi}{\partial x} \end{cases} \qquad \begin{cases} H_x=\dfrac{\partial\varphi}{\partial z} \\ H_z=-\dfrac{\partial\varphi}{\partial x}. \end{cases}$$

Тогда $\dfrac{\partial v_x}{\partial z}-\dfrac{\partial v_z}{\partial x}=\Delta\psi$ и $\dfrac{\partial H_x}{\partial z}-\dfrac{\partial H_z}{\partial x}=\Delta\varphi$.

Линеаризуя систему (3), получим систему следующего вида:

$$\begin{cases} (\Delta\psi)'_t=\left(-Gr_T\dfrac{\partial T}{\partial x}+Gr_S\dfrac{\partial S}{\partial x}\right)+\Delta(\Delta\psi)+M\dfrac{\partial}{\partial z}(\Delta\varphi) \\ T'_t=-\dfrac{\partial\psi}{\partial x}+\dfrac{1}{Pr}\Delta T+C_{TS}\Delta S \\ S'_t=-\dfrac{\partial\psi}{\partial x}+\dfrac{1}{Sc}\Delta S+C_{ST}\Delta T \\ \varphi'_t=\dfrac{\partial\psi}{\partial z}+\dfrac{1}{Pm}\Delta\varphi \end{cases} \tag{5}$$

Имеем следующие граничные условия при $z=0$ и $z=1$:

$$\psi=\frac{\partial^2\psi}{\partial z^2}=\frac{\partial\varphi}{\partial z}=T=S=0\,. \qquad (6)$$

Задача (5), (6) решалась на ЭВМ ЕС-1060 с помощью системы аналитических вычислений *REDUCE*, с генерацией *FORTRAN*-программ для получения численных результатов.

Представим искомые функции в следующем виде, автоматически удовлетворяющем граничным условиям (6):

$$\begin{cases}\psi=A_1\cdot e^{\lambda t}\cdot\sin(\pi z)\cdot\sin(\pi\alpha x)\\ T=A_2\cdot e^{\lambda t}\cdot\sin(\pi z)\cdot\cos(\pi\alpha x)\\ S=A_3\cdot e^{\lambda t}\cdot\sin(\pi z)\cdot\cos(\pi\alpha x)\\ \varphi=A_4\cdot e^{\lambda t}\cdot\cos(\pi z)\cdot\sin(\pi\alpha x).\end{cases} \qquad (7)$$

Подставляя выражения (7) в систему (5), получим однородную линейную алгебраическую систему относительно амплитуд. Приравнивая определитель этой системы нулю, получим дисперсионное соотношение (связь декремента λ и волнового числа α). Наличие у этого уравнения корня с положительной действительной частью свидетельствует о линейной неустойчивости решения задачи, при этом если мнимая часть корня равна нулю, то говорят о монотонной неустойчивости, в противном случае - о колебательной неустойчивости. Определенный интерес представляет случай наличия двойного положительного действительного корня - "колебательная неустойчивость с нулевой частотой". Колебательные режимы движения могут существовать только в области параметров между границами колебательной неустойчивости и колебательной неустойчивости с нулевой частотой.

Выражение для границы монотонной неустойчивости получаем следующим образом: подставляем в дисперсионное соотношение значение $\lambda=0$ и выражаем Gr_T в зависимости от других параметров задачи:

$$Gr_T^c = Gr_S \cdot \frac{Sc}{Pr} \cdot \frac{PrC_{ST}-1}{ScC_{TS}-1} + M \cdot \frac{\gamma^2}{\alpha^2} \cdot \frac{Pm}{Pr} \cdot \frac{PrScC_{TS}C_{ST}-1}{ScC_{TS}-1} +$$

$$+ \frac{\gamma^6}{(\pi\alpha)^2} \cdot \frac{1}{Pr} \cdot \frac{PrScC_{TS}C_{ST}-1}{ScC_{TS}-1}, \qquad (8)$$

где $\gamma^2 = \pi^2(1+\alpha^2)$.

Критическое волновое число α_m, при котором достигается минимум Gr_T^c, находится из условия $\frac{\partial Gr_T^c}{\partial \alpha} = 0$

$$\alpha_m^2 = ch(arch(1+2 \cdot M \cdot Pm/\pi^2)/3) - 1/2.$$

Как видно, с увеличением числа Гартмана растет и критическое волновое число.

Границу колебательной неустойчивости находим следующим образом: подставляем в дисперсионное соотношение значение $\lambda = i\omega$, приравнивая нулю мнимую часть выражения, получаем ω в зависимости от других параметров задачи; подставляем ω в действительную часть выражения и получаем соотношение для вычисления Gr_T^o. Полученное соотношение описывает кривую второго порядка, в отличие от задачи о двойной диффузии и задачи о влиянии магнитного поля на конвекцию, где границей колебательной неустойчивости является прямая.

Границу "колебательной неустойчивости с нулевой частотой" находим следующим образом: наличие двойного корня дисперсионного соотношения определяется равенством нулю дискриминанта этого соотношения; это приводит к алгебраическому уравнению пятой степени для определения Gr_T^{co}. В ходе работы системы *REDUCE* генерировалась *FORTRAN*-программа для получения численных значений критических чисел Грасгофа. Корни многочленов вычислялись с помощью стандартной подпрограммы.

Приведем некоторые результаты расчета критических чисел Грасгофа.

Pr =I. Gr_s =0. α =I.

Pm	M	Gr_T^c	Gr_T^{co}	Gr_T^o
I.	I00.	2753.I9	*	*
2.	I00.	4727.II	4503.53	3233.79
5.	I00.	I0648.86	5942.50	2306.50
I0.	I0.	2753.I9	I9II.34	I05I.48
I0.	I00.	205I8.46	6445.79	2028.57
20.	I00.	40257.67	6702.I7	I895.46

* - колебательная неустойчивость отсутствует.

Здесь полученные результаты хорошо согласуются с результатами работы /8/.

Рассмотрим численное решение задачи (3), (4). Для решения этой задачи использовался метод Бубнова-Галеркина. Выбор базисных функций и методика подбора гармоник описаны в работе/4/. Расчеты проводились при значениях параметров задачи: числа Прандтля, магнитного числа Прандтля, числа Гартмана, числа Грасгофа и геометрических размеров, использованных в работе /7/, где задача решалась методом конечных разностей. Полученные результаты сравнивались по типу конвективного движения и вычисленной характеристике теплообмена - числу Нуссельта.

Приведем значения параметров задачи, при которых проводились расчеты, и полученные значения числа Нуссельта.

Pr =I. Gr_s =0. α =I. N =4 M_1 =4

(Nu ; режим)

I.	I00.	4000.(I.73:с),6000(2.50;с),I0000.(3.3I;с)
2.	I00.	4000.(I.I2;к),4800.(I.30;к),5000.(I.3I;с), 8000.(2.8I;с)
5.	I00.	2500.(I.03;к),5500.(I.50;к),6000.(I.62;с), 6I00.(I.87;с),I0000.(3.77;с)
I0.	I0.	I400.(I.09;к),I750.(I.78;с),I800.(I.82;с), 2200.(2.36;с),3200.(2.87;с)
I0.	I00.	3000.(I.28;к),6250.(3.33;с),6500.(3.4I;с), 7500.(3.64;с)

20. I00. 3000.(I.36;к),6500.(3.I4;с),6800.(3.2I;с), 7000.(3.23;с)

Полученные результаты по типу конвективного движения (колебательный, стационарный) совпадают с приведенными в работе /7/, можно отметить и хорошую согласованность полученных чисел Нуссельта.

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

Список литературы

I. Гершуни Г.З., Жуховицкий Е.М. Конвективная устойчивость несжимаемой жидкости .- М.: Наука ,I972.- 392 с.
2. Knobloch E., Proctor M.R.E. Nonlinear periodic convection in double-diffusive systems.//J.Fluid Mech. - 1981.-V.108.-P.291-316.
3. Veronis G. On finite amplitude instability in thermohaline convection //J.Mar.Res.-1965.-V.23.- N 1.-P.1-
4. Герценштейн С.Я.,Калейс А.Я. О некоторых вопросах конвективной устойчивости трехкомпонентной жидкости //Прикладные задачи математической физики. - Рига: ЛГУ им. П.Стучки, I985. - С.92-I0I.
5. Герценштейн С.Я., Родичев Е.Б.,Семин В.Н.,Шмидт В.М. О нелинейных конвективных движения в средах с "двойной диффузией" //Докл.АН СССР.-I98I.-Т.257.-№ 3.-С.350-35
6. Huppert H.E., Moore D.R. Nonlinear double-diffusive convection //J.Fluid Mech.- 1976. -V.78.-N 4.- P.821-854.
7. Weiss N.O. Convection in imposed magnetic field.Part.1 The development of nonlinear convection //J.Fluid Mech - 1981. -V.108.- P.247-272.
8. Rudraiah N., Shivakumara I.S, Double-diffusive convection with an imposed magnetic field //Int.J.Heat Mass Transfer. - 1984. -V.27. -N 10. - P.1825-1836.

УДК 519.6:518.61

Х.Э.Калис
ЛГУ им.П.Стучки, Рига

ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ТЕМПЕРАТУРНЫХ И ГИДРОДИНАМИЧЕСКИХ ПОЛЕЙ В СИСТЕМЕ КРИСТАЛЛ-РАСПЛАВ-ФЛЮС

Процесс выращивания методом Чохральского кристаллов из-под слоя флюса сильно зависит от свойств флюса, который является более вязким материалом, чем расплав. Работа посвящена исследованию задачи определения температурного поля и гидродинамических потоков в системе кристалл-расплав-флюс.

Дифференциальная задача ставится в цилиндрической системе координат (r,θ,z). В области $D_1=\{0\leq r<R,\ 0\leq\theta\leq 2\pi, 0<z<z_0\}$ находится жидкость-расплав, область $D_2 = \{r_0<r<R,\ 0\leq\theta\leq 2\pi,\ z_0<z<H\}$ занимает флюс, а в области $D_3=\{0<r<r_0, 0\leq\theta\leq 2\pi,\ z_0\leq z\leq H\}$ имеется твердый кристалл, который вращается с угловой скоростью $\Omega_1\neq 0$. В областях D_1 и D_2 рассматривается следующая система безразмерных уравнений для осесимметрического течения вязкой несжимаемой жидкости /I/

$$\frac{\partial\zeta}{\partial t}+v_r\frac{\partial\zeta}{\partial r}+v_z\frac{\partial\zeta}{\partial z}-r^{-4}\frac{\partial\omega^2}{\partial z}=\frac{1}{Re}\left\{\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}(r^2\zeta)+\frac{\partial^2\zeta}{\partial z^2}\right\}-\frac{Gr}{rRe^2}\frac{\partial T}{\partial r}, \quad (1)$$

$$\frac{\partial\omega}{\partial t}+v_r\frac{\partial\omega}{\partial r}+v_z\frac{\partial\omega}{\partial z}=\frac{1}{Re}\left\{r\frac{\partial}{\partial r}\frac{1}{r}\frac{\partial\omega}{\partial r}+\frac{\partial^2\omega}{\partial z^2}\right\}, \quad (2)$$

$$\frac{\partial T}{\partial t}+v_r\frac{\partial T}{\partial r}+v_z\frac{\partial T}{\partial z}=\frac{1}{PRe}\left\{\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}\left(r\frac{\partial T}{\partial r}\right)+\frac{\partial^2 T}{\partial z^2}\right\}, \quad (3)$$

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

где $v_r=-\frac{1}{r}\frac{\partial\psi}{\partial z}$, $v_z=\frac{1}{r}\frac{\partial\psi}{\partial r}$ - радиальная и осевая составляющие вектора скорости, $\psi=\psi(t,r,z)$ - функция тока жидкости, $\zeta=\zeta(t,r,z)=\frac{\omega}{r}$ - "нормированная" завихренность, $\omega=\partial v_r/\partial z-\partial v_z/\partial r$ - завихренность жидкости, $T=T(t,r,z)$ - безразмерная температура среды, $w = w(t,r,z)= v_\theta r$ - момент вращения, v_θ - азимутальная составляющая вектора скорости, $Re=U_0 L/\nu$ - число Рейнольдса, $U_0=\Omega_1 R$ - характерная скорость, Ω_1, Ω - угловая скорость вращения кристалла и тигля $\Gamma_1 \cup \Gamma_2$, $\Gamma_1=\{r=R,\ 0\leq\theta\leq 2\pi,\ 0\leq z\leq H\}$ - основание тигля, $\Gamma_2=\{0\leq r\leq R,\ 0\leq\theta\leq 2\pi,\ z=0\}$ - стенка тигля, $L=R$ - характерная длина (маштаб длины), R, r_0 - радиусы кристаллизатора и твердого кристалла, $\nu=\eta/\rho$, η - кинематическая и динамическая вязкость, ρ - плотность, $Gr = \beta g\Delta T L^3/\nu^2$ - число Грасгофа, β - коэффициент объемного расширения, g - ускорение свободного падения, $\Delta T^0 = T_{max}-T_n$ - характерная температура, $T_{max}=T/\Gamma_1$ - максимальная температура, $T_n=T/\Gamma_{13}$ - температура плавления, $\Gamma_{13}=\{0\leq r\leq r_0,\ 0\leq\theta\leq 2\pi,\ z=z_0\}$ - основание кристалла, $P=\nu/\chi$ - число Прандтля, t - параметр времени, $\chi=\varkappa/c_p$ - температуропроводность, $\varkappa$, c_p - теплопроводность и удельная теплоемкость, z_0 - высота жидкого слоя расплава, $H-z_0$ - высота слоя флюса.

Соответствующие переменные и постоянные в областях D_1 или D_2 обозначаются индексами "I" или "2", а их отношение - индексом "а", например, $P_a=P^{(2)}/P^{(1)}$, $\eta_a=\eta^{(2)}/\eta^{(1)}$ и т.д. С рядом твердых стенок Γ_1, Γ_2, Γ_{13} рассмотрены ось симметрии -

$$\Gamma_0=\{r=0,\ 0\leq\theta\leq 2\pi,\ 0<z\leq z_0\},$$

свободная поверхность области "флюса" -

$$\Gamma_3=\{r_0<r\leq R,\ 0\leq\theta\leq 2\pi,\ z=H\},$$

граница раздела сред "расплав-флюс" -

$$\Gamma_{12}=\{r_0<r<R,\ 0\leq\theta\leq 2\pi,\ z=z_0\},$$

твердая боковая стенка кристалла -

$$\Gamma_{23}=\{r=r_0,\ 0\leq\theta\leq 2\pi,\ z_0\leq z\leq H\}.$$

На твердых стенках Γ_1, Γ_2, Γ_{13}, Γ_{23} ставятся следующие граничные условия:

$$1)\ \psi = 0, \tag{5}$$

$$2)\ \omega/_{\Gamma_{23}} = r_0^2,\ \omega/_{\Gamma_2} = \Omega_2/\Omega_1,\ \omega/_{\Gamma_1} = \Omega_2 r^2/\Omega_1, \tag{6}$$
$$\omega/_{\Gamma_{13}} = r^2\ (0 \le r \le 1),$$

$$3)\ \frac{\partial\psi}{\partial z}\Big|_{\Gamma_1} = \frac{\partial\psi}{\partial r}\Big|_{\Gamma_2} = \frac{\partial\psi}{\partial z}\Big|_{\Gamma_{13}} = \frac{\partial\psi}{\partial r}\Big|_{\Gamma_{23}} = 0, \tag{7}$$

$$4)\ T/_{\Gamma_{13}} = 0,\ T/_{\Gamma_1} = 1,\ T/_{\Gamma_2} = T/_{\Gamma_{23}} = 0. \tag{8}$$

На оси симметрии Γ_0 имеем

$$\psi = \omega = \frac{\partial\zeta}{\partial r} = \frac{\partial T}{\partial r} = 0, \tag{9}$$

на свободной поверхности Γ_3 –

$$\psi = \frac{\partial\omega}{\partial z} = \zeta = \frac{\partial T}{\partial z} = 0, \tag{10}$$

а на границе раздела сред Γ_{12} /2/ –

$$\psi=0,\ \frac{\partial\psi^{(1)}}{\partial z} = \frac{\partial\psi^{(2)}}{\partial z},\quad \eta^{(1)}\zeta^{(1)} = \eta^{(2)}\zeta^{(2)},$$
$$\varkappa^{(1)}\frac{\partial T^{(1)}}{\partial z} = \varkappa^{(2)}\frac{\partial T^{(2)}}{\partial z},\ T^{(1)} = T^{(2)},\ \omega^{(1)} = \omega^{(2)}. \tag{11}$$

В качестве начальных условий при $t = 0$ берем

$$\zeta = 0,\ T = 0,\ \psi = 0,\quad \omega = Ar^2 + B, \tag{12}$$

где

$$A = \left(\frac{\Omega_2}{\Omega_1} - r_0^2\right)\Big/(1 - r_0^2),\quad B = -r_0^2\left(\frac{\Omega_2}{\Omega_1} - 1\right)\Big/(1 - r_0^2).$$

Соответствующая начально-краевая задача (1)-(12) решается методом сеток. Для этого на неравномерной сетке

$$\omega_h = \{(r_i, z_j):\ 1 \le i \le N+1,\ 1 \le j \le M+1,$$

$$r_{i+1}-r_i=h_i\ ,\ z_{j+1}-z_j=g_j\ ,\ z_1=r_1=0,\ z_{M_0+1}=z_0\ ,$$
$$z_{M+1}=H,\ r_{N_0+1}=r_0\ ,\ r_{N+1}=1\ ,\ M_0\leq M\ ,\ N_0<N\} \qquad (13)$$

дифференциальные уравнения (I)-(3) заменяют конечно-разностными, используя интегро-интерполяционный метод и линеаризацию относительно вектора $u=(w,T,\zeta)$ /3,4/. Полученная разностная схема монотонна. Уравнение (4) аппроксимируется на сетке (I3) в центральных разностях. Производные по времени заменяются разностями по времени вперед, т.е.

$$\frac{\partial U}{\partial t}(t_n,r_i,z_j)\approx(U_{ij}^{n+1}-U_{ij}^{n})/\tau,$$

где U_{ij}^{n} – приближенное значение $U(t_n,r_i,z_j)$; $t_n=n\tau$, $n=0,1,\ldots$, τ – шаг по времени.

Следовательно, каждое из уравнений (I)-(4) на $(n+1)$-ом временном слое, используя 5-ти точечный шаблон, можно заменить конечно-разностным в виде

$$b_{ij}U_{i+1,j}^{n+1}+s_{i,j}U_{i-1,j}^{n+1}+c_{ij}U_{ij+1}^{n+1}+d_{ij}U_{ij-1}^{n+1}+c_0U_{ij}^{n}+f_{ij}=$$
$$=(c_0+b_{ij}+s_{ij}+c_{ij}+d_{ij})\,U_{ij}^{n+1}, \qquad (14)$$

где коэффициенты b,s,c,d,f определяются соответственно из таблицы I.

Таблица I.

Значения коэффициентов разностной схемы

U	b_{ij}	s_{ij}	c_{ij}	d_{ij}	c_0	f_{ij}
I	2	3	4	5	6	7
w	$\tau_1\delta(-h_i\lambda_{1+}^{(1)})$	$\tau_2\delta(h_{i-1}\lambda_{1-}^{(1)})$	$\tau_3\delta(-g_j\lambda_{1+}^{(2)})$	$\tau_4\delta(g_{j-1}\lambda_{1-}^{(2)})$	1	0
T	$\tau_1\delta(-h_i\lambda_{2+}^{(1)})$	$\tau_2\delta(h_{i-1}\lambda_{2-}^{(1)})$	$\tau_3\delta(-g_j\lambda_{2+}^{(2)})$	$\tau_4\delta(g_{j-1}\lambda_{2-}^{(2)})$	P	0

I	2	3	4	5	6	7
ζ	$\tau_1\delta(-h_i\lambda^{(1)}_{3+})$	$\tau_2\delta(h_{i-1}\lambda^{(1)}_{2-})$	$\tau_3\delta(-g_j\lambda^{(2)}_{1+})$	$\tau_4\delta(g_{j-1}\lambda^{(2)}_{1-})$	1	f
ψ	$\dfrac{r_i}{r_{i+1/2}h_i\hbar_i}$	$\dfrac{r}{r_{i-1/2}h_{i-1}\hbar_i}$	$\dfrac{1}{g_j\, g}$	$\dfrac{1}{g_{j-1}\, g_i}$	0	$r_i^2\zeta_{ij}^{n+1}$

Здесь $f=\ell_{ij}\,\omega^{n+1}_{i,j+1}+q_{ij}\,\omega^{n+1}_{i,j-1}-(\ell_{ij}+q_{ij})\,\omega^{n+1}_{ij}+$

$$+\alpha_{ij}T^{n+1}_{i+1,j}+\beta_{ij}T^{n+1}_{i-1,j}-(\alpha_{ij}+\beta_{ij})T^{n+1}_{ij},$$

$$\ell_{ij}=\tau_3\tilde{\Gamma}\delta'_\lambda(-g_j\lambda^{(2)}_{1+}),\quad q_{ij}=\tau_4\tilde{\Gamma}\delta'_\lambda(g_{j-1}\lambda^{(2)}_{1-}),$$

$$\alpha_{ij}=\tau_1\tilde{G}\delta^+_{2,3},\quad \beta_{ij}=\tau_2\tilde{G}\delta^-_{2,3},\quad \tilde{\Gamma}=2Re\,\omega r^{-4},$$

$$\tilde{G}=-Gr(Re\,r)^{-1},\ \hbar_i=0{,}5(h_i+h_{i-1}),\ g_j=0{,}5(g_j+g_{j-1}),$$

$$r_{i+1/2}=r_i+h_i/2,\quad r_{i-1/2}=r_i-h_{i-1}/2,\quad z_{j+1/2}=z_j+g_j/2,$$

$$z_{j-1/2}=z_j-g_{j-1}/2,\quad \delta(h\lambda)=\frac{h\lambda}{\exp(h\lambda)-1},\quad \delta'_\lambda(h\lambda)=\frac{\partial\delta(h\lambda)}{\partial\lambda},$$

$$\delta_{2,3}=\frac{\delta(h\lambda^{(1)}_2)-\delta(h\lambda^{(1)}_3)}{\lambda^{(1)}_2-\lambda^{(1)}_3}\longrightarrow\delta'_\lambda(h\lambda^{(1)}_3)\quad(\lambda^{(1)}_2\to\lambda^{(1)}_3)$$

$$\tau_1=\tau/(Re\,h_i\hbar_i),\ \tau_2=\tau/(Re\,h_{i-1}\hbar_i),\ \tau_3=\tau/(Re\,g_j g_j),$$

$$\tau_4=\tau/(Re\,g_{j-1}g_j),\quad \lambda^{(1)}_{\kappa\pm}=\lambda^{(1)}_\kappa\Big|_{r=r_i\pm 1/2,\,z=z_j},$$

$$\lambda^{(2)}_{\kappa\pm}=\lambda^{(2)}_\kappa\Big|_{r=r_i,\,z=z_j\pm 1/2}\quad(\kappa=1,2,3),$$

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

$$\lambda_1^{(2)}=\lambda_3^{(2)}=-Re\,v_z\,,\quad \lambda_2^{(2)}=-Re\,P\,v_z\,,$$

$$\delta_{2,3}^{\pm}=\delta_{2,3}\Big|_{r=r_i\pm 1/2,\,z=z_j}\,,\quad (r,z)\in\omega_h\,.$$

Для постановки граничных условий для ζ на твердых стенках использовались граничные условия Вудса для равномерной сетки /I/, т.к. первые два шага сетки от твердой границы брались одинаковыми. Используя алгоритм получения условий Вудса на твердой стенке, можно получить условие второго порядка точности такого типа на границе раздела Γ_{12} в виде

$$\zeta_{i,M_0+1}^{(1)}=-\frac{3}{r_i^2 g(1+\eta_a^{-1})}\Big[\frac{1}{g}(\psi_{i,M_0}^{(1)}+\psi_{i,M_0+2}^{(2)})+\frac{r_i^2}{6}g(\zeta_{i,M_0}^{(1)}+\zeta_{i,M_0+2}^{(2)})\Big],\quad (15)$$

где

$$g=g_{M_0}=g_{M_0+1}\quad (N_0+2\leqslant i\leqslant N).$$

На оси симметрии Γ_0 использовалось условие второго порядка аппроксимации в виде

$$\zeta_{1,j}=\frac{8[(h_1+h_2)^2\psi_{2,j}-h_1^2\psi_{3,j}]}{h_1^2(h_1+h_2)^2\,h_2(h_2+2h_1)}\quad (2\leqslant j\leqslant M_0).\quad (16)$$

Условие $\partial T/\partial z=0$ на свободной поверхности Γ_3 заменялось следующим разностным условием второго порядка точности

$$g_{M-1}(g_{M-1}+2g_M)T_{i,M+1}-(g_M+g_{M-1})^2T_{i,M}+g_M^2\,T_{i,M-1}=0.\quad (17)$$

Каждое из разностных уравнений (I4) на ($n+1$)-ом временном слое решается итеративно методом локальной релаксации, т.е.

$$U_{ij}^{n+1,k+1}=(1-\omega_{ij})U_{ij}^{n+1,k}+\omega_{ij}U_{ij}^{z} \quad (k=0,1,\dots,K), \qquad (18)$$

где

$$U_{ij}^{z}=(b_{ij}U_{i+1,j}^{n+1,k}+s_{ij}U_{i-1,j}^{n+1,k+1}+c_{ij}U_{i,j+1}^{n+1,k}+d_{ij}U_{i,j-1}^{n+1,k+1}+F_{ij})/Q_{ij},$$

$$F_{ij}=f_{ij}+c_0U_{ij}^{n}, \qquad Q_{ij}=c_0+b_{ij}+s_{ij}+c_{ij}+d_{ij},$$

$$U_{ij}^{n+1,0}\equiv U_{ij}^{n}, \quad U_{ij}^{n+1,K+1}\equiv U_{ij}^{n+1}, \; 0<\omega_{ij}<2, \; i=2,\dots,N, \; j=2,\dots,M.$$

Коэффициенты локальной релаксации определялись по формулам, предложенным И.А.Фрязиновым в 1984 г. в Новосибирске на X Всесоюзном семинаре по вязкой жидкости:

$$\omega_{ij}=2/(1+Q_{ij}^{-1}(|b_{ij}-s_{ij}|+|c_{ij}-d_{ij}|+2\varphi(\xi)+\varepsilon), \qquad (19)$$

где

$$\varphi(\xi)=\frac{x_1\xi^2+2x_2\xi+x_3}{|b_{ij}+s_{ij}|\xi^2+|c_{ij}+d_{ij}|},$$

$$x_1=|b_{ij}^2-s_{ij}^2|, \qquad x_3=|c_{ij}^2-d_{ij}^2|,$$

$$x_2=\frac{1}{2}(|b_{ij}-s_{ij}|\,|c_{ij}+d_{ij}|+|b_{ij}+s_{ij}|\,|c_{ij}-d_{ij}|),$$

$$\xi=\frac{\eta}{2}+\left(\frac{\eta^2}{4}+\left|\frac{c_{ij}+d_{ij}}{b_{ij}+s_{ij}}\right|\right)^{1/2},$$

$$\eta = \frac{x_1|c_{ij}+d_{ij}|-x_3|b_{ij}+s_{ij}}{x_2|b_{ij}+s_{ij}|}, \qquad \varepsilon = (\delta_o(2-\delta_o))^{1/2},$$

$$\delta_o = \frac{2h_z^2}{h_r^2+h_z^2}\sin^2\frac{\pi h_r}{2R} + \frac{2h_r^2}{h_r^2+h_z^2}\sin^2\frac{\pi h_z}{2H},$$

$$h_z = (\max_j g_j + \min_j g_j)/2, \quad h_r = (\max_i h_i + \min_i h_i)/2.$$

Другой вид коэффициентов локальной релаксации дан в /5/. При проведении расчетов решалась нестационарная задача, хотя основной интерес представляет стационарное решение. В этом подходе шаг по времени рассматривается как итерационный параметр (K =I), а для определения выхода на стационарный режим использовалась относительная ошибка для завихренности

$$\varepsilon\% = \frac{\max_{ij}|\zeta_{ij}^{n+1} - \zeta_{ij}^{n}|}{\max_{ij}|\zeta_{ij}^{n+1}|}\,100. \tag{20}$$

Задавалось определенное число временных шагов $n \leq n_o$, где n_o =350 и в зависимости от величины шага по времени (τ=I;0,I; 0,05; 0,0I) проверялось условие $\varepsilon\% \leq$ 0,0I.

Для выяснения качественного поведения течения будем считать, что все параметры в двух средах, кроме вязкостей η совпадают. Основные результаты расчета для модельных задач были получены при τ =0,05; r_o =0,2; z_o=0,8; R = =H=I на двух неравномерных сетках:

I) M_o =I3, N_o=7, M =N= 20, $\min g_j = \min h_j$ =0,025, $\max g_j = \max h_i$ =0,I;

2) M_o=26, N_o =I4, M =N=40, $\min g_j = \min h_j$ =0,0I25 $\max g_j = \max h_j$ =0,05.

В таблице I2 приведены результаты вычислений изотермической задачи при Ω_2 =0, $Re^{(1)}$ =4000, $\varepsilon\%$ = 0,0I, где $\psi^{(1)}_{ext}$, $\psi^{(2)}_{ext}$ - экстремальные значения (положительные максимумы и отрицательные минимумы) функций тока соответственно в области расплава и флюса (два вида этих значений с разными знаками указывают, что в данной об - ласти имеется два вихря), ζ_{ext} - экстремальное значение завихренности ζ на границе Γ_{12} со стороны расплава.

Таблица 2

Результаты расчетов изотермической задачи при $\Omega_2 = 0$

№	η_a	$40\,\psi^{(1)}_{ext}$	$40\,\psi^{(2)}_{ext}$	$40\,\zeta_{ext}$
I	I	0,072	0,032; -0.007	- 415
2	I0	0,064	0,002; -0,00I	- 743
3	I00	0,063	0,0002;-0,0002	- 795

Видно, что величина ζ_{ext} растет по модулю с ростом числа η_a . В пределе, когда $\eta_a \to \infty$, величина ζ_{ext} стремится к значению η_a на твердой стенке, т.е. при больших η_a для функций ζ на Γ_{12} можно ставить граничные условия типа Тома и Вудса на твердой стенке, пренебрегая слоем флюса. Распределение момента вращения ω при η_a = =I00 на границе раздела Γ_{12} отличается от распределения для квазитвердого вращения. Более точно для расчета без флюса при больших значениях η_a вместо краевого условия первого рода для ω на Γ_{12} (распределение квазитвердого вращения) задавать условие Неймана, т.е. $\partial\omega/\partial z$ = =0. Ясно, что на Γ_{12} , решая задачу без флюса, нельзя задавать условие стенки без трения (ζ =0). Из таблицы 2 также видно, что интенсивность вихрей (значения $\psi^{(1)}_{ext}$, $\psi^{(2)}_{ext}$ по модулю) уменьшается с ростом η_a , т.е. слой флюса стабилизирует течение жидкого расплава.

Если одновременно вращается кристалл ($\Omega_1 \neq 0$) и тигель ($\Omega_2 \neq 0$), то картина течения усложняется. Например, если $R_e^{(1)}$ =2000, Ω_2/Ω_1 =-4/5 (вращение тигля в противоположную сторону) η_a =I00, то имеем 20 ζ_{ext} =-250,

$20\ \Psi^{(1)}_{ext}$ =0,0II; - 0,0II (в области расплава имеется два вихря), $20\Psi^{(2)}_{ext} = -5\cdot IO^{-5}$; $3\cdot IO^{-5}$. Аналогичный расчет без учета флюса дает $20\Psi^{(1)}_{ext}$ =0,0I8; - 0,0I6.

Чтобы учесть влияние температуры, предположим, что $Re_a = K^{-1}$, $Gr_a = K^{-2}$, $P_a = K$, $\eta_a = K$, где K =I0; I00; I000. Точность вычисления в зависимости от шагов двух пространственных сеток контролировалась при $Re^{(1)}$=4000, $P^{(1)}$=0,0I; $Gr^{(1)}$ =I0^5, Ω_2=0, K =I000. Получено, что на грубой сетке 2Iх2I - 40 $\Psi^{(1)}_{ext}$ =0,035, а на мелкой сетке 4Iх4I - 40 $\Psi^{(1)}_{ext}$ =0,036. Далее все расчеты были проведены на грубой сетке 2Iх2I. Результаты расчетов при Ω_2 =0 показали, что I) с ростом числа $Re^{(1)}$ вклад конвекции уменьшается и начинает доминировать вторичный вихрь, вызванный вращением кристалла, при этом для конвекции характерен вихрь с $\Psi^{(1)}_{ext} >$ 0, а для вращательного движения вихрь с $\Psi^{(1)}_{ext} >$ 0; 2) с ростом числа η_a, так же как и в изотермическом случае, интенсивность вихрей во флюсе уменьшается и гидродинамика флюса мало влияет на гидродинамику расплава, например, при K = =I00, $Re^{(1)}$=400, $Gr^{(1)}$ =I0^6, $P^{(1)}$ =0,0I имеем 4 $\Psi^{(1)}_{ext}$ = =-0,75, 4 $\Psi^{(2)}_{ext}$ =I0^{-4}, 4 ζ_{ext} =2I3, а без флюса - 4 $\Psi^{(1)}_{ext}$ = -0,85, 4 ζ_{ext} -227.

Стационарное течение в расплаве состоит из двух вихрей, например, при K =I000, $Re^{(1)}$ =4000: $Gr^{(1)}$ =I0^5, $P^{(1)}$ =0,0I имеем 40 $\Psi^{(1)}_{ext}$ =0,036; - 0,026, $\Psi^{(2)}_{ext}$ I0^{-8}; 40 ζ_{ext} = =-I0I. Распределение температуры аналогично распределения момента вращений на границе раздела Γ_{12} с ростом K отличается от линейного распределения. Так, например, если $Re^{(1)}$ =4000, $Gr^{(1)}$ =I0^5, $P^{(1)}$ =0,0I, то разность температуры от линейного распределения достигает значения 0,35 (K =I00); 0,5I (K =I000) при r =0,45, причем $\partial^2 T/\partial r^2|_{\Gamma_{12}} < 0$.

Список литературы

1. Роуч М. Вычислительная гидродинамика. - М.:Наука, 1977. - 455 с.
2. Симановский И.Б. Численное исследование конвекции в системе двух несмешивающихся жидкостей, подогреваемых снизу//Конвективные течения и гидродинамическая устойчивость: Сб.науч.тр. - Свердловск, 1979. - С.126-131.
3. Калис Х.Э., Луринс Г.Р. Применение специальной разностной схемы для расчета потоков вязкой несжимаемой электропроводящей жидкости//Проблемы динамики вязкой жидкости. Труды X Всесоюзной школы. - Новосибирск, 1985. - С.172-175.
4. Калис Х.Э. Специальные разностные схемы решения краевых задач математической физики//Электронное моделирование. - 1986. - Т.8. - № 3. - С.78-83.
5. Strikwerda I., Iterative methods for the numerical solution of second order elliptic equations with large first order terms//SIAM J.Sci.Stat.Comput. - 1980. - V.1. - P. 119-130.

УДК 621.315.592

М.В.Кояло,Б.Я.Мартузан,Ю.И.Скрыль
ВЦ ЛГУ им. П.Стучки, Рига
Я.А.Липскис
РНИИ Микроприборов, Рига

МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ТЕХНОЛОГИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ ИЗГОТОВЛЕНИЯ СБИС С УЧЕТОМ РАСПРЕДЕЛЕНИЯ ТЕМПЕРАТУРЫ И ТЕРМОНАПРЯЖЕНИЙ В СТРУКТУРЕ

В настоящее время широкое развитие получило применение математического моделирования технологических процессов изготовления СБИС (см.например, /1/,/2/,/3/). В основном моделируется центральный процесс технологии - диффузионное создание слоев легирующих примесей и связанные с ним процессы - окисление, наращивание, травление и др. При этом внимание исследователей концентрируется на явлениях, проходящих на микроуровне, в пределах одного прибора или его части, пренебрегая процессами, происходящими в полупроводниковой структуре в целом. Такое пренебрежение, конечно, объясняется не отсутствием понимания существенного значения этих процессов, а трудностями прямого математического описания процессов групповой обработки, в частности, происходящих в диффузионной печи.

Целью работы, представленной в настоящей статье, является создание математической модели и реализующего ее математического обеспечения, позволяющих, кроме обычно рассчитываемого распределения легирующих примесей в отдельном приборе, получить еще и нестационарное распределение температуры и компонент термонапряжений по радиусу в структуре.

I. Описание технологического маршрута

Технологический процесс изготовления СБИС характеризуется большим количеством разнообразных этапов, в течение которых и происходит образование отдельных элементов /4/, /5/.

При разработке математической модели в качестве основы описания этапа была взята термическая история пластины, поскольку температура является наиболее общей характеристикой любого высокотемпературного процесса. В частности, именно перепад температуры, возникающий в пластине при нагреве или охлаждении, обуславливает появление термонапряжений, которые могут вызвать и нередко вызывают образование дислокаций или даже разрушение структуры. Кроме того, достаточно точное распределение температуры в пластине может дать возможность учесть влияние температурного поля на разброс характеристик отдельных приборов, находящихся в центре или на периферии пластины, где температура по времени изменяется по-разному и, следовательно, диффузия примесей проходит иначе, например, из-за зависимости коэффициента диффузии от температуры.

Изменения температуры имеет наибольшее влияние на этапы, проводимые в прямоточном реакторе, поскольку там пластина нагревается с периферии и перенос тепла проходит в радиальном направлении, в отличие от этапов, проводимых в эпитаксиальном реакторе, где теплоперенос проходит в поперечном направлении, и, следовательно, температура устанавливается намного быстрее и влияние нестационарного изменения температуры в этом случае существенно меньше.

Считается, что в течение этапа температура нагревателя меняется линейно от начальной температуры до конечной температуры за определенный отрезок времени. Таким образом, термическую историю этапа можно описать двумя числами - длительностью этапа D и конечной температурой T_K . Начальная температура этапа совпадает с конечной температурой предыдущего этапа, поскольку считается, что этапы идут друг за другом непрерывно.

Совокупность всех этапов образует технологический маршрут.

При описании реального процесса технологический маршрут удобно формировать из групп этапов, описывающих операции от начала нагрева до конца охлаждения. В частности, в случае сложного хода изменения температуры нагревателя можно это изменение аппроксимировать отрезками прямых, и каждому отрезку сопоставлять отдельный этап.

Следует заметить, что одинаково описывается нагрев пластины обеспечиваемый как изменением температуры нагревателя при неподвижной садке, так и при продвижении садки внутрь печи с нагревателем при неравномерной температуре.

Пример начала технологического маршрута приведен на рис.I. Считается, что в начале каждого технологического маршрута температура нагревателя равна комнатной.

Технологические операции, как, например, ионное легирование, не связанные с существенным изменением температуры, но влияющие на распределение примесей или другие важные параметры приборов, могут быть включены в технологический маршрут как этапы нулевой длительности.

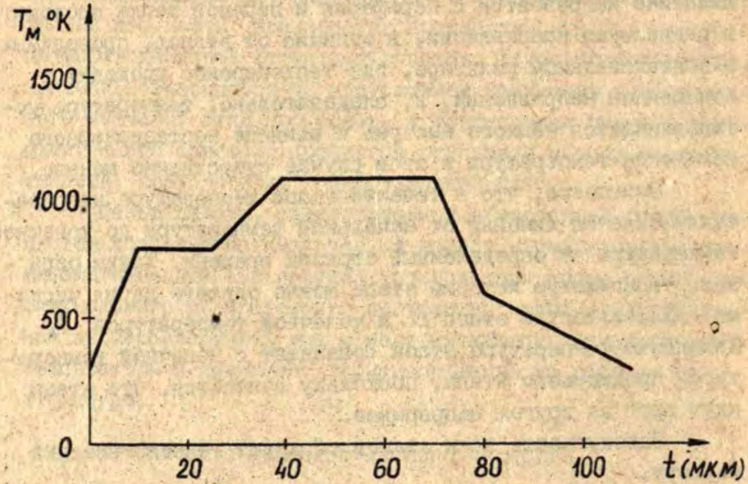

Рис.I. Изменение температуры нагревателя в течение одного этапа технологического процесса.

2. Распределение температуры в пластине

При исследовании температуры рассматриваются только пластины, находящиеся в середине садки, условия нагрева которых приближенно можно считать симметричными по отношению к серединной плоскости пластины. Кроме того, распределение температуры считается осесимметричным. В этих предположениях средняя по толщине пластины температура T круглой пластины радиуса R и толщины H может быть найдена из решения уравнения теплопроводности, осредненного по толщине пластины:

$$a\frac{\partial u}{\partial t}=\frac{\partial^2 u}{\partial r^2}+\frac{1}{r}\frac{\partial u}{\partial r}\,, \qquad 0<r<R\,,$$

где a - температуропроводность материала пластины.

На оси пластины ставится обычное условие симметрии

$$\frac{\partial u}{\partial r} = 0 \ , \quad r = 0 \ ,$$

а на кромке пластины условие теплообмена излучением с нагревателем печи:

$$\lambda \frac{\partial u}{\partial r} = -\varepsilon \sigma [u^4 - T_м^4(t)] ,$$

где λ - теплопроводность пластины, ε - осредненный коэффициент черноты стенки нагревателя и кромки пластины, $T_м$ - температура нагревателя. В сущности, $T_м$ является температурой внешней среды, в которой в настоящий момент находится пластинка.

Полученная простая краевая задача решается численно неявным разностным методом. Значения температуры нагревателя берутся из описания технологического маршрута.

Представление о характере изменения температуры в пластине дает рис.2, на котором приведены зависимости перепада температуры между периферией и центром пластины для различных способов нагрева. В течение первых 10 минут пластинка нагревается от комнатной температуры до 800 градусов Кельвина, а потом в течение отрезка времени t_2 минут - до температуры 1400°К и потом выдерживается при этой температуре. На рисунке приведены зависимости перепада температуры для различных значений t_2 .

Получившиеся значения перепада температуры достаточны, чтобы создать заметные термоупругие напряжения. Прямого сравнения с измерениями температуры в настоящее время не имеется, однако измерения для близких к настоящей постановке условий показывают /6/, что значения перепада температуры, получившиеся в расчетах, не завышены.

3. Расчет термоупругих напряжений

При термообработке пластин, при эпитаксиальном наращивании слоев, при внедрении примесей диффузионным мето -

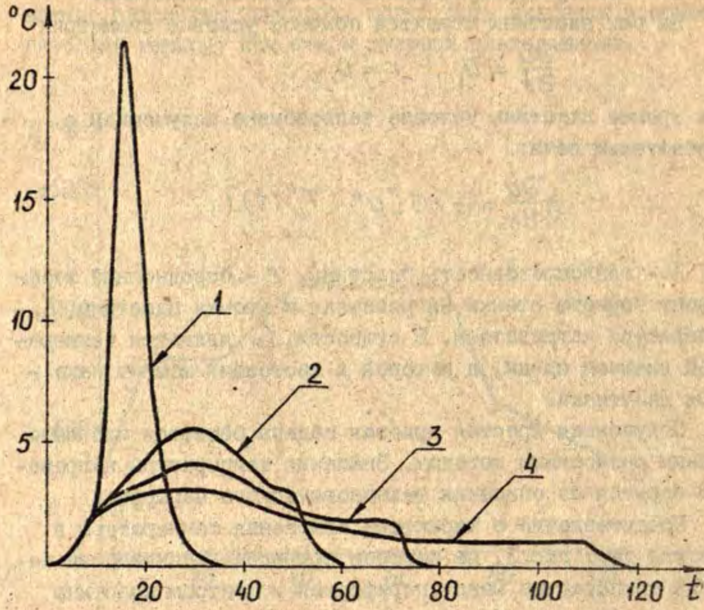

Рис.2. Зависимость перепада температуры между периферией и центром пластины от времени при различных способах нагрева.
I - t_2 = 5; 2 - t_2 = 40; 3 - t_2 = 60; 4 - t_2 = 100.

дом в пластинах возникают перепады температуры, вызывающие термонапряжения. Поскольку пластина является плоской только в идеальном случае, а в действительности всегда имеет сферический изгиб, то возникающие температурные напряжения частично снимаются дополнительным изгибом пластины.

Математическое моделирование указанных явлений основывается на работах по теории оболочек /7/, /8/ и применительно к эпитаксиальному наращиванию было начато в работе /9/ без расчета температуры и в работах /10/, /11/ с учетом распределения температуры. Расчет термонапряжений при нагреве в прямоточной печи существенных отличий от расчетов для эпитаксиального наращивания не имеет, если распределение температуры известно, и если считать, что изменение упругого состояния происходит значительно быстрее, чем изменение температуры, т.е. можно решать стационарные уравнения для определения термонапряжений и нестационарное уравнение для температуры.

Считая круглую пластину изотропной и имеющей первоначальный сферический изгиб радиусом R_0 , учитывая нелинейное влияние изгиба и предполагая, что температура постоянна по толщине пластины, можно выписать уравнения для изгибающей силы N и радиальной производной вертикального смещения w : $y=\frac{dw}{dr}$

$$r^2\frac{d^2N}{dr^2}+3r\frac{dN}{dr}+rE\alpha H\frac{dT}{dr}+EH\left(\frac{1}{2}y^2+y\frac{dw_0}{dr}\right)=0$$

$$\frac{EH^3}{12(1-\mu^2)}\left(r^2\frac{d^2y}{dr^2}+\frac{dy}{dr}-\frac{y}{r}\right)-rNT-rN\frac{dw_0}{dr}=0,$$

где w_0 - первоначальное сферическое смещение, E - модуль Юнга, α - коэффициент термического расширения, μ - коэф - фициент Пуассона.

Краевые условия для свободной осесимметричной пластины имеют вид:

$$\frac{dN}{dr}=0 \qquad y=0, \qquad r=0$$

$$N=0 \qquad \frac{dy}{dr}+\frac{\mu}{r}y=0, \qquad r=R.$$

Решив эту систему уравнений и получив значения N и y , можно рассчитать средние значения по толщине напря - жений σ_r и σ_φ .

В качестве примера расчетов на рис.3 приводятся распределения σ_r и σ_φ по радиусу. Для компоненты напряжений σ_φ характерен быстрый рост абсолютного значения вблизи периферии пластины, где значения всегда выше, чем в центре пластины. Другая компонента σ_r достигает макси-

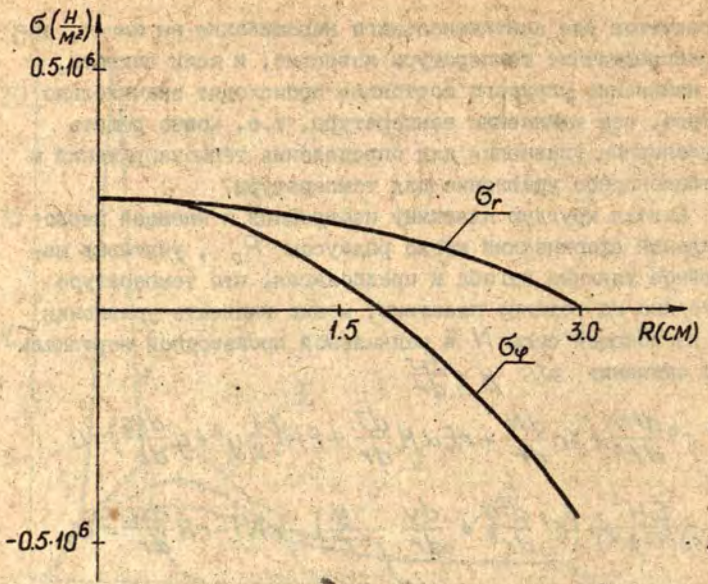

Рис.3. Радиальная зависимость компонент напряжений.

мума в центре, где ее значение совпадает со значением σ_φ. Таким образом, наибольшее значение всех компонент напряжений достигается у σ_φ на периферии пластины, поскольку, как известно из предыдущих расчетов, компонента σ_{rz} получается значительно меньше компонент σ_r и σ_φ.

Поэтому для простоты можно ограничиться выводом и изучением поведения только компоненты σ_φ при $r = R$. Изменение по времени этого значения при условиях нагрева, соответствующих рисунку 2, приведено на рис.4.

4. Программное обеспечение моделирования процесса

Программное обеспечение моделирования технологического процесса разрабатывалось с целью создания программной системы, позволяющей пользователю - инженеру-технологу проводить поиск наиболее приемлемых режимов техно -

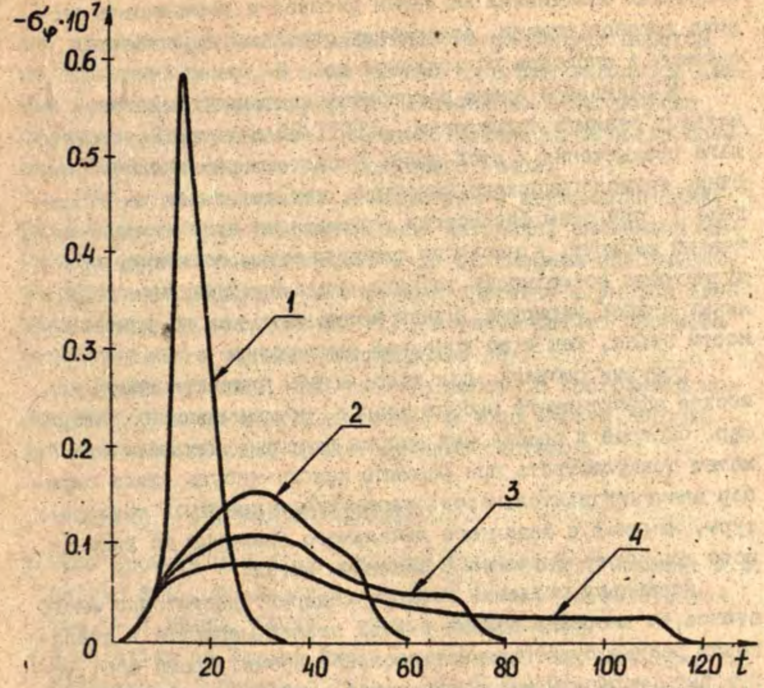

Рис.4. Зависимость максимального значения компонент напряжений σ_r и σ_φ от времени при различных способах нагрева.
I - t_2 =5; 2 - t_2 =40; 3- t_2 =60; 4 - t_2 =I00.

логии, исходя из разработанных им самим собственных критериев оптимальности. Следует отметить, что речь идет именно о поиске, сама система не должна вырабатывать никаких предложений, претендующих на оптимальность.

Работа с такой системой должна проходить в диалоговом режиме, и для обеспечения успешной работы она должна содержать средства помощи пользователю - вывод достаточно подробных объяснений на экран дисплея и возможность вы - зова экранов помощи, содержащих описание возможностей системы и способов пользования ею.

В настоящее время разработка система поиска опти - мальных режимов технологии - СПОРТ-85 в качестве первого шага продвижения к этой цели. В системе реализовано описание технологического маршрута, как оно изложено в разделе I, при этом фактически задается не один технологи - ческий маршрут, а целая их совокупность, поскольку пре - дусмотрена возможность задания цикла при описании отде - льных этапов маршрута. Циклы могут быть как по длитель - ности этапа, так и по конечной температуре этапа.

Другими словами, для того, чтобы провести поиск наиболее эффективного набора этапов, обеспечивающих, например, быстрый и безопасный нагрев пластин, пользователь может предусмотреть при расчете какого-нибудь этапа перебор значений длительности этапов и/или конечной температуры, начиная с заданного начального значения до задан - ного конечного значения с заданным шагом.

Поскольку реальный маршрут содержит достаточно много этапов,то внесение данных о всех этапах маршрута в диалоговом режиме будет занимать большое время. Кроме того,могут быть маршруты малоотличающиеся, такие, например, ко - торые относятся к отдельным приборам одной и той же мик - росхемы или к отдельным частям одного и того же прибора. Занесение таких маршрутов в диалоговом режиме по отдель - ности нецелесообразно. Поэтому в системе предусмотрена возможность ведения библиотеки описаний технологических маршрутов. В этой библиотеке хранятся данные об этапах отдельных технологических маршрутов. Маршруты в библиотеку заносятся по имени, и по этому имени их можно вызвать, просмотреть, откорректировать, выпечатать, запомнить заново под тем же или другим именем и запустить на счет.

Счет маршрута может проходить в автоматическом и поэтапном режимах. В автоматическом режиме счет ведется по данным маршрута, предварительно считанного с библиотеки, до тех пор, пока пользователь не затребует переход на поэтапный режим. В этом режиме на экран выводятся данные о текущем этапе маршрута, считанного с библиотеки (если это было сделано), их можно изменять, и после изменения продолжить счет до следующего этапа.

Кроме распределений температуры и термонапряжений, рассчитываемых по описанной выше методике, система в настоящее время проводит расчеты по одномерным приближениям процессов диффузии легирующих примесей с учетом электрического взаимодействия /2/, а также расчет процесса окисления /4/ и ионного легирования /5/.

Предполагается, что техника работы с программой может быть освоена непосредственно в ходе работы, используя средства помощи, представляемые системой.

Список литературы

1. VLSI Process Modeling - SUPREM III/Ho C.P., Plummer J.D. Hansen S.E., Dutton R.W.. - IEEE Trans. on elec.devices. - V.ED-30. -N.11.- 1983. -P.1438-1453.
2. Simulation of Doping Processes /Ryssel H., Haberger K., Hoffmann K., Prinke G. etc. - IEEE Trans. on elec.devices. - V.ED-27. -N.8.- 1980. -P.1483-1492.
3. Schaarschmidt I., Viergutz H.Modellierung und Simulation des Halbleitertechnologieprozesses mit dem Programmsystem PROSIM // Wissenschaftliche Zeitschrift der Techmischen Universität Dresden. - 33(1984). - Heft 4. - S. 179-185.
4. Технология СБИС/Пирс К., Адамс А., Кац А., Цай Дж. и др. - Пер. с англ. - Т.I. - М.:Мир, I986. - 404 с.
5. Курносов А.И., Юдин В.В. Технология производства полупроводниковых приборов. - М.:Высшая школа, I979. - 342 с.
6. Особенности нагрева пластин кремния в диффузионных печах/Фомин Г.А., Иванов В.И., Насонов В.С.,Ефимова З.Е. и др. //Электронная техника. - Сер.7. - Технология, организация производства и оборудование. - 1976. - Вып.I (7I). - С.26 -3I.

7. Тимошенко С.П., Войновский-Кригер С. - Пер. с англ. - М.:Наука, 1966. - 635 с.
8. Расчеты конструкций на теловые воздействия/Бажанов В.Л., Гольденблат И.И., Николаенко Н.А., Синюков А.М. - М.:Машиностроение, 1969. - 600 с.
9. Dyer L.D., Huff H.R., Boyd W.W. Plastic Deformation in Central Regions of Epitaxial Silicon Slices //J.Appl. Phys.- 1971.- V.42. - N.13.- P.5670-5687.
10. Распределение температур, термоизгибов и термонапряжений в пластинах кремния при термообработке в режимах эпитаксиального наращивания/Дороничева Н.И., Ладочкин А.А., Лопатин Е.В., Мартузан Б.Я. и др. - Электронная техника. - Сер.6. - Материалы. - 1982. - Вып. 6(169). - С.35-40.
11. Распределение температуры в пьедестале и распределение температуры, деформаций и напряжений в пластине кремния при термообработке в режимах эпитаксиального наращивания/Дороничева Н.И., Ладочкин А.А., Мартузан Б.Я., Уланов Н.Л. и др. - Электронная техника. - Сер. 6. - Материалы. - 1985. - Вып.8(207). - С,17-21.

УДК 539.319

С.С.Вахрамеев, Н.В.Козельская
ВЦ ЛГУ им. П.Стучки, Рига
Ю.М.Шашков,ГИДЕРМЕТ,Москва

ЧИСЛЕННОЕ СРАВНЕНИЕ НАПРЯЖЕННОГО СОСТОЯНИЯ КРИСТАЛЛОВ КРЕМНИЯ ПРИ РАЗЛИЧНЫХ УСЛОВИЯХ ОХЛАЖДЕНИЯ

В технологическом процессе производства монокристаллов полупроводниковых материалов кремния, после их выращивания из расплава, кристаллы помещают в специальную камеру для ускоренного охлаждения. Однако при интенсивном охлаждении скалывающие напряжения становятся слишком велики, что может привести к растрескиванию слитка. В работе /I/ рассматривались расчеты напряженного состояния кристаллов кремния (диаметром 80 мм), при их охлаждении в специальной камере, наполняемой инертным газом под высоким давлением. В результате произведенной серии расчетов для различных режимов охлаждения получено, что максимальный уровень сдвиговых напряжений в кристаллах достигает 3 кГ/мм^2. Эта расчетная величина, по имеющимся в литературе данным, находится близко к пределу прочности при одноосном сжатии монокристаллов кремния вдоль направления [III].

В настоящей работе производятся аналогичные исследования для кристаллов кремния большого диаметра (I50 и 250 мм), охлаждаемых после выращивания из расплава. Рассматриваются два способа охлаждения. В одном случае слиток отрывается, затем приподнимается над расплавом и в таком состоянии в течение некоторого времени охлаждается до температуры примерно I00°С. В другом - слиток после отрыва от расплава помещают в специальную камеру, которая поддерживается при постоянной температуре 50°С. Цель расчетов - определение максимального уровня скалывающих напряжений и их анализ при различных режимах охлаждения.

В первом разделе данной работы коротко изложена методика расчета тепловой задачи, задачи термоупругости в перемещениях и определение скалывающих термоупругих напряжений. Далее, во втором разделе приводятся результаты расчетов полей температур и напряжений в процессе охлаждения слитков, и величины максимальных сдвиговых напряжений в зависимости от времени охлаждения.

I. Рассмотрим осесимметричный слиток радиуса R и высотой H, в координатах (r, x). Уравнение теплопроводности запишем в следующем виде

$$c\rho\frac{\partial T}{\partial t}=\lambda\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}\left(r\frac{\partial T}{\partial r}\right)+\lambda\frac{\partial^2 T}{\partial x^2},\quad \begin{matrix}0<r<R\\0<x<H\end{matrix} \tag{I}$$

c - удельная теплоемкость, ρ - плотность, λ - теплопроводность.

Теплообмен кристалла с внешней средой $T_1(x,t)$ происходит за счет излучения. Это означает, что на поверхности кристалла выполняются условия:

$$\lambda\frac{\partial T}{\partial r}=-\varepsilon\sigma\left(T^4-T_1^4(x)\right),\quad \text{при } r=R \tag{2}$$

$$\lambda\frac{\partial T}{\partial x}=\varepsilon\sigma\left(T^4-T_1^4(0)\right),\quad \text{при } x=0 \tag{3}$$

$$\lambda\frac{\partial T}{\partial x}=-\varepsilon\sigma\left(T^4-T_1^4(H)\right),\quad \text{при } x=H \tag{4}$$

ε - степень черноты, σ - постоянная Стефана-Больцмана. $T(r,x,t)$ - искомая температура кристалла, $T_1(x,t)$ - заданная температура внешней среды.

Кроме того, на оси при $r=0$ выполняется условие симметрии

$$\frac{\partial T}{\partial r}=0 \tag{5}$$

в начальный момент времени t задается температура

$$T = T_{нач}(x, r), \tag{6}$$

которая равна температуре кристалла, на момент его отрыва от расплава. Эта температура рассчитывается решением задачи при выращивании слитка из расплава. Для решения тепловой задачи (I)-(6) применяется метод конечных разностей, итерационный процесс строится на основе метода переменных направлений, /2/.

Определение температурных напряжений производится по следующей схеме. Записывается система уравнений термоупругости в перемещениях, /3/

$$a\left(\frac{\partial^2 U}{\partial r^2} + \frac{1}{r}\frac{\partial U}{\partial r} - \frac{U}{r^2}\right) + \frac{\partial^2 U}{\partial x^2} + b\frac{\partial^2 W}{\partial r \partial x} = d\frac{\partial T}{\partial r} \tag{7}$$

$$\frac{\partial^2 W}{\partial r^2} + \frac{1}{r}\frac{\partial W}{\partial r} + a\frac{\partial^2 W}{\partial x^2} + b\left[\frac{\partial}{\partial x}\left(\frac{\partial U}{\partial r} + \frac{U}{r}\right)\right] = d\frac{\partial T}{\partial x}, \tag{8}$$

с граничными условиями при свободной от внешних сил поверхности кристалла:

при $r = R$

$$\frac{\partial U}{\partial r} + k\left(\frac{U}{R} + \frac{\partial W}{\partial x}\right) = cT, \quad \frac{\partial U}{\partial x} + \frac{\partial W}{\partial r} = 0, \tag{9}$$

при $x = 0$, $x = H$

$$\frac{\partial W}{\partial x} + k\left(\frac{\partial U}{\partial r} + \frac{U}{r}\right) = cT, \quad \frac{\partial W}{\partial r} + \frac{\partial U}{\partial x} = 0 \tag{10}$$

и условиями симметрии при $r = 0$

$$U = 0, \quad \frac{\partial W}{\partial r} = 0$$

$$a = 2\frac{1-\mu}{1-2\mu}, \quad b = \frac{1}{1-2\mu}, \quad d = 2\frac{1+\mu}{1-2\mu}\alpha, \tag{11}$$

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

μ, α - коэффициенты Пуассона и термического расширения. Если задача (7)-(II) решена, то компоненты тензора напряжений определяются следующим образом

$$\sigma_r = G\, a \left[\frac{\partial U}{\partial r} + \kappa\left(\frac{U}{r} + \frac{\partial W}{\partial x}\right) - cT\right]$$

$$\sigma_\varphi = G\, a \left[\frac{U}{r} + \kappa\left(\frac{\partial U}{\partial r} + \frac{\partial W}{\partial x}\right) - cT\right]$$

$$\sigma_z = G a \left[\frac{\partial W}{\partial x} + \kappa\left(\frac{\partial U}{\partial r} + \frac{U}{r}\right) - cT\right]$$

$$\sigma_{rz} = G\left[\frac{\partial U}{\partial x} + \frac{\partial W}{\partial r}\right] \qquad (I2)$$

G - модуль сдвига.

Далее, по рассчитанным компонентам тензора напряжений определялись осредненные по системам скольжения среднеквадратичные касательные напряжения

$$\tau_1 = \frac{1}{3\sqrt{2}}\sqrt{(\sigma_r - \sigma_\varphi)^2 + \frac{4}{3}(\sigma_z - \sigma_\varphi)(\sigma_z - \sigma_r) + \frac{13}{3}\sigma_{rz}^2}\,,$$

$$\tau_2 = \frac{1}{3}\sqrt{(\sigma_r - \sigma_\varphi)^2 + \frac{1}{2}\sigma_{rz}^2}\,,$$

$$\tau_3 = \sqrt{\frac{2}{3}\tau_1^2 + \frac{1}{3}\tau_2^2}\,. \qquad (I3)$$

Эти формулы являются удобным средством для оценки величин скалывающих напряжений, действующих по системам скольжения.

Задача (7)-(I3) решается разностным методом, /I/. Для уравнений задачи термоупругости (7)-(I2) строилась консервативная разностная схема на основе интегро-интерполяционного метода Самарского /2/. Нарушение консервативности приводит к дополнительной погрешности в определении напряжений по формулам (I2), при этом нарушается баланс сил для уравнений равновесия (7), (8).

Итерационный процесс решения системы разностных уравнений строится на основе метода переменных направлений. Итерационный счет ведется до выхода на стационар, что контролируется по величине

$$\max \left| \frac{(U,W)^{\kappa+1} - (U,W)^{\kappa}}{\tau} \right| < \varepsilon \, , \tag{14}$$

где (U,W) - разностные функции перемещений, κ - номер итерационного слоя, τ - параметр.
В расчетах принималось $\varepsilon \leqslant 10^{-3}$, это обеспечивает нужную (порядка 2-3%) точность расчета компонент напряжений, что проверялось на модельных примерах.

Выше уже отмечалось, что исходное температурное поле $T\ (r,x,t)$ является нестационарным. Компоненты тензора напряжений в данном случае рассматриваются 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, полученное на момент времени t. Таким образом была рассчитана серия вариантов полей напряжений на различные моменты времени.

Для расчетов был составлен пакет программ, состоящий из отдельных модулей: тепловой задачи, решения уравнений равновесия в перемещениях, определения термоупругих напряжений, расчета скалывающих напряжений. Практика расчетов показывает, что для решения задачи определения напряжений с достаточной степенью точности требовалось 100-150 итераций для определения перемещений при числе узлов разностной сетки 20x50.

2. Рассмотрим некоторые результаты расчетов, которые приведены на рис.1-4.

На рис.1 даны максимальные значения скалывающих напряжений τ_3 в кристалле, в зависимости от времени охлаждения t . Сплошные линии на графике указывают значения τ_3 для диаметра кристалла 250 мм, прерывистые - для диаметра 150 мм. Графики 1,2 рис.1 соответствуют охлаждению кристаллов над расплавом, графики 1', 2' охлаждению

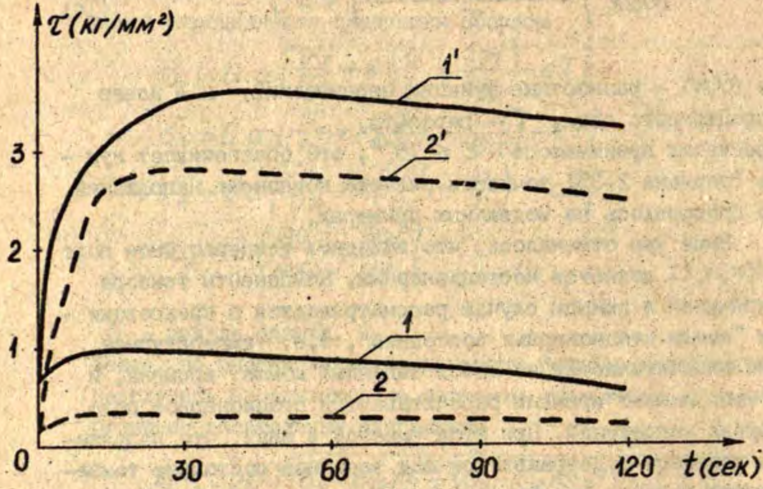

Рис.I. Величина максимальных сдвиговых напряжений кг/мм^2 в кристалле в зависимости от времени охлаждения t сек.

I - кристалл R=I25 мм охлаждается над расплавом;
I' - охлаждается в камере;
2 - кристалл R=75 мм охлаждается под расплавом;
2' - охлаждается в камере.

кристаллов в камере. В начальный момент времени максимальные значения $\tau_з$ невелики. Для кристалла диаметром I50 мм $\tau_з$=0,25 кг/мм^2, а для кристалла диаметром 250 мм максимальное $\tau_з$=0,65 кг/мм^2. В этом случае градиенты температуры тоже невелики, они соответствуют градиентам температуры на момент окончания процесса выращивания из расплава. Градиенты по длине в среднем составляют I8-20 ^{0}/см для кристаллов обоих диаметров при длине кристаллов равной 3Д. Можно было заметить, что для кристалла Д=250 мм $\tau_з$ больше, это обьясняется в основном тем, что градиент температуры (60-70 $^{\circ}$/см) по радиусу в 2-3 раза больше, чем у кристалла Д=150 мм.

Далее, если кристалл оторван от расплава ($\sim$ на 2 см) и охлаждается над ним, то напряжения с течением времени несколько увеличиваются и достигают максимальных значений для кристалла Д=150 мм 0,36 кг/мм^2, а для Д=250 мм 0,8-0,9 кг/мм^2, при t=10-15 сек. Затем, с увеличением времени охлаждения, напряжения τ_3 уменьшаются. Процесс остывания обычно происходит 2-3 часа. Температура внешней среды при остывании над расплавом задавалась следующим образом:

$$T_1(x,t) = T_{пер}\, e^{-\kappa_1 t} - \kappa(x+h_0),$$

h_0 - высота отрыва кристалла от расплава, $T_{пер}$ - температура поверхности расплава.

Если кристаллы помещаются для охлаждения в камеру, температура которой поддерживается при 50°С, то, как и следовало ожидать (графики 1$'$, 2$'$ рис.1), напряжения заметно вырастают, достигая максимальной величины для Д=250, τ_3 =3,5 кг/мм^2; для Д = 150, τ_3 =2,6 кг/мм^2 при времени охлаждения 25-30 сек. При увеличении времени охлаждения максимальные сдвиговые напряжения убывают. Если время t =120 сек, то в кристаллах охлаждаемых над расплавом $\tau_3 < 0,3$ кг/мм^2, для Д=150 мм и $\tau_3 < 0,5$ кг/мм^2, для Д=250 мм, если кристалл охлаждается в камере, то соответственно $\tau_3 < 3,2$ кг/мм^2 и $\tau_3 < 2,5$ кг/мм^2. На следующих рисунках 2-4 рассматриваются результаты расчетов более подробно, кроме того приводится распределение температуры в кристалле на различные моменты времени. На этих рисунках все результаты расчетов приводятся для кристаллов диаметром 250 мм. На рис.2,а) даны изотермы при t =0, на момент окончания выращивания слитка. На рис.2,в) распределение напряжений τ_3. Максимальные τ_3 (0,65 кг/мм^2) находятся в области поверхности кристалла на расстоянии диаметра от торца. На рис.3 аналогичные результа-

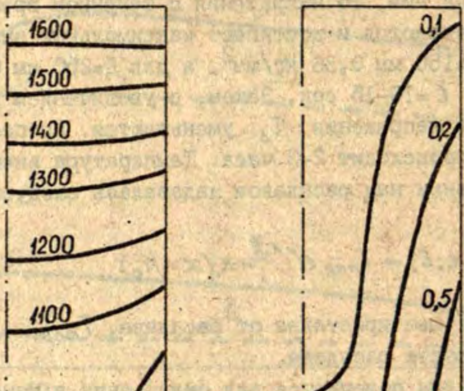

Рис.2. Изотермы в ^{o}K (а) и величина сдвиговых напряжений τ_3 в кг/мм^3 (б) в кристалле Д=250 мм, при t =0.

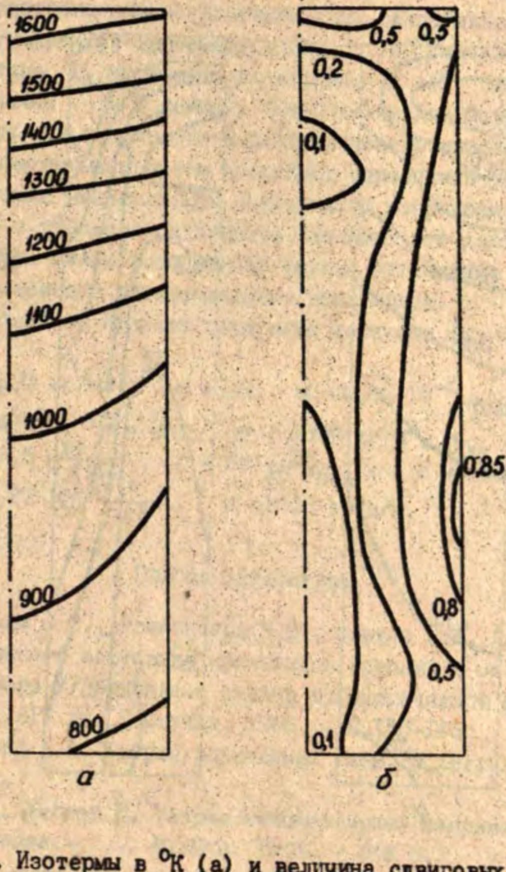

Рис.3. Изотермы в $^{\circ}$К (а) и величина сдвиговых напряжений τ_3 в кг/мм^3 (б) в кристалле D =250 мм, охлаждаемом над расплавом, при t = I2 сек.

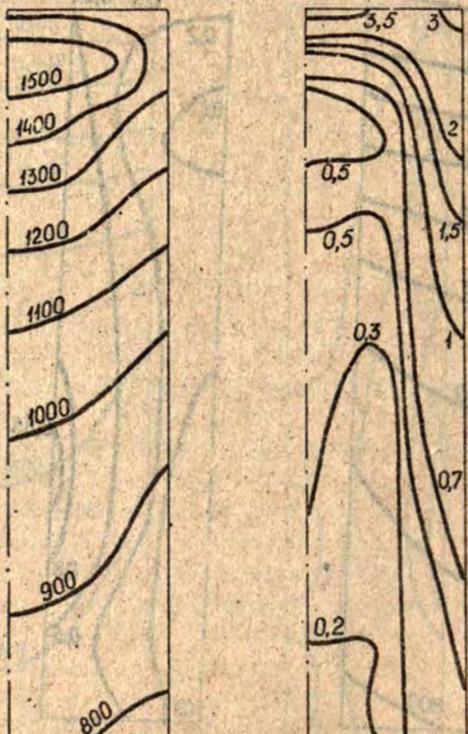

Рис.4. Изотермы в °К (а) и величина сдвиговых напряжений τ_3 в кг/мм^3 (б) в кристалле Д=250 мм, охлаждаемом в камере, при t = 12 сек.

ты при охлаждении над расплавом при t =12 сек. Градиенты температур здесь несколько больше, больше и $\tau_з$ (0,85 кг/мм^2). На следующем рис.4 при охлаждении в камере видно, что изотермы сильно изогнуты, что свидетельствует о больших градиентах температуры (более 100°/см) в кристалле, значения $\tau_з$ на момент охлаждения t =12 сек достигают величины $\sim$ 3 кг/мм^2. Такой интенсивный процесс охлаждения может привести к растрескиванию кристалла.

Приведенные расчеты позволяют определить уровень и распределение максимальных скалывающих напряжений и их изменение в процессе охлаждения слитков. Это дает возможность выбора более безопасного режима охлаждения с точки зрения возможного растрескивания кристаллов.

В расчетах приняты следующие величины физических констант:

G = 5100 кг/мм^2, μ =1/3, α =0,48$\cdot 10^{-5} \frac{1}{\text{град}}$

$T_{пл}$= 1410°С, H = 3Д, ρ = 2300 кг/м^3,

λ = 21,6 $\frac{\text{вт}}{\text{м град}}$, c = 981$\frac{\text{дж}}{\text{кг град}}$, ε =0,7,

κ_1 = 0,27$\cdot 10^{-3}$ $\frac{1}{\text{сек}}$, κ =2000 град/м.

Список литературы

1. Вахрамеев С.С., Козельская Н.В., Шашков Ю.М. Расчет напряженного состояния кристаллов кремния в охлаждаемой камере //Прикладные задачи математической физики - Рига: ЛГУ им. П.Стучки, 1985. - С.150-163.
2. Самарский А.А. Теория разностных схем. М.:Наука, 1977. - 654 с.
3. Боли Б., Уэйлер Д. Теория температурных напряжений. - Пер. с англ.- М.:Мир, 1964. - 518 с.

УДК 537.84 Я.К.Приеде
Институт физики АН Латвийской ССР

МАТЕМАТИЧЕСКИЕ МОДЕЛИ ДЛЯ ЧИСЛЕННОГО РАСЧЕТА МГД-ТЕЧЕНИЯ В ОСЕСИММЕТРИЧНЫХ МАГНИТНОМ И ЭЛЕКТРИЧЕСКОМ ПОЛЯХ

Рассматриваются две математические модели осесимметричного МГД - течения в цилиндрической области, возникающего в результате взаимодействия протекающего по жидкости электрического тока $\vec{j}=(j_r, j_\alpha, j_z)$ и внешнего магнитного поля $\vec{B}_0=(B_r, 0, B_z)$. Ток обусловлен (рис.I) разностью потенциалов между центральным электродом I, стенками и дном цилиндрической емкости 2. Магнитное поле в области, занимаемой жидкостью 3, образуется как суперпозиция полей двух диполей, расположенных на оси симметрии цилиндрической емкости и имеющих противоположно ориентированные магнитные моменты. Предполагается, что магнитное поле токов, протекающих в жидкости, значительно меньше внешнего поля. Ниже приводится сравнение двух вариантов математического описания вышеуказанного МГД-течения с точки зрения физической адекватности получаемых дискретных моделей и экономичности счета.

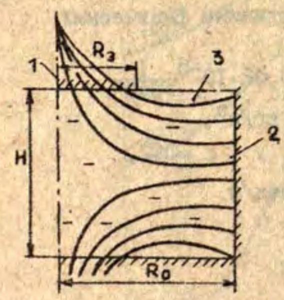

Рис.I. Принципиальная схема физической модели.

Математические модели

В соответствии со схемой рис.I и с учетом аксиальной симметрии, задача рассматривается в цилиндрической системе координат. В общем случае гидродинамика жидкости характеризуется полями скоростей $\vec{v}=(v_r(r,z), v_\varphi(r,z), v_z(r,z))$ и давления $p=p(r,z)$. Вместо переменных v_r, v_φ, v_z и p целесообразно ввести новые переменные : Ω - угловая скорость азимутального вращения, W - момент ротора скорости и ψ - функция тока Стокса, которые определяются следующим образом:

$$\Omega=\frac{v_\alpha}{r}; \quad (1) \qquad \frac{1}{r}\frac{\partial\psi}{\partial r}=-v_z; \quad (3)$$

$$W=r\left(\frac{\partial v_r}{\partial z}-\frac{\partial v_z}{\partial r}\right); \quad (2) \qquad \frac{1}{r}\frac{\partial\psi}{\partial z}=v_r. \quad (4)$$

Тогда соответствующая система уравнений принимает вид:

$$\frac{\partial\Omega}{\partial t}=-\frac{1}{r^2}\,div\,(r^2\vec{I})+\frac{1}{\rho}\frac{1}{r}[\vec{j}\times\vec{B}_0]_\alpha; \quad (5)$$

$$\frac{\partial W}{\partial t}=-r^2\,div\left(\frac{1}{r^2}\vec{\mathcal{F}}\right)+\frac{r}{\rho}[rot(\vec{j}\times\vec{B}_0)]_\alpha+r^2\frac{\partial\Omega^2}{\partial z}; \quad (6)$$

$$\vec{I}=-\nu\,grad\,\Omega+\vec{v}\,\Omega; \quad (7)$$

$$\vec{\mathcal{F}}=-\nu\,grad\,W+\vec{v}\,W; \quad (8)$$

где $\vec{I}$ и $\vec{\mathcal{F}}$ - полные потоки соответственно Ω и W, $\vec{j}$ - плотность электрического тока, ν - кинематическая вязкость, ρ - плотность жидкости.

Для электромагнитной части задачи имеются два варианта математического описания, из которых получаются следующие выражения для электрического тока :

1. $$j_r=\frac{1}{r}\frac{\partial\Phi}{\partial z}; \quad (9) \qquad 2.\ j_r=-\sigma\frac{\partial\varphi}{\partial r}+r\Omega B_z; \quad (11)$$

$$j_z=-\frac{1}{r}\frac{\partial\Phi}{\partial r}; \quad (10) \qquad j_z=-\sigma\frac{\partial\varphi}{\partial z}-r\Omega B_r; \quad (12)$$

где Φ - функция электрического тока ($\Phi=rH_\alpha$),
φ - скалярный потенциал электрического поля.

Одним из математических отличий этих вариантов является изменение рода граничных условий для физически эквивалентных моделей. В первом случае условие эквипотенциальности на поверхности S при помощи скалярного потенциала определяется условием $\varphi|_S=const$, а во втором - функцией электрического тока с условием $\frac{\partial\Phi}{\partial n}\big|_S=0$. Физический смысл этих вариантов заключается в фиксации различных электрических режимов при изменении внешнего магнитного поля. В этом случае с помощью φ фиксируется постоянное значение электрического напряжения между электро - дами, а при помощи Φ фиксируется величина протекающего по жидкости тока при условиях эквипотенциальности на электродах.

Практически, численная реализация системы уравнений гидродинамики совместно с уравнением для функции электрического тока Φ , из-за более жестких требований к величине дискретного шага по времени, оказывается малоэффективной, в сравнении с аналогичным вариантом при использовании скалярного потенциала φ .Обнаруженное отличие по требованиям к величине шага по времени объясняется, по-видимому тем, что при помощи Φ плотность электрического тока $\vec{J}$, в уравнении (5) для Ω , определяется по явной схеме из соотношений (9,10), а при помощи φ часть электрического тока определяется неявным образом через переменную Ω . Исходя из вышесказанного, далее будут рассмотрены варианты математической модели только со скалярным потенциалом φ .

При переходе к безразмерной форме уравнений в качестве характерных параметров выбираются радиус емкости R_0 , разность потенциалов между центральным электродом и стенками емкости $\Delta\varphi_0$ и значение индукции магнитного поля, определяемое из следующего соотношения:

$$B_0=\left[\frac{1}{V}\int_V B^2 dV\right]^{1/2}; \qquad (13)$$

где V - объем, занимаемый жидкостью, $B^2=B_r^2+B_z^2$. Таким образом, B_0 характеризует среднеквадратичное значение индукции в объеме. В качестве характерной скорости и времени соответственно выбираются:

$$v_0=\frac{\nu}{R_0} \quad (14а); \qquad \tau_0=\frac{R_0^2}{\nu}, \quad (14б)$$

Система уравнений в безразмерной форме имеет вид :

$$\frac{\partial\Omega}{\partial t}=\frac{1}{r^3}\frac{\partial}{\partial r}\left[r^3\left(\frac{\partial\Omega}{\partial r}-\Omega v_r\right)\right]+\frac{\partial}{\partial z}\left(\frac{\partial\Omega}{\partial z}-\Omega v_z\right)+$$

$$+PHa^2\frac{1}{r}\left(\frac{\partial\varphi}{\partial r}B_z-\frac{\partial\varphi}{\partial z}B_r\right)-Ha^2B^2\Omega; \qquad (15)$$

$$\frac{\partial W}{\partial t}=r\frac{\partial}{\partial r}\left[\frac{1}{r}\left(\frac{\partial W}{\partial r}-Wv_r\right)\right]+\frac{\partial}{\partial z}\left(\frac{\partial W}{\partial z}-Wv_z\right)+r^2\frac{\partial\Omega^2}{\partial z}+$$
$$+Ha^2 r\left[\frac{\partial}{\partial z}\left(v_r B_r^2+v_z B_r B_z\right)-\frac{\partial}{\partial r}\left(v_z B_z^2+v_r B_r B_z\right)-\right.$$
$$\left.-v_r\frac{\partial B^2}{\partial z}+v_z\frac{\partial B^2}{\partial r}\right]-Ha^2B^2W; \qquad (16)$$

$$v_r=\frac{1}{r}\frac{\partial\psi}{\partial z}; \quad (17) \qquad v_z=-\frac{1}{r}\frac{\partial\psi}{\partial r}; \quad (18)$$

$$r\frac{\partial}{\partial r}\left(\frac{1}{r}\frac{\partial\psi}{\partial r}\right)+\frac{\partial^2\psi}{\partial z^2}=W; \qquad (19)$$

$$\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}\left[r\left(-\frac{\partial\varphi}{\partial r}+\frac{1}{P}r\Omega B_z\right)\right]+\frac{\partial}{\partial z}\left(-\frac{\partial\varphi}{\partial z}-\frac{1}{P}r\Omega B_r\right)=0; \qquad (20)$$

где $Ha=B_0R_0\sqrt{\sigma/(\rho\nu)}$ - число Гартмана, $P=\frac{\sigma\varphi_0}{\nu B_0}$ - число подобия электрического потенциала.

Во втором варианте математической модели вместо угловой скорости Ω и момента ротора скорости W вводится момент азимутального вращения w и функция вихря ζ, которые определяются следующим образом:

$$w=rv_\alpha; \quad (21) \qquad \zeta=\frac{1}{r}\left(\frac{\partial v_r}{\partial z}-\frac{\partial v_z}{\partial r}\right). \quad (22)$$

В переменных w и ζ вместо уравнений (15,16,20) получаются следующие уравнения в безразмерной форме:

$$\frac{\partial w}{\partial t}=\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}\left[r\left(\frac{\partial w}{\partial r}-wv_r\right)\right]-\frac{2}{r}\frac{\partial w}{\partial r}+\frac{\partial}{\partial z}\left(\frac{\partial w}{\partial z}-wv_z\right)+$$
$$+PHa^2r\left(\frac{\partial\varphi}{\partial r}B_z-\frac{\partial\varphi}{\partial z}B_r\right)-Ha^2B^2w; \qquad (23)$$

$$\frac{\partial\zeta}{\partial t}=\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}\left[r\left(\frac{\partial\zeta}{\partial r}-\zeta v_r\right)\right]+\frac{2}{r}\frac{\partial\zeta}{\partial r}+\frac{\partial}{\partial z}\left(\frac{\partial\zeta}{\partial z}-\zeta v_z\right)+\frac{1}{r^4}\frac{\partial w^2}{\partial z}+$$
$$+Ha^2\frac{1}{r}\left[\frac{\partial}{\partial z}\left(v_r B_r^2+v_z B_r B_z\right)-\frac{\partial}{\partial r}\left(v_z B_z^2+v_r B_r B_z\right)-\right.$$
$$\left.-v_r\frac{\partial B^2}{\partial z}+v_z\frac{\partial B^2}{\partial r}\right]-Ha^2B^2\zeta; \qquad (24)$$

$$\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}\left[r\left(-\frac{\partial\varphi}{\partial r}+\frac{1}{P}\frac{w}{r}B_z\right)\right]+\frac{\partial}{\partial z}\left(-\frac{\partial\varphi}{\partial z}-\frac{1}{P}\frac{w}{r}B_r\right)=0. \qquad (25)$$

Граничные и начальные условия

Граница L расчетной области содержит следующие участки (рис.2): центральный электрод I, свободная поверхность II, боковая стенка и дно емкости III, ось симметрии IУ. Соответственно граничные условия записываются в следующем виде:

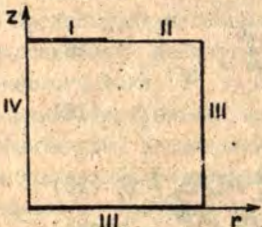

Рис.2. Расчетная область

$$\Omega|_{I,III} = \omega|_{I,III} = 0;$$

$$\frac{\partial \Omega}{\partial z}\Big|_{II} = \frac{\partial \omega}{\partial z}\Big|_{II} = 0;\ W|_{II} = \zeta|_{II} = 0;$$

$$\frac{\partial \Omega}{\partial r}\Big|_{IV} = \frac{\partial \zeta}{\partial r}\Big|_{IV} = \frac{\partial \varphi}{\partial r}\Big|_{IV} = 0;$$

$$W|_{IV} = \omega|_{IV} = 0;\ \varphi|_{I} = 1;\ \varphi|_{III} = 0;$$

$$\frac{\partial \varphi}{\partial z}\Big|_{II} = -\frac{1}{P} r \Omega B_r\Big|_{II} = -\frac{1}{P}\frac{\omega}{r} B_r\Big|_{II}.$$

Для W и ζ на твердых поверхностях использовалось условие Тома. В моделях предполагается, что свободная поверхность жидкости остается плоской.

Начальные условия:

$$\Omega|_{t=0} = \omega|_{t=0} = W|_{t=0} = \zeta|_{t=0} = \Psi|_{t=0} = 0.$$

Для скалярного потенциала в качестве начального условия использовалось решение уравнения (20,25) с условием $B_r = B_z = 0$.

Метод численного решения

Полученная система уравнений решается методом конечных разностей. С этой целью в пространственной области $\mathcal{D} = [0;1]\times[0;H/R_0]$ строится в общем случае неоднородная сетка:

$$\omega_{h_0} = \{(r_i, z_j): r_i = r_{i-1} + g_{i-1},\ i = 2,3,\ldots,N_r;\ z_j = z_{j-1} + h_{j-1},\ j = 2,3,\ldots,N_z;\ r_1 = 0,\ r_{N_r} = 1,\ z_1 = 0,\ z_{N_z} = H/R_0\},$$

где N_r и N_z число узлов сетки соответственно у направлениях Or и Oz. Для записи разностной схемы используется сетка:

$$\omega_{h_2}=\{(r_{i+\frac{1}{2}}, z_{j+\frac{1}{2}}): r_{i+1/2}=(r_i+r_{i+1})/2, g_i=r_{i+1/2}-r_{i-1/2},$$
$$i=1,2,\dots,Nr-1; z_{j+1/2}=(z_j+z_{j+1})/2, t_j=z_{j+1/2}-z_{j-1/2},$$
$$j=1,2,\dots,Nz-1\}.$$

Для потоков, содержащих диффузионный и конвективный члены, в уравнениях (I5,I6,23,24), которые в общем виде определяются следующим выражением:

$$\phi=\frac{\partial Y}{\partial x}-uY; \tag{26}$$

где Y - одна из переменных Ω , W , ω , ξ ; u- обозначает ϑ_r или ϑ_z ; x - одна из независимых переменных r или z , используется аппроксимация экспо - ненциального типа /I,2,3/. Таким образом, сеточная аппроксимация потока ϕ в узле с номером k определяется выражением:

$$\phi_k=\frac{1}{t_{k-1}}\left[Y_{k+1/2}\delta(u_k t_{k-1})-Y_{k-1/2}\delta(-u_k t_{k-1})\right]; \tag{27}$$

где δ - функция, которая вычисляется следующим образом /4/ :

$$\delta(x)=\begin{cases} x(\exp(x)-1)^{-1}; & |x|\geq 10^{-4} \\ \left(1+\frac{x}{2}+\frac{x^2}{6}\right)^{-1}; & |x|<10^{-4}. \end{cases}$$

В других случаях используется аппроксимация с центральными разностями.

Рассмотрим дифференциальное приближение сеточного потока ϕ_k на однородной сетке:

$$\phi(x_k)=\sigma_k\frac{\partial Y}{\partial x}\Big|_{x=x_k}-u_k Y(x_k)+O(h^2); \tag{28}$$

$$\sigma_k=\frac{u_k h}{2}\,cth\left(\frac{u_k h}{2}\right). \tag{29}$$

Сравнение (28) с (26) показывает, что в дифференциальном приближении перед диффузионным членом появляется множитель σ_k , в общем случае отличный от единицы и имеющий смысл эффективного коэффициента вязкости. Надо отметить, что σ_k совпадает с коэффициентом экспоненциальной подгонки, введеном в работе /5/ для обыкновенных дифференциальных уравнений типа конвективной диффузии. Из опредения (29) следует, что σ_k всегда положительная величина, и потому обеспечивает параболичность разностных уравнений. При $h \to 0$ следует $\sigma_k \to 1$, что обеспечивает аппроксимацию потока (26).

Для решения полученных систем сеточных уравнений используется метод переменных направлений /6/ :

$$\left\{\begin{aligned}&(\Lambda_r - \omega_n^{(r)}E)u^{n+\frac{1}{2}} = -[(\Lambda_z + \omega_n^{(r)}E)u^n + f^n]; && (30)\\ &(\Lambda_z - \omega_n^{(z)}E)u^{n+1} = -[(\Lambda_r + \omega_n^{(z)}E)u^{n+\frac{1}{2}} + f^n]; && (31)\end{aligned}\right.$$

где Λ_r и Λ_z - сеточные операторы, действующие в направлениях r и z соответственно, E - единичный оператор, u - одна из неизвестных функций, f^n - источниковый член в общем случае, n - временной слой для нестационарных уравнений (15,16,23,24), или итерационный шаг для уравнений (19,20,25), $\omega_n^{(r)}$, $\omega_n^{(z)}$ - итерационные параметры для уравнений (19,20,25), которые выбираются оптимальным образом по Жордану /6/. Для уравнений (15, 16,23,24) $\omega_n^{(r)} = 1/\tau^{(r)}$ и $\omega_n^{(z)} = 1/\tau^{(z)}$, где $\tau^{(r)} + \tau^{(z)} = \tau$ - безразмерный шаг по времени.

При исключении промежуточного слоя $u^{n+\frac{1}{2}}$ получается следующая схема:

$$[E + \tau^2 \beta(1-\beta)\Lambda_r \Lambda_z]\frac{u^{n+1} - u^n}{\tau} =$$

$$= \Lambda_r[(1-\beta)u^n + \beta u^{n+1}] + \Lambda_z[\beta u^n + (1-\beta)u^{n+1}] + f^n, \qquad (32)$$

где $\beta = \frac{\tau^{(r)}}{\tau} = 1 - \frac{\tau^{(z)}}{\tau}$.

При условии $\beta = \frac{1}{2}$, т.е. $\tau^{(r)} = \tau^{(z)} = \frac{\tau}{2}$ схема (32) имеет $O(\tau^2)$ порядок аппроксимации по времени, без учета аппроксимации источникового члена f^n.

Существенным отличием переменных Ω, W и ϑ, ζ является то, что в первом случае сеточный оператор $\Lambda_r + \Lambda_z$ не обладает свойством монотонности, а во втором случае этот оператор монотонен. При этом в обоих случаях каждый оператор Λ_r и Λ_z в отдельности не является монотонным, что существенно для схемы переменных направлений.

Применительно к переменным u и ζ в работе /I/ предложен способ тождественного преобразования таким образом, что каждый преобразованный оператор $\tilde{\Lambda}_r$ и $\tilde{\Lambda}_z$ становится монотонным. Предложенное преобразование можно записать в следующей форме:

$$\Lambda_r \to \tilde{\Lambda}_r : \tilde{\Lambda}_r u^n = (\Lambda_r + \alpha_{ij} E) u^n ; \tag{33}$$

$$\Lambda_z \to \tilde{\Lambda}_z : \tilde{\Lambda}_z u^n = (\Lambda_z - \alpha_{ij} E) u^n ; \tag{34}$$

где $\Lambda_{r;z}$ - исходный сеточный оператор, полученный на основе аппроксимации (27), α_{ij} определяется из сеточного уравнения неразрывности:

$$\alpha_{ij} = \frac{1}{r_i g_{i-1}} \left(r_{i+1/2} \vartheta^r_{i+1/2\,j} - r_{i-1/2} \vartheta^r_{i-1/2\,j} \right) = -\frac{1}{h_{j-1}} \left(\vartheta^z_{ij+\frac{1}{2}} - \vartheta^z_{ij-\frac{1}{2}} \right); \tag{35}$$

Как видно из (33,34) для тождественности данного преобразования, когда $\tilde{\Lambda}_r + \tilde{\Lambda}_z \equiv \Lambda_r + \Lambda_z$, существенным является то, что Λ_r и Λ_z действует на одном и том же временном слое. В противном случае, преобразование не является тождественным, что и происходит для схемы переменных направлений (30,3I).

Применяя преобразования к схеме (30,3I), операторы Λ_r и Λ_z заменяем в соответствии с выражениями (33,34) операторами $\tilde{\Lambda}_r$ и $\tilde{\Lambda}_z$ и получаем следующую схему:

$$\begin{cases} \left(\Lambda_r - \frac{1}{\tilde{\tau}^{(r)}_{ij}} E\right) u^{n+\frac{1}{2}} = -\left[\left(\Lambda_z + \frac{1}{\tilde{\tau}^{(r)}_{ij}} E\right) u^n + f^n\right]; & (36) \\ \left(\Lambda_z - \frac{1}{\tilde{\tau}^{(z)}_{ij}} E\right) u^{n+1} = -\left[\left(\Lambda_r + \frac{1}{\tilde{\tau}^{(z)}_{ij}} E\right) u^{n+1/2} + f^n\right]; & (37) \end{cases}$$

$$\frac{1}{\tilde{\tau}^{(r)}_{ij}} = \frac{1}{\tau^{(r)}} - \alpha_{ij} ; \tag{38}$$

$$\frac{1}{\tilde{\tau}^{(z)}_{ij}} = \frac{1}{\tau^{(z)}} - \alpha_{ij} . \tag{39}$$

При сравнении (30,3I) и (36,37) видно, что данное преобразование в случае схемы переменных направлений сводится к локальному изменению величины дискретных шагов по времени в соответствии с (38,39). Из этого следует, что $\tilde{\tau}^{(r)}_{ij} \neq \tilde{\tau}^{(z)}_{ij}$ и схема (36 37) имеет $O(\tau)$ порядок аппроксимации по времени, и во вторых - что условие параболичности на каждом полшаге по времени в данном случае эквивалентно требованиям $\tilde{\tau}_{ij}^{(r)} \geq 0$ и $\tilde{\tau}_{ij}^{(z)} \geq 0$, из которых следует ограничение на величину шага по времени:

$$\frac{1}{\tau^{(r)}} = \frac{1}{\tau^{(z)}} = \frac{2}{\tau} \geq \max_{i,j} |\alpha_{ij}|. \qquad (40)$$

Условие (40) эквивалентно начальному ограничению для немонотонных операторов Λ_r и Λ_z. Из вышесказанного следует, что предлагаемое в работе /I/ преобразование операторов к недивергентному виду применительно к схеме переменных направлений не является алгебраически эквивалентным, не снимает ограничение на шаг по времени, связанное с немонотонностью операторов Λ_r и Λ_z, и уменьшает порядок апроксимации по времени.

Как показывает практика расчетов, по данным моделям, немонотонность оператора $\Lambda_r + \Lambda_z$ в первом варианте математической модели не является существенным ограничением на величину дискретного шага по времени. Также численно подтвердилось нецелесообразность недивергентного преобразования для второй модели, которое не уменьшает жесткость требований к величине дискретного шага по времени. Например, для сетки 31 х 31 при Ha = I ÷ 200, P = I ÷ 10^3 стабильность счета для всех вариантов обеспечивалась величиной безразмерного шага по времени τ = 2, 10^{-5} ÷ 10^{-3}. При этом стационарное решение получается за 30 ÷ 80 шагов по времени и расчет требует 40 ÷ 80 минут машинного времени для ЕС ЭВМ-1022.

При значениях числа Гартмана Ha = I ÷ 40 появляются существенные отличия получаемых картин течения по обеим моделям. Для варианта в переменных w, ξ наблюдается искажение конфигурации распределения азимутальной скорости у оси симметрии, которое обусловлено приближенным выполнением условия:

$$\xi_r|_{r=0} = \frac{\partial w}{\partial r}\Big|_{r=0} = 0. \qquad (41)$$

На рис.3 показана зависимость азимутальной скорости от радиуса на различных расстояниях от плоскости центрального электрода при Ha = 40, P = 60. Вариант а) соответствует переменным ϑ , ξ , б) - Ω , W .Подчеркиваем, что невыполнение условия (4I) обусловливает различные значения интенсивностей меридионального течения,рассчитываемых по указанным моделям. В частности, для вышерассмотренного случая $Ha = 40$, $P = 60$ отличие по максимуму функции тока ψ в расчетах по двум моделям составляет 27%.

Если порядок апроксимации ϑ на неоднородной сетке оценить как $O(h)$, то для (4I) получается оценка $O(1)$. В общем случае из условия аксиальной симметрии следует, что момент вращения на оси должен удовлетворять следующим требованиям:

$$\vartheta\big|_{r=0}=0; \qquad (42) \qquad \frac{\partial^{2k+1}}{\partial r^{2k+1}}\vartheta\Big|_{r=0}=0;\ k=0,1,2,\ldots \qquad (43)$$

В данном случае (42) использовалось как граничное условие на оси, а условие (4I) является частным случаем (43),которые в непрерывной задаче получаются как свойства решения. Точность выполнения условий (43) на сетке обусловлена точностью аппроксимации соответствующего уравнения (23) у оси симметрии и без изменения шаблона может быть повышена за счет уменьшения шага сетки в этой области.

Таким образом,вариант с переменными Ω , W, независимо от немонотонности соответствующих сеточных операторов, с точки зрения экономичности счета, эквивалентен варианту с переменными ϑ , ξ .Однако модель с переменными Ω , W более адекватно отражает свойства физической модели.

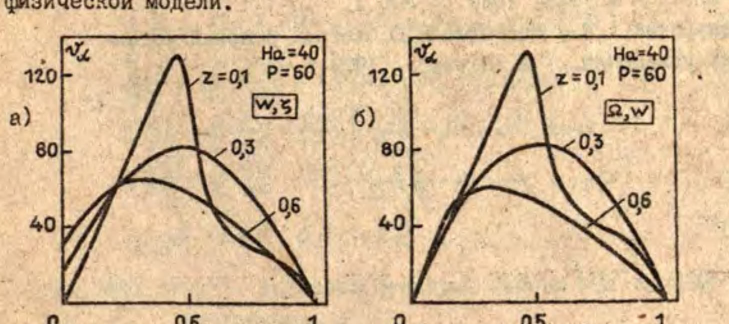

Рис.3. Зависимость азимутальной скорости от радиуса.

Список литературы

1. Люмкис Е.Д., Мартузане Э.Н. Численный метод расчета конвективной диффузии в зоне расплава //Вычислительная техника и краевые задачи. Методы и специальные средства:Межведомственный сб. научн.тр./Отв.ред. А.П.Спалвинь - Рига: РПИ, 1981. - С.111-136.
2. Люмкис Е.Д.Консервативная монотонная для вихря скорости разностная аппроксимация двумерных уравнений Навье-Стокса //Латвийский математический ежегодник.- 1986.- №30.- С.218-227.
3. Козельская Н.В., Люмкис Е.Д.,Юдов А.А. Численное сравнение разностных схем для задачи о течении жидкости между бесконечными вращающимися дисками // Прикладные задачи математической физики. Сб.научн. тр./Отв.ред. Н.А.Авдонин.- Рига: ЛГУ,1985. - С.39 - - 50.
4. Калис Х.Э. Построение монотонной разностной схемы для решения задачи об осесимметрично-вращательных конвективных течениях вязкой несжимаемой жидкости// Прикладные задачи математической физики: Сб.научн. тр./Отв.ред. Н.А.Авдонин. - Рига:ЛГУ,1985. - С.50 - - 59.
5. Дулан Э., Миллер Дж., Шилдерс У. Равномерные численные методы решения задач с пограничным слоем. -Пер. с анг. - М.: Мир, 1983. - 200 с.
6. Самарский А.А., Николаев Е.С. Методы решения сеточных уравнений. - М.:Наука, - 1978.

УДК 517.958

А.А.Земитис
ЛГУ им.П.Стучки,Рига

ИССЛЕДОВАНИЕ ОДНОЙ ЗАДАЧИ,СОДЕРЖАЩЕЙ СТАРШИЕ ПРОИЗВОДНЫЕ В КРАЕВЫХ УСЛОВИЯХ

В работе /4/ рассматривалась задача для эллиптического уравнения с кусочно-постоянными коэффициентами в полом цилиндре при смешанных краевых условиях, которая моделирует фильтрацию жидкости (воды) в окрестности дрены с фильтром. В упомянутой работе показано, что при практических расчетах более удобно исходную задачу свести к другой. Новая задача рассматривается в меньшей области,чем исходная, двухслойность среды учитывается с помощью специальных краевых условий типа сосредоточечной емкости /3/. Оказывается, что для упомянутой выше задачи в угловой точке можно поставить краевое условие, приводящее задачу к самосопряженному виду. Численные результаты при этом остаются того же порядка точности, что и в работе /4/.

В настоящей работе доказывается теорема существования и единственности обобщенного решения подобной задачи, содержащей старшие производные в краевых условиях.

I. Формулировка задачи. Несколько более общую чем в /4/ задачу, можно написать в следующем виде:

$$\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}\left(r\frac{\partial U}{\partial r}\right)+\frac{\partial^2 U}{\partial z^2}=0,\ \tilde{r}_1<r<R,\ 0<z<2Z, \tag{I}$$

$$\frac{\delta}{r}\frac{\partial}{\partial r}\left(r\frac{\partial U}{\partial r}\right)+\frac{\partial U}{\partial z}=-\varphi(r),\ \tilde{r}_1<r<R,\ z=0, \tag{2}$$

$$\frac{\delta}{r}\frac{\partial}{\partial r}\left(r\frac{\partial U}{\partial r}\right)-\frac{\partial U}{\partial z}=-\varphi(t),\ \tilde{r}_1<r<R,\ z=2Z, \tag{3}$$

$$\frac{\partial U}{\partial r}+\frac{E}{\tilde{r}_1}\frac{\partial^2 U}{\partial z^2}=-\psi(z),\ r=\tilde{r}_1,\ 0<z<2Z, \tag{4}$$

$$\delta\frac{\partial U}{\partial r}+\frac{E}{\tilde{r}_1}\frac{\partial U}{\partial z}=\frac{\delta\alpha(U-\bar{U}_0)}{(\tilde{r}_1-\tilde{r}_0)^2\tilde{r}_1}-A,\ r=\tilde{r}_1,\ z=0, \tag{5}$$

$$\delta\frac{\partial U}{\partial r}-\frac{E}{\tilde{r}_1}\frac{\partial U}{\partial z}=\frac{\delta\alpha(U-\bar{U}_0)}{(\tilde{r}_1-\tilde{r}_0)^2\tilde{r}_1}-A,\ r=\tilde{r}_1,\ z=2Z, \tag{6}$$

$$U=0,\ r=R,\ 0\leqslant z\leqslant 2Z, \tag{7}$$

где $\varphi(r),\psi(z)$ – заданные функции, причем $\psi(Z-z)=\psi(Z+z)$; δ,α, A,E, $\bar{U}_0$. – постоянные, $E>0$.

Гладкость функций будет уточнена ниже.

Обозначим $\Omega=\{(r,z)\,|\,0<z<2Z,\ \tilde{r}_1<r<R\}$. Возьмем произвольную достаточно гладкую в $\bar{\Omega}$ функцию ϑ, которая при $r=R$ обращается в 0. Умножим (I) на $-\vartheta$ и проинтегрируем по области Ω. Применяя формулу Грина, а также учитывая краевые условия (2)-(4), (7), получим

$$\iint\limits_{\Omega} r\left(\frac{\partial U}{\partial r}\frac{\partial \vartheta}{\partial r}+\frac{\partial U}{\partial z}\frac{\partial \vartheta}{\partial z}\right)dr\,dz-E\int\limits_{0}^{2Z}\left(\frac{\partial^2 U}{\partial z^2}\vartheta\right)\Big|_{r=\tilde{r}_1}dz-\delta\int\limits_{\tilde{r}_1}^{R}\left(\frac{\partial}{\partial r}\left(r\frac{\partial U}{\partial r}\right)\vartheta\right)\Big|_{z=0}dr-$$
$$-\delta\int\limits_{\tilde{r}_1}^{R}\left(\frac{\partial}{\partial r}\left(r\frac{\partial U}{\partial r}\right)\vartheta\right)\Big|_{z=2Z}dr=\tilde{r}_1\int\limits_{0}^{2Z}\psi(z)\vartheta\Big|_{r=\tilde{r}_1}dz+\int\limits_{r_1}^{R}\varphi(r)r\left(\vartheta|_{z=0}+\vartheta|_{z=2Z}\right)dr. \quad (8)$$

Проведя еще раз интегрирование по частям в интегралах, содержащих вторые производные с использованием условий (5)-(6), будем иметь

$$\iint\limits_{\Omega} r\left(\frac{\partial U}{\partial z}\frac{\partial \vartheta}{\partial z}+\frac{\partial U}{\partial r}\frac{\partial \vartheta}{\partial r}\right)dr\,dz+E\int\limits_{0}^{2Z}\left(\frac{\partial U}{\partial z}\frac{\partial \vartheta}{\partial z}\right)\Big|_{r=\tilde{r}_1}dz+\delta\int\limits_{\tilde{r}_1}^{R}r\left(\left(\frac{\partial U}{\partial r}\frac{\partial \vartheta}{\partial r}\right)\Big|_{z=0}+\right.$$
$$\left.+\left(\frac{\partial U}{\partial r}\frac{\partial \vartheta}{\partial r}\right)\Big|_{z=2Z}\right)dr+\beta\left((U\vartheta)\big|_{(\tilde{r}_1,0)}+(U\vartheta)\big|_{(\tilde{r}_1,2Z)}\right)=\tilde{r}_1\int\limits_{0}^{2Z}\psi(z)\vartheta\Big|_{r=\tilde{r}_1}dz+$$
$$+\int\limits_{r_1}^{R}\varphi(r)r\left(\vartheta|_{z=0}+\vartheta|_{z=2Z}\right)dr+\left(\beta\bar{U}_0+A\tilde{r}_1\right)\left(\vartheta|_{(\tilde{r}_1,0)}+\vartheta|_{(\tilde{r}_1,2Z)}\right), \quad (9)$$

где $\beta=\dfrac{\delta\alpha}{(\tilde{r}_1-\tilde{r}_0)^2}$.

2. Определения обобщенного решения. Теперь можем дать одно из возможных определений обобщенного решения задачи (I) (7).

Определение I. Назовем обобщенным решением задачи (I)-(7) функцию $U\in H^1(\Omega)$, обращающейся в нуль при $r=R$, которая удовлетворяет интегральному тождеству (9) при любой функции $\vartheta\in \overset{\circ}{C}{}^{\infty}(\bar{\Omega})$, обращающейся в нуль при $r=R$.

Здесь $H^1(\Omega)$ - пространство Соболева /I/. Сразу отметим, что не для каждой функции из $H^1(\Omega)$ след на границе области $\partial\Omega$ будет обладать нужными свойствами. А именно, $U|_{\partial\Omega}$ должен принадлежать пространству $H^1(\partial\Omega)$.

В дальнейшем мы дадим еще одно определение решения задачи (I)-(7), но для этого проделаем некоторые преобразования.

На границе $\partial\Omega$ области Ω рассмотрим функции пространства Соболева $H^1(\partial\Omega)$. Точнее, нас будет интересовать подпространство $\dot{H}^1(\partial\Omega)$ этого пространства, содержащее те функции из $H^1(\partial\Omega)$, которые обращаются в нуль при $r=R$. В $\dot{H}^1(\partial\Omega)$ можно ввести эквивалентное обычному скалярное произведение и соответствующую норму по формулам

$$(u,v)_{\dot{H}^1(\partial\Omega)}=(u,v)=E\int_0^{2Z}\left(\frac{\partial u}{\partial z}\frac{\partial v}{\partial z}\right)\Big|_{r=\tilde{r}_1}dz+\delta\int_{\tilde{r}_1}^{R}r\left(\left(\frac{\partial u}{\partial r}\frac{\partial v}{\partial r}\right)\Big|_{z=0}+\left(\frac{\partial u}{\partial r}\frac{\partial v}{\partial r}\right)\Big|_{z=2Z}\right)dr+$$

$$+\beta\left((u,v)|_{(\tilde{r}_1,0)}+(uv)|_{(\tilde{r}_1,2Z)}\right),\ \forall u,v\in\dot{H}^1(\partial\Omega),$$

$$\|u\|^2_{\dot{H}^1(\partial\Omega)}=\|u\|^2=(u,u),\ \forall u\in\dot{H}^1(\partial\Omega). \tag{10}$$

В области Ω рассмотрим функции из $H^1(\Omega)$, имеющие след на части границы $r=R$ равным нулю. Обозначим это подпространство через $\tilde{H}^1(\Omega)$. Для таких функций можно ввести эквивалентное обычному скалярное произведение и соответствующую норму:

$$(u,v)_{\tilde{H}^1(\Omega)}=\iint_\Omega r\left(\frac{\partial u}{\partial z}\frac{\partial v}{\partial z}+\frac{\partial u}{\partial r}\frac{\partial v}{\partial r}\right)dr\,dz,\ \forall u,v\in\tilde{H}^1(\Omega), \tag{11}$$

$$\|u\|^2_{\tilde{H}^1(\Omega)}=(u,u)_{\tilde{H}^1(\Omega)},\ \forall u\in\tilde{H}^1(\Omega).$$

Можно установить, что для каждой функции $f\in\dot{H}^1(\partial\Omega)$ существует продолжение $F\in\tilde{H}^1(\Omega)$ на область Ω такое, что $F|_{\partial\Omega}=f$ и

$$\|F\|_{\tilde{H}^1(\Omega)}\le C\|f\|, \tag{12}$$

где C не зависит от f.

Из (12) и общей теории эллиптических уравнений /I/ следует, что решение задачи Дирихле:

$$\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}\left(r\frac{\partial U}{\partial r}\right)+\frac{\partial^2 U}{\partial z^2}=0,\ (r,z)\in\Omega, \tag{13}$$

$$U|_{\partial\Omega}=u\ ,\qquad \text{где } u\in\dot{H}^1(\partial\Omega),$$

существует и единственно, причем справедлива оценка:

$$\|U\|_{\tilde{H}^1(\Omega)}\le C\|u\|. \tag{14}$$

Теперь можно ввести линейный ограниченный оператор , который каждой функции $u \in \dot{H}^1(\partial\Omega)$ сопоставляет решение задачи (13) U. То есть $U = Du \quad \forall u \in \dot{H}^1(\partial\Omega)$, $\|D\| \leq C$. После этого интегральное соотношение (9) можно привести к виду

$$(Du, D\vartheta)_{\tilde{H}^1(\Omega)} + (u, v) = \tilde{r}_1 \int_0^{2Z} \psi(z) v|_{r=\tilde{r}_1} dz + \int_{\tilde{r}_1}^{R} \varphi(r) r (v|_{z=0} + \vartheta|_{z=2Z}) dr +$$

$$+ (\beta \bar{U}_0 + A\tilde{r}_1)(v|_{(\tilde{r}_1,0)} + \vartheta|_{(\tilde{r}_1,2Z)}), \qquad (15)$$

если в качестве пробных функций использовать гармонические в Ω функции, граничные значения которых принадлежат $\dot{H}^1(\partial\Omega)$.

Дадим второе определение обобщенного решения задачи (1)-(7).

О п р е д е л е н и е 2. Обобщенным решением задачи (1)-(7) назовем функцию $Du \in \tilde{H}^1(\partial\Omega)$, где $u \in \dot{H}^1(\partial\Omega)$ удовлетворяет интегральному тождеству (15) $\forall v \in \dot{H}^1(\partial\Omega)$.

Л е м м а. Определения 1,2 обобщенных решений задачи (1)-(7) эквивалентны.

Доказательство. Пусть сначала $U \in \tilde{H}^1(\Omega)$ обобщенное решение задачи (1)-(7) в смысле определения 1. Возьмем произвольную финитную в Ω функцию $v_0 \in \dot{C}^\infty(\Omega)$ и подставим в (9). Тогда получим

$$\iint_\Omega r \left(\frac{\partial U}{\partial r} \frac{\partial v_0}{\partial r} + \frac{\partial U}{\partial z} \frac{\partial v_0}{\partial z} \right) dr\, dz = 0.$$

Следовательно, U является решением некоторой задачи Дирихле (13). Из справедливости интегрального тождества (9) также следует, что $U|_{\partial\Omega} = u \in \dot{H}^1(\partial\Omega)$. В таком случае (9) можно переписать в виде:

$$(Du, v)_{\tilde{H}^1(\Omega)} + (u, v|_{\partial\Omega}) = \tilde{r}_1 \int_0^{2Z} \psi(z) \vartheta|_{r=\tilde{r}_1} dz + \int_{\tilde{r}_1}^{R} \varphi(r) r (v|_{z=0} + v|_{z=2Z}) dr +$$

$$+ (\beta \bar{U}_0 + A\tilde{r}_1)(v|_{(\tilde{r}_1,0)} + v|_{(\tilde{r}_1,2Z)}). \qquad (9')$$

Так как $C^\infty(\Omega)$ плотно вложено в пространствах Соболева, то следует справедливость тождества (15).

Пусть $Du \in \tilde{H}^1(\Omega)$, где $u \in \dot{H}^1(\partial\Omega)$ и Du - обобщенное решение в смысле определения 2. Возьмем производную функцию $V\in\dot{C}^{\infty}(\bar\Omega)$. Естественно, что $V|_{\partial\Omega}=\vartheta\in\dot H^1(\partial\Omega)$. Тогда можно рассматривать $D\vartheta\in\tilde H^1(\Omega)$. Введем функцию $W=(V-D\vartheta)\in\tilde H^1(\Omega)$. Легко видеть, что $W|_{\partial\Omega}=0$. Так как Du - решение задачи Дирихле (13), то тогда $(Du,W)_{\tilde H^1(\Omega)}=0$ или $(Du,D\vartheta)_{\tilde H^1(\Omega)}=(Du,V)_{\tilde H^1(\Omega)}$. Следовательно, из справедливости равенства (15) следует справедливость равенства (9) $\forall v\in\dot C^{\infty}(\bar\Omega)$, где $U=Du$, $U|_{\partial\Omega}=u$.

3. Сведение задачи к операторному уравнению. В дальнейшем докажем существование и единственность обобщенного решения задачи (1)-(7) в смысле определения 2. Рассматриваемую задачу сведем к операторному уравнению в пространстве $\dot H^1(\partial\Omega)$. Сначала отметим, что по определению $\dot H^1(\partial\Omega)$ является замкнутым подпространством пространства $H^1(\partial\Omega)$. Используя в $\dot H^1(\partial\Omega)$ скалярное произведение (10), $\dot H^1(\partial\Omega)$ становится полным гильбертовым пространством.

Для дальнейших исследований нам понадобятся некоторые оценки для функций из пространства $\dot H^1(\partial\Omega)$. Легко установить следующие неравенства Фридрихса:

$$\int_0^{2Z}\vartheta^2|_{r=\tilde r_1}dz\le 4Z\vartheta^2|_{(\tilde r_1,0)}+8Z^2\int_0^{2Z}\left(\frac{\partial v}{\partial z}\Big|_{r=\tilde r_1}\right)^2dz, \tag{16}$$

$$\int_{\tilde r_1}^{R}r\vartheta^2|_{z=0}dr\le\frac{(R-\tilde r_1)R}{2\tilde r_1}\int_{\tilde r_1}^{R}r\left(\frac{\partial v}{\partial r}\Big|_{z=0}\right)^2dr. \tag{17}$$

Отметим, что такое же неравенство, как (17) имеет место и при $z=2Z$. Кроме того, значения в функций в угловых точках $(\tilde r_1,0)$, $(\tilde r_1,2Z)$ можно оценить с помощью неравенства (будем писать для $z=0$)

$$\vartheta^2|_{(\tilde r_1,0)}\le\frac{R-\tilde r_1}{\tilde r_1}\int_{\tilde r_1}^{R}r\left(\frac{\partial v}{\partial r}\Big|_{z=0}\right)^2dr. \tag{18}$$

Используя определение нормы в пространстве $\dot H^1(\partial\Omega)$, получим оценки через $\|v\|$:

$$\int_0^{2Z}\vartheta|_{r=\tilde r_1}dz\le\max\left(\frac{4Z}{\beta},\frac{8Z^2}{E}\right)\|v\|^2, \tag{19}$$

$$\int_{\tilde r_1}^{R}r\vartheta^2|_{z=0}dr\le\frac{(R-\tilde r_1)^2R}{2\tilde r_1\delta}\|v\|^2, \tag{20}$$

$$\vartheta^2|_{(\tilde r_1,0)}\le\min\left(\frac{R-\tilde r_1}{\tilde r_1\delta},\frac{1}{\beta}\right)\|v\|^2. \tag{21}$$

Теперь перейдем к исследованию интегрального соотношения (15). Легко видеть, что в правой части стоит линейный ограниченный функционал при условии, что $\psi(z)\in L_2(0,2Z)$, $\varphi(r)\in L_2(\tilde{r}_1,R)$.

Действительно, используя (19), (21), можно получить оценку

$$\left|\tilde{r}_1\int\limits_0^{2Z}\psi(z)\vartheta\big|_{r=\tilde{r}_1}dz+\int\limits_{\tilde{r}_1}^{R}\varphi(r)r\left(\vartheta\big|_{z=0}+\vartheta\big|_{z=2Z}\right)dr+(\beta\bar{U}_0+A\tilde{r}_1)\left(\vartheta\big|_{(\tilde{r}_1,0)}+\vartheta\big|_{(\tilde{r}_1,2Z)}\right)\right|\le$$

$$\le\left(\left(\int\limits_0^{2Z}\psi^2(z)dz\right)^{\frac{1}{2}}\tilde{r}_1\sqrt{\max\left(\frac{4Z}{\beta},\frac{8Z^2}{E}\right)}+\left(\int\limits_{\tilde{r}_1}^{R}r\varphi^2(r)dr\right)^{\frac{1}{2}}2(R-\tilde{r}_1)\sqrt{\frac{R}{2\tilde{r}_1\delta}}+\right.$$

$$\left.+2|\beta\bar{U}_0+A\tilde{r}_1|\cdot\sqrt{\min\left(\frac{R-\tilde{r}_1}{\tilde{r}_1\delta},\frac{1}{\beta}\right)}\right)\|\vartheta\|,\ \forall\vartheta\in\overset{\circ}{H}{}^1(\partial\Omega). \qquad (22)$$

По теореме Рисса существует единственный элемент $\phi\in\overset{\circ}{H}{}^1(\partial\Omega)$ такой, что функционал, стоящий в правой части (15), можно представить в виде скалярного произведения (ϕ,ϑ) и

$$\|\phi\|\le\|\psi\|_{L_2(0,2Z)}\tilde{r}_1\sqrt{\max\left(\frac{4Z}{\beta},\frac{8Z^2}{E}\right)}+\|\sqrt{r}\,\varphi\|_{L_2(\tilde{r}_1,R)}\cdot2(R-\tilde{r}_1)\sqrt{\frac{R}{2\tilde{r}_1\delta}}+$$

$$+2|\beta\bar{U}_0+A\tilde{r}_1|\sqrt{\min\left(\frac{R-\tilde{r}_1}{\tilde{r}_1\delta},\frac{1}{\beta}\right)}. \qquad (23)$$

В таком случае равенство (15) можно переписать в виде

$$(Du,D\vartheta)_{\tilde{H}^1(\Omega)}+(u,\vartheta)=(\phi,\vartheta). \qquad (24)$$

Исследуем функционал $B(u,\vartheta)=(Du,D\vartheta)_{\tilde{H}^1(\Omega)}+(u,\vartheta)$, определенный на $\overset{\circ}{H}{}^1(\partial\Omega)\times\overset{\circ}{H}{}^1(\partial\Omega)$. Этот функционал является линейным по каждому аргументу, а также ограниченным. Действительно,

$$|B(u,\vartheta)|\le\|Du\|_{\tilde{H}^1(\Omega)}\cdot\|D\vartheta\|_{\tilde{H}^1(\Omega)}+\|u\|\,\|\vartheta\|\le(C^2+1)\|u\|\cdot\|\vartheta\|,\ \forall u,\vartheta\in\overset{\circ}{H}{}^1(\partial\Omega).$$

$B(u,\vartheta)$ - положительно определен, так как

$$B(u,u)=(Du,Du)_{\tilde{H}^1(\Omega)}+(u,u)\ge(u,u).$$

Следовательно, выполняются все условия теоремы Лакса-Мильграма /2/. Тогда существует определенный единственным образом ограниченный линейный оператор S, обладающий ограниченным обратным линейным оператором S^{-1} такой, что

$$(u,v)=B(Su,v) \qquad \text{для } \forall u,v\in \dot{H}^1(\partial\Omega),$$

Кроме того,

$$\|S\|\leq 1,\ \|S^{-1}\|\leq C^2+1.$$

В результате (24) можем переписать так:

$$(S^{-1}u,v)=(\Phi,v).$$

Это означает, что обобщенное решение задачи (I)-(7) можно найти воздействуя оператором D на решение u операторного уравнения

$$S^{-1}u=\Phi,$$

или

$$u=S\Phi. \tag{25}$$

4. Теорема существования и единственности решения. В результате проведенных исследований можем сформулировать теорему.

Т е о р е м а . Обобщенное решение задачи (I)-(7) существует и единственно при любых ограниченных значениях $\bar{U}_0$, A и для $\forall\psi(z)\in L_2(0,2Z)$, $\forall\varphi(r)\in L_2(\tilde{r}_1,R)$. Кроме того, для решения справедлива априорная оценка

$$\|Du\|_{\tilde{H}^1(\Omega)}\leq C\Big(\|\psi\|_{L_2(0,2Z)}\tilde{r}_1\sqrt{\max\Big(\frac{4Z}{\beta},\frac{8Z^2}{E}\Big)}+\|\sqrt{r}\,\varphi\|_{L_2(\tilde{r}_1,R)}\cdot 2(R-\tilde{r}_1)\sqrt{\frac{R}{2\tilde{r}_1\beta}}+$$

$$+2Z|\beta\bar{U}_0+A\tilde{r}_1|\cdot\sqrt{\min\Big(\frac{R-\tilde{r}_1}{\tilde{r}_1\sigma},\frac{1}{\beta}\Big)}\Big), \tag{26}$$

u определяется из (25), C не зависит от ψ, φ, $\bar{U}_0$, A.

Доказательство. Существование и единственность решения следует из возможности представления граничной функции u в виде (25). Из свойств оператора S получим, что $\|u\|\leq\|\Phi\|$. Следуя (I4), (23) будем иметь (26). Теорема доказана.

В заключении автор выражает искреннюю благодарность У.Е.Райтуму и А.Б.Цибулису за ценные замечания и советы.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Михайлов В.П. Дифференциальные уравнения в частных производных.-М.:Наука, 1983.-424 с.
2. Иосида К. Функциональный анализ. - М.:Мир, 1967.-624 с.
3. Самарский А.А., Андреев В.Б. Разностные методы для эллиптических уравнений. - М.:Наука, 1976.-352 с.
4. Буйкис А.А., Земитис А.А. Приближенное решение смешанной задачи для уравнения Лапласа в двухслойной среде// Численные методы механики сплошной среды Сб.научн.тр. Новосибирск: ВЦИТПМ СО АН СССР, 1985.- Т.16.-№4.-С.3-12.
5. Никольский С.М. Приближение функций многих переменных и теоремы вложения. - М.:Наука, 1969. - 480 с.
6. Агранович М.С., Вишик М.И. Эллиптические задачи с параметром и параболические задачи общего вида // Успехи математических наук.- 1964. - Т.19. - Вып.3(117).- С.53-162.
7. Буйкис А.А., Земитис А.А., Шкинкис Ц.Н. Вычисление фильтрационного напора в придренной зоне и притока воды к щелям дрены // Водные ресурсы.- 1986. -№6.-С.16-23.
8. Краснов И.П. О решении некоторых граничных задач теории гармонических функций //Дифференциальные уравнения.-1975. - Т.11.- №11.- С.2052-2066.
9. Михлин С.Г. Вариационные методы в математической физике. -М.: Гос.изд-во технико-теоретической литературы, 1957.-476 с.
10. Мироненко В.А. Динамика подземных вод. - М.:Недра, 1983.-357 с.
11. Полубаринова-Кочина П.Я. Теория движения грунтовых вод. - М.: Наука, 1977.- 664 с.
12. Самарский А.А. Теория разностных схем.-М.: Наука, 1977. - 654 с.
13. Цейтлин Л.А. Об определении магнитных и электрических полей тонких слоев и оболочек // Журнал технической физики - 1957.-Т.28.-Вып.6.-С.1326-1329.
14. Шкинкис Ц.Н. Гидрологическое действие дренажа.- Л.: Гидрометеоиздат, 1981.-312 с.

УДК 532.546

Ф.Хэфнер, ГДР, г.Фрейберг
Х.Фойгт, ГДР, г.Магдебург

АНАЛИТИЧЕСКИ-ЧИСЛЕННОЕ РЕШЕНИЕ ЗАДАЧ ТЕПЛО-И МАССОПЕРЕНОСА В ПОРИСТЫХ СРЕДАХ

Изучение переноса химически активных веществ и тепла в пластах подземных вод имеет множество применений в гидрологии, получении геотермальной энергии, аккумулировании подземного тепла, защите и охране грунтовых вод. Нарушение естественной системы путем вмешательства человека требует оценки и прогнозирования скорости массо- и теплопереноса, для прогноза процессов такого рода требуется также идентификация параметров переноса.

Известны методы решения дифференциальных уравнений с частными производными для проблем тепло- и массопереноса: аналитические, приближенные (асимптотические) и численные решения. Отметим работы /I/-/8/, в которых рассматриваются одномерные задачи. Большое число работ посвящено численному решению задач переноса. Наиболее часто применяются следующие методы решения: метод характеристик /9/, конечных разностей /I0/ и конечных элементов /II/, /I2/. Мы здесь приведем решение одномерной задачи для неоднородной среды, которое по сравнению с численным методом требует существенно меньше машинного времени.

Задача массопереноса. Рассмотрим сечение водоносного пласта вдоль линии потока подземных вод (Рис.Iа).

Вектор скорости фильтрации $\vec{v}$ принимается стационарным, но допускается криволинейность координаты $x \in R^1$. Закон сохранения массы учитывает следующие физические эффекты: молекулярную диффузию, механическую диспесию, конвекцию, радиоактивный распад, физико-химическое взаимодействие между жидкостью и твердыми частицами. Используется следующая математическая модель /6/:

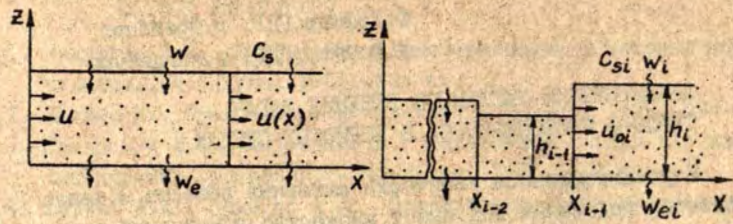

Рис.I. а - одномерный однородный пласт;
в - кусочно-неоднородный пласт.

$$
\frac{\partial}{\partial x}\left(D(x)\frac{\partial C}{\partial x}-u(x)\cdot C\right)-A_c(C)\cdot C+B_c = n R\frac{\partial C}{\partial t}+(1-n)\cdot S(C,F) \qquad (1а)
$$

$$
-\lambda F=\frac{\partial F}{\partial t}-S(C,F) \qquad (1б)
$$

$$
x\in(0,\infty),\ t\in(0,t_E];\quad C=C(x,t);\ F=F(t).
$$

Начальные и граничные условия таковы:

$$
\begin{array}{ll}
C(x,0)=F(x,0)=0 & \forall x\in(0,\infty) \\
\left.\begin{array}{l} C(0,t)=C_0+\alpha t \\ |C(\infty,t)|\leq Q<\infty \end{array}\right\} & \begin{array}{l}\forall t\in(0,t_E] \\ a\in(-\infty,+\infty).\end{array}
\end{array} \qquad (2)
$$

Здесь C - концентрация вещества в жидкости (кг/м^3); $D(x)$ - коэффициент дисперсии, м^2/с; F - концентрация вещества в скелете (кг/м^3); h - мощность пласта, м; n - пористость; S - скорость массообмена жидкость-скелет, кг/(м^3 с); t - время, с; u - скорость фильтрации, м/с; w - мощность источника на единицу площади, м/с;

w_e - мощность стоков на единицу площади, м/с; λ - коэффициент радиоактивного распада c^{-I}; R - коэффициент запаздывания.

$$D(x)=n\cdot D_m+\delta|u|\ ; \qquad u(x)=u_o+(w-w_e)\frac{x}{\ell}\ ; \qquad (3)$$

$$B_c=\frac{w}{h}C_s-(1-n)S(C,F)\ .$$

$$A_c(C)=\lambda\cdot n+\frac{w_e}{h}+n\frac{B_m}{B_\ell+C}\ ;$$

$$S(C,F)=K_f(F_s-F)\cdot C-K_c(C_T-C)\cdot F\ . \qquad (4)$$

Здесь D_m - коэффициент молекулярной диффузии, $м^2/с$; δ - дисперсия, м; B_m, B_ℓ - коэффициенты распада вещества, кг/$м^3$ с и кг/$м^3$; K_f, K_c - коэффициенты взаимодействия, $м^3$/кг с; F_s - коэффициент сорбции скелета, кг/$м^3$; C_T - полная концентрация, кг/$м^3$; C_s - интенсивность отдельного источника, кг/$м^3$.

Мы будем искать решение задачи (I),(2) для двух случаев:

I) $v(x)=v_m=const$;

2) $u(x)$ находится по уравнению (3),

$$\frac{\delta}{u_m}u^2(x)\approx\delta|u_m|, \qquad u_m=\frac{1}{2}(u_o+u),$$

$$S(C,F)\equiv 0 \qquad и \qquad C_T\gg C \quad (равновесие).$$

Отсюда следует

$$F=\frac{F_s}{F_\ell+C}\cdot C \qquad ,\ где \quad F_\ell=\frac{K_c}{K_f}\cdot C_T\ . \qquad (5)$$

Используя средние концентрации для C и F в уравнениях (3) и (4), линеаризуем уравнения (I), тем самым уравнения (I) могут быть решены раздельно при помощи преобразования Лапласа.

Р е ш е н и е   д л я   с л у ч а я   I): $v = const$.
При R = I решение уравнения (Iа) имеет вид:

$$C(x,t) = C_0 \cdot P_0(x,t) + \alpha \cdot P_t(x,t) + \frac{B_c}{A_c} \cdot P_s(x,t), \qquad (6)$$

где $P_0 = \frac{1}{2}(P_{01} + P_{02})$,

$$\left.\begin{matrix} P_{01} \\ (P_{02}) \end{matrix}\right\} = exp\left(\frac{x}{2D}(u_m \mp v)\right) \cdot erfc \frac{x \mp \frac{vt}{nR}}{\sqrt{4D\frac{t}{nR}}}$$

$$P_t = \frac{1}{2}\left\{(t - \frac{Rnx}{v}) \cdot P_{01} + (t + \frac{Rnx}{v}) \cdot P_{02}\right\}$$

$$P_s = 1 - exp(-A_c \frac{t}{nR}) + exp(-A_c \frac{t}{nR}) \cdot R(x,t) - P_0(x,t)$$

$$R(x,t) = P_0(x,t,v = u_m); \quad v = \sqrt{u_m^2 + 4 \cdot D \cdot A_c} \ .$$

Решение дифференциального уравнения (Iб) таково:

$$F(t) = \frac{S(C,F)}{\lambda}\left\{1 - exp(-\lambda t)\right\}. \qquad (7)$$

Уравнения (6) и (7) итерируются, причем после каждой итерации находится новое значение $S(C,F)$. Итерации заканчиваются, когда $|C^{k+1} - C^k| \leqslant \varepsilon_1$, $|F^{k+1} - F^k| \leqslant \varepsilon_2$.

Р е ш е н и е   д л я   с л у ч а я   2). При $u(x) = u_0 + (w - w_e)\frac{x}{h}$, $u_0 > 0$ пренебрегаем молекулярной диффузией $D \approx \delta|u_m|$ и уравнение (5) переходит в соотношение равновесия взаимодействия. Решая его, получаем уравнение (6), где

$$X=\frac{u_m h}{w-w_e}\ln\frac{u(x)}{u_o}\ , \quad B_c=\frac{w}{h}C_s \tag{8}$$

$$R(C)=1+\frac{1-n}{n}\ \frac{F_s}{F_8+C}$$

$$A_c(C)=n\lambda\cdot R+\frac{w}{h}+n\frac{B_m}{B_8+C}\ . \tag{9}$$

Уравнение (6) решается итерационно.

Разностный метод и суперпозиция. Предположим, что доминирует конвективный перенос, и выберем элементарные длины блоков Δx_i (см. рис.Iв) Решение $C(x_{i-1},t)$ возьмем в качестве граничного условия для элемента i. Изменение во времени краевых условий и концентрации источника C_s будем учитывать методом суперпозиции. Такой метод надо считать приближенным, так как принцип суперпозиции действует точно лишь для линейных уравнений.

Можно показать, что решение разностной задачи сходится к решению линеаризованных уравнений.

Преимущество предложенного метода состоит в незначительной требуемой машинной памяти и времени счета, он может быть использован и для идентификации параметров.

Идентификация параметров. Пусть заданы значения измеренных концентраций $C^M(x_i,t_j)$, $(i=\overline{1,L}\ ;\ j=\overline{1,N})$ и требуется определить некоторые компоненты вектора параметров: $\vec{P}=\{P_K, K=\overline{1,K}\}=\{K_f, K_e, F_s, \ ,n,..\}$ Минимизируем функционал

$$f=\left\{\frac{1}{LN}\sum_{j=1}^{N}\sum_{i=1}^{L}[C(x_i,t_j,P_K)-C^M(x_i,t_j)]^2\right\}^{\frac{1}{2}}\to min! \tag{10}$$

Компоненты $\frac{\partial f}{\partial P_K}$ $(K=\overline{1,K}$) можно вычислить при помощи разностных аппроксимаций и минимум функционала найти итерационно градиентным методом.

Метод идентификации параметров, заключающийся в решении уравнения (6) разностно-суперпозиционной схемой был запрограммирован на языке *FORTRAN*. Он требует около 30К байтов памяти и 5-I0 мин. времени счета на СМ 4/20.

П р и м е р. Рассматривается область течения длиной в I м (лабораторный образец с песком), через который неравновесно протекает растворенный вводе радиоактивный изотоп (рис.2а)

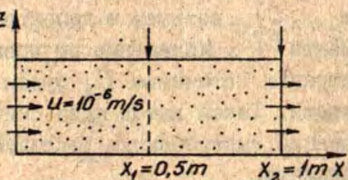

Рис.2а. Поток в лабораторном образце.

На рис.2в дано сравнение приближенного решения (6) (с итерациями по нелинейности) с точным решением для следующих данных: $u = 10^{-6}$ м/с, $D = 10^{-8}$ м^2/с, L = I м, λ = = 10^{-6} I/с, $P_e = vL/D$ =100, $\lambda_D = \lambda L^2/D$ =100.

В качестве точного решения было использовано уравнение (6) с $K_f = K_e$ =0, n =0,I, $\lambda = 10^{-6}$, C_s =0 (случай I). Приближенное решение было тестировано с K_f =I,III 10^{-10}, K_c =0, $F_s = 10^3$.

На рис.2с приведены результаты идентификации параметров для этого примера, когда требуется определить K_f и D .

Т е п л о п е р е н о с. Проблему теплопереноса в пластах рассмотрим для линейного случая (рис.3а и 3в).

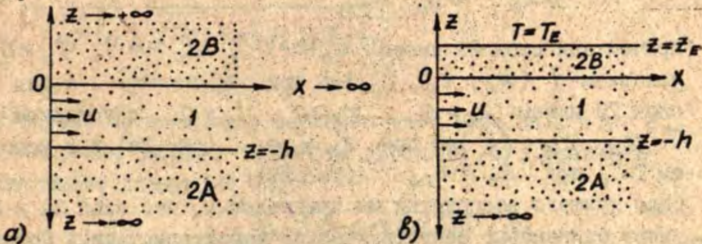

Рис.3. Схематизация области для постановок, рассмотренных:
а) Ловерье (1955 г.) и Авдониным (1964 г.);
в) в настоящей работе.

Нагнетание воды в слое I приводит к стационарной фильтрации со скоростью течения u. Тепло из-за конвекции и теплопроводности передается в направлении x, для пласта принимается независимость температуры от координаты z. Этот слой сопряжен со слоем 2А при $z=-h$, а при $z=0$-со слоем 2В; здесь осуществляется кондуктивный теплоперенос в направлении z. Теплоперенос в направлении z рассматривается нами при бесконечной мощности слоя 2В - это полученное Авдониным решение /2/,/3/ (рис. 3а)-и при конечной толщине поверхностного слоя 2В (рис. 3в).

Упомянутая проблема описывается следующими дифференциальными уравнениями:

слой I: $0 \geqslant z_D \geqslant -1, \; x_D > 0, \; t_D > 0$

$$\frac{\partial^2 T_1}{\partial x_D^2} - 2u_D \frac{\partial T_1}{\partial x_D} - 2\lambda_D \frac{\partial T_1}{\partial z_D} = \frac{\partial T_1}{\partial t_D}; \qquad (II)$$

слой 2:

$$\frac{\partial^2 T_2}{\partial z_D^2} = \frac{1}{w\lambda_D} \frac{\partial T_2}{\partial t_D} , \qquad (12)$$

причем для слоя 2А имеем $z_D < -1$, $x_D > 0$, $t_D > 0$ с условием $T(x_D, z_D, t_D) = 0$ при $z_D = -\infty$, а для слоя 2В имеем $z_D > 0$, $x_D > 0$, $t_D > 0$ с условием $T(x_D, z_D, t_D) = 0$ при $z_D = \infty$ (рис.3а) и с условием $T = T_E$ при $z_D = z_{DE}$ (рис.3в).

(Для лучшего восприятия мы предположим, что слой 2А и 2В имеют одинаковые теплофизические характеристики). Добавляются следующие начальные и граничные условия:

$$\begin{aligned} &T_{1,2} = 0 && \text{при } x_D > 0, \ |z_D| \geq 0, \ t_D = 0 \\ &T_1 = 1 && \text{при } x_D = 0, \ 0 \geq z_D \geq -1, \ t_D > 0 \\ &T_1 = T_{2A} && \text{при } x_D > 0, \ z_D = 0 \quad \text{и} \\ &T_1 = T_{2B} && \text{при } x_D > 0, \ z_D = -1, \ t_D \geq 0 \end{aligned} \qquad (13)$$

Использованные в уравнениях безразмерные параметры определяются следующим образом: $T = \frac{T(x,z,t) - T_i}{T_0 - T_i}$, $x_D = \frac{x}{h}$, $z_D = \frac{z}{h}$, $t_D = \frac{t\lambda_1}{(\rho c)_1 h}$, $u_D = \frac{(\rho c)_{F_i} u h}{2\lambda_1}$, $\lambda = \frac{\lambda_2}{\lambda_1}$, $w = \frac{(\rho c)_1}{(\rho c)_2}$.
Уравнения (II)-(I3) могут быть решены с помощью преобразования Лапласа.

В случае конечного верхнего слоя (Рис.3в) получаем следующее решение для изображения:

$$\bar{T}(x_D, s) = \left\{ \frac{1}{s} - \frac{2T_E \lambda \sqrt{\frac{s}{w\lambda}} \cdot e^{-\sqrt{\frac{s}{w\lambda}} \cdot z_{DE}}}{s^2\left(1 - e^{-\sqrt{\frac{s}{w\lambda}} \cdot z_{DE}}\right) + 2\lambda s \sqrt{\frac{s}{w\lambda}}} \right\} \times \qquad (14)$$

$$\times \exp\left(\left[u_D - \left(u_D^2 + s + \frac{2\lambda \sqrt{\frac{s}{w\lambda}}}{1 - e^{-2\sqrt{\frac{s}{w\lambda}} \cdot z_{DE}}} \right)^{\frac{1}{2}} \right] x_D \right) +$$

$$+\frac{2T_E\lambda\sqrt{\frac{s}{w\lambda}}\,e^{-\sqrt{\frac{s}{w\lambda}}\cdot z_{DE}}}{s^2\left(1-e^{-\sqrt{\frac{s}{w\lambda}}\cdot z_{DE}}\right)+2\lambda s\sqrt{\frac{s}{w\lambda}}}\,.$$

В случае бесконечного верхнего слоя (рис.3а), т.е. z_{DE} = $=\infty$, как следует из работы Авдонина /2/, уравнение принимает следующий вид:

$$T(x_D,s)=\frac{1}{s}\,e^{\left[u_D-\sqrt{u_D^2+s+2\lambda\sqrt{s/w\lambda}}\right]\cdot x_D}, \qquad (I5)$$

Выражение (I4) аналитически обратить не удается. В случае бесконечного верхнего слоя (рис.3а) в работе Авдонина /2/ с помощью обратного преобразования Лапласа-Карсона дано выражение для оригинала, которое, однако, вызывает трудности при вычислении интеграла. Поэтому распределение температуры в верхнем слое конечной мощности определялось численным обращением выражений (I4) и (I5). По требуемому времени счета и получаемой точности наиболее хорошо показал себя метод Штефеста /I3/.

Численные результаты. Так как изменение температуры во времени и пространстве зависит от безразмерных параметров $T=f(x_D, t_D, T_E, z_{DE}, u_D, \lambda, w)$ и, поэтому, одним графиком это отобразить нельзя, для графического отображения были выбраны следующие типичные параметры слоя: h =I0 м, u =I0^{-6}м/с, λ_1 = $=\lambda_2$ =I вт/м к, $(\rho c)_1$ = $(\rho c)_2$ =I,5$\cdot$I0^6 Дж/м^3 к, $(\rho c)_{F_i}$ = =4.5$\cdot$I0^6 Дж/м^{3}к, T_E =0,5. Это дает следующие величины безразмерных параметров: u_D =22.5, w =I, λ =I. Результаты расчетов приведены на Рис.4. Они показывают, что малая мощность конечного настилающего слоя значительно влияет на распределение температуры. Лишь при $(x_D/z_{DE})=(x/z_E)<2$ можно пренебречь влиянием мощности верхнего слоя и применять решение Авдонина /2/ с $z_{DE}=\infty$ (рис.5). Для больших интервалов времени, т.е. для $t_D \to \infty$ распределение температуры устанавливается. Обращение уравнения (I5) в этом случае приводит к выражению

$$T(x_D, t_D=\infty) = (1-T_E)\exp\left[\frac{-2\lambda_2 x_D}{z_E \cdot u(\rho c)_{FI}}\right] + T_E \quad . \qquad (I6)$$

Уравнение (I6) показывает, что горизонтальная теплопроводность λ_1 не влияет на стационарное распределение температуры.

Учет изменения температуры на поверхности. В естественных условиях температура T_E на поверхности земли не постоянна, а меняется согласно временам года, т.е. $T_E = f(t)$. Такое изменение можно свести к рассмотренным выше уравнениям с помощью суперпозиции по времени.

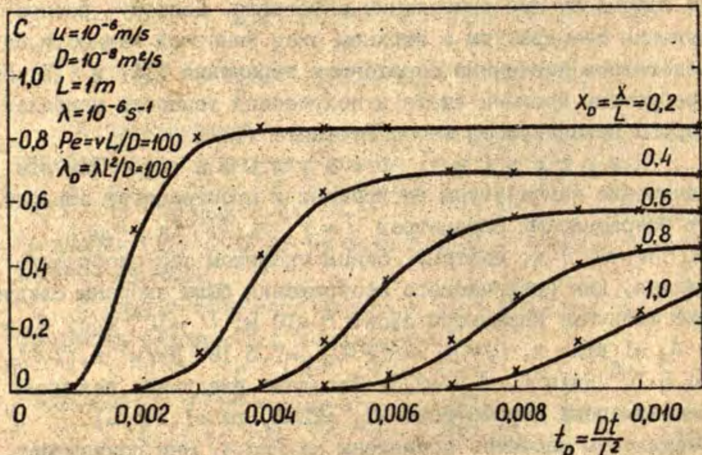

Рис.3в. Сравнение точного (-) и приближенного x решений.

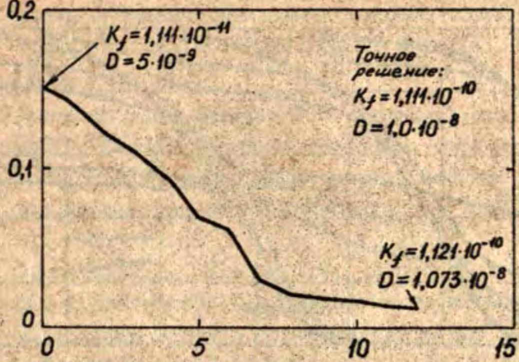

Рис.3с. Зависимость функционала f от числа итераций.

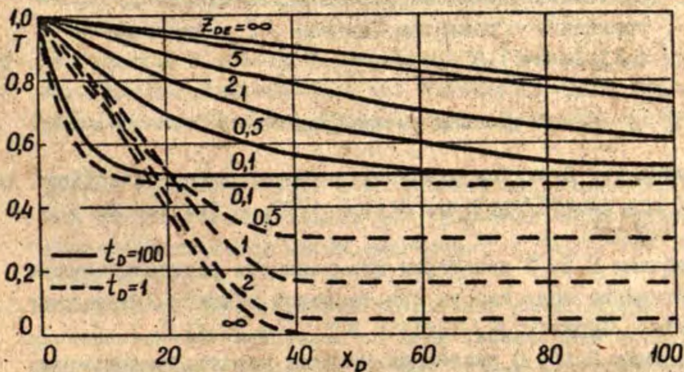

Рис.4. Безразмерная температура продуктивного пласта в зависимости от расстояния x_D для различных моментов времени и различных мощностей настилающих пород.

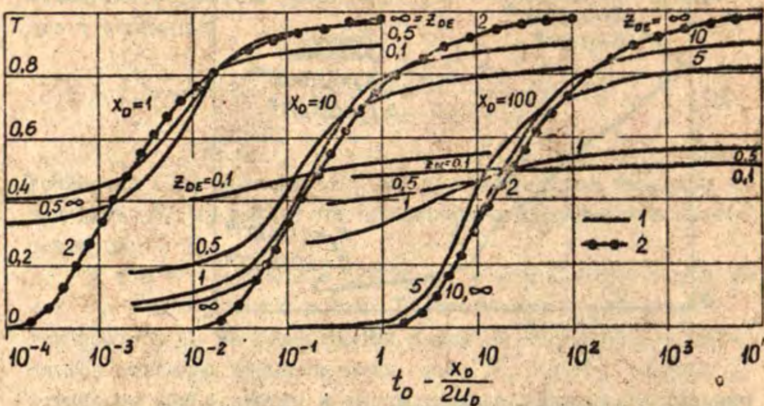

Рис.5. Безразмерная температура продуктивного пласта для различных мощностей настилающего слоя - I, сравнение с решением Ловерье - 2 и Авдонина ($z_{DE} = \infty$).

Список литературы

I. Lauwerier H.A. The transport of heat in an infection of hot fluid//Applied. Sci. - 1955. - Sec A.- No 5.- P.145-150.
2. Авдонин Н.А. О некоторых формулах для подсчета температурного поля пласта при тепловой инжекции//Известия ВУЗов. Серия НГ. - 1964. - № 3. - С.37-41.
3. Авдонин Н.А. О различных методах расчета температурного поля пласта при тепловой инжекции//Известия ВУЗов, Серия НГ. - 1964. - № 8. - С.39-46.
4. Буйкис А.А. Двухтемпературное поле в гетерогенной среде в приближении сосредоточенной емкости//Прикладные задачи теоретической и математической физики:Сб.науч.тр. - Рига: ЛГУ им. П.Стучки, 1977.- С.74-83.

5. Буйкис А.А., Кузьмишкина Н.В.Решение двух задач теплопроводности при краевых условиях сосредоточенной емкости //Прикладные задачи теоретической и математической физики:Сб. науч. тр. - Рига:ЛГУ им. П.Стучки, 1980.- С.85-90.

6. Carnahan C.L., Rehmer J.S. Nonequilibruim sorption with a linear sorption isotnerms durring mass transport through an infinite porous medium: some analytical solutions//Journal Hydrology.- 1984. - V,73.- P. 227-258.

7. Carnahan C.L., Miller C.W., Benson L.V. Verifocation and improvement of a preditive model for radionuclide migrations //Earth Sciences Divisions Annual Report. - Univercity Calif., 1981.

8. Chen C.S., Reddell D.I. Temperature distribution around a well during thermal injection and graphical technique for evaluating aquifer properties //Water Resources Research. - Washington 1983. -V.19. - N 2.- P.351-362.

9. Heidenreich H., Heeg W., Schünzel D. Gekoppeltes Massen-Impuls-Transpormodell auf Wanderpunktbasis//Regieanleitung Programm MITRA. - Leipzig-Freiberg, 1980.

10. Буйкис А.А.,Шмите М.З. О разностной аппроксимации одной некласcической задачи для уравнения теплопроводности.//Латвийский матем.ежегодник, 1982.- №26.- С.217-222.

11. Pinder G.F. A Galerkin-finite-element simulations of groundwater contamination on Long Island, New York.// Water Resources Research.-1973.- V.9.-N 6.-P.1657-1669.

12. Diersch H.J. Finite-element-Galerkin-Modell zur Simulation zwei-dimensionaler kovektiver und dispersiver Stofftransportprozesse im Boden//Acta Hydrophys.- Berlin, 1979.

13. Stehfest H. Numerical inversion of Laplase transforms //Comm.ACM,-1970. - V.13.- P.47-49.

УДК 532.546 626.841 517.946

Л.В.Веретехина,
Л.И.Демченко,
Г.Е.Мистецкий
Киевский государственный
университет

РАСЧЕТ НАПОРНОЙ ФИЛЬТРАЦИИ НА ФОНЕ СИСТЕМАТИЧЕСКОГО ГОРИЗОНТАЛЬНОГО ДРЕНАЖА

При проектировании дренажа на рисовых оросительных системах возникает проблема выбора параметров дренажа, обеспечивающих благоприятную почвенно-мелиоративную обстановку на полях. В частности, для вегетационного периода развития растений условия, накладываемые на водный режим на рисовых полях, сводятся к следующему: обеспечить равномерное распределение скорости фильтрации воды в корнеобитаемом слое почвы на всех участках чеков, затопленных водой при минимальном расходе воды в дрену. В настоящей работе на основании решения двумерной напорной задачи фильтрации, исследуются рациональные параметры систематического горизонтального дренажа для одно-, двух- и трехслойных грунтов.

Процессы фильтрации под затопленными рисовыми чеками в насыщенных изотропных грунтах на фоне систематического горизонтального дренажа (рис. I) описываются уравнением

$$\frac{\partial}{\partial x}\left(K_\phi \frac{\partial H}{\partial x}\right) + \frac{\partial}{\partial y}\left(K_\phi \frac{\partial H}{\partial y}\right) = 0, \quad \begin{matrix} x \in [0, L_1], \\ y \in [0, M] \end{matrix} \tag{1}$$

с граничными условиями

$$H\big|_{BC} = \ell, \quad H\big|_{DE} = -d \tag{2}$$

$$\frac{\partial H}{\partial x}\Big|_{AB} = \frac{\partial H}{\partial x}\Big|_{CD} = \frac{\partial H}{\partial x}\Big|_{EF} = \frac{\partial H}{\partial y}\Big|_{FA} = 0, \tag{3}$$

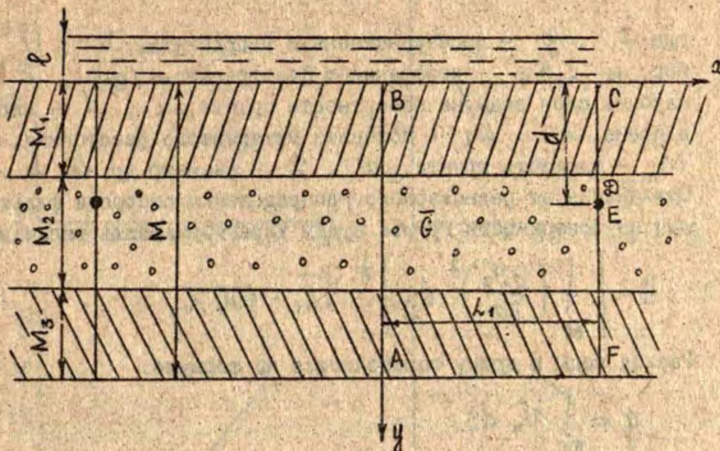

Рис.I Схема закрытого систематического горизонтального дренажа.

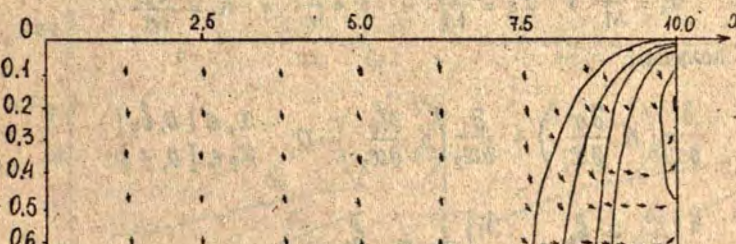

Рис.2 Гидродинамическая сетка притока воды к горизонтальной дрене.

Линии равных напоров: 1-h = -0.2 ; 2-h = 0.08 ;
3-h = 0.1 ; 4-h = 0.13 ;
5-h = 0.14.

где x, y - пространственные координаты, $м$; H - напор, $м$; $K_ф$ - коэффициент фильтрации $м/сут$, l - глубина слоя воды на поверхности грунта, $м$, d - напор в дрене, $м$, L_1 - половина междренного расстояния, $м$, M - мощность грунта, $м$, D - диаметр дрены, $м$. Отклонение от равномерного распределения скорости фильтрации по поверхности грунта будем характеризовать величиной

$$\sigma = \left[\int\limits_{BC} \left(\frac{\partial v_y}{\partial x} \right)^2 dx \right]^{\frac{1}{2}} \sqrt{L_1} \cdot 100\%. \qquad (4)$$

Расход воды в дрену определяется по формуле:

$$q = \int\limits_{DC} v_n \, dS. \qquad (5)$$

В задачах (I-3) сделаем замену переменной и, обозначив

$$x_1 = \frac{x}{M}, \quad x_2 = \frac{y}{M}, \quad h = \frac{H}{M}, \quad K = \frac{K_ф}{M},$$

получим:

$$\frac{\partial}{\partial x}\left(K \frac{\partial h}{\partial x_1}\right) + \frac{\partial}{\partial x_2}\left(K \frac{\partial h}{\partial x_2}\right) = 0, \quad \begin{matrix} x_1 \in [0, b_1] \\ x_2 \in [0, 1] \end{matrix}$$

$$h\Big|_{\widetilde{BC}} = b_4, \quad h\Big|_{\widetilde{DE}} = -b_2,$$

$$\frac{\partial h}{\partial x_1}\Big|_{\widetilde{AB}} = \frac{\partial h}{\partial x_1}\Big|_{\widetilde{CD}} = \frac{\partial h}{\partial x_1}\Big|_{\widetilde{EF}} = \frac{\partial h}{\partial x_2}\Big|_{\widetilde{FA}} = 0.$$

Здесь введены обозначения

$$b_1 = \frac{L_1}{M}, \quad b_2 = \frac{d}{M}, \quad b_3 = \frac{D}{M}, \quad b_4 = \frac{l}{M},$$

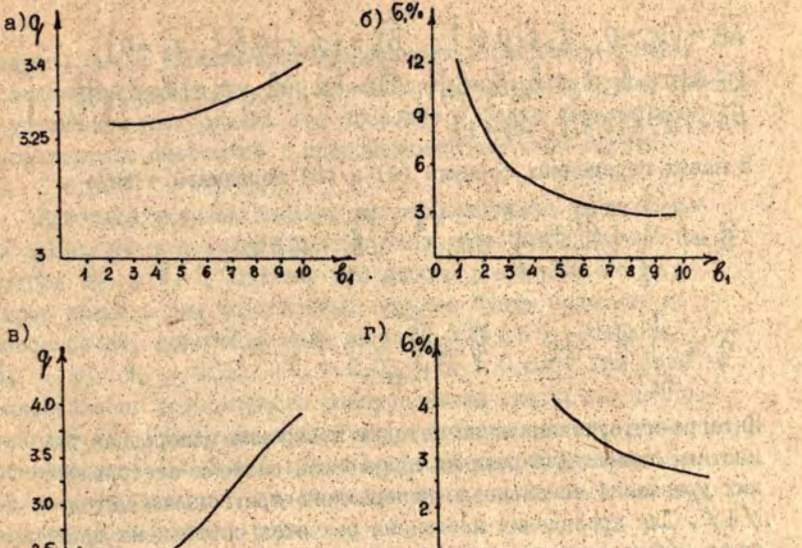

Рис.3 Зависимость расхода в дрену q и величины $б$ от параметров $в_1, в_2, в_3$ и $в_4$ для однослойного грунта.

$\widetilde{AB}=\{x_1=0,\ x_2\in[0,1]\}$, $\widetilde{BC}=\{x_1\in[0,b_1],\ x_2=0\}$,
$\widetilde{DE}=\{x_1=b_1, x_2\in[b_2, b_2+b_3]\}$, $\widetilde{CD}=\{x_1=b_1,\ x_2\in[b_2+b_3, 1]\}$,
$\widetilde{FA}=\{x_1\in[0,b_1],\ x_2=1\}$.

В новых переменных формулы (4) и (5) перепишем в виде

$$\tilde{\sigma}=\left(\int_0^{b_1}\left(\frac{\partial v_{x_2}}{\partial x_1}\right)^2 dx_1\right)^{\frac{1}{2}}\sqrt{b_1}\cdot 100\%,$$

$$\tilde{q}=\int_{\widetilde{DE}}\tilde{v}_n\, dS,\quad \tilde{v}=\frac{v}{K_\phi}.$$

Интегро-интерполяционным методом построена однородная разностная схема. Для решения полученной системы алгебраических уравнений использован попеременно-треугольный метод /I/. Для проведения численных расчетов составлена программа /2/ на языке Фортран. Будем изменять величины b_i, $i=\overline{1,4}$ в следующих пределах $0.5\le b_1\le 10$, $b_2\geqslant 0.1$, $0.01\le b_3\le 0.03$; $0.005\le b_4\le 0.2$. Справедливы неравенства: $b_2+b_3\le 1$, $b_2\le 1$, означающие, что дренаж находится в водоносной толще.

Анализ влияния параметров дренажа и водно-физических свойств грунта на расход воды в дрену и на степень отклонения от равномерного распределения скоростей в приповерхностном слое начнем с изучения однородно-изотропного грунта. Расчет на ЭВМ проводился для следующих значения параметров b_1 = 0,5; 2,5; 5,0; I0; b_2 = 0,I0; 0,I6; 0,24; b_3 = 0,0I; 0,02; 0,03; b_4 = 0,005; 0,0I5; 0,03. На рис.2 приведено направление скоростей и линии равных напоров при промывке однослойных грунтов для b_1 = I0, b_2 = 0,I6, b_3 = 0,03, b_4 = 0,0I5.

На рис. 3 а,б даны зависимости от междренного расстояния при заданной мощности грунта расхода воды $\tilde{q}$ в дрену и отклонения σ от равномерного распределения скоростей при b_2 = 0,I6, b_3 = 0,03, b_4 = 0,0I5. Из рис.3 а,в следует, что с увеличением междренного расстояния и глубины заложения дрены при той же мощности грунта расход в дрену увеличивается, однако это приводит к более равномерному распределению скоростей в приповерхностном слое грунта рис. 3 б,г.

Наиболее сильное влияние на равномерность распределения скоростей в подчековой зоне оказывают безразмерные параметры b_2 и b_1 . Поэтому при выборе рациональных параметров дренажа для однослойных грунтов будем исходить из зависимостей, представленных на рис. 3 б) и г). Положим $b_1 = 10$, $b_2 = 0,16$, $b_3 = 0,03$, $b_4 = 0,015$. При этом отклонение от равномерного распределения скоростей не превосходит 3%. Приведенные параметры дренажа обеспечивают оптимальную 0.003-0.005 м/сут скорость фильтрации воды в верхнем суглинистом слое почвы во всех участках чеков в вегетационный период риса.

При изучении фильтрации в двухслойных грунтах появляются параметры $b_5 = M_1/M$ и $b_6 = K_{ф_1}/K_{ф_2}$, где M_1 - мощность первого слоя, $K_{ф_1}$, $K_{ф_2}$ - коэффициенты фильтрации соответственно первого и второго слоя. При проведении численного эксперимента параметры b_i , $i = \overline{1,4}$ сохранялись такими же, как для оптимального варианта однослойного грунта. Параметр b_5 изменялся в пределах $0 \le b_5 \le 1$. Значения $b_5 = 0$ и $b_5 = 1$ соответствуют однослойному грунту, при этом $b_6 = 1$. В расчетах параметр b_6 полагался равным 0,01; 0,5; 2; 100. Первые два варианта соответствуют фильтрации в двухслойном грунте, верхний слой которого обладает меньшей дренированностью, чем нижний соответственно в 100 и 2 раза; последующих два варианта соответствуют случаю, когда коэффициент фильтрации подстилаемого пласта больше соответственно в 2 и 100 раз коэффициента фильтрации верхнего слоя. Из рис. 4 а) следует, что на расход в дрене влияет проводимость верхнего слоя. Если верхний слой грунта является более дренированным, то

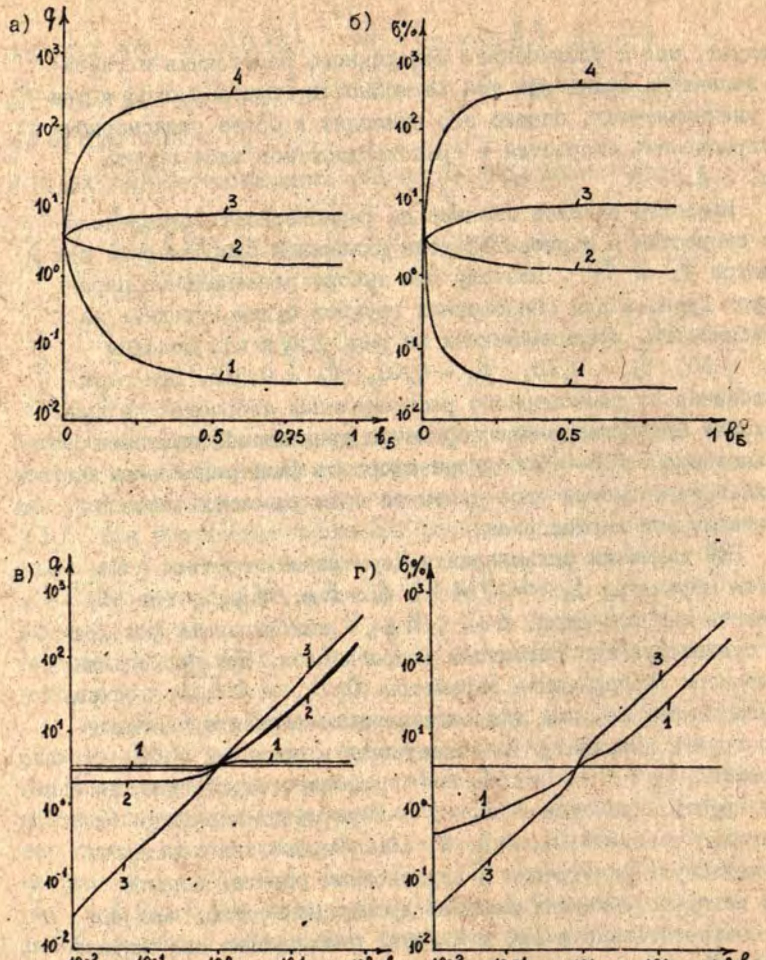

Рис.4 Зависимость расхода в дрену q и величины $б$ от параметров $b_б$ и $b_б$ двухслойного грунта
а),б) - 1 - $b_б$ = 0.01, 2 - $b_б$ = 0.5,
3 - $b_б$ = 2, 4 - $b_б$ = 100;
в),г) - 1 - b_5 = 0.015, 2 - $b_б$ = 0.5, 3 - b_5= 0.9

при увеличении мощности верхнего слоя до глубины заложения дренажа наблюдается увеличение расхода в дрену, а в противном случае расход в дрену уменьшается. Аналогично рис. 4 б) при более проницаемом верхнем слое наблюдается увеличение отклонения от равномерного распределения скоростей по поверхности грунта, а при менее проницаемом верхнем слое скорости фильтрации в чеках распределяются более равномерно. При $b_5 > b_2$ (если мощность верхнего слоя больше глубины заложения дренажа), влияние параметра b_5 на величины $\tilde{q}$ и $\tilde{\sigma}$ незначительно. Чем меньше величина параметра b_5 и чем ближе b_6 к I (рис.4 в),г), тем ближе характеристики $\tilde{q}$ и $\tilde{\sigma}$ приближаются к величинам $\tilde{q}$ и $\tilde{\sigma}$ для однослойных грунтов. Таким образом, если мощность первого слоя небольшая или грунты имеют близкие значения коэффициентов фильтрации, то можно ограничиться рассмотрением однослойных грунтов. Если нижний слой является менее проницаемым, т.е. $K_{\phi_1} \geqslant K_{\phi_2}$, то расход $\tilde{q}$ и величина $\tilde{\sigma}$ находятся в пределах (рис. 4 а),б):

$$q_{2,1} \leqslant \tilde{q} \leqslant q_{2,1} b_6 , \qquad \sigma_{2,1} \leqslant \tilde{\sigma} \leqslant \sigma_{2,1} b_6 ;$$

в противном случае (при $K_1 \leqslant K_2$) справедливы оценки:

$$q_{2,1} b_6 \leqslant \tilde{q} \leqslant q_{2,1} , \qquad \sigma_{2,1} b_6 \leqslant \tilde{\sigma} \leqslant \sigma_{2,1} ,$$

где $\tilde{q}_{2,1}$ и $\tilde{\sigma}_{2,1}$ - безразмерный расход и характеристика отклонения от равномерного распределения скоростей для однослойного грунта с коэффициентом фильтрации K_{ϕ_2} и мощностью M .

Если грунт состоит из 3 слоев, то появляются еще 2 параметра $b_7 = K_{\phi_3}/K_{\phi_2}$, $b_8 = M_2/M$,где K_{ϕ_3} - коэффициент фильтрации третьего слоя. Численные исследования проводились для следующих параметров: b_1 = I0, b_2 =0,I6; b_3 = 0,03; b_4 = 0,0I5; b_5 = 0,I; b_6 = 0,5, параметры b_7 , b_8 варьировались (рис.5). Пересечения линий на

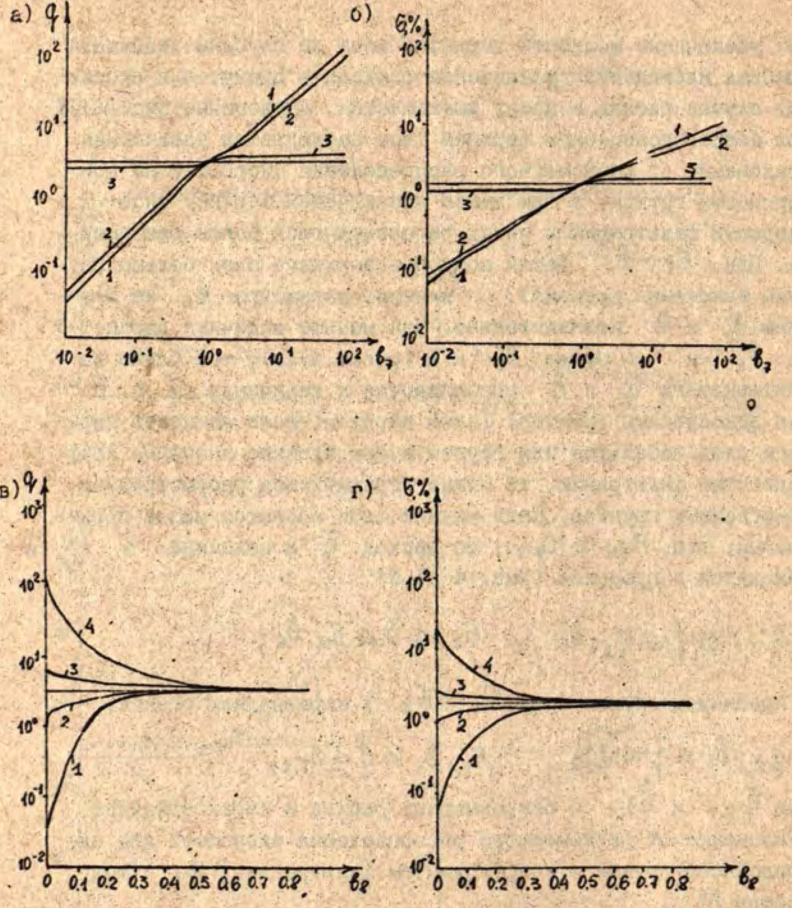

Рис.5 Зависимость расхода в дрену q и величины σ от параметров b_7 и b_8 трехслойного грунта

а),б) - I - $b_8 = 0$, 2 - $b_8 = 0.0I$, 3 - $b_8 = 0.8$;
в),г) - I - $b_7 = 0.0I$, 2 - $b_7 = 0.5$, 3 - $b_7 = 2$, 4 - $b_7 = I00$.

рис.5 а и 5 б соответствуют параметрам $\tilde{q}$ и $\tilde{\sigma}$ для двухслойного грунта $b_7 = 1$. Если $b_i = const$ $i = \overline{1,7}$, то зависимости $\tilde{q}$ и $\tilde{\sigma}$ от параметра b_8 имеют ассимптотический характер с ассимптотами, соответствующими характеристикам для двухслойного грунта с $K_{ф_1} = b_6$, $K_{ф_2} = 1$. Как видно из рис. 5 в),г), при $b_8 = 0$ значения $\tilde{q}$ и $\tilde{\sigma}$ совпадают со значениями $\tilde{q}$ и $\tilde{\sigma}$ для двухслойных грунтов с $K_{ф_1} = b_6$ и $K_{ф_2} = b_7$. Параметры $b_8 = 0$ и $b_7 = 1$ соответствуют двухслойным грунтам. Аналогично изменяется характеристика $\sigma(b_8)$.

Если между коэффициентом фильтрации слоев выполняются следующие неравенства $K_1 \geqslant K_2$, $K_3 \geqslant K_2$, $K_3 \geqslant K_1$, то границы изменения характеристик $\tilde{q}$ и $\tilde{\sigma}$ определяются следующим образом:

$$q_{2,2} \leq \tilde{q} \leq q_{2,2}\, b_7, \qquad \sigma_{2,2} \leq \tilde{\sigma} \leq \sigma_{2,2}\, b_7. \tag{6}$$

Если же выполняются неравенства $K_1 \geqslant K_2$, $K_3 \geqslant K_2$, $K_1 \geqslant K_3$, то соответственно

$$q_{2,2} \leq \tilde{q} \leq q_{2,2}\, b_6, \qquad \sigma_{2,2} \leq \tilde{\sigma} \leq \sigma_{2,2}\, b_6. \tag{7}$$

Здесь $q_{2,2}$ и $\sigma_{2,2}$ - безразмерные характеристики для двухслойного грунта с коэффициентами фильтрации $K_{ф_1} = b_6$ и $K_{ф_2} = 1$. Оценки вида (6) и (7) могут быть получены для любых соотношений между коэффициентами фильтрации слоев в трехслойных грунтах.

Список литературы

1. Самарский А.А., Николаев Е.С. Методы решения сеточных уравнений.- М.: Наука.-1978, 590 с.
2. Ляшко И.И., Демченко Л.И., Лычман В.В., Мистецкий Г.Е. Программа для решения задач фильтрации и влагопереноса при работе дренажа.- Киев, ИК АН УССР, 1985. Препринт 85-50.-С.22.

УДК 518:517.949

В.Ф.Демченко
Институт электросварки
им. О.Е.Патона АН УССР
Киев

РАЗНОСТНЫЕ СХЕМЫ НА ОБОБЩЕННЫХ РЕШЕНИЯХ ДВУХТОЧЕЧНОЙ КРАЕВОЙ ЗАДАЧИ ДЛЯ ОБЫКНОВЕННОГО ДИФФЕРЕНЦИАЛЬНОГО УРАВНЕНИЯ

I°. Введение. Рассмотрим двухточечную краевую задачу для обыкновенного дифференциального уравнения второго порядка

$$-(k(x)u'(x))' + q(x)u(x) = f(x), \quad \begin{array}{l} x \in [0,1], \\ u(0)=u(1)=0. \end{array} \tag{I}$$

Если $k(x) \in W^1_\infty(0,1)$, $q(x) = Q'(x)$, $f(x) = F'(x)$, где $Q(x) \in W^\lambda_p(0,1)$, $F(x) \in W^\lambda_p(0,1)$, $p \geq 2$, $0<\lambda<1$, и $q(x) \geq 0$, $0 < M_1 \leq k(x) < M_2 < \infty$, то существует и единственно /1/, /2/ обобщенное решение задачи (I) из $W^1_2(0,1)$. Дальнейшее ослабление требований, накладываемых на функцию $k(x)$, в постановке (I) оказывается невозможным, т.к. в интегральном тождестве

$$\int_0^1 k(x)u'(x)v'(x)dx + \int_0^1 q(x)u(x)v(x)dx = \int_0^1 f(x)v(x)dx, \ \forall v(x) \in \overset{\circ}{W}{}^1_2(0,1),$$

произведение $k(x)u'(x)$ становится неопределенным из-за ухудшения гладкости решения $u(x)$. В этом смысле выписанный выше вариант задания класса коэффициентов и, соответственно, допустимого класса решений является предельным для формулировки (I). Однако он может быть существенно расширен, если отказаться от (I) в пользу эквивалентной (для данного класса коэффициентов) формулировки задачи в виде системы уравнений первого порядка

$$\begin{cases} -W'(x) + q(x)u(x) = f(x) \\ u'(x) = \sigma(x)W(x), \end{cases} \quad x \in (0,1),\ u(0)=u(1)=0, \tag{2}$$

где $\sigma(x) = k^{-1}(x)$ имеет смысл удельного сопротивления переносу субстанции, $W(x)$ - удельный поток данной субстанции. Запись задачи в форме (2) является естественной с физической точки зрения, т.к. первое уравнение системы представляет собой закон сохранения субстанции, а второе - соответствующий феноменологический закон ее переноса по диффузионному механизму (законы Фурье, Фика, Дарси и т.п.). Важным преимуществом записи (2) является то, что в системе интегральных тождеств, соответствующих (2), удается исключить производные от искомых функций $U(x)$ и $W(x)$, благодаря чему класс функций $\sigma(x)$ может быть расширен.

2°. Существование и единственность обобщенного решения.

Будем пользоваться следующими определениями и понятиями /3/ :

$W_2^{-1}(0,1)$ - негативное пространство, полученное пополнением $L_2(0,1)$ по негативной метрике

$$\|\xi\|_- = \sup_{v \neq 0} \frac{|(\xi, v)_0|}{\|v\|_+}, \quad \xi(x) \in L_2(0,1), \quad v(x) \in W_2^1(0,1),$$

$\|\cdot\|_+$, $(\cdot\,,\cdot)_+$ - норма и скалярное произведение в $W_2^1(0,1)$, соответственно $\|\cdot\|_0$, $(\cdot\,,\cdot)_0$ - в пространстве $L_2(0,1)$;

$\langle v, \xi\rangle$ - билинейная форма, определенная /3/ $\forall\, v(x) \in W_2^1(0,1)$, $\xi \in W_2^{-1}(0,1)$.

$\mathcal{D}^+$ - оператор дифференцирования в смысле Соболева,

$\mathcal{D}^-$ - расширение по непрерывности ($\|\mathcal{D}^+ v\|_- \le \|v\|_0$, $v \in L_2(0,1)$) оператора $\mathcal{D}^+$ на все $L_2(0,1)$ /4/;

i^+ - оператор интегрирования (в смысле Лебега), переводящий элемент $g(x) \in L_2(0,1)$ в элемент $v(x) \in W_2^1(0,1)$, аннулирующийся при $x=0$

$$v(x) = i^+ g = \int_0^x g(x)\,dx$$

i^- - расширение по непрерывности ($\|i^+_* y\|_0 \le \|y\|_-$, $y(x) \in L_2(0,1)$) оператора i^+_* на все $W_2^{-1}(0,1)$, где i^+_* - оператор интегрирования, сопряженный в смысле теории гильбертовых пространств оператору i^+, т.е.

$$i^+_* = \int_x^1 y(x)\,dx\,; \quad y(x) \in L_2(0,1).$$

В рамках этих обозначений сформулируем две задачи для системы (2).

Задача I

$$\begin{cases} \mathcal{D}^+ w + qu = f\,, & \sigma(x) \in W_2^{-1}(0,1),\ f(x) \in L_2(0,1), \\ \mathcal{D}^- u = \sigma w & q(x) \in L_2(0,1), \end{cases} \qquad (3)$$

Ограничения: $|\langle \sigma, 1\rangle| \geq C_1 > 0$, $\langle \sigma, i^+\eta\, i^+ q\eta\rangle \geq 0$, $\forall \eta(x) \in L_2(0,1)$. Будем говорить, что функция $u(x) \in \mathring{L}_2(0,1)$, если $\forall v(x) \in W_2^1(0,1)$ справедливо равенство

$$\langle \mathcal{D}^- u, v\rangle = (u, \mathcal{D}^+ v)_0. \qquad (4)$$

Задача 2

$$\begin{cases} \mathcal{D}^- w + qu = f\,, & k(x) \in W_\infty^1(0,1),\ f(x) \in W_2^{-1}(0,1), \\ k\mathcal{D}^+ u = w & q(x) \in W_2^{-1}(0,1),\ u(0) = u(1) = 0, \end{cases} \qquad (5)$$

ограничения: $0 < M_1 \leq k(x) \leq M_2$, $q(x) \geq 0$.

Теорема I. Задача I однозначно разрешима в классе функций $u(x) \in \mathring{L}_2(0,1)$, $w(x) \in W_2^1(0,1)$.

Доказательство. Из первого уравнения системы (3) найдем $w(x) = i^+(f - qu) + w_0$, где $w_0 = w(0)$. После исключения $w(x)$ из второго уравнения получим

$$\mathcal{D}^- u = \sigma i^+(f - qu) + w_0 \sigma. \qquad (6)$$

Понимая (6) как равенство функционалов, определенных /4/ на элементах $W_2^{-1}(0,1)$, запишем

$$\langle \mathcal{D}^- u, v\rangle = \langle \sigma, v i^+(f - qu)\rangle + w_0 \langle \sigma, v\rangle \quad \forall v(x) \in W_2^1(0,1). \qquad (7)$$

Для определения неизвестной постоянной W_0 достаточно потребовать, чтобы равенство (7) выполнялось $\forall v(x)-C=const$.

Тогда

$$W_0=-\langle \sigma, i^+(f-qu)\rangle\cdot S_0^{-1}, \; S_0^{-1}=\langle\sigma,1\rangle.$$

Выберем $v(x)$ в виде $v(x)=i^+\eta$, где $\eta(x)$ – любая функция из $L_2(0,1)$, и перепишем (7) в виде $A[u,\eta]=\ell(\eta)$.

Здесь $A[u,\eta]=(u,\eta)_0+\langle \sigma i^+\eta i^+ qu\rangle$ – билинейная форма, $\ell(\eta)=\langle \sigma, i^+\eta(i^+f+W_0)\rangle$ – линейная форма. Нетрудно проверить, что $A[u,u]\geq\|u\|_0^2$, что означает коэрцитивность билинейной формы. Покажем непрерывность $A[u,\eta]$.

Имеем $|A[u,\eta]|\leq\|u\|_0\cdot\|\eta\|_0+\|\sigma\|_-\cdot\|i^+(qu)\|_+\|i^+\eta\|_+$. Так как $\|i^+g\|_+\leq\|g\|_0 \; \forall g(x)\in L_2(0,1)$, то $\|i^+qu\|_+\leq\|q\|_0\|u\|_0$ и $\|i^+\eta\|_+\leq\|\eta\|_0$, следовательно,

$$A[u,\eta]\leq M\cdot\|u\|_0\cdot\|\eta\|_0, \quad M=1+\|\sigma\|_-\|q\|_0.$$

Оценим линейную форму

$$|\ell(\eta)|\leq\|\sigma\|_-\|i^+\eta(i^+f+W_0)\|_0\leq\|\sigma\|_-\|\eta\|_0(|W_0|+\|f\|_0).$$

Если $u(x)\in L_2(0,1)$, то $|W_0|$ ограничена. Действительно, $\|W_0\|\leq C_1^{-1}\|\sigma\|_-(\|f\|_0+\|q\|_0\cdot\|u\|_0)$. Отсюда следует ограниченность функционала $\ell(\eta)$, следовательно, выполнены все условия, требуемые в теореме Лакса-Мильграмма /5/.

Теорема доказана.

Теорема 2. Задача 2 однозначно разрешима в классе функций $W(x)\in L_2(0,1)$, $u(x)\in \overset{\circ}{W}{}_2^1(0,1)$.

Доказательство. Система (5) эквивалентна уравнению второго порядка в обобщенных производных

$$\mathcal{D}^-(k\mathcal{D}^+u)+qu=f. \tag{8}$$

Под обобщенным решением уравнения (8) с однородными граничными условиями первого рода будем понимать функцию $u(x) \in \overset{\circ}{W}{}_2^1(0,1)$, удовлетворяющую $\forall \eta(x) \in \overset{\circ}{W}{}_2^1(0,1)$ интегральному соотношению

$$(\kappa D^+u,\ D^+\eta)_\cdot + \langle q,\ u\eta\rangle = \langle f,\ \eta\rangle.$$

Образуем билинейную форму $A[u,\eta] = (\kappa D^+u, D^+\eta)_\cdot + \langle q, u, \eta\rangle$. Из неравенств $|A[u,\eta]| \le M_2 \|u\|_+ \cdot \|\eta\|_+$ и $A[u,u] \geqslant M\|u\|_+$, $(M = 2/3\, M_1)$ следует непрерывность и коэрцитивность билинейной формы. Так как функционал $\ell(\eta) = \langle f,\eta\rangle$ в силу неравенства $|\langle f,\eta\rangle| \le \|f\|_- \|\eta\|_+$ непрерывен, то из теоремы Лакса-Мильграмма вытекает однозначная разрешимость задачи 2.

3°. Разностные схемы.

Рассмотрим расширенный отрезок $[-\Delta, 1+\Delta]$, $\Delta > 0$. Доопределим нулями вне $[0,1]$ функции $u(x)$, $q(x)$, $f(x)$, $6(x)$ и продолжим по непрерывности функцию $W(x)$ на отрезки $[-\Delta, 0]$ и $[1, 1+\Delta]$. Таким образом, продолжение функций $u(x)$ и $W(x)$ являются обобщенным решением системы (3) с соответствующим набором продолженных коэффициентов $6(x)$, $q(x)$, $f(x)$.

Пусть $\Delta = h$, $W_h = \{x_i = ih,\ i = \overline{-1, N+1}\}$ - равномерная сетка, покрывающая отрезок $[-h, 1+h]$ с шагом h. Построим разностную схему для задачи I. Выберем конечные последовательности функций $\eta_i(x) \in L_2[-h, 1+h]$, $v_i(x) = i^+\eta_i(x)$, $v_i(x) \in W_2^1[-h, 1+h]$, $i = \overline{0,}$

$$\eta_i(x) = \begin{cases} -h^{-1}, & x \in [x_i, x_{i+1}], \\ h^{-1}, & x \in [x_{i-1}, x_i], \\ 0, & x \notin (x_{i-1}, x_{i+1}). \end{cases}$$

Из (7) при $\eta(x) = \eta_i(x)$ и $\eta(x) = \eta_{i+1}(x)$ получим

$$-a_i \bar{u}_{\bar{x},i} = W_0 + a_i \varphi_i, \quad -a_{i+1}\bar{u}_{x,i} = W_0 + a_{i+1}\varphi_{i+1}, \tag{9}$$

где $a_i = [h^{-1}\langle 6, v_i\rangle]^{-1}$; $\varphi_i = h^{-1}\langle 6, v_i\, i^+(f - qu)\rangle$;

$$\bar{u}_i = \frac{1}{h}\int_{x_i}^{x_{i+1}} u(x)\,dx, \quad \bar{u}_{\bar{x},i} = \frac{\bar{u}_i - \bar{u}_{i-1}}{h}, \quad \bar{u}_{x,i} = \frac{\bar{u}_{i+1} - \bar{u}_i}{h}.$$

Имеем

$$\|z\|_{C^{(h)}} \le 2\left(\sum_{k=0}^{N} h|R_k| + \sum_{k=0}^{N} h a_k^{-1} \left|\sum_{i=0}^{k-1} h \psi_{d,i}\right|\right). \qquad (14)$$

Обозначим $\mathcal{F}(x) = i^{+} f \in W_2^1(0,1)$. Пусть $\sigma_m(x)$ - фундаментальная в $W_2^{-1}(0,1)$ последовательность функций из $L_2(0,1)$, такая, что $\sigma(x) = \lim_{m\to\infty} \sigma_m(x)$, $\mathcal{B}_k^{(m)} = h^{-1}(\sigma_m, v_k(\mathcal{F}(x) - \mathcal{F}(x_k)))_0$.

Последовательность $\mathcal{B}_k^m$, $(m = 1, 2, \ldots)$ является фундаментальной числовой последовательностью, т.к.

$$|\mathcal{B}_k^{(m)} - \mathcal{B}_k^{(n)}| \le h^{-1} \|\sigma_m - \sigma_n\|_- \|v_k\|_+ \|\mathcal{F}(x) - \mathcal{F}(x_k)\|_+$$

следовательно, существует $\lim_{m\to\infty} \mathcal{B}_k^{(m)}$, который по определению /3/ билинейной формы совпадает с $\mathcal{B}_k$.

Так как функция $\mathcal{F}(x)$ абсолютно непрерывна, то для нее справедливо условие Липшица $|\mathcal{F}(x) - \mathcal{F}(x_k)| \le M_k |x - x_k|$, где $0 < M_k < \infty$. Оценим $\mathcal{B}_k^{(m)}$

$$|\mathcal{B}_k^{(m)}| \le \frac{M_k}{h^2}\left\{\int_{x_{k-1}}^{x_k} \sigma_m(x)|x - x_k||x - x_{k-1}|dx + \int_{x_k}^{x_{k+1}} \sigma_m |x_{k+1} - x||x - x_k| dx\right\} \le M_k \int_{x_{k-1}}^{x_{k+1}} \sigma_m(x) dx$$

Из этого неравенства следует оценка

$$\sum_{k=0}^{N} h|\mathcal{B}_k^{(m)}| \le M^* h \int_0^1 \sigma_m(x) dx = M^* h (1, \sigma_m)_0,\ M^* = \max M_k,\ k = \overline{0, N}.$$

Переходя к пределу при $m \to \infty$, получим

$$\sum_{k=0}^{N} h\, |\mathcal{B}_k| \le M^* h \langle 1, \sigma \rangle \le M^* \|\sigma\|_- h.$$

Совершенно аналогично устанавливается оценка $\sum_{k=0}^{N} h|G_k|$, поэтому

$$\sum_{k=0}^{N} h|R_k| \le M h, \qquad (15)$$

Из (9) следует разностное соотношение

$$-(a\bar{u}_{\bar{x}})_{x,i}+\varphi_{q,i}=\varphi_{f,i}+(a\mathcal{B})_{x,i}-(aG)_{x,i},\ i=\overline{0,N-1} \qquad (10)$$

Здесь $\mathcal{B}_i=h^{-1}\langle 6,v_i\int\limits_{x_i}^{x} f(s)ds\rangle$, $G_i=h^{-1}\langle 6,v_i\int\limits_{x_i}^{x} qu\,ds\rangle$,

$$\varphi_{f,i}=\frac{1}{h}\int\limits_{x_i}^{x_{i+1}} f(x)dx, \qquad \varphi_{q,i}=\frac{1}{h}\int\limits_{x_i}^{x_{i+1}} q(x)u(x)dx.$$

Примем во внимание, что функция $u(x)$ продолжена нулем вне $[0.1]$, поэтому

$$\bar{u}_{-1}=\bar{u}_N=0. \qquad (11)$$

При $q(x)=0$ из (10), (11) следует точная схема

$$-(a\bar{u}_{\bar{x}})_x=\varphi_{f,i}+(a\mathcal{B})_{x,i},\quad \bar{u}_{-1}=\bar{u}_N=0.$$

Аппроксимируем $\varphi_{q,i}$ следующим образом $\varphi_{q,i}\approx d_i\bar{u}_i$, где $d_i=\frac{1}{h}\int\limits_{x_i}^{x_{i+1}} q(x)dx$. Рассмотрим разностную схему

$$-(ay_{\bar{x}})_{x,i}+d_iy_i=\varphi_{f,i},\ i=\overline{0,N-1};\ y_1=y_N=0. \qquad (12)$$

Обозначим $z_i=y_i-\bar{u}_i$. Сеточная функция z_i является решением задачи

$$-(az_{\bar{x}})_{x,i}+d_iz_i=\psi_i,\ i=\overline{0,N-1},\ z_{-1}=z_N=0, \qquad (13)$$

где $\psi_i=(aR)_{x,i}+\psi_{d,i}$, $R_i=\mathcal{B}_i+G_i$, $\psi_{d,i}=\varphi_{q,i}-d_i\bar{u}_i$.

Представим z в виде: $z=w+p$, где w и p - сеточные функции, являющиеся решением задач /6/

$$-(aw_{\bar{x}})_x=\psi,\ w_{-1}=w_N=0,\ -(ap_{\bar{x}})_x+dp=dw,\ p_1=p_N=0.$$

Оценим w и p, используя априорные оценки из /6/

$$|w|_{C^{(h)}}\le\sum_{k=0}^{N}\frac{h}{a_k}\left|\sum_{i=0}^{k}h\psi_i\right|;\ \|p\|_C^{(h)}\le\|w\|_C^{(h)},\ \text{где } \|w\|_C^{(h)}=\max|w_i|,$$
$$i=\overline{0,N},$$

где M - некоторая положительная постоянная, $M<\infty$. Пусть $\tilde{u}_h(x)$ - кусочно-постоянное восполнение /7/ сеточной функции $\bar{u}=\{u_i, i=\overline{-1,N}\}$. Тогда

$$\left|\sum_{i=0}^{K-1} h\psi_{d,i}\right| \le \int_0^1 q(x)|u(x)-\tilde{u}_h(x)|dx \le \|q\|_0 \|u(x)-\tilde{u}_h(x)\|_0 .$$

Остается оценить $\sum_{i=0}^{N-1} h a_i^{-1}$. Имеем:

$$\sum_{i=0}^{N-1} h a^{-1} = \sum_{i=0}^{N-1} \langle \sigma, v_i \rangle \le \|\sigma\|_- . \tag{16}$$

В соответствии с леммой 4.I работы /7/ $\forall g(x)\in L_2(0,1)$ $\|g(x)-\tilde{g}_h(x)\|_0 \to 0$ при $h\to 0$. Поэтому из (I4) - (I6) следует, что $\|z\|_{C^{(h)}} \to 0$ при $h\to 0$. Тем самым доказана

Теорема 3. Разностная схема (I2) равномерно сходится на обобщенном решении задачи I из $L_2(0,1)$.

Замечание I. При выводе разностных соотношений (9) накладывалось ограничение $\langle \sigma, v_i\rangle \ne 0$, $i=\overline{0,N}$, которое не требовалось при доказательстве теоремы существования и единственности. В априорной оценке (I4) и оценках погрешностей аппроксимации (I5), (I6) это ограничение не требовалось, таким образом результаты теоремы 3 остаются в силе, если $\sigma(x)=0$, $x\in[c,d]$, $[c,d]\in[0,1]$. В указанном случае форму записи разностной схемы целесообразно подчинить записи (3) исходной дифференциальной задачи, выписав систему разностных уравнений первого порядка, и для их решения использовать метод потоковой прогонки /6/.

Замечание 2. При $q(x)=0$ разностная схема (I2) имеет первый порядок точности.

Для задачи 2 имеет место следующее разностное соотношение:

$$-(a u_{\bar{x}})_x + h^{-1}\langle q, u\eta_i\rangle = h^{-1}\langle f, \eta_i\rangle, \quad i=\overline{1,N-1},$$

где $u_i = u(x_i)$. Пробные функции $\tilde{\eta}_i(x)$ и коэффициенты a_i определяются по аналогии с /8/, с. 87. Положив $\langle q, u\tilde{\eta}_i\rangle \approx u_i \langle q, \tilde{\eta}_i\rangle$, получим разностную схему

$$-(a y_{\bar{x}})_x + d_i y_i = \varphi_i, \quad i=\overline{1,N-1}, \quad y_0 = y_N = 0. \tag{17}$$

где $d_i = h^{-1}\langle q, \tilde{\eta}_i\rangle, \quad \varphi_i = h^{-1}\langle f, \tilde{\eta}_i\rangle.$

Сеточная функция $z = \{z_i = y_i - u_i, \ i=\overline{1,N-1}\}$ является решением уравнения (13) с граничными условиями $z_0 = z_N = 0$ и правой частью $\psi = h^{-1}\langle q, (u-u_i)\tilde{\eta}_i\rangle$. Для нее справедлива априорная оценка

$$\|z\|_{C^{(h)}} \le \sum_{k=1}^{N-1} h a_k^{-1} \left|\sum_{i=1}^{k-1} h \psi_i\right|. \tag{18}$$

Из ограничений, накладываемых на коэффициент $k(x)$, получаем

$$0 < a_k^{-1} \le M_1, \quad \tilde{\eta}_i(x) \le \frac{M_1}{M_2} V_i(x), \quad i=\overline{1,N-1}. \tag{19}$$

Теорема 4. Разностная схема (17) имеет первый порядок точности, и верна оценка $\|y-u_h\|_{C^{(h)}} \le Mh$, где $M = const > 0$,

$u_h = \{u(x_i), \ i=\overline{0,N}\}$.

Для доказательства теоремы рассмотрим последовательность $g_m(x) \in L_2(0,1)$, фундаментальную по метрике $W_2^{-1}(0,1)$. Заменим в (18) $g(x)$ на $g_m(x)$ и учтем, что $u(x) \in W_2^1(0,1)$. Тогда

$$\left|\sum_{i=1}^{N-1}\left(g_m,(u-u_i)\cdot V_i\right)_0\right| \le \bar{M}h\int_0^1 g_m(x)\,dx,\ \bar{M}=const.$$

Переходя в этом неравенстве к пределу при $m\to\infty$ и учитывая (19), получим: $\|\chi\|_c \le \bar{M}\|q\|_- h$, что и доказывает результат, сформулированный в теореме.

Список литературы

1. Макаров В.Л., Самарский А.А. Применение точных разностных схем к оценке скорости сходимости метода прямых // Журн. вычисл. математики и мат. физики.- 1980.- т. 20, - № 2.- с.371-387.
2. Ладыженская О.А., Уральцева Н.И. Линейные и квазилинейные уравнения эллиптического типа.- М.: Наука, 1973 .- 576 с.
3. Ляшко И.И., Диденко В.П., Цитрицкий О.Е. Фильтрация шумов.- Киев: Наукова думка, 1979.- 232 с.
4. Березанский Ю.М. Разложение по собственным функциям самосопряженных операторов. - Киев: Наукова думка, 1965. - 798 с.
5. Ректорис К. Вариационные методы в математической физике и технике.- М.: Мир, 1985.- 589 с.
6. Самарский А.А. Теория разностных схем.- М.: Наука, 1977, - 656 с.
7. Ладыженская О.А. Краевые задачи математической физики.- М.: Наука,- 1973.- 407 с.
8. Марчук Г.И. Методы вычислительной математики.- М.: Наука, 1980.- 534 с.

УДК 532.546+517.94

А.А.Буйкис,
М.З.Шмите
ЛГУ им.П.Стучки

ПОСТАНОВКИ С ОСРЕДНЕНИЕМ ДЛЯ ОПИСАНИЯ ПРОЦЕССОВ ПЕРЕНОСА В СЛОИСТЫХ ПЛАСТАХ

Эффективные математические модели для описания процессов переноса в многослойных пластах представляют большой практический интерес, так как подавляющее большинство реальных пластов имеют именно такое строение. На практике встречаются как ситуации, когда продуктивные (основные) пропластки непосредственно соприкасаются между собой, так и ситуации, когда между ними расположены перемычки (разделяющие слои).

Проблема моделирования слоистости пластов мало зависит от физических особенностей процесса (от того, рассматривается ли тепло- или массоперенос, и от геометрии потока в плоскости пласта), поэтому для краткости изложения мы ограничимся исследованием двумерной плоскопараллельной задачи миграции подземных вод с учетом горизонтальной конвекции и поперечной диффузии /1/-/3/. При отсутствии разделяющих слоев принято вместо многослойной задачи рассматривать однослойный пласт со средними характеристиками /2/-/4/. В нашей работе /5/, а также в /6/ дана другая постановка, позволяющая учитывать слоистость пласта. Она основана на использовании интегрального параболического сплайна (ИПС) /7/. Для моделирования пласта с разделяющими слоями наибольшее распространение получила схема Мятиева-Гиринского /1/-/3/, согласно которой выписывается лишь система уравнений для основных (водоносных) слоев.

В этой статье будет показано, что возможно обобщение схемы Мятиева-Гиринского: когда на основе ИПС выписываются уравнения для основных слоев с принятием линейного распределения концентрации по мощности разделяющих слоев. Кроме того, будет указано также, как методика работ /5/, /6/ может быть применена для пластов с разделяющими слоями.

Выпишем сперва постановку без осреднения, ср.с /8/. Начнем с уравнений для основных пропластков и разделяющих слоев:

$$m_i \frac{\partial c_i}{\partial t} = D_i \frac{\partial^2 c_i}{\partial z^2} - w_i \frac{\partial c_i}{\partial x}, \; x>0, \; z_i < z < z_{i+1/2}, \; i=\overline{0,N}, \tag{I}$$

$$m_{i+1/2} \frac{\partial c_{i+1/2}}{\partial t} = D_{i+1/2} \frac{\partial^2 c_{i+1/2}}{\partial z^2}, \; x>0, \; z_{i+1/2} < z < z_{i+1}, \; i=\overline{0,N-1}, \tag{2}$$

к которым должны добавляться условия сопряжения на линиях $z = z_i$:

$$c_{i-1/2} = c_i, \; D_{i-1/2} \frac{\partial c_{i-1/2}}{\partial z} = D_i \frac{\partial c_i}{\partial z}, \; i = \overline{1,N}, \tag{3}$$

такие же условия сопряжения на линиях $z = z_{i+1/2}$, $i=\overline{0,N-1}$, начальные условия:

$$c_i\Big|_{t=0} = c_i^{(0)}(x,z), \; c_{i+1/2}\Big|_{t=0} = c_{i+1/2}^{(0)}(x,z), \tag{4}$$

условия для нижнего и верхнего слоев:

$$\left(D_0 \frac{\partial c_0}{\partial z} - \lambda_0 c_0\right)\Big|_{z=z_0} = -\varphi_0(x,t), \; \left(D_N \frac{\partial c_N}{\partial z} + \lambda_1 c_N\right)\Big|_{z=z_{N+1}} = \varphi_1(x,t) \tag{5}$$

и условия на входах основных пропластков:

$$c_i\Big|_{x=0} = c_i^{(1)}(z,t). \tag{6}$$

Обозначим через $H_i = z_{i+1/2} - z_i$, $i=\overline{0,N}$, $(z_{N+1/2}=z_{N+1})$ мощности основных пропластков, через $H_{i+1/2} = z_{i+1} - z_{i+1/2}$, $i = \overline{0,N-1}$ – мощности разделяющих слоев и перейдем к формулировке схемы Мятиева-Гиринского. Основные предположения ее (см./I/-/3/,/9/): I) концентрация в основных слоях не зависит от z : $c_i(x,z,t) = u_i(x,t)$ 2) в разделяющих слоях концентрация меняется линейно по z (другими словами, левая часть уравнения (2) заменяется нулем). Таким обрзэом, в итоге вместо постановки (I)-(6) получаем:

$$m_i \frac{\partial u_i}{\partial t} = -w_i \frac{\partial u_i}{\partial x} + \alpha_i^+(u_{i+1} - u_i) + \alpha_i^-(u_{i-1} - u_i), \; i=\overline{0,N}, \tag{7}$$

$$u_i\Big|_{t=0} = \tilde{c}_i^{(0)}(x), \tag{8}$$

$$u_i\Big|_{x=0} = \tilde{c}_i^{(1)}(t). \tag{9}$$

Здесь $\alpha_i^- = D_{i-1/2} H_i^{-1} H_{i-1/2}^{-1}, i=\overline{1,N}, \alpha_i^+ = \alpha_{i+1}^- H_{i+1} H_i^{-1}, i=\overline{0,N-1},$

$$\alpha_0^- = \begin{cases} \lambda_0 H_0^{-1}, \lambda_0 \neq 0, \\ H_0^{-1}, \lambda_0 = 0, \end{cases} \alpha_N^+ = \begin{cases} \lambda_1 H_N^{-1}, \lambda_1 \neq 0, \\ H_N^{-1}, \lambda_1 = 0, \end{cases} \tag{10}$$

Фигурирующие в (7) неизвестные u_{-1} и u_{N+1} определяются так:

$$u_{-1} = \begin{cases} \lambda_0^{-1} \Phi_0, \lambda_0 \neq 0, \\ u_0 + \Phi_0, \lambda_0 = 0, \end{cases} u_{N+1} = \begin{cases} \lambda_1^{-1} \Phi_1, \lambda_1 \neq 0, \\ u_N + \Phi_1, \lambda_1 = 0. \end{cases} \tag{11}$$

Наконец, $\tilde{c}_i^{(0)}(x)$ и $\tilde{c}_i^{(1)}(t)$ являются некоторыми средними по z от $c_i^{(0)}(x,z)$ и $c_i^{(1)}(z,t)$.

Рассмотрим теперь упомянутое выше обобщение схемы Мятиева-Гиринского, основанное на введении $u_i(x,t)$ - средней интегральной по мощности i -го основного слоя концентрации:

$$u_i(x,t) = H_i^{-1} \int_{z_i}^{z_{i+1/2}} c_i(x,z,t)\,dz, \ i=\overline{0,N}. \tag{12}$$

Для этого будем аппроксимировать концентрации по z следующими выражениями:

$$\begin{aligned} c_i(x,z,t) &= \overline{u}_i + \overline{m}_i(z-\overline{z}_i) + \frac{e_i}{D_i H_i}(z-\overline{z}_i)^2, \ i=\overline{0,N}, \\ c_{i+1/2}(x,z,t) &= \overline{u}_{i+1/2} + \overline{m}_{i+1/2}(z-\overline{z}_{i+1/2}), \ i=\overline{0,N-1}, \end{aligned} \tag{13}$$

где $\overline{z}_i = z_i + 0.5H_i$, $\overline{z}_{i+1/2} = z_{i+1/2} + 0.5H_{i+1/2}$, а зависящие от x и t коэффициенты $\overline{u}_i$, $\overline{m}_i$, e_i, $\overline{u}_{i+1/2}$, $\overline{m}_{i+1/2}$ должны трактоваться как неизвестные коэффициенты сплайна. Используя для их нахождения по аналогии с работой /7/ условия сопряжения (3) при $z = z_i$, $z = z_{i+1/2}$, условия (5) и (12), все можно свести к системе уравнений относительно неизвестных e_i, $i=\overline{0,N}$. Для них, так же как в /7/, можно получить представление

$$e_i = \sum_{j=0}^{N+1} \alpha_{i,j}(u_{j-1}-u_j)\,\mathrm{sgn}(i-j+0.5), \tag{14}$$

где u_{-1} и u_{N+1} определены из (11). Вспомогательные коэффициенты $\alpha_{i,j}$ могут быть найдены для каждого фиксированного $j=\overline{0,N+1}$ как решение следующей системы уравнений:

$$\begin{cases} \alpha_{-1,j} = \alpha_{N+1,j} = 0, \\ A_i \alpha_{i-1,j} + C_i \alpha_{i,j} + B_i \alpha_{i+1,j} = 0, \ i = \overline{0,N}, \ i \neq j-1, \ i \neq j, \\ A_i \alpha_{i-1,j} + C_i \alpha_{i,j} - B_i \alpha_{i+1,j} = F_i^+, \ i = j-1, \\ -A_i \alpha_{i-1,j} + C_i \alpha_{i,j} + B_i \alpha_{i+1,j} = F_i^-, \ i = j. \end{cases} \tag{15}$$

Здесь

$$\begin{gathered} A_i = G_{i-1}(G_i + 2G_{i+1/2} + G_{i+1}), \ B_i = G_{i+1}(G_i + 2G_{i-1/2} + G_{i-1}), \\ C_i = A_i + B_i + D_i, \ D_i = (G_i + G_{i-1/2} + G_{i-1})(G_i + G_{i+1/2} + G_{i+1}) + \\ + 2[G_{i+1/2}(G_i + 2G_{i-1/2} + G_{i-1}) + G_{i-1/2}(G_i + 2G_{i+1/2} + G_{i+1})], \\ F_i^- = 3(G_i + 2G_{i+1/2} + G_{i+1}), \quad F_i^+ = F_{i-1}^-, \end{gathered} \tag{16}$$

где $G_\gamma = H_\gamma D_\gamma^{-1}$ для $\gamma = i = \overline{0,N}$ и $\gamma = i+1/2, \ i = \overline{0,N-1}$. Кроме того $G_{-1/2} = G_{N+1/2} = 0$, а

$$G_{-1} = \begin{cases} 2\lambda_0^{-1}, \ \lambda_0 \neq 0, \\ 2 - G_0, \ \lambda_0 = 0, \end{cases} \quad G_{N+1} = \begin{cases} 2\lambda_1^{-1}, \ \lambda_1 \neq 0, \\ 2 - G_N, \ \lambda_1 = 0. \end{cases} \tag{17}$$

Наконец, надо учесть, что при $\lambda_0 = 0$ коэффициент $A_0 = D_0 - 4G_{1/2}$, при $\lambda_1 = 0$ коэффициент $B_N = D_N - 4G_{N-1/2}$, а остальные коэффициенты вычисляются по общим формулам (16). Заметим, что при $z_{i+1/2} \to z_{i+1}, \ i = \overline{0,N-1}$ все формулы (15)-(17) переходят в выражения для ИПС из /7/.

Использование методики работ /5/,/6/: интегрирование уравнений (1) по z с последующей аппроксимацией потоков выражениями (13),(14) позволяет записать обобщение схемы Мятиева-Гиринского в таком виде:

$$m_i \frac{\partial u_i}{\partial t} = -w_i \frac{\partial u_i}{\partial x} + \frac{2}{H_i} \sum_{j=0}^{N+1} \alpha_{i,j}(u_{j-1} - u_j) + g_n(i-j+0.5), \quad i = \overline{0,N}, \tag{18}$$

$$u_i|_{t=0} = u_i^{(0)}(x), \tag{19}$$

$$u_i|_{x=0} = u_i^{(1)}(t), \tag{20}$$

где $u_i^{(0)}(x)$, $u_i^{(1)}(t)$ являются средними, согласно (12), величинами от $c_i^{(0)}(x,z)$, $c_i^{(1)}(z,t)$.

Подчеркнем, что в отличие от постановки (7)-(9) Мятиева-Гиринского, в постановке (18)-(20) могут обращаться в ноль любое число разделяющих слоев, при этом из формул (16) автоматически исчезают лишь соответствующие величины $G_{i\pm 1/2}$. Приведем, наконец, еще одно обобщение постановки (7)-(9), при котором для разделяющих слоев применяется та же аппроксимация I-ой формулой (13), как для основных слоев. Тогда многослойный пласт должен рассматриваться как состоящий из $2N+1$-го пропластка: $i=\overline{0,2N}$, без разделяющих слоев (все $G_{i\pm 1/2}=0$). Таким образом, все сводится к постановке (18)-(20) для $i=\overline{0,2N}$, в которой для пропластков с нечетными номерами $w_i=0$, для них отсутствуют также условия (20).

Нами было проведено сравнение постановок (7)-(9) и (18)-(20) между собой (описание разностной схемы дано в /5/,/6/), когда в трехслойном пласте с выбранными параметрами отношение коэффициентов диффузии разделяющих и основных слоев составляет приблизительно 10^{-4}. Для всех представляющий практический интерес мощностях разделяющих слоев обе постановки дают весьма близкие результаты. Однако при малых мощностях отдельных разделяющих слоев для устойчивого счета по постановке (7)-(9) требуется выбрать существенно меньший временной шаг.

Заметим в заключение, что вывод о близости результатов по обеим постановкам не может быть автоматически перенесен на задачи теплопереноса, так как в этом случае коэффициенты теплопроводности основных и разделяющих слоев есть величины одного порядка.

Список литературы

1. Развитие исследований по теории фильтрации в СССР.-М.: Наука,1969.-546 с.

2. Лукнер Л., Шестаков В.М. Моделирование геофильтрации. -М.: Недра,1976.-407 с.
3. Мироненко В.А. Динамика подземных вод.-М.: Недра,1983. -358 с.
4. Фрид Ж. Загрязнение подземных вод.-М.: Недра, 1981.- 304 с.
5. Буйкис А.А., Шмите М.З. Анализ постановок класса задач геотермодинамики для слоистых пластов//Деп. в ЛАТИНТИ 13.02.1986.-79 А-Д 86.-10 с.
6. Буйкис А.А. Решение задач тепломассопереноса для слоистых сред при помощи интерполирующих в среднем сплайнов//Материалы Международной школы семинара. Ч.2: Математические модели, аналитические и численные методы в теории переноса /Под рук. А.А.Самарского.- Минск,1986.-С.141-147.
7. Буйкис А.А. Вычисление коэффициентов интегрального параболического сплайна//Латв. математический ежегодник, 1986.- №30.- С.228-232.
8. Буйкис А.А., Шмите М.З. Разностные схемы для процессов переноса в многослойных пластах// Прикладные задачи математической физики /Отв. ред. Н.А.Авдонин.- Рига:ЛГУ им. П.Стучки, 1983.- С.53-66.
9. Мятиев А.Н. Напорный комплекс подземных вод и колодцы//Изв. АН СССР.ОТН.-1947.- № 9.-С.1069-1088.
10. Гиринский Н.К. Некоторые вопросы динамики подземных вод.//Гидрогеология и инженерная геология, 1947.- №9.- 102с.

УДК 621.382

С.А.Абашкина, Я.С.Римшанс
ВЦ ЛГУ им. П.Стучки, Рига

МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ СТАЦИОНАРНЫХ, ОДНОМЕРНЫХ ПРОЦЕССОВ В БИПОЛЯРНЫХ ГЕТЕРОТРАНЗИСТОРНЫХ СТРУКТУРАХ В ДИФФУЗИОННО-ДРЕЙФОВОМ ПРИБЛИЖЕНИИ

Полупроводниковые гетероструктуры представляют значительный интерес как перспективные компоненты современных интегральных схем. В последнее время интенсивно развивается численное моделирование гетеропереходных биполярных транзисторных структур на основе как кинетических подходов /2,3/, так и при помощи фундаментальной системы уравнений физики полупроводников /1,4/.

Выбор математической модели, описывающей процессы переноса заряда в гетероструктурах, довольно сложен. В диффузионно-дрейфовом приближении развитие получил подход /4/, который основан на аналогии гетеропереходных структур со структурами, обладающими пространственной неоднородностью энергетических зон, вызванной сильным легированием.

В настоящей работе, на основе подхода /4/, построена математическая модель гетеропереходов, описывающая зонную структуру, и вырождение носителей заряда при помощи двух величин - эффективной собственной концентрации и асимметрии сужения ширины запрещенной зоны. Построена разностная схема и приведены результаты вычислений для $Al_xGa_{1-x}As$-$GaAs$ гетеропереходной транзисторной структуры.

В диффузионно-дрейфовом приближении система уравнений, описывающая перенос заряда в гетероструктуре, может быть представлена следующим образом:

$$\frac{d}{dz}\left(\varkappa\frac{d\varphi}{dz}\right)=n-p-N\ , \qquad (1)$$

$$\frac{dJ_n}{dz}=R\ , \qquad (2)$$

$$\frac{dJ_p}{dz}=-R\ , \qquad (3)$$

$$J_n=\mu_n\left[-n\left(\frac{d}{dz}(\varphi+w)+\frac{d}{dz}\ln n_{ie}\right)+\frac{dn}{dz}\right], \qquad (4)$$

$$J_p=-\mu_p\left[p\left(\frac{d}{dz}(\varphi+w)-\frac{d}{dz}\ln n_{ie}\right)+\frac{dp}{dz}\right], \qquad (5)$$

$$R=(np-n_0p_0)\left(\frac{1}{\tau_n(p+\sqrt{n_0p_0})+\tau_p(n+\sqrt{n_0p_0})}+C_p p+C_n n\right), \qquad (6)$$

$$n_{ie}=\sqrt{np\exp(-(f_n+f_p))}\ , \qquad (7)$$

$$w=\frac{1}{2}\left[\ln\frac{n}{p}+(f_p-f_n)\right], \qquad (8)$$

$$n=\int_{-\infty}^{\infty}\frac{\rho_n d\varepsilon}{1+\exp(\varepsilon-f_n)}\ , \qquad (9)$$

$$p=\int_{-\infty}^{\infty}\frac{\rho_p d\varepsilon}{1+\exp(\varepsilon-f_p)}\ . \qquad (10)$$

Система уравнений (I)-(I0) записана в безразмерном виде. Обозначения такие же, как в работе /5/. Уравнения (I)-(I0) замыкаются соответствующими краевыми условиями, сформулированными на основе предположений о равновесии и зарядовой нейтральности приконтактных областей структуры /5/. В случае гомопереходных структур система дифференциальных уравнений (I)-(I0) сводится к рассмотренной и численно реализованной в работах /5,6/. Выражения для плотностей электронного и дырочного токов (4)-(5) учитывают пространственную неоднородность энергетических зон при помощи эффективной собственной концентрации n_{ie} и асимметрии сужения ширины запрещенной зоны w . Предложенный в настоящей работе метод численного решения системы уравнений (I)-(I0) позволяет осуществлять моделирование гетероструктур, заданных при помощи различных моделей энергетических зон. В каждом рассматриваемом случае необходимо вычислить величины n_{ie} и w по формулам (7)-(I0). Величины n_{ie} и w определяются функциями плотности состояний ρ_n и ρ_p , а также химическими потенциалами электронов и дырок f_n и f_p . В ряде случаев выражения для n_{ie} и w имеют простой вид.

В случае слаболегированных полупроводниковых структур функции плотности состояний выражаются в виде известных параболических функций. С учетом статистики Больцмана из выражений (7)-(I0) получаем:

$$n_{ie}=(m_e^* m_h^*)^{\frac{3}{4}} exp(-\varepsilon_G) , \tag{II}$$

$$w=\frac{3}{4}\ln(m_e^*/m_h^*)+(\varepsilon_G^*-\varepsilon_G)+\delta E_v , \tag{I2}$$

где m_e^* , m_h^* - эффективные массы электронов и дырок, ε_G - полуширина запрещенной зоны беспримесного полупроводника, δE_v - разность энергий границ валентных зон полупроводника, рассматриваемого и взятого за основу с полушириной запрещенной зоны ε_G^* .

В случае задания структуры энергетических зон при помощи сродства электрону и ширины запрещенной зоны полупроводника ε_g , имеем:

$$n_{ie}=(m_e^* m_h^*)^{\frac{3}{4}} exp(-\varepsilon_g/2) , \tag{I3}$$

$$w=\frac{3}{4}\ln\left(\frac{m_e^*}{m_h^*}\right)+\frac{1}{2}(2\chi+\varepsilon_g) . \tag{I4}$$

Известно /5/, что одним из наиболее важных вопросов численного решения системы дифференциальных уравнений (I)-(I0) является вопрос построения разностной схемы для уравнений непрерывности электронов и дырок (2), (3), т.к. после подстановки выражений (4),(5) в уравнения непрерывности (2),(3) получаем уравнения эллиптического типа, коэффициенты которых зависят от электрического потенциала φ, как правило, резко меняющегося в окрестности pn-переходов. Необходимо также учитывать, что искомые решения имеют большой разброс значений в активных областях структуры. В случае моделирования гетероструктур задача осложнена еще и следующими обстоятельствами. Величины m_e^*, m_h^*, $\mathcal{E}_G$, $\mathcal{E}_g$, $\varkappa$, фигурирующие в уравнениях (I)-(I0), могут быть разрывными функциями на границах раздела различных полупроводниковых материалов. При построении разностной схемы для уравнений (2)-(3) в точках границ раздела необходимо учитывать разрывный характер величин n_{ie} и ϖ. В /5/ показано, что условиям аппроксимации и точности на грубых сетках наиболее удовлетворяют разностные схемы экспоненциального типа, впервые полученные Шарфеттером и Гуммелем /7/. Таким же образом, как в /5/, на основе интегроинтерполяционного метода /8/, построим разностные схемы экспоненциального типа для уравнений непрерывности (2)-(3), учитывая разрывной характер величин n_{ie} и ϖ.

В дальнейшем, не теряя общности, будем считать, что точки разрыва величин n_{ie} и ϖ совмещены с узлами разностной сетки

$$\varpi_h = \{ z_i \in [0,L], \quad 0 \leq i \leq M \},$$

$$z_0 = 0, \quad z_M = L,$$

$$z_{i+1} = z_i + h_{i+1}, \qquad i = 0,1,\dots,M-1,$$

$$z_{i+1/2} = z_i + h_{i+1}/2, \quad i = 0,1,\dots,M-1.$$

Примем за правило, что все разрывные величины, фигурирующие в коэффициентах разностных схем, принимают свое левостороннее значение, если они обозначены знаком "-", и правостороннее значение,—если они обозначены знаком "+".

Начнем построение разностной схемы с уравнения непрерывности для электронов. Введем замену переменной:

$$n = n_{ie} \exp(\psi) u , \quad \psi = \varphi + \omega . \tag{15}$$

Тогда из выражения (4) для плотности электронного тока:

$$J_n = \mu_n n_{ie} \exp(\psi) \frac{du}{dz} . \tag{16}$$

Проинтегрируем уравнение (2) в пределах от $z_{i-1/2}$ до $z_{i+1/2}$, полагая при этом

$$R = \begin{cases} R_i^- = const, & z \in [z_{i-1/2}, z_i], \\ R_i^+ = const, & z \in [z_i, z_{i+1/2}]. \end{cases}$$

Имеем:

$$(J_n)_{i+1/2} - (J_n)_{i-1/2} = \frac{1}{2}\left(h_{i+1} R_i^+ + h_i R_i^-\right). \tag{17}$$

Для нахождения $(J_n)_{i+1/2}$ проинтегрируем выражение (16) в пределах от z_i до z_{i+1}, при этом считая, что

$$(J_n)_{i+1/2} = J_n(z_{i+1/2}) = const ,$$

$$\left(\frac{d\psi}{dz}\right)_{i+1/2} = \frac{\psi_{i+1}^- - \psi_i^+}{h_{i+1}} = const .$$

После несложных преобразований находим:

$$(J_n)_{i+1/2} = \frac{(\mu_n)_{i+1/2} (n_{ie})_{i+1/2} (\psi_{i+1}^- - \psi_i^+) \exp(\psi_{i+1}^-)}{h_{i+1} \left(\exp(\psi_{i+1}^- - \psi_i^+) - 1\right)} (u_{i+1} - u_i). \tag{18}$$

Таким же образом может быть найдено выражение для $(J_n)_{i-1/2}$. Из выражения (18) оно получается формальной заменой индекса i на $i-1$. Подставляя найденные значения $(J_n)_{i+1/2}$ и $(J_n)_{i-1/2}$ в уравнение баланса (17), получаем следующую разностную схему:

$$(\Lambda_n(\varphi)u)_i = a_{i+1}u_{i+1} - (a_{i+1}+a_i)u_i + a_i u_{i-1} = \\ = \frac{1}{2}(h_{i+1}R_i^+ + h_i R_i^-), \tag{19}$$

$$a_i = \frac{(\mu_n)_{i-1/2}(n_{ie})_{i-1/2}(\psi_i^- - \psi_{i-1}^+)\exp(\psi_i^-)}{h_i(\exp(\psi_i^- - \psi_{i-1}^+)-1)}. \tag{20}$$

Разностная схема для уравнения непрерывности (3) может быть получена аналогичным образом, при помощи замены переменной:

$$p = n_{ie}\exp(-\psi)v. \tag{21}$$

Она имеет вид:

$$(\Lambda_p(\varphi)v)_i = b_{i+1}v_{i+1} - (b_{i+1}+b_i)v_i + b_i v_{i-1} = \\ = \frac{1}{2}(h_{i+1}R_i^+ + h_i R_i^-), \tag{22}$$

$$b_i = \frac{(\mu_p)_{i-1/2}(n_{ie})_{i-1/2}(\psi_{i-1}^+ - \psi_i^-)\exp(-\psi_i^-)}{h_i(\exp(\psi_{i-1}^+ - \psi_i^-)-1)}. \tag{23}$$

Разностная схема для уравнения Пуассона (I) хорошо известна /8/ и может быть записана в виде

$$(\Delta^h\varphi)_i = c_{i+1}\varphi_{i+1} - (c_{i+1}+c_i)\varphi_i + c_i\varphi_{i-1} = \\ = \frac{1}{2}(h_{i+1}Q_i^+ + h_i Q_i^-), \tag{24}$$

$$c_i = \frac{\varkappa_{i-1/2}}{h_i}, \quad Q_i = n_i - p_i - N_i. \tag{25}$$

В результате получаем нелинейную систему разностных уравнений для определения величин φ, u и v:

$$(\Delta^h\varphi)_i = \frac{1}{2}(h_{i+1}Q_i^+ + h_i Q_i^-), \tag{26}$$

$$(\Lambda_n(\varphi)u)_i = \frac{1}{2}(h_{i+1}R_i^+ + h_i R_i^-), \tag{27}$$

$$(\Lambda_p(\varphi)v)_i = \frac{1}{2}(h_{i+1}R_i^+ + h_i R_i^-). \tag{28}$$

Для ее решения применялся известный итерационный метод Гуммеля /9/. Итерационный процесс был организован таким же образом, как в работе /6/. На каждой итерации, после определения величин φ, u и v, концентрации электронов и дырок вычислялись по формулам (15) и (21). После этого, так же, как в /6/, из соотношений (9), (10) находились химические потенциалы f_n и f_p. По известным значениям n, p, f_n и f_p по формулам (7), (8) определялись величины n_{ie}, w. В случае задавания n_{ie} и w на основе более простых моделей (11)-(14) нет необходимости осуществлять пересчет величин n_{ie} и w. В коэффициентах разностной схемы (20), (23) эти величины считаются известными физическими параметрами.

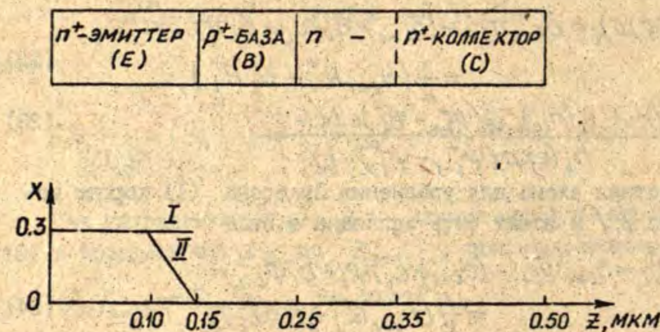

Рис.1. Схематическое изображение $Al_xGa_{1-x}As$-$GaAs$ структуры.

Расчеты проводились для двух (I, II) $Al_xGa_{1-x}As$-$GaAs$ гетеропереходных биполярных транзисторных структур, с различным содержанием мольной доли x алюминия в эмиттере. Размеры структур и распределение x приведены на рис.1. Для возможности сравнения с результатами моделирования, полученными в работе /3/, вычисления велись с n_{ie} и w, заданными по формулам (13)-(14). Концентрация примеси в n^+ эмиттере и n^+ коллекторе была равна $5\cdot10^{17}$ см$^{-3}$, в p^+ базе - $2\cdot10^{18}$ см$^{-3}$, в n коллекторе - $1\cdot10^{16}$ см$^{-3}$. Параметры зонной структуры, подвижность и времена жизни носителей заряда для $GaAs$ были взяты из /10/, для $Al_xGa_{1-x}As$ - из работ /3,4/. Время счета одной точки вольтамперной характеристики на сетке 40 узлов составляло 0,5-30 сек. Расчеты проводились на ЭВМ ЕС-1060. Результаты расчета I транзистора представлены на рис.2-3.

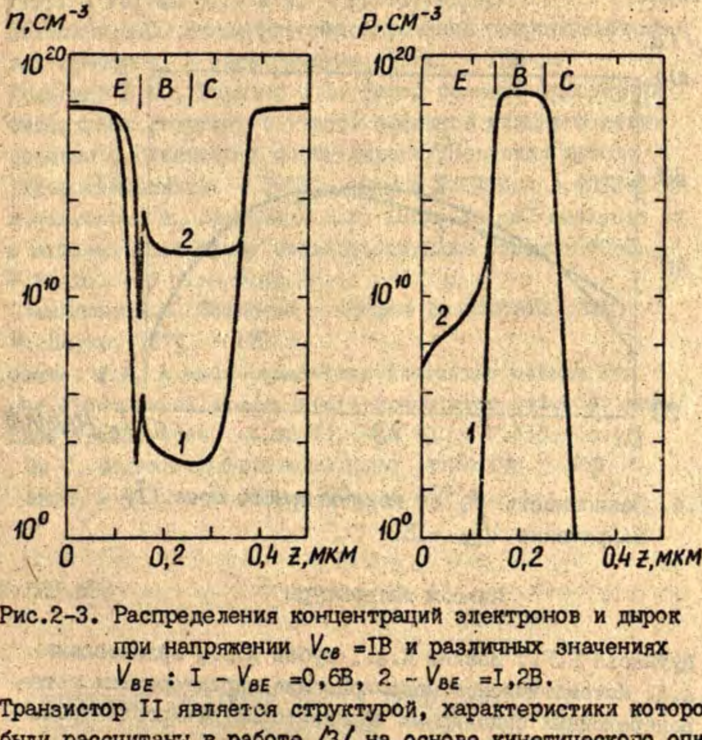

Рис.2-3. Распределения концентраций электронов и дырок при напряжении V_{CB} =1В и различных значениях V_{BE} : 1 - V_{BE} =0,6В, 2 - V_{BE} =1,2В.

Транзистор II является структурой, характеристики которой были рассчитаны в работе /3/ на основе кинетического описания переноса для электронов.

На рис.4 изображена полученная в работе /3/ зависимость граничной частоты усиления по току от плотности коллекторного тока, кривая I, кривая 2 на этом же рисунке дает зависимость f_T от тока, полученную нами по диффузионно-дрейфовой модели. Как следует из рис.4, результаты, полученные по диффузионной-дрейфовой модели и более общей модели из /3/, хорошо совпадают между собой.

В заключение авторы считают приятным долгом выра - зить признательность Б.С.Польскому за полезное обсуждение работы.

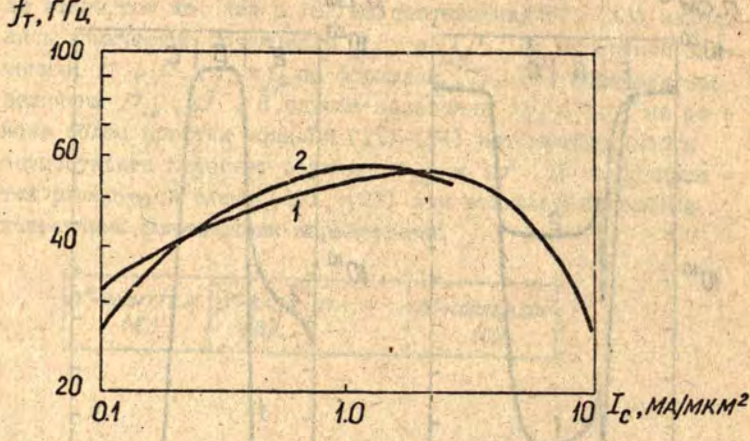

Рис.4. Зависимость f_T от коллекторного тока I_C. Напряжение V_{CB} =IB.

Список литературы

I. Бутакова Н.Г., Валиев К.А., Зубов А.В., Орликовский А.А. Математическое моделирование характеристик гетеропереходных биполярных транзисторов//Микроэлектроника.- I985. - Т.I4. - № 4. - С.337-346.

2. Баннов Н.А., Рыжий В.И., Святченко А.А. Численное моделирование нестационарных электронных процессов в n-p$^+$-n биполярных гетеротранзисторах//Доклады АН СССР. - I986. - Т.287. - № 6. - С.I368-I373.

3. Tomizawa K., Hashizume N. Method of Monte Carlo simulation for submicron heterojunction devices//Proc.NASECODE IV conf./Ed. by J.J.H.Miller. - Dublin Boole Press, 1985. - P.98-107.

4. Lundstrom M.S., Schuelke R.J. Numerical analysis of heterostructure semiconductor devices//IEEE Trans. - 1983. - Vol.ED-30.- N 9. - P.1151-1159.
5. Польский Б.С. Численное моделирование полупроводниковых приборов. - Рига:Зинатне, 1986. - 168 с.
6. Польский Б.С., Римшанс Я.С. Метод расчета одномерных биполярных структур с учетом эффектов сильного легирования и статистики Ферми-Дирака//Известия вузов. Радиоэлектроника. - 1982. - Деп.в ВИНИТИ - № 4273-82.
7. Scharfetter D.L., Gummel H.K. Large-signal analysis of a silicon Read diode oscillator//IEEE Trans.- 1969. - V.ED-16. - N 1. - P.64-77.
8. Самарский А.А. Введение в теорию разностных схем. - М.:Наука, 1971. - 552 с.
9. Gummel H.K. A self-consistent iterative scheme for one dimensional steady-state transistor calculations// IEEE Trans.-1964. -V.ED-11. - N 10. - P.455-465.
10. Зи С. Физика полупроводниковых приборов. - Пер. с англ. - Т.I. - М.:Мир, 1984. - 455 с.

УДК 519.633

А.И.Шур
РНИИМП, Рига

ДВУМЕРНЫЙ ЧИСЛЕННЫЙ АНАЛИЗ ПЕРЕХОДНЫХ ПРОЦЕССОВ В МОП-ТРАНЗИСТОРЕ

I. Уменьшение минимальных топологических размеров компонентов интегральных схем - транзисторов при создании схем большой степени интеграции, делает необходимым развитие точных моделей полупроводниковых приборов, адекватно описывающих физические процессы в них. С уменьшением характерных размеров транзисторов упрощенные математические модели, пренебрегающие рядом эффектов, не описывают с надлежащей точностью работу электронных приборов. С другой стороны, экспериментальный подход в проектировании интегральных схем, связанный с изготовлением тестовых структур, требует больших материальных затрат и времени. Как следствие этих тенденций в моделировании полупроводниковых приборов сложился подход, связанный с численным решением на ЭВМ системы уравнений физики полупроводников, состоящей из уравнения Пуассона для потенциала электрического поля и двух уравнений непрерывности для электронов и дырок /4/. При этом, как правило, предполагается справедливость статистики Больцмана для носителей заряда, полная ионизация легирующей примеси, постоянство температуры в рассматриваемой области. Эффекты, связанные с нарушением этих допущений, моделируют с помощью введения эмпирических зависимостей параметров, например, таких как сужение ширины запрещенной зоны /4,5/ (эффекты сильного легирования), эмпирической зависимости подвижности носителей в канале МОП-транзистора от составляющих поля /9/ и т.д.

В настоящее время имеется большое количество работ, посвященных математическому моделированию как биполярных, так и МОП-транзисторов в одномерном, двумерном и даже трехмерном случае. Обзор этих работ приведен в /4,8/. Однако большинство из них относится к исследованию стационарных процессов и лишь меньшая часть - изучению переходных, что связано с большими вычислительными трудностями при решении нестационарных задач.

В работе /6/ была предложена эффективная, полунеявная абсолютно-устойчивая разностная схема. В данной работе метод, предложенный в /6/ и использованный для исследования переходных процессов в биполярных приборах, применяется для моделирования нестационарных процессов в МОП-транзисторе.

2. Система уравнений, описывающая нестационарные процессы переноса заряда в МОП-транзисторе состоит из уравнения Пуассона для потенциала электрического поля(φ) и двух уравнений непрерывности для электронов (n) и дырок (p):

$$\Delta\varphi = -\frac{\rho}{\varepsilon\varepsilon_0}\ ; \qquad \rho = q(p - n + N_d - N_a) \tag{1}$$

$$-\frac{\partial n}{\partial t} + div\,\vec{J}_n = R - G \tag{2}$$

$$\frac{\partial p}{\partial t} + div\,\vec{J}_p = G - R \tag{3}$$

с выражениями для плотностей токов

$$\vec{J}_n = q(D_n \nabla n - \mu_n n \nabla\varphi) \tag{4}$$

$$\vec{J}_p = -q(D_p \nabla p + \mu_p p \nabla\varphi). \tag{5}$$

Уравнение (I) решается в области полупроводника и диэлектрика, причем в области диэлектрика плотность объемного заряда ρ полагается равной 0. Уравнения переноса (2)-(3) решаются в области полупроводника. Величины, входящие в правую часть (2)-(3), R -скорость рекомбинации, G - скорость генерации носителей заряда. R определяется с учетом рекомбинации на дефектах (модель Шокли-Холла-Рида) /I/:

$$R = (pn - n_i^2)\left(\frac{1}{\tau_n(p+n_i) + \tau_p(n+n_i)}\right)\ ; \tag{6}$$

в (6) τ_n, τ_p - времена жизни носителей заряда, n_i - собственная концентрация носителей заряда. G - определяется процессами лавинного умножения носителей в больших электрических полях /7/. Коэффициенты диффузии D_n, D_p связаны с подвижностями μ_n, μ_p в (4)-(5) соотношением Эйнштейна:

$$D_n = \frac{kT}{q}\mu_n\ , \quad D_p = \frac{kT}{q}\mu_p\ .$$

Для подвижности μ_n, μ_p , являющейся нелинейной функцией суммарной концентрации примеси N и составляющих поля, используется модель, предложенная в /9/.

Сформулируем граничные условия для задачи (I)-(5). Геометрия моделируемого МОП-транзистора приведена на рис. I.

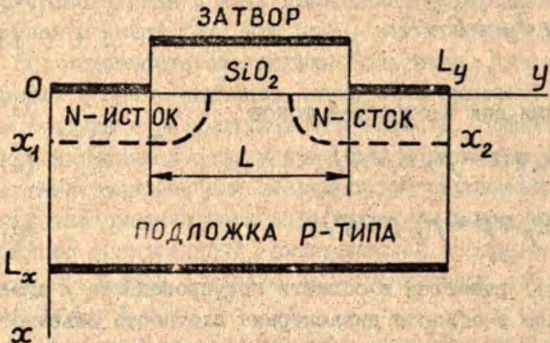

Рис.I

Для потенциала на контактах металл-полупроводник и металл-окисел задаются значения φ . На границе раздела $Si - SiO_2$ выполняется условие:

$$\varepsilon_{SiO_2} \frac{\partial \varphi}{\partial x} = \varepsilon_{Si} \frac{\partial \varphi}{\partial x} . \tag{7}$$

На остальных участках границы нормальная компонента электрического поля полагается равной 0. Для концентрации электронов и дырок на контактах задаются равновесные значения, а на свободной границе n и p определяются из условия равенства 0 нормальной компоненты электрического тока.

Условие (7) для потенциала на границе раздела Si - SiO_2 может быть заменено более грубой аппроксимацией, а именно: уравнение Пуассона решается только в области полупроводника со следующим граничным условием:

$$-\varepsilon_{SiO_2}\frac{U_з-\varphi}{d_{ox}}=\varepsilon_{Si}\frac{\partial\varphi}{\partial x}\cdot \tag{8}$$

$U_з$ - напряжение на затворе, d_{ox} - толщина окисла.

Таким образом задача моделирования нестационарных процессов в МОП-транзисторе сводится к решению нелинейной системы уравнений:

$$\Delta\varphi=-\frac{\rho}{\varepsilon\varepsilon_0} \tag{9}$$

$$L_n(\varphi)\equiv div(D_n\nabla n-\mu_n n\nabla\varphi)=\frac{\partial n}{\partial t}+R-G \tag{10}$$

$$L_p(\varphi)\equiv div(D_p\nabla p+\mu_p p\nabla\varphi)=\frac{\partial p}{\partial t}+R-G \tag{11}$$

с соответствующими краевыми и начальными условиями.

3. Для решения поставленной задачи была использована полунеявная абсолютно-устойчивая схема /6/. В ней, помимо основных уравнений (9)-(II), используется дополнительное уравнение неразрывности для полного тока:

$$div((\mu_n n+\mu_p p)\nabla\varphi)=-\frac{\partial\Delta\varphi}{\partial t}+\nabla(\mu_n\nabla n-\mu_p\nabla p), \tag{12}$$

являющееся следствием уравнений (9)-(II). Решение уравнения (I2) определяет предварительное значение потенциала на слое $\ell+1/2$, после чего окончательное значение на слое $\ell+1$ находится из решения (9). Кроме того, использование (I2) обеспечивает выполнение условия баланса токов проводимости и смещения.

Система уравнений (9)-(I2) аппроксимируется следующим образом:

$$(\Lambda_n(\varphi^{\ell})n^{\ell+1})_{ij}=R(n^{\ell},p^{\ell})+\frac{n_{ij}^{\ell+1}-n_{ij}^{\ell}}{\tau} \tag{13}$$

$$(\Lambda_p(\varphi^{\ell})p^{\ell+1})_{ij}=R(n^{\ell},p^{\ell})+\frac{p_{ij}^{\ell+1}-p_{ij}^{\ell}}{\tau} \tag{14}$$

$$(\Lambda(n^{\ell+1},p^{\ell+1})\varphi^{\ell+1/2})_{ij}=-\frac{(\Delta^{hr}\varphi^{\ell+\frac{1}{2}})_{ij}-(\Delta^{hr}\varphi^{\ell})_{ij}}{\tau}+F_{ij}^{\ell+1} \tag{15}$$

$$(\Delta^{hr}\varphi^{\ell+1})_{ij}=n_{ij}^{\ell+1}-p_{ij}^{\ell+1}-N_{ij}+\alpha(n_{ij}^{\ell+1}+p_{ij}^{\ell+1})(\varphi_{ij}^{\ell+1}-\varphi_{ij}^{\ell+1/2}). \tag{16}$$

Разностные операторы Λ_n, Λ_p аппроксимируют L_n, L_p в (10),(11), Λ - левую часть (12), F - правую часть (12). Параметр $\alpha = O(\tau)$. Точные выражения для Λ_n, Λ_p, Λ, F, α приведены в /6/. Для решения линейных уравнений (13)-(16) используются итерационные методы. Уравнения (13)-(14) решаются методом Булеева /3/, (15)-(16) методом $ICCG$ /2/. Шаг интегрирования по времени определяется автоматически с контролем локальной погрешности /6/.

Моделирование переходного процесса в МОП-транзисторе проводилось в следующем режиме: $U_u = 0$, $U_c = 1$В, $U_n = 0$, напряжение на затворе ($U_з$) менялось скачком от 0 до 2В. Времена жизни полагались равными 10^{-6}с. (Как и следовало ожидать, в таком режиме ток рекомбинации оказался пренебрежимо мал по сравнению с токами проводимости, поскольку время переходного процесса значительно меньше τ_n, τ_p).

Размеры транзистора (рис.1) были следующими: $L_x = 4$ мкм, $L_y = 13$ мкм, $L = 5$ мкм, $d_{ox} = 0.05$ мкм, $x_1 = x_2 = 0.5$ мкм. Легирующая примесь задавалась по аппроксимационным формулам стандартного вида. Концентрация акцепторной примеси в подложке была 2×10^{16} см$^{-3}$.

Расчет проводился на разностной сетке, содержащей

34х38 узлов. Точность интегрирования по времени была 10^{-2}. Интегрирование проводилось до t =2 нс. В результате потребовалось 250 шагов по времени, что составило 90 мин. машинного времени ЕС-1060.

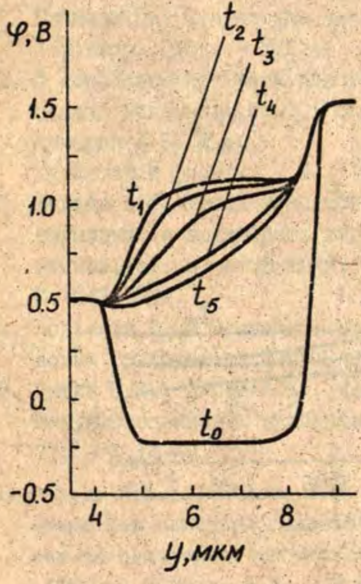

Рис.2

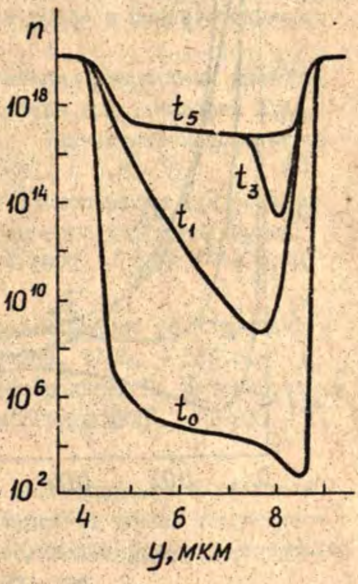

Рис.3

На рис.2,3 приведены распределения потенциала и концентраций электронов вдоль канала (x =0) для различных моментов времени t : t_0 =0, t_1 =0.004 нс, t_2 =0.012 нс, t_3 =0.022 нс, t_4 =0.08 нс, t_5 =0.2 нс. Окончательный вид распределений потенциала и концентраций устанавливается за время, примерно равное 0.2 нс. При переключении МОП-транзистора из закрытого состояния ($U_з$ =0) в открытое ($U_з$ =2В) канал в области истока индуцируется быстрее, чем в области стока, поскольку поле смещенного p-n перехода стока препятствует диффузии электронов из области стока в канал. В дальнейшем область обеднения вблизи стока уменьшается и конечное распределение концентраций электрснов в канале почти симметрично.

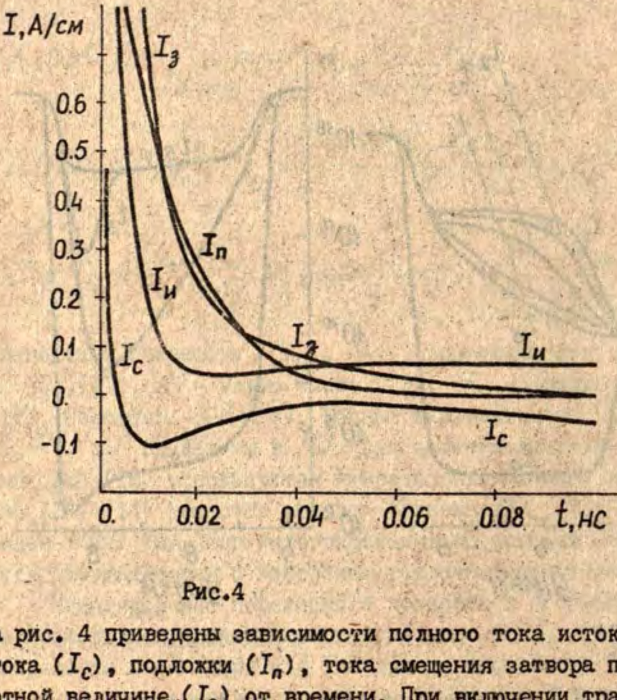

Рис.4

На рис. 4 приведены зависимости пслного тока истока ($I_и$), стока ($I_с$), подложки ($I_п$), тока смещения затвора по абсолютной величине ($I_з$) от времени. При включении транзистора ток подложки заряжает емкость затвор-подложка, токи истока и стока формируют канал. Затем ток подложки стремится к 0, ток стока меняет направление и вместе с током истока стремится к стационарному значению. В каждый момент времени выполняется условие баланса токов, а именно, ток затвора равняется алгебраической сумме $I_и$, $I_с$, $I_п$.

Приведенный пример иллюстрирует возможности метода и показывает, что при приемлемых затратах машинного времени исследователь может получить интересующие характеристики переходного процесса в МОП-транзисторе.

В заключение автор выражает благодарность Б.С.Польскому за научное руководство работой.

Список литературы

I. Блэкмор Дж. Статистика электронов в полупроводниках. - М.:Мир, I964. - 392 с.
2. О комплексе программ для решения разностных краевых задач/ Богданова М.С., Голубева А.А., Капорин И.Е., Кучеров А.Б. и др. Разностные методы математической физики. - М., I98I. - С.69-76.
3. Булеев Н.И. Метод неполной факторизации для решения двумерных и трехмерных задач типа диффузии//Журнал вычисл.мат. и мат.физики. - I970. - Т.IO. - № 4. - С.I042-I044.
4. Польский Б.С. Численное моделирование полупроводниковых приборов. - Рига:Зинатне, I986. - I68 с.
5. Энгль В.Л., Диркс Х.К., Майнерцхаген Б. Моделирование полупроводниковых приборов//Труды ИИЭР. - I983. - Т. 7I. - С.I4-42.
6. Polsky B.S., Rimshans J.S. Half-implicit difference sheme for numerical simulations of transient processes in semiconductor devices//Solid-State Electronics. - 1986. - V.29. - N 3. - P.321-328.
7. Schütz A., Selberherr S., Pötzl H. A two dimensional model for avalanche effect in MOS-transistor//Solid-State Electronics. - 1982. - V.25. - N 3. - P.177-183.
8. Selberherr S. Process and device modeling for VLSI// Microelectron. Reliab. - 1984. -V.24. - n 2. -P.225-257.
9. Yamaguchi K. A mobility for carriers in the MOS inversion layer//IEEE Trans. - 1983. -V.ED-30. - n 6. - P.658-663.

СОДЕРЖАНИЕ

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Результаты работ по математическому моделированию, полученные в статьях настоящего сборника, могут быть использованы в технологии производства монокристаллов для улучшения их структуры и качества, для оптимизации технологических режимов изготовления интегральных схем, при совершенствовании характеристик полупроводниковых приборов.

Теоретические исследования численных методов решения задач гидродинамики, фильтрации, теплообмена будут полезны для повышения эффективности пакетов прикладных программ.

ПРИКЛАДНЫЕ ЗАДАЧИ
МАТЕМАТИЧЕСКОЙ ФИЗИКИ

Сборник научных трудов

Рецензенты: Я.Я.Лиелпетер, академик, председатель секции магнитной гидродинамики и теплофизики Уч.совета Ин-та физики АН ЛатвССР;
У.Е.Райтум, канд.физ.-мат.наук, зав.лаб. магнитной гидродинамики ВЦ ЛГУ;
А.Г.Темкин, д-р техн.наук, проф.РПИ.

Редакторы :Н.Авдонин, Н.Терентьева
Технический редактор С.Лининя
Корректор А.Гельфгат

Подписано к печати 25.05.87. ЯТ 09154. Ф/б 60x84/16.
Бумага №3.II,3 физ.печ.л.10,0 усл.печ.л. 8,5 уч.-изд.л.
Тираж 500 экз. Зак. № 794 Цена 1 р. 30 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

РЕФЕРАТЫ

УДК 537.42I

ЧИСЛЕННЫЙ АНАЛИЗ КРИСТАЛЛИЗАЦИИ МОНОКРИСТАЛЛИЧЕСКОГО СЛИТКА ОХЛАЖДАЕМОГО С ПОВЕРХНОСТИ. Авдонин Н.А.,Гулбе М.Л.

Данная статья посвящена анализу случаев решения задачи о фазовом переходе (задачи Стефана) как в классической, так и в обобщенной постановке. Разработан алгоритм численного решения задачи и проведен расчет модельного примера. Анализ результатов расчетов показывает, что как и в случае кристаллизации в ампуле, так и в случае кристаллизации слитка со свободной поверхностью вдоль боковой поверхности слитка растет дендрит вытянутой формы и переохлаждение вглубь расплава не проникает.

Ил.5, библиогр.7 назв.

УДК 532.5I6.5

ВАРИАЦИОННЫЙ МЕТОД РЕШЕНИЯ ЗАДАЧ ДИНАМИКИ ВЯЗКОЙ НЕСЖИМАЕМОЙ ЖИДКОСТИ В ПРЯМОУГОЛЬНЫХ ОБЛАСТЯХ. Гельфгат А.Ю.

Предложен способ построения систем координатных функций, удовлетворяющих однородным граничным условиям и уравнению неразрывности. Метод иллюстрируется на примере решения системы уравнений тепловой конвекции в прямоугольной полости.

Ил.I, библиогр. 9 назв.

УДК 519.633.8

ПОЛУНЕЯВНЫЕ РАЗНОСТНЫЕ СХЕМЫ РЕШЕНИЯ УРАВНЕНИЙ КОНВЕКЦИИ. Люмкис Е.Д.

В статье проводится сравнение общепринятого и двух новых полунеявных алгоритмов решения уравнений конвекции в переменных вихрь-функция тока-температура. Приведены результаты расчета модельной задачи при различных числах Прандтля. Показано, что расчеты по новым алгоритмам можно проводить с существенно большим шагом по времени.

Ил.2, библиогр. 6 назв.

УДК 536.42I.I+537.42I+536.24+532.5I6.5+62I.3I5.692

ЧИСЛЕННОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ТЕПЛОВЫХ, ГИДРОДИНАМИЧЕСКИХ И КОНЦЕНТРАЦИОННЫХ ПОТОКОВ В ПРОЦЕССЕ ЗОННОЙ АМПУЛЬНОЙ ПЛАВКИ В НЕВЕСОМОСТИ. Гулбе М.Л., Мартузане Э.Н., Волков Ю.Л., КОПЕЛИОВИЧ Э.С., РАКОВ В.В.

В настоящей работе проведено численное исследование тепловых, гидродинамических и диффузионных процессов, проходящих в невесомости при ампульной зонной плавке германия, легированного мышьяком или галлием, путем решения уравнений теплопроводности, Навье-Стокса в приближении Буссинеска и конвективной диффузии. Тепловая задача решается как в квазистационарной, так и в нестационарной постановках. Получено качественное совпадение с результатами экспериментов.

Ил.4, библиогр. 8 назв., табл.I.

УДК 536.25+537.84

О КОНВЕКТИВНОЙ УСТОЙЧИВОСТИ ДВУХКОМПОНЕНТНОЙ ЖИДКОСТИ В МАГНИТНОМ ПОЛЕ. Герценштейн С.Я., Калейс А.Я.

В статье рассматриваются вопросы конвективной устойчивости двухкомпонентной жидкости в горизонтальном слое со свободными границами при наличии магнитного поля. Движение описывается трехмерными уравнениями Навье-Стокса в приближении Буссинеска с учетом воздействия магнитного поля. Приводятся результаты линейного анализа устойчивости, полученные с помощью системы аналитических вычислений *REDUCE*. Нелинейная задача решалась методом Бубнова-Галеркина, приведены результаты численных расчетов.

Библиогр. 9 назв.

УДК 519.6:518.61

ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ТЕМПЕРАТУРНЫХ И ГИДРОДИНАМИЧЕСКИХ ПОЛЕЙ В СИСТЕМЕ КРИСТАЛЛ-РАСПЛАВ-ФЛЮС. Калис Х.Э.

Работа посвящена численному исследованию температурного поля и гидродинамических потоков в системе кристалл-расплав-флюс на основе монотонной векторно-разностной схемы. Показано, что с ростом коэффициента вязкости флюса интенсивность вихрей во флюсе уменьшается и гидродинамика флюса мало влияет на гидродинамику расплава.

Библиогр. 5 назв., табл.2.

УДК 621.315.592

МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ТЕХНОЛОГИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ ИЗГОТОВЛЕНИЯ СБИС С УЧЕТОМ РАСПРЕДЕЛЕНИЯ ТЕМПЕРАТУРЫ И ТЕРМОНАПРЯЖЕНИЙ В СТРУКТУРЕ. Кояло М.В., Липскис Я.А., Мартузан Б.Я., Скрыль Ю.И.

Излагается методика расчета радиального распределения температуры и компонент термоупругих напряжений в полупроводниковых структурах при нагреве в прямоточных диффузионных печах.

Приводится описание программного обеспечения расчетов, оформленного в виде Системы поиска оптимальных режимов технологии - СПОРТ-84, позволяющей пользователю в диалоговом режиме проводить расчеты с целью минимизации термоупругих напряжений, возникающих в полупроводниковой структуре, проходящей технологический маршрут.

Ил.4, библиогр. II назв.

УДК 539.319

ЧИСЛЕННОЕ СРАВНЕНИЕ НАПРЯЖЕННОГО СОСТОЯНИЯ КРИСТАЛЛОВ КРЕМНИЯ ПРИ РАЗЛИЧНЫХ УСЛОВИЯХ ОХЛАЖДЕНИЯ.
Вахрамеев С.С., Козельская Н.В., Шашков Ю.М.

Производятся численные расчеты термоупругих напряжений в кристаллах кремния (диаметром 250 мм) при различных способах их охлаждения после выращивания из расплава. Показано, что при интенсивном охлаждении скалывающие напряжения становятся слишком велики (до 3 кг/мм^2), что может привести к растрескиванию кристалла.

Ил.4, библиогр. 3 назв.

УДК 537.84

МАТЕМАТИЧЕСКИЕ МОДЕЛИ ДЛЯ ЧИСЛЕННОГО РАСЧЕТА МГД-ТЕЧЕНИЯ В ОСЕСИММЕТРИЧНЫХ МАГНИТНОМ И ЭЛЕКТРИЧЕСКОМ ПОЛЯХ.
Приеде Я.К.

Проведен численный расчет осесимметричного МГД-течения с использованием двух математических моделей: с переменными угловая скорость Ω - момент завихренности W и момент вращения ω - функция вихря ξ. Задача решается методом конечных разностей с использованием схемы переменных направлений. Приведены результаты расчета одного типа течения по обоим вариантам, показывающие, что при использовании второй модели не выполняется условие $v_{\alpha}|_{r=0}=0$. Это, в свою очередь, обуславливает искажение скоростных структур и интенсивностей возникающих гидродинамических течений. Установлено также, что требования к величине дискретного шага по времени эквивалентны для обеих моделей счета.

Ил. 3, библиогр. 6 назв.

УДК 517.958

ИССЛЕДОВАНИЕ ОДНОЙ ЗАДАЧИ, СОДЕРЖАЩЕЙ СТАРШИЕ ПРОИЗВОДНЫЕ В КРАЕВЫХ УСЛОВИЯХ. Земитис А.А.

В работе исследуется краевая задача для уравнения Лапласа, содержащая вторые производные в краевых условиях. Такие задачи возникают после преобразования некоторых эллиптических краевых задач с кусочно-постоянными коэффициентами к более удобному для численных расчетов виду.

Введено понятие обобщенного решения, доказана его существование и единственность, получена априорная оценка.

Библиогр. 14 назв.

УДК 532.546

АНАЛИТИЧЕСКИ-ЧИСЛЕННОЕ РЕШЕНИЕ ЗАДАЧ ТЕПЛО- И МАССОПЕРЕНОСА В ПОРИСТЫХ СРЕДАХ. Хэфнер Ф., Фойгт Х.

В статье предлагается приближенный численно-аналитический метод решения одномерных задач тепло- массопереноса для кусочно-однородного пласта. На основе предложенного метода решается также задача идентификации параметров. Приводятся результаты проведенных расчэтов.

Ил.9, библиогр. 13 назв.

УДК 532.546 626.84I 5I7.946

РАСЧЕТ НАПОРНОЙ ФИЛЬТРАЦИИ НА ФОНЕ СИСТЕМАТИЧЕСКОГО ГОРИЗОНТАЛЬНОГО ДРЕНАЖА. Веретехина Л.В., Демченко Л.И., Мистецкий Г.Е.

Рассматривается задача напорной фильтрации при промывках многослойных грунтов. Методом вычислительного эксперимента исследуется влияние междренажного расстояния, глубины заложения, диаметра систематического горизонтального дренажа, глубина слоя воды на поверхности почвы на расход в дрено и на степень равномерности распределения скорости фильтрации воды в корнеобитаемом слое при промывках одно, двух и трехслойных грунтов.

Ил.5, библиогр. 2 назв.

УДК 518:5I7.949

РАЗНОСТНЫЕ СХЕМЫ НА ОБОБЩЕННЫХ РЕШЕНИЯХ ДВУХТОЧЕЧНОЙ КРАЕВОЙ ЗАДАЧИ ДЛЯ ОБЫКНОВЕННОГО ДИФФЕРЕНЦИАЛЬНОГО УРАВНЕНИЯ. Демченко В.Ф.

Рассматривается краевая задача

$$\begin{cases} D^+\omega + qu = f, & \sigma(x)\in W_2^{-1}(0,1);\ q(x), f(x)\in L_2(0,1), \\ D^-u = \sigma\omega, & |\langle\sigma,1\rangle| \geq C_1 > 0, \langle\sigma, i+\eta\cdot i + q\eta\rangle \geq 0, \\ & \forall\eta(x)\in L_2(0,1), \end{cases}$$

$$\langle D^-u, v\rangle = (u, D^+v), \quad \forall v(x)\in W_2^1(0,1),$$

где D^+ – оператор дифференцирования в смысле С.А.Соболева, D^- – расширение по непрерывности на все L_2 (0,I), i^+ – оператор интегрирования в смысле Лебега, $\langle \xi, v\rangle$ – билинейная форма, определенная над $\xi(x)\in W_2^{-1}$ (0,I), $v(x)\in W_2^1$ (0,I). Доказана однозначная разрешимость задачи в классе функций $u(x)\in L_2$ (0,I), $\omega(x)\in W_2^1$ (0,I), построена и исследована однородная разностная схема.

Рассмотрен случай $u(x)\in W_2^1(0,1)$; $\omega(x)\in L_2(0,1)$, $\kappa(x)=\sigma^{-1}(x)\in W_\infty^1(0,1)$; $q(x)$, $f(x)\in W_2^{-1}(0,1)$.

УДК 532.546+517.94

ПОСТАНОВКИ С ОСРЕДНЕНИЕМ ДЛЯ ОПИСАНИЯ ПРОЦЕССОВ ПЕРЕНОСА В СЛОИСТЫХ ПЛАСТАХ. Буйкис А.А., Шмите М.З.

В статье предлагаются две новые постановки для задач тепло- массопереноса в слоистых средах. Эти постановки, в частности, обобщают известную схему Мятиева-Гиринского и могут быть применены как при наличии между основными пропластками разделяющих слоев, так и при отсутствии их.

Библиогр. 10 назв.

УДК 621.382

МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ СТАЦИОНАРНЫХ, ОДНОМЕРНЫХ ПРОЦЕССОВ В БИПОЛЯРНЫХ ГЕТЕРОТРАНЗИСТОРНЫХ СТРУКТУРАХ В ДИФФУЗИОННО-ДРЕЙФОВОМ ПРИБЛИЖЕНИИ. Абашкина С.А., Римшанс Я.С.

Предложена математическая модель переноса заряда в гетеропереходных структурах. Гетеропереход рассматривается как структура, обладающая пространственной неоднородностью энергетических зон. Описание зонной структуры и учет вырождения носителей заряда проводится при прмощи двух величин - эффективной собственной концентрации и асимметрии сужения ширины запрещенной зоны. Построена разностная схема и приведены результаты вычислений для $AlGaAs$ - $GaAs$ гетеропереходного транзистора.

Ил.5, библиогр. 18 назв.

УДК 519.633

ДВУМЕРНЫЙ ЧИСЛЕННЫЙ АНАЛИЗ ПЕРЕХОДНЫХ ПРОЦЕССОВ В МОП-ТРАНЗИСТОРЕ. Шур А.И.

Осуществлено численное моделирование переходных процессов в МОП-транзисторах. Использована полунеявная абсолютно устойчивая разностная схема. Приводятся и анализируются результаты расчетов.

Ил.4, библиогр. 9 назв.

[illegible]

УДК [illegible]

[illegible]

[illegible]

1 р. 30 *к.*