Прикладные задачи математической физики

Министерство народного 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 1989

ПРИКЛАДНЫЕ ЗАДАЧИ МАТЕМАТИЧЕСКОЙ ФИЗИКИ

Прикладные задачи математической физики: Сборник научных трудов/ Отв.ред. Н.А.Авдонин. - Рига; ЛГУ им.П.Стучки, 1989. - 187 с.

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

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

П $\frac{1704020000-070}{М812(11)-89}$ 34.89

ВВЕДЕНИЕ

В настоящий сборник помещены статьи, отражающие основные научные направления работ, проводимых в Вычислительном центре при ЛГУ им. П.Стучки, на кафедрах физико-математического факультета ЛГУ им. П.Стучки, в других научных учреждениях, с которыми поддерживается научное сотрудничество.

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

Так в работе Н.А.Авдонина, Х.Э.Калиса и др. построена осредненная математическая модель вторичного вибрационного течения в жидкости. Получены осредненные граничные условия на вибрирующей поверхности. Расчеты по указанной модели позволяют обнаружить вторичное течение в виде вихря высокой интенсивности вблизи вибрирующей поверхности.

В работе Ю.В.Апановича разработана математическая модель и численный алгоритм решения задачи тепломассопереноса в двухкомпонентной системе в области с заранее неизвестной границей.

В работах подробно исследуются задачи термо- и концентрационной конвекции. В работах А.Ю.Гельфгата, С.Я. Герценштейна, А.Я.Калейса для численного решения указанных задач эффективно используется метод Галеркина. Исследована устойчивость конвективных течений.

В ряде статей исследуются задачи термоупругости и задачи упругопластического деформирования. Предложены эффективные численные методы нахождения остаточных напряжений и плотности дислокаций в кристаллах.

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

Сборник научных трудов
ПРИКЛАДНЫЕ ЗАДАЧИ МАТЕМАТИЧЕСКОЙ ФИЗИКИ
Рига: ЛГУ им. П.Стучки, 1989

УДК 537:84:669.713.7

Н.А.Авдонин, Х.Э.Калис
Вычислительный центр
при ЛГУ им. П.Стучки,
Рига
Е.В.Жариков, Н.Р.Сторожев
ИОФАН СССР, Москва

АНАЛИЗ ВТОРИЧНЫХ ТЕЧЕНИЙ В ЖИДКОСТИ ВБЛИЗИ ВИБРИРУЮЩЕЙ ПОВЕРХНОСТИ

I. Введение

Вопросам влияния вибраций твердых тел на переносные свойства в жидкости посвящено значительное число работ, /I-6/ . Большое внимание уделяется изучению влияния вибраций кристалла, выращиваемого из расплава на его физико-химические свойства. Так, в работе /I/ экспериментально изучалось влияние вибраций кристалла на установление локальных равновесных условий в процессе его выращивания. В работе /2/ исследовано влияние вибраций на гранный рост и форму поверхности кристалла. В работах /3-4/ исследовано влияние вибраций на переносные свойства жидкости (теплопроводность и диффузию).

Большое число работ посвящено изучению акустических колебаний на гидродинамику жидкости, /5-7/ . Так, в работах /5-6/ исследуется влияние акустических колебаний на неоднородность течений в расплаве, в работе /7/ изучено глобальное вторичное течение, полученное при вибрации на акустических частотах тела сложной формы. В работе /8/ путем численного моделирования изучалось влияние колебаний с малой частотой и большой амплитудой на устойчивость гидродинамических течений. Однако механизм воздействия вибраций на характер течения в жидкости изучен недостаточно. В частности, отсутствует замкнутая математическая модель, описывающая осредненные вторичные течения.

Целью настоящей работы является построение осредненной математической модели, описывающей возможное возникновение и развитие вторичных течений вблизи вибрирующей поверхности, а также экспериментальное исследование явления образования и характера вторичных течений в зависимости от параметров вибрационной установки.

2. Построение осредненной математической модели вторичного вибрационного гидродинамического течения жидкости

Анализ математической модели проведем на модельной жидкости (вода, глицерин) в простой геометрии.

Рассмотрим цилиндрический сосуд радиуса R, высотой H с расположенным на поверхности жидкости вибрирующим твердым телом, см.рис.I.

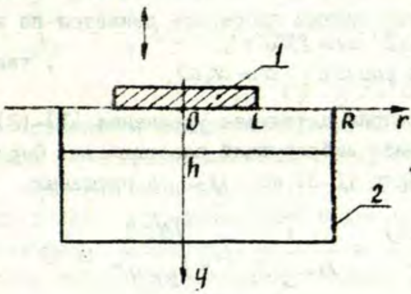


Рис.I. Схема установки: I - вибрирующий цилиндр;
2 - стенки сосуда с жидкостью.

Запишем уравнение Навье-Стокса для вязкой несжимаемой жидкости в приближении Буссинеска:

$$\frac{\partial u_r}{\partial t} + u_r \frac{\partial u_r}{\partial r} + u_y \frac{\partial u_r}{\partial y} = -\frac{\partial P}{\partial r} +$$

$$+ \nu \left(\frac{\partial}{\partial r} \left(\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (r u_r) \right) + \frac{\partial^2 u_r}{\partial y^2} \right) \qquad (I.1)$$

$$\frac{\partial u_y}{\partial t} + u_r \frac{\partial u_y}{\partial r} + u_y \frac{\partial u_y}{\partial y} = -\frac{\partial P}{\partial y} +$$

$$+ \nu \left(\frac{\partial^2 u_y}{\partial y^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial u}{\partial r} \right) \right). \qquad (I.2)$$

$$\frac{1}{r} \frac{\partial (r u_r)}{\partial r} + \frac{\partial u_y}{\partial y} = 0 . \qquad (I.3)$$

Здесь введены общепринятые обозначения, /7/, ν - кинематическая вязкость.

Твердое тело вибрирует с частотой ω_1 и амплитудой a_1, т.е. его нижняя плоскость движется по закону:
$y^* = a_1 \sin \omega t; \; \omega = 2\pi \omega_1;$
$u_y|_{y=y^*} = a \cos \omega t; \; a = a_1 \omega.$, так что

2.I. Рассмотрим детальнее уравнения (I)-(3) в слое толщиной h вблизи вибрирующей поверхности. Осредним уравнение неразрывности (I.3) по y в пределах h слоя:

$$\frac{1}{r} \frac{\partial (r \bar{u})}{\partial r} + \frac{1}{h - y^*} u_y \Big|_{y=y^*}^{y=h} = 0 . \qquad (I.4)$$

Здесь $\bar{u}_r = (h - y^*)^{-1} \cdot \int\limits_{y^*}^{h} u_r \, dy$ - среднее значение по толщине h - слоя.

Будем считать, что толщина h слоя выбрана таким образом, что скорость u_y на границе этого слоя затухает, т.е. $u_y|_{y=h} = 0$.[ж)] Тогда соотношение (I.4) перепишется так:

$$\bar{u}_r = \frac{0.5ar}{h-y^*} \cos\omega t . \qquad (I.5)$$

Таким образом, получили вибрационную радиальную компоненту скорости, осредненную в h слое. Ниже будем пренебрегать величиной $y^*(t)$ по сравнению с h .

Рассмотрим теперь уравнение (I.I) в h-слое. Осредним это уравнение по y , преобразуя конвективный член для вибрационной составляющей

$$\overline{u_y \frac{\partial u_r}{\partial y}} = \frac{1}{h} u_y(0) \cdot \int\limits_{y^*}^{y_1} \frac{\partial u_r}{\partial y} dy \approx -\frac{1}{h} u_y(0) u_r(y^*) \approx \qquad (I.6)$$

$$\approx -h^{-1} \cdot u_y(0) \cdot \bar{u}_r .$$

Здесь применена теорема о среднем в предположении, что u_y монотонна и не меняет знака в пределах h-слоя.

Учитывая преобразование (I.6), после осреднения, получим:

$$\frac{\partial \bar{u}_r}{\partial t} + \bar{u}_r \frac{\partial \bar{u}_r}{\partial r} - \frac{1}{h} u_y(0) \bar{u}_r = -\frac{\partial \bar{p}}{\partial r} + \nu \frac{1}{h} \frac{\partial u_r}{\partial y}\Big|_{y=y^*}^{y=h} + \nu \left(\frac{\partial}{\partial r} \left(\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (r \bar{u}_r) \right) \right). \qquad (I.7)$$

Здесь при осреднении мы приняли допущение, что среднее от произведения есть произведение средних, которое оправдано, если u_r медленно меняется по y и не меняет своего знака в пределах h-слоя. Ниже будет показано, что такое предположение допустимо.

Проведем теперь осреднение уравнения (I.7) по времени, введя обозначение $\bar{\bar{u}}$ для среднего.

ж) Значение h определим ниже.

Представляя выражение (I.5) для осциллирующей составляющей скорости $\tilde{u}_r$ и учитывая, что среднее от осциллирующей части равно нулю, получим:

$$\frac{\partial \tilde{\bar{u}}_r}{\partial t} + \tilde{\bar{u}}_r \frac{\partial \tilde{\bar{u}}_r}{\partial r} - \frac{1}{8}\frac{a^2 r}{h^2} = -\frac{\partial \tilde{\bar{p}}}{\partial r} + \frac{\nu}{h}\frac{\partial \tilde{u}_r}{\partial y}\Big|_{y=0}^{y=h} + \nu\left(\frac{\partial}{\partial r}\left(\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}(r\tilde{\bar{u}}_r)\right)\right). \qquad (I.7)$$

Напомним, что прямая черта сверху означает среднее по y, а волнистая - среднее по t. Итак, мы получили граничное условие на вибрирующей стенке для компоненты $\tilde{\bar{u}}_r$ типа "сосредоточение емкости". Считая h малой величиной, в первом приближении можно получить более простое условие, если в (I.7) пренебречь слагаемыми, содержащими множитель h:

$$\nu\frac{\partial \tilde{u}_r}{\partial y}\Big|_{y=h} = -\frac{1}{8}\frac{a^2 r}{h} + \nu\frac{\partial \tilde{u}_r}{\partial y}\Big|_{y=0}. \qquad (I.8)$$

Условие (I.8) означает, что на вибрирующей стенке задается касательное напряжение, которое является движущей силой для вторичного течения. В качестве второго условия принимаем $\tilde{u}_y\big|_{y=0} = 0$. Если принять приближенно $\partial\tilde{u}_r/\partial y\big|_{y=0} = h^{-1}(\tilde{u}_r(h) - \tilde{u}_r(0))$, то условие (I.8) можно переписать в виде:

$$\nu\frac{\partial \tilde{\bar{u}}_r}{\partial y}\Big|_{y=0} = \frac{\nu}{h}\left(\tilde{\bar{u}}_r - \frac{1}{8}\frac{a^2 r}{\nu}\right) \qquad (I.9)$$

т.к. $\tilde{u}_r(0) = 0$, $\tilde{u}_r(h) \approx \tilde{\bar{u}}_r$.

Это условие аналогично условию на свободной поверхности жидкости, или условию Марангони. Вне h - слоя осредненное течение описывается осредненными (по времени) уравнениями (I.I)-(I.3), которые не меняют своего вида после осреднения, т.к. вне h -слоя вибрации затухают. Граничные условия на других участках границы остаются неизменными после осреднения - это условия прилипания на стенках сосуда и соответствующие условия на свободной поверхности.

Таким образом, сформулирована задача для осредненного течения, численное решение которой можно выполнить одним из хорошо известных методов. Однако условие (I.8) получено при достаточно грубых допущениях. Кроме того, величина h -слоя остается пока не определенной. Поэтому ниже дадим оценку вибрирующей составляющей скорости и более точно проведем процедуру осреднения. Одновременно будет получено значение h.

2.2. Следуя методу последовательных приближений Линя, /9/, рассмотрим уравнение (I.2) для вибрирующей составляющей компоненты скорости u_y в первом приближении. Будем считать, что u_y не зависит от r, а давление P не зависит от y. Тогда уравнение (I.2) в подвижной системе координат $z = y - a_1 \sin\omega t$; t примет вид:

$$\frac{\partial u_y}{\partial t} + (u_y - a\cos\omega t)\frac{\partial u_y}{\partial z} = \nu \frac{\partial^2 u_y}{\partial z^2}. \qquad (I.10)$$

Граничные условия для u_y:

$$u_y|_{z=0} = a\cos\omega t; \quad u_y|_{z\to\infty} = 0; \quad (a = a_1\omega). \qquad (I.11)$$

Оценим приближенно вклад каждого члена в уравнении (I.10). Будем считать, что амплитуда скорости затухает на расстоянии $z = h$ от вибрирующей стенки и что $\partial u_y/\partial z \approx \approx h^{-1} \cdot u_y(0)$. Тогда члены уравнения (I.10) по порядку оцениваются следующим образом:

$$a_1\omega^2; \; (a_1\omega)^2 \cdot h^{-1}; \; (a_1\omega^2)h^{-1}; \; \nu a_1\omega h^{-2}.$$

Вторым слагаемым в уравнении (I.10) можно пренебречь, если

$$a_1 h^{-1} \ll 1. \qquad (I.12)$$

Уравнение (I.10) принимает вид:

$$\frac{\partial u_y}{\partial t} = \nu \frac{\partial^2 u_y}{\partial z^2}. \qquad (I.10')$$

Решение этого уравнения с условиями (I.11) легко находится и имеет известный вид /9/ :

$$u_y = a e^{-\beta \cdot z} \cos(\omega t + \beta z); \beta = \sqrt{\frac{\omega}{2\nu}}; \quad (I.13)$$

Подставляя это решение в уравнение (I.10) и сравнивая отдельные члены, найдем, что вторым слагаемым можно пренебречь, если

$$a, \delta^{-1} << 1 \ ; \ (\delta = \beta^{-1}). \qquad (I.14)$$

По найденному u_y можно определить вибрирующую составляющую компоненты u_r из уравнения неразрывности (I.3):

$$u_r^{(1)} = 0{,}5 a \beta r e^{-\beta z} (\cos(\omega t + \beta z) + \sin(\omega t + \beta z)). \quad (I.15)$$

Подставляя найденное значение вибрирующей составляющей (I.13), (I.15) в уравнение (I.1) и осредняя по времени, как и выше, найдем:

$$\frac{\partial \tilde{u}_r}{\partial t} + \tilde{u}_r \frac{\partial \tilde{u}_r}{\partial r} + \tilde{u}_y \frac{\partial \tilde{u}_r}{\partial y} - \frac{1}{4} a^2 r \beta^2 e^{-\beta z} = -\frac{\partial \tilde{p}}{\partial r} + \nu \left(\frac{\partial^2 \tilde{u}_r}{\partial y^2} + \frac{\partial}{\partial r} \left(\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (r \tilde{u}_r) \right) \right). \qquad (I.16)$$

Осредним теперь уравнение (I.16) по δ -слою, в пределах которого объемная сила падает в e^2 раз. Пренебрегая, как и выше, членами, содержащими множитель δ , получим:

$$\nu \left. \frac{\partial \tilde{u}_r}{\partial y} \right|_{y=\delta} = -\frac{a^2 r}{8\delta} + \nu \left. \frac{\partial \tilde{u}_r}{\partial y} \right|_{y=0} \qquad (I.17)$$

Учитывая характер обьемной силы, содержащей множитель $exp(-2\beta y)$ в уравнении (I.16), можно предположить, что во вторичном течении сформировался погранслой шириной

δ^{ϑ}, в пределах которого можно приближенно принять

$$\tilde{u}_r = \tilde{\bar{u}}_r ; \quad \partial \tilde{u}_r / \partial y |_{y=0} = \delta^{-1} \tilde{\bar{u}}_r .$$

Тогда

$$\nu \frac{\partial \tilde{\bar{u}}_r}{\partial y}\Big|_{y=\delta} = \frac{\nu}{\delta} \left(\tilde{\bar{u}}_r - \frac{a^2 r}{8\nu} \right). \qquad (I.18)$$

Сравнивая граничное условие (I.18) с полученным выше,(I.9) находим, что $h = \delta$.

Напомним, что условие (I.18) получено при ограничении (I.14). Если принять, что вибрации проводятся при постоянном энергетическом вкладе $(a, \omega)^2 = const$, то легко видеть, что ограничение (I.14) выполняется при малых a_1 и при больших ω. Действительно, колебания при больших амплитудах и малых частотах могут привести к потере устойчивости течения в жидкости, как это показано в работе /8/. Понятно, что в этом случае осредненная теория не может быть применена.

2.3. Можно получить качественную оценку скорости $\tilde{u}_r$ в известном приближении движения в одном направлении /9/. Будем считать, что в цилиндре бесконечного радиуса имеется вторичное течение одного направления, т.е. $\tilde{u}_y = 0$. Тогда из уравнения (I.2) следует, что $\partial \tilde{P} / \partial y = 0$ и, следовательно, $\partial \tilde{P} / \partial r$ не зависит от y. Запишем уравнение (I.I) в стационарном случае в вязком приближении:

$$\nu \frac{\partial^2 \tilde{u}_r}{\partial y^2} = A, \quad 0 < y < H; \quad A = \frac{\partial P}{\partial r}. \qquad (I.19)$$

Общее решение уравнения (I.19) можно записать в виде:

$$\tilde{u}_r = 0{,}5 A (H-y)^2 + B(H-y) + C. \qquad (I.20)$$

Граничное условие $\tilde{u}_r = 0$ при $y = H$ даёт $C = 0$. Из условия сохранения интегрального баланса

$$\int_0^H \tilde{u}_r \, dy = 0 \qquad (I.21)$$

находим $B = -2/3 \cdot AH$.

Константу A находим из условия (I.18):

$$A = -\frac{9}{4} \frac{1}{1+\frac{4\delta}{H}} \frac{a^2 r}{\nu H^2}. \qquad (I.22)$$

Таким образом решение $\tilde{u}_r$ имеет вид:

$$\tilde{u}_r = A_0 u(y); \qquad (I.23)$$

$$A_0 = \frac{1}{8} \frac{a^2 r}{\nu(1+\frac{4\delta}{H})}; \quad u(y) = \left(1-\frac{y}{H}\right)\left(1-3\frac{y}{H}\right).$$

Вид этого решения изображен на рис.2.

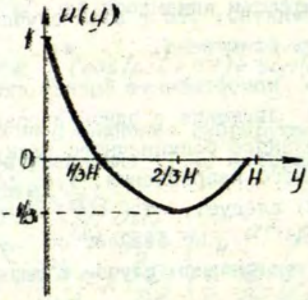


Рис.2. Зависимость скорости $u(y)$ от y.

Характер решения показывает, что существует один положительный вихрь в правой половине рассматриваемой цилиндрической области. Точное же решение можно получить численно, решая осредненные уравнения (I.I)-(I.3) с граничным условием (I.18) на поверхности вибрирующего тела и условиями прилипания на стенках сосуда.

3. Экспериментальные наблюдения

Исследование движения жидкости проводилось в прозрачном цилиндрическом контейнере диаметром 65 мм и высотой 80 мм. Колеблющееся тело крепилось на плоском жестком подвесе, связанном с вибратором. Вибратор электромагнитного типа обеспечивал вертикальные гармонические колебания тела с амплитудой от 0,005 до 0,5 мм на частотах 43, 62 и 78 Гц. Для визуализации течений в жидкости представляющую собой водоглицериновую смесь, вводились визуализирущие частицы в виде взвешенной в смеси графитовой пудры. В качестве источника света использовали осветитель с щелевой диафрагмой.

В экспериментах изучалась зависимость максимальной и средней скорости в вихревом потоке от амплитуды и частоты вибраций. Средняя скорость частицы определялась по времени прохождения частиц полного периметра циркуляции.

Результаты измерений представлены на рис.3. Как видим, наблюдается параболическая зависимость средней скорости от амплитуды.

4. Результаты и обсуждения

Поставленная в п.I. задача гидродинамики считалась разностным методом на ЭВМ. Не останавливаясь здесь на описании расчетного алгоритма, см. /10/, приведем результаты численных расчетов. Расчеты были проведены для геометрии, указанной на рис.I. с размерами: L =1,5 см; R =3 см; H =3 см . Для смеси воды с глицерином. Кинематическая вязкость принималась равной 0,36 см^2/с. Амплитуда и частота вибраций задавались соответственно равными a_1 =10^{-2}см, ω_1 =80 Гц. На рис.4. приведены линии тока, полученные из расчетов (правая сторона). Слева приведен характер вихря, полученного визуальным наблюдением за частицами, движущимися в жидкости. Как видим, общая картина

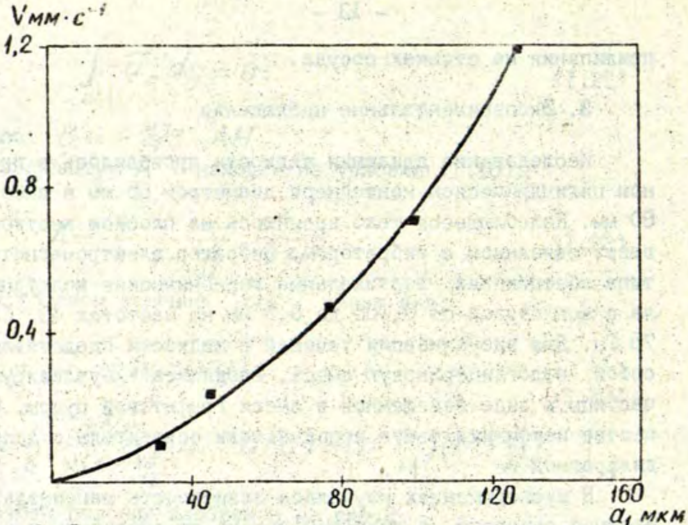


Рис.3. Экспериментальная зависимость средней скорости движения жидкости в вихревом потоке от амплитуды вибраций a_1 ; $\nu = 36 сПз$; $\omega = 78$ Гц .

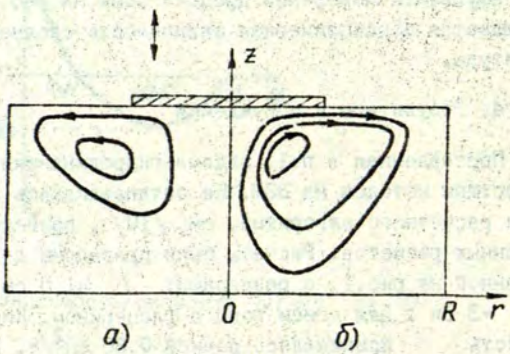


Рис.4. Картина стационарного вторичного течения.
а) экспериментальные наблюдения;
б) линии тока по расчетным данным.

вихря, полученная расчетным путем, полностью совпадает с наблюдаемым в эксперименте.

Однако расчетная картина вихря несколько смещена к оси, в то время как в эксперименте центральная часть вихря наблюдается под кромкой вибрирующей пластины.

Сравним максимальное значение расчетной скорости с максимальной наблюдаемой скоростью. Согласно (I.23) $max\ \tilde{u}_r$ достигается при y =0 вблизи вибрирующей пластины:

$$\tilde{u}_r(0) = A_0 = \frac{a_1^2 \omega^2 \cdot r}{8\nu}\left(1+\frac{4\delta}{H}\right)^{-1}. \quad (3.I)$$

Как видим, указанная скорость имеет параболическаую зависимость от амплитуды и частоты колебаний и обратно пропорциональна вязкости. Качественная зависимость от амплитуды колебаний совпадает с экспериментально наблюдаемой зависимостью, см. рис.3.

Что касается максимального значения расчетной скорости вблизи поверхности пластины, то для приведенных выше данных она составляет ~ 4 см/с (см. выражение (3.I)), а наблюдаемая в эксперименте максимальная скорость движения частиц около вибрирующей поверхности ~ 2 см/с. Для вязкости 4,3 см^2/с (глицерин при 36°С) максимальная расчетная и наблюдаемая скорости составили соответственно I,2 см/с и 0,6 см/с при вязкости I4 см^2/с - 0,I и 0,2 см/с.

Зависимость скорости u от y, приведенная на рис.2. соответствует экспериментальным наблюдениям, ср. рис. 4а.

Приведенные данные подтверждают качественное совпадение результатов теоретических расчетов и эксперимента и удовлетворительное соответствие значений скорости. Отметим еще, что ограничение (I.I4) при заданных выше значениях параметров выполняется.

5. Заключение

1. Построена модель осредненного вторичного течения. Получено осредненное граничное условие (1.18) на поверхности вибрирующей пластины или цилиндра.

2. Проведены численные расчеты вторичного вибрационного течения и сравнение с экспериментом. Показано, что линейные колебания твердого тела вызывают вихревое движение большой интенсивности.

3. Полученная в работе математическая модель вибрационной конвекции позволяет проводить анализ влияния вибраций на естественную, термокапиллярную и принудительную конвекцию применительно к конкретным условиям эксперимента.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Никитина Г.В., Романенко В.Н., Тучкевич В.М. Влияние вибраций на выращивание монокристаллов бинарных систем // Кристаллизация и фазовые переходы. - М.: АН СССР, 1962. - С.379-385.
2. Изергин А.П., Павленко Ю.С., Строителев С.А. О влиянии вибраций на форму монокристаллов, выращиваемых по методу Чохральского // Изв.ВУЗов, сер. физика. - 1959. - № 1. - С.107-110.
3. Kurzweg V.H. Trans.ASME.J. Heat Transfer.// - 1985.- V.107. - P.459-462.
4. Liu W.-S., Wolf M.F., Elwell D.J.//of Crystal Grouth.- 1982.-1987.- P.589-597.
5. Jackson J.// J. of the Acoustical Society of America. - 1960.- N 11.- V.32. - P.1387-1395.
6. Физическая акустика под ред.У.Мезона // Свойства полимеров и нелинейная акустика. - М.:Мир, 1969. - Т.2. - Ч.В. - С.302-377.
7. Ko Tomada, Tosio Miyagi. // J. of the Physical Society of Japan, 1974. - N 1. - V.37. - P.249-253.

8. Полежаев В.И. Изв. АН СССР. Сер. физика. - 1985. - Т.49. - № 4. - С.635-642.

9. Шлихтинг Г. Теория пограничного слоя. - М.: Наука, 1974. - 710с.

10. Калис Х.Э. Построение монотонных разностных схем для решения задачи об осесимметрично-вращательных конвективных течениях несжимаемой жидкости // Прикладные задачи математической физики: Из-во ЛГУ им.П.Стучки. - Рига, 1985. - С.51-59.

Сборник научных трудов
ПРИКЛАДНЫЕ ЗАДАЧИ МАТЕМАТИЧЕСКОЙ ФИЗИКИ
Рига: ЛГУ им.П.Стучки, 1989

УДК 519.63+536.42

Ю.В.Апанович
ВЦ при ЛГУ им.П.Стучки,
г.Рига

МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССА ЗОННОЙ ПЛАВКИ ДВУХКОМПОНЕНТНОГО МАТЕРИАЛА

В настоящей работе обсуждаются результаты расчетов процесса зонной плавки двухкомпонентного материала. Математическая модель такого процесса отличается от традиционной модели зонной плавки однокомпонентного материала прежде всего тем, что температура фазового перехода зависит от концентрации, и фронты, вообще говоря, не являются изотермическими. Кроме того, расчеты осложнены тем, что зависимость плотности некоторых материалов, например $Cd_x Hg_{(1-x)} Te$, от концентрации x и температуры носит нелинейный характер. Это может приводить к качественным отличиям процесса зонной плавки двухкомпонентных веществ по сравнению с однокомпонентными. Предлагаемая математическая модель позволяет находить положение и форму фронтов, распределение температуры в жидкой и твердой фазах, концентрацию компонента в жидкой фазе и в выращенном кристалле.

I. Постановка задачи

Рассмотрим задачу об ампульной зонной плавке двухкомпонентного материала. Процесс проводится в прозрачной цилиндрической ампуле, поэтому будем считать, что боковая поверхность расплава не деформируется и теплообмен с нагревателем осуществляется посредством излучения. Пусть жидкая фаза занимает область G_1 (см.рис.I) ограниченную боковой поверхностью ампулы Γ_1 , фронтами фазового

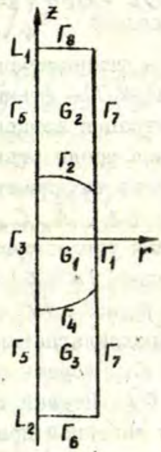


Рис.I.

перехода Γ_2, Γ_4 и осью симметрии Γ_3. Нагреватель может либо покоиться, либо двигаться со скоростью $v_н > 0$ в положительном направлении оси z. В случае движения нагревателя граница Γ_2 является фронтом плавления, а Γ_4 - фронтом кристаллизации. Область G_2 занята исходным переплавляемым составом с постоянной концентрацией C_x, а G_3 -составом, который кристаллизуется в соответствии с равновесной диаграммой. Поскольку длина ампулы $L_1 - L_2$ много больше ее радиуса R, не будем учитывать детали теплообмена на торцах (Γ_6, Γ_8). Диффузией вещества в твердой фазе (области G_2 и G_3) пренебрегаем. Будем искать стационарное решение задачи методом установления.

Математическая модель включает в себя уравнение теплопроводности в жидкой и твердой фазах, уравнения естественной конвекции в приближении Буссинеска и уравнение конвективной диффузии компонента в жидкой фазе. Уравнения запишем в безразмерных переменных.

В системе отсчета, связанной с нагревателем, система уравнений имеет вид

$$\rho_к C_к(\partial T/\partial t + div(\vec{v}T)) = Pr^{-1} div(\lambda_к \, grad\, T), \quad (I)$$

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

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

$$\vec{v} = rot\vec{\psi}, \tag{4}$$

$$\partial c/\partial t + div(\vec{v}c) = Sc^{-1} div\, grad\, c, \tag{5}$$

где Т - температура нормированная на T_H =1360°К, $\vec{\psi}=(0,\psi,0)$ - функция тока, $\vec{\omega}=(0,\omega,0)$ - вихрь, С - концентрация компонента, $\vec{v}=(u,0,v-v_H)$ - скорость движения среды относительно нагревателя, u, v - проекции скорости движения среды относительно ампулы на оси Or и Oz, λ_K, C_K, ρ_K - коэффициент теплопроводности, удельная теплоемкость и плотность в жидкой $(K=\ell)$ и в твердой $(K=S)$ фазах, соответственно, $\lambda_\ell=1$, $C_\ell=1$, $\rho_\ell=\rho_S=1$, Pr - число Прандтля, Sc - число Шмидта.

Предполагается, что плотность жидкой фазы зависит от Т и С. Расчеты проводились при двух типах зависимости $\rho(T,c)$. Первый тип - традиционный, когда $\rho(T,c)$ считается линейной при малых отклонениях T и c от T_0 и c_0:

$$\rho(T,c)=\rho(T_0,c_0)(1+\alpha(c-c_0)-\beta(T-T_0)). \tag{6}$$

Второй тип зависимости построен на основе измерений плотности растворов $Cd_x Hg_{(1-x)} Te$ (КРТ)приведенных в работе /I/. Результаты /I/ аппроксимировались следующей формулой:

$$\rho(T,c)=8{,}05-2{,}5c-0{,}12\cdot10^{-4}(1-c/0{,}13)^2(T-1023-50c)^2, \tag{7}$$

где единицей измерения ρ является г/см^3, а Т - I°К. Из (7) видно, что зависимость плотности растворов КРТ от температуры при фиксированном значении c имеет максимум.

В случае использования (6) $\vec{f}$ в уравнении (2) выглядит так: $\vec{f}=\rho^{-1}rot(\rho\vec{g})=Gr_T[\vec{g}\times\nabla T]+Gr_D[\vec{g}\times\nabla c]$, где $\vec{g}=(0,0,-1)$, Gr_T, Gr_D - соответственно тепловое и концентрационное число Грасгофа. Число Gr_T определено по температуре T_H.

При расчетах с зависимостью (7) $\vec{f}$ имеет вид:

$$\vec{f} = B\,rot(\rho(T,c)/\rho(T_0,c_0)\vec{q}),$$

где $B = R^3 g_0/\nu^2$ - безразмерный параметр, $g_0 = 981$ см/сек^2, $\rho(T_0,c_0)$ - плотность при $c_0 = 0$ и T_0 =1023°К, $\rho(T_0,c_0)$ =8,05 г/см^3.

На оси зададим граничные условия симметрии: на $\Gamma_5 - \partial T/\partial r = 0$, на $\Gamma_3 - \partial T/\partial r = 0$, $\partial c/\partial r = 0$, $\psi = 0$, $\omega = 0$. На Γ_6: $T = T_k(L_2)$ на Γ_8: $T = T_h(L_1)$. Боковая поверхность ампулы Γ_1 нагревается излучением, поэтому имеем $\lambda_s \partial T/\partial r = -A(T^4 - T_h^4)$ на Γ_7 и $\lambda_\ell \partial T/\partial r = -A(T^4 - T_h^4)$ на Γ_1, где A - безразмерный параметр. Для c и ψ на Γ_1 ставим условия $\partial c/\partial r = 0$, $\psi = -v_H/2$ и $\partial(r\psi)/\partial r = -v_H$. Граничные условия на фронте плавления Γ_2 получаем из условия баланса энергии и массы: $\lambda_s \partial T/\partial n - \partial T/\partial n = St\, v_n$, $\psi = -v_H r/2$, $\partial(r\psi)/\partial n = -r v_{H\tau}$, $j_2 = -v_n c_\infty$,

где $\partial/\partial n$ - производная по внутренней к Γ_2 нормали, v_n - нормальная скорость плавления, $v_{H\tau}$ - проекция скорости движения нагревателя на касательную к фронту, j_2 - плотность потока компонента через Γ_2 в жидкую фазу, St - безразмерный параметр. Наконец, на Γ_4 имеем: $\lambda_s \partial T/\partial n - \partial T/\partial n = St\, v_k$, $\psi = -v_H r/2$, $\partial(r\psi)/\partial n = r v_{H\tau}$, $j_4 = -v_k c_{sol}$, здесь j_4 - плотность потока компонента из жидкой фазы, v_k - скорость кристаллизации, $v_{H\tau}$ - проекция скорости движения нагревателя на касательную к фронту, $c_{sol} = \theta(T)$ - равновесная концентрация в твердой фазе, получаемая из уравнения линии солидуса при температуре на фронте Γ_4. Обычно в расчетах на фронтах задается равновесное условие $c = c_{liq}$. Отличие данной постановки от традиционной состоит в том, что скорости v_k и v_n, по которым ищется положение фронтов, находятся из нормального закона роста $v_k = \mu(c - c_{liq})$ на Γ_4 и $v_n = \mu(c - c_{liq})$ на Γ_2, где μ - кинетический коэффициент, c_{liq} - равновесная концентрация ликвидус, которая связана с температурой на фронтах уравнением

$c_{liq} = \varphi(T)$. Температура $T_h(z)$, задаваемая на нагревателе, имела вид: $T_h(z) = 0{,}48 + 0{,}32\, z/2{,}2 \quad L_2 \leq z \leq 2{,}2$, $T_h(z) = 0{,}88 \quad 2{,}2 < z < 2{,}8$, $T_h(z) = 0{,}8 - 0{,}32(z-2{,}8)/2{,}2 \quad 2{,}8 \leq z \leq L_1$. Результаты расчетов с другим типом нагревателя, максимальная температура и градиенты которого меньше, чем у приведенного, описаны в /2/.

Дифференциальные уравнения аппроксимировались разностными схемами на нерегулярной сетке из ячеек Дирихле. В процессе решения сетка перестраивалась в соответствии с движением границ фазового перехода. Подробно постановка задачи и методика расчета описана в работе /2/.

2. Результаты расчетов

Расчеты процесса ампульной зонной плавки проводились для двухкомпонентного полупроводникового материала, имеющего равновесную диаграмму типа сигары (см.рис.2), приведенную в /3/. Скорость движения нагревателя задавалась $v_H = 0$ (покоящийся нагреватель) и $v_H = 3{,}5 \cdot 10^{-3}$. Радиус ампулы $R = 1$ см. Масштаб скорости $\tilde{v}_H = 4{,}3 \cdot 10^{-3}$ см/сек. Характерные числа имели следующие значения: $Sc = 88$, $Pr = 0{,}08$, $St = 0{,}1$, $A = 0{,}25$. $\lambda_s / \lambda_\ell = 0{,}14$, $C_s / C_\ell = 0{,}8$, $\rho_s / \rho_\ell = 1$. Число Грасгофа Gr_T изменялось в пределах $0 \leq Gr_T \leq 5{,}5 \cdot 10^6$. $Gr_T = 5{,}5 \cdot 10^6$ соответствует земным условиям. Расчеты проводились при $Gr_D = 0$, $Gr_D = 2 \cdot 10^7$ и $B = 8 \cdot 10^7$. Коэффициент изменялся в пределах $5 \leq \mu \leq 15$.

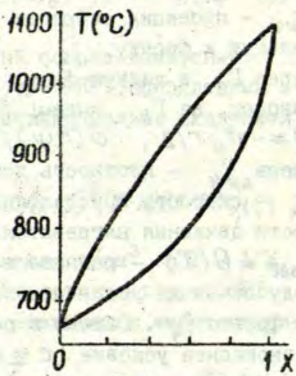


Рис.2.

В результате расчетов находилось распределение температуры в $G_1 \cup G_2 \cup G_3$, форма жидкой зоны, распределение концентрации компонента и функция тока в G_1.

На рис.3,4,5 представлены результаты расчетов с движущимся нагревателем с учетом линейной зависимости $\rho(T,c)$ типа (6). Форма зоны при v_H =3,5·10^{-3} (нагреватель движется вверх) в отсутствии конвекции показана на рис.3. Смещение зоны относительно центра нагревателя в этом случае объясняется тем, что коэффициент распределения для данного материала больше I, и стационарное решение получается тогда, когда масса компонента, входящая в G_1, равна массе компонента, выходящей из G_1. Концентрация компонента перед фронтом кристаллизации получается меньше, чем перед фронтом плавления, что приводит к различным температурам фронтов, и, следовательно, к асимметрии зоны. Искривление фронта кристаллизации является причиной радиальной неоднородности распределения компонента в G_1. Как видно из рисунка 3, изолинии равной концентрации практически прямые, поскольку нет перемешивания в расплаве. По сравнению с описанным в /2/ расчетом, где нагреватель имел другие параметры, жидкая зона стала короче, уменьшилась кривизна фронта роста и фронт плавления стал вогнутым в расплав.

На рис.4 представлены изолинии концентрации и линии тока при тепловой гравитационной конвекции в жидкой зоне (Gr_T =5,5·10^6 , Gr_D =0). Конвекция, сильно перемешивая расплав, симметризует положение жидкой зоны. В зоне образуется область полного перемешивания с практически постоянной концентрацией, а около фронтов формируются концентрационные пограничные слои. Радиальная неоднородность растущего кристалла в этом случае, вследствие перемешивания, существенно меньше, чем при отсутствии конвекции.

Результаты, представленные на рис.4, были взяты в качестве начального условия для расчета влияния совместной тепловой и концентрационной конвекции в жидкой зоне (Gr_T =5,5·10^6, Gr_D =2·10^7). Характер течения и распределение изолиний концентрации при этом практически не изменились. Это объясняется тем, что в центральной части зоны из-за сильного перемешивания градиенты концентрации малы. Область концентрационных пограничных слоев по толщине слишком мала, чтобы внутри них могло образоваться заметное по интенсивности течение.

На рис.5 показана форма жидкой зоны, изолинии концентрации и линии тока тепловой гравитационной конвекции в случае когда вектор $\vec{g}$ направлен вверх. Фронт роста при этом стал практически плоским, а фронт плавления по сравнению с показанным на рис.4 сильно выгнулся в твердую фазу.

Конвекция, как это видно из сравнения рис.3 с рис.4 и 5 симметризует положение зоны относительно нагревателя и увеличивает длину зоны. Радиальная неоднородность выращенного кристалла сильно уменьшается вследствие конвективного перемешивания.

В приведенных выше результатах считалось, что зависимость $\rho(T,c)$ линейная. Использование нелинейной зависимости типа (7) приводит к качественно другим формам конвективного течения, нежели описанные выше. Например, расчеты показывают, что при неподвижном нагревателе в расплаве может образоваться двухвихревое течение вместо одновихревого.

Движение нагревателя приводит к появлению в жидкой зоне перепада концентрации вдоль оси зоны. Это является причиной стратификации плотности расплава, которая может быть устойчивой. Расчеты показали, что при движении нагревателя вверх в процессе выхода на стационарный режим в расплаве около нагревателя формируется слабое одновихревое течение, которое вызвано относительно большим градиентом температуры около него, см.рис.6б. На рис.6а изображены изолинии концентрации, 6б - линии тока. Остальной объем расплава при этом оказывается устойчиво стратифицированным и не перемешивается. При некоторых режимах выращивания на участке квазистационарного роста эта область может занимать всю жидкую зону,

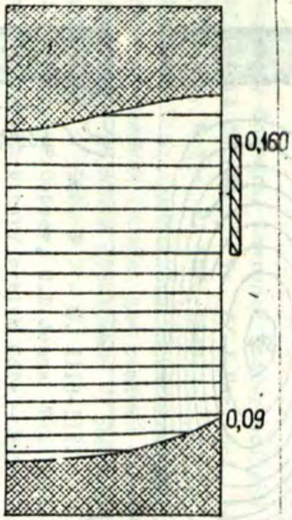


Рис 3 Изолинии концентрации проведены с шагом 0,005.

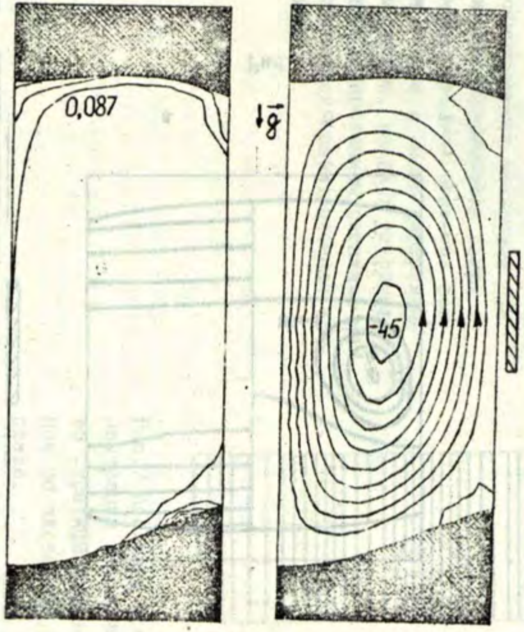


Рис 4. Изолинии концентрации проведены с шагом 0,00025.

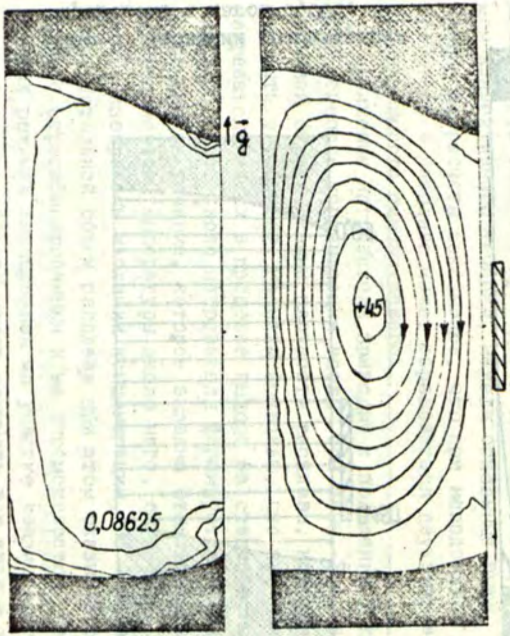
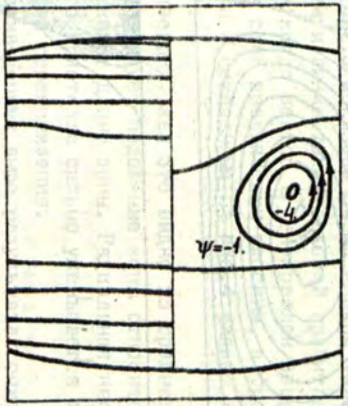


Рис.5 Изолинии концентрации проведены с шагом 0,00025.



а б

Рис. 6

см. рис.7. Сравнивая результаты приведенные на рис. 3 и 7, можно придти к выводу, что для рассмотренного материала при движении нагревателя вверх в земных условиях возможна зонная плавка в чисто диффузионном режиме, когда в устойчиво стратифицированном расплаве не развивается гравитационная конвекция.

Рис.7 Изолинии концентрации в устойчиво стратифицированном по плотности расплаве.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Dipankar Chandra, Lawrence Rozier Holland Density of liquid $Cd_x Hg_{1-x} Te$ // J.Vac. Sci. Technol. - 1983.- A1, N 3 - P. 1620-1624.
2. Апанович Ю.В., Люмкис Е.Д. Применение разностных схем на ячейках Дирихле для решения задач тепломассообмена с фазовыми переходами // Дифференциальные уравнения. - 1988.- № 7 - С. 1113-1121.
3. J.C.Brice, P.Capper, C.L.Jones The phase diagram of the pseudo-binary system CdTe - HgTe and the segregation of CdTe // J. of Crystal Growth. - 1986.- V.75 - P. 395-399.

Сборник научных трудов
ПРИКЛАДНЫЕ ЗАДАЧИ МАТЕМАТИЧЕСКОЙ ФИЗИКИ
Рига: ЛГУ им.П.Стучки, 1989

УДК 536.25

А.А.Божко,
ПГУ, г.Пермь

ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ПРОЦЕССА РАЗВИТИЯ ТЕРМОКОНВЕКЦИИ

Анализ устойчивости какого-либо стационарного состояния обычно начинают, рассматривая бесконечно малые возмущения этого состояния и линеаризуя уравнения движения в его окрестности /I,2/. Получаемая при такой процедуре система однородных линейных дифференциальных уравнений имеет частные решения в виде не взаимодействующих друг с другом и экспоненциально эволюционирующих во времени нормальных возмущений. Поскольку линейный подход применим лишь при достаточной малости этих возмущений, принято считать, что утверждение об их экспоненциальном развитии в области неустойчивости в действительности пригодно лишь в течение короткого промежутка времени после момента срыва стационарного режима /2,I/. С другой стороны, в экспериментах по возбуждению термоконвективной неустойчивости механического равновесия стратифицированной по плотности жидкости наблюдался неожиданно долгий с указанной точки зрения экспоненциальный рост интенсивности конвективной циркуляции: по времени этот этап занимал до половины всего процесса перехода из состояния покоя к устанавливающемуся в итоге стационарному течению, а по амплитуде верхняя граница диапазона экспоненциального роста могла быть сопоставима с интенсивностью конечного режима. В данной работе причины этого расхождения рассматриваются с учетом нелинейного взаимодействия между различными модами, на которые может быть разложено конвективное движение в надкритической области. С этой целью с помощью расположенной в жидкости системы термопар выделяются две низшие гармоники пространственного спектра конвективного движения с точностью до численных коэффициентов соответствующие температурным модам триплета Лоренца /I/. Показано, что на начальном этапе эти гармоники развиваются с существенно разными скоростями. Вследствие этого гармоника с меньшими скоростью развития и, соответственно, амплитудой долгое время практически не влияет на быстро растущую моду, и поведение последней остается аналогичным поведению решения линеаризованных уравнений конвекции.

Для экспериментального изучения задачи о возникновении конвекции из состояния покоя с надкритическим линейным по вертикали профилем плотности используется метод /3/, состоящий в быстром повороте щелевой камеры с жидкостью из горизонтального положения в вертикальное; обратный поворот моделирует возвращение к равновесному состоянию. Для выяснения основных закономерностей переходных процессов целесообразно начать рассмотрение с простейшей термогидродинамической системы /3/. С этой целью ограничим в вертикальном слое замкнутый контур в виде двух параллельных вертикальных каналов, соединенных на концах - так называемую конвективную петлю. Установившиеся режимы течения в связанных каналах изучены весьма подробно /2/. Основной уровень неустойчивости представляет собой циркуляционный поток, поднимающийся в одном из каналов и опускающийся в другом. Следующая структура в виде подъемно-опускного течения, совершающегося автономно в каждом из каналов, проявляется, начиная с чисел $R \approx 6R_0$. Чтобы ограничиться рассмотрением простого циркуляционного течения, в дальнейшем будем описывать диапазон $R \leqslant 5R_0$.

Экспериментальная установка представляла собой алюминиевый стержень, оканчивающийся теплообменниками, по которым прокачивалась вода от ультратермостатов. В стержне были вырезаны две прямоугольные канавки глубиной $2d_1=0{,}82$ см., шириной $2d_2=0{,}64$ см. и длиной I5,5 см. с расстоянием между их осями I.2 см. Концы канавок соединялись поперечными перемычками такого же сечения. Их оси отстояли друг от друга на расстоянии I5 см. Чтобы обеспечить возможность визуальных наблюдений, образовавшийся замкнутый канал закрывался прозрачной пластиной из органического стекла. В качестве светорассеивающих частиц использовалась алюминиевая пудра.

Как известно, циркуляционное движение в подогреваемом снизу замкнутом контуре в приближении плоских траекторий или в гидравлическом приближении, предполагающем неизменность профиля скорости в каждом из каналов, описывается при соответствующем выборе единиц измерения нелинейной системой для переменных v, θ_1, θ_2 /4/, аналогичной триплету Лоренца /I/. Величина характеризует скорость конвективной циркуляции. Переменная θ_1 описывает разность температур между каналами, обусловленную циркуляционным движением, а θ_2 - инверсный перепад температур, возникающий в жидкости вследствие накопления избыточного тепла и, соответственно, холода в верхней и нижней частях полости, и играющий роль потенциальной энергии. Для выделения составляющих θ_1 и θ_2 термопарами измерялись разность температур v_1 между центрами длинных каналов в их среднем поперечном сечении и перепад температур v_2 между верхней и нижней соединительными перемычками. С помощью термопары, спаи которой были размещены в алюминиевом блоке напротив соединительных перемычек, находилось падение температуры в массиве на длине каналов. Переход к безразмерным величинам осуществлялся с помощью соотношений $\theta_1 = v_1/T$, $\theta_2 = (v_2 - T)/T$. В качестве единицы единицы длины в числах Рэлея и Фурье $Fo = \chi t/d^2$ использовался обобщенный поперечный размер канала $d = (1/d_1^2 + 1/d_2^2)^{-1/2}$, где χ -коэффициент температуропроводности жидкости. Для нашей установки d = =0,25 см., число Fo =I соответствует 87 с. Экстраполяцией обсуждаемых ниже экспериментальных зависимостей найдено, что пороговое число Рэлея, начиная с которого равновесие жидкости делается неустойчивым, R_0 =5,5∓0,I.

<u>Результаты эксперимента</u>. Характер эволюции составляющих θ_1 и θ_2 в процессе возбуждения конвективного те-

чения демонстрирует рис.I. Первое время после включения силового поля переменные θ_1 и θ_2 испытывают медленный дрейф в пределах 10^{-4}-10^{-3}. Участки кривых с такой амплитудой сливаются с осью абсцисс. На следующем этапе составляющая θ_1 увеличивается по закону $\theta_1 \sim exp(\lambda_1 Fo)$; переменная θ_2 изменяется намного медленнее, чем θ_1, и остается малой по величине. Вследствие этого составляющая θ_1 остается эффективно независимой и довольно долго продолжает нарастать по экспоненциальному закону. Еще один этап эволюции переходных кривых сопряжен с возбуждением изменений второй температурной составляющей по закону $\theta_2 \sim exp(\lambda_2 Fo)$. Развиваясь в таком режиме, составляющая θ_2 быстро приобретает амплитуду, достаточно большую для того, чтобы оказывать влияние на переменную θ_1. В итоге на этом этапе становятся существенными нелинейное взаимодействие и конкуренция изучаемых мод, что приводит к перекачке энергии от первой составляющей ко второй и замедлению темпов роста сначала амплитуды θ_1, а затем - θ_2. На заключительной стадии из-за нелинейного ограничения роста амплитуд этих мод система при малых надкритичностях апериодически, а при больших числах Рэлея - через затухающие колебания, достигает стационарного состояния θ_1^s, θ_2^s.

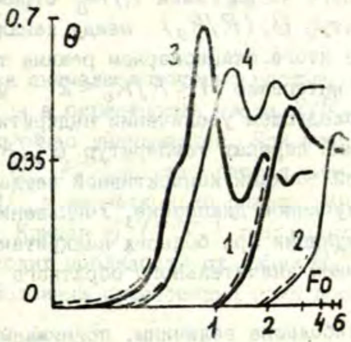


Рис.I. Переходные функции: $\theta_1(Fo)$ - кривые I и 3, относительные числа Рэлея R/R_0 = =2,5 и 5,2; $\theta_2(Fo)$ - кривые 2 и 4 соответственно. Экспоненциальные участки выделены пунктиром.

Для умеренных чисел Рэлея $R/R_0 \leq 3$ характерным является поведение переходных функций, показанное на рис.I кривыми I и 2. При таких надкритичностях нелинейное взаимодействие мод не проявляется долгое время и участки экспоненциального развития имеют большую протяженность. При больших надкритичностях взаимодействие составляющих усиливается и сказывается значительно раньше, поэтому экспоненциальные участки делаются короче, а на переходной кривой $\theta_1(Fo)$ в области, непосредственно прилегающей к концу экспоненциального диапазона появляется добавочный горб.

Зависимость амплитуды составляющих θ_1 и θ_2 на различных стадиях процесса возбуждения конвекции от относительного числа Рэлея R/R_0 отражена на рис.2. Разность температур $\theta_1(R/R_0)$ между каналами в устанавливающемся в итоге стационарном режиме течения быстро возрастает в интервале $1<R/R_0<2$ и медленно уменьшается при последующем увеличении надкритичности. Стационарный инверсный перепад температур $\theta_2^s(R/R_0)$ между верхней и нижней точками конвективной петли монотонно растет во всем изученном диапазоне. Уменьшение амплитуды и скорости циркуляции при больших надкритичностях связано с образованием значительного обратного перепада температур θ_2.

Наибольшие величины, принимаемые составляющими θ_1 и θ_2 в колебательных переходных режимах, то есть ординаты их первых максимумов, представлены на рис.2. кривыми $\theta_1^m(R/R_0)$ и $\theta_2^m(R/R_0)$. В нестационарных условиях в области $R/R_0>1,5$ в окрестности первого максимума составляющая θ_1 имеет существенно большую интенсивность, чем в итоговом состоянии. Максимумы на переходных функциях $\theta_2(Fo)$ выражены намного слабее.

Амплитуды, приобретаемые температурными составляющими к концу экспериментального роста, показаны на рис.2 кривыми $\theta_1^e(R/R_0)$ и $\theta_2^e(R/R_0)$. Амплитуды в начале этих стадий $\theta_1^0(R/R_0)$, $\theta_2^0(R/R_0)\sim 10^{-3}$ в используемом на графике масштабе вплотную примыкают к горизонтальной оси. Из рисунка следует, что интервалы $\theta_1^e-\theta_1^0$ и $\theta_2^e-\theta_2^0$ экспоненциального изменения амплитуд по мере

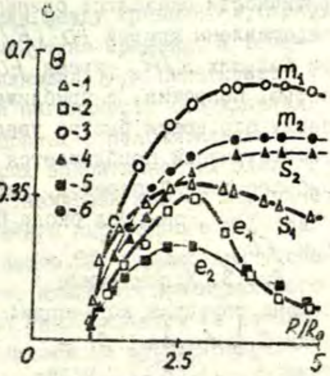


Рис.2. Амплитудные характеристики процесса возбуждения точки I,4, кривые S_1, S_2 - стационарные температуры $\theta_1^s(R/R_0)$ и $\theta_2^s(R/R_0)$ соответственно; точки 2,5, линии e_1, e_2 - верхние границы $\theta_1^e(R/R_0)$ и $\theta_2^e(R/R_0)$ экспоненциального роста температур; точки 3,6, кривые m_1, m_2 - максимальные температуры $\theta_1^m(R/R_0)$ и $\theta_2^m(R/R_0)$.

увеличения параметра Рэлея сначала монотонно растут, достигая максимальных величин в окрестности числа $R/R_0 = 3$, а в дальнейшем так же монотонно уменьшаются. При этом в области максимума кривой $\theta_1^e(R/R_0)$ развиваются значения, близкие или, по данным /3/, даже несколько большие амплитуды конечного состояния. Кривая $\theta_2^e(R/R_0)$ при малых и больших числах Рэлея проходит поблизости от линии $\theta_1^e(R/R_0)$, а в области масимума расположена существенно ниже последней.

Представление о длительности характерных этапов возбуждения конвекции дает рис.3. Протяженность всего переходного процесса и отдельных его стадий существенно зависит от надкритичности. Поэтому целесообразно сопоставлять длительность того или иного этапа эволюции с полными временами Fo_1^s и Fo_2^s достижения установившихся величин θ_1^s и θ_2^s. В апериодических режимах и в тех колебательных переходных процессах, когда температурные кривые приближались к стационарным значениям снизу, эти времена определялись соотношениями $\theta_1(Fo_1^s)=0{,}99\theta_1^s$, $\theta_2(Fo_2^s)=0{,}99\theta_2^s$. Когда переходные функции достигали стационарных величин сверху, использовались уравнения $\theta_1(Fo_1^s)=1{,}01\theta_1^s$; $\theta_2(Fo_2^s)=1{,}01\theta_2^s$. В пределах погрешностей времена полной эволюции составляющих θ_1 и θ_2 при одной и той же надкритичности оказались одинаковыми; на рис.3 эти времена представлены кривой $Fo^s(R/R_o)$. Как видно из графика, при больших R/R_o время Fo^s слабо убывает с надкритичностью. Напротив, с приближением к пороговому значению R_o сверху это время быстро увеличивается - кривая $Fo^s(R/R_o)$ асимптотически приближается к вертикальной оси $R/R_o = 1$. Наиболее долгий переход, зафиксированный в окрестности точки R_o , занимал около 60 единиц безразмерного времени Fo .

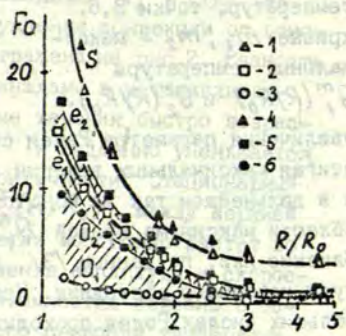


Рис.3. Характерные времена развития конвекции: точки I,4 кривая S - время $F_o^s\,(R/R_o)$ установления стационарной циркуляции; точки 3,6, линии O_1 и O_2 - нижние границы $Fo_1^o(R/R_o)$ и $Fo_2^o(R/R_o)$ экспоненциальных этапов роста температур θ_1 и θ_2 соответственно; точки 2,5, кривые e_1 и e_2 - верхние границы $Fo_1^e(R/R_o)$ и $Fo_2^e(R/R_o)$ экспоненциальных этапов.

Кривая $Fo_1^o(R/R_o)$ на рис.3 показывает время, при котором начинается экспоненциальный рост составляющей $\theta_1(Fo)$. Ниже этой кривой возмущения, вносимые экспериментальной установкой, имеют большую величину, нежели возмущения со структурой критического движения. С увеличением параметра R основное конвективное течение нарастает и делается преобладающим на фоне экспериментальных возмущений намного быстрее; поэтому граница $Fo_1^o\,(R/R_o)$ по мере приближения к правому концу исследованного интервала чисел Рэлея опускается более, чем на порядок. Моменты времени, в которые нарастание переменной θ_1 по экспоненциальному закону прекращается, представлены на рис.3 кривой $Fo_1^e(R/R_o)$.

Таким образом, область, заключенная между кривыми $Fo_1^e(R/R_0)$ и $Fo_1^o(R/R_0)$, отвечает промежуткам времени, в течение которых температурная составляющая θ_1 испытывает экспоненциальное нарастание. Для наглядности обсуждаемая область заштрихована отрезками прямых с положительным угловым коэффициентом. При больших закритичностях этап экспоненциального роста этой составляющей мал по величине и занимает незначительную долю всего переходного периода Fo_1^s : в режиме R/R_0 - около 5%. Однако при уменьшении надкритичности длительность этапа экспоненциального нарастания амплитуды θ_1 резко увеличивается (в режиме $R/R_0 = 1,05$ этот этап продолжался I5 единиц безразмерного времени, или I,3·I0 с), причем доля его во всем переходном процессе повышается до половины и даже более.

Нижняя и верхняя границы области экспоненциального роста составляющей θ_2 изображены на рис.3 линиями $Fo_2^e(R/R_0)$ и $Fo_2^o(R/R_0)$; сама область заштрихована отрезками с отрицательным угловым коэффициентом. Линия $Fo_2^e(R/R_0)$ весьма близка к верхней границе экспоненциального поведения переменной θ_1 .

Однако нижняя граница промежутка экспоненциального роста амплитуды θ_2 вблизи порога неустойчивости R_0 располагается намного выше кривой $Fo_1^o(R/R_0)$. В связи с этим интервал времен экспоненциального развития составляющей θ_2 при таких числах Рэлея оказывается много меньшим аналогичного интервала для переменной θ_1 ; это различие уменьшается с ростом R . Инкременты λ_1 и λ_2 роста амплитуд θ_1 и θ_2 описываются линейными зависимостями $\lambda_1 = m_1(R/R_0 - 1)$ и $\lambda_2 = m_2(R/R_0 - 1)$, проходящими через пороговую точку $R/R_0 = 1$ оси абсцисс. Угловые коэффициенты имеют близкие значения $m_1 = 2,4 \pm 0,1$; $m_2 = 2,2 \pm 0,1$.

В заключение для более полного представления о проведении изучаемой конвективной системы приведем её фазовый портрет в плоскости переменных θ_1 , θ_2 (рис.4: показаны фазовые траектории движений с одним направлением циркуляции; траектории движений с противоположной закруткой отличаются знаком при θ_1 и зеркально симметричны относительно вертикальной оси рисунка). Механическому равновесию отвечает начало координат $\theta_1=0$, $\theta_2=0$. В подкритической области точка (0,0) является устойчивым узлом. Когда параметр Рэлея переходит через критическое значение R_0, начало координат превращается в неустойчивый узел. В области $1< R/R_0<1.5$ переходный процесс носит апериодический характер /3/; поэтому траектории монотонно приближаются к стационарным состояниям, а точки, изображающие такие состояния, являются устойчивыми узлами. Начиная со значения $R/R_0=1,5$, процесс установления представляет собой затухающие колебания, поэтому фазовые траектории имеют вид спиралей, скручивающихся к стационарным точкам, которые в этом случае являются устойчивыми фокусами.

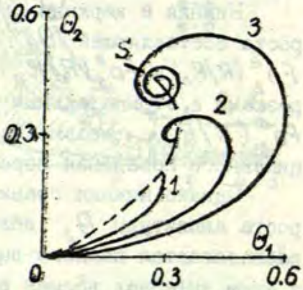


Рис.4. Фазовые траектории переходных процессов. Траектории I,2,3 соответствуют относительным числам Рэлея R/R_0 = I,5, 2,5 и 5,2. S - кривая стационарных состояний. Устойчивые узлы показаны короткими, а устойчивые фокусы - длинными штрихами.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

I. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Гидродинамика.- М.: Наука, 1986.- 736 с.

2. Гершуни Г.З., Жуховицкий Е.М. Конвективная устойчивость несжимаемой жидкости.-М.: Наука, 1972.- 392 с.

3. Зорин С.В., Путин Г.Ф. Лабораторное моделирование процесса развития термоконвекции//Изв АН СССР,ФАС.- 1988.- №4.- С.351-358.

4. Глухов А.Ф., Зорин С.В., Путин Г.Ф., Петухова Е.С. Тепловая конвекция в связанных вертикальных каналах конечной высоты//Конвективные течения - Пермь: ПГПИ.- 1985.- С.24-31.

Сборник научных трудов
ПРИКЛАДНЫЕ ЗАДАЧИ МАТЕМАТИЧЕСКОЙ ФИЗИКИ
Рига: ЛГУ им.П.Стучки, 1989

УДК 536.25

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

УСТОЙЧИВОСТЬ ЗАКРИТИЧЕСКОГО ТЕЧЕНИЯ В БЕСКОНЕЧНОМ СЛОЕ С ДВОЙНОЙ ДИФФУЗИЕЙ ПРИ ТРЕХМЕРНЫХ ВОЗМУЩЕНИЯХ

В настоящей статье исследуется устойчивость двухмерных валов, возникших в результате потери устойчивости неоднородного нагретого слоя двухкомпонентной жидкости. Устойчивость рассматривается по отношению к трехмерным возмущениям.

В настоящее время довольно подробно изучена двухмерная задача о конвективной устойчивости горизонтального слоя двухкомпонентной жидкости. Эта задача рассмотрена, например, в работах /1,2,3/. В работе /4/ исследована устойчивость двухмерных конвективных структур в горизонтальном слое однородной жидкости. В этой работе установлено, что в области существования конвективных валов имеется интервал значений волнового числа, внутри которого они устойчивы по отношению к трехмерным возмущениям, при этом ширина этого интервала зависит от числа Рэлея и область устойчивости ограничена сверху некоторым предельным значением числа Рэлея. Работы, содержащие рассмотрение трехмерных задач для двухкомпонентной жидкости, неизвестны.

Рассмотрим постановку задачи о конвективных движениях двухкомпонентной жидкости в горизонтальном слое. Пусть на границах слоя поддерживается постоянными температура раствора T_Σ и концентрация тяжелой компоненты S_Σ, причем поперек слоя задано линейное распределение температуры и концентрации, а на границах слоя выполняется

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

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

(ось z направлена в вертикальном направлении).
Тогда при возникновении конвективного движения отклонения температуры и концентрации от заданного начального распределения обозначим через

$T(x,y,z,t)$ и $S(x,y,z,t)$, соответственно.
Теперь температуру и концентрацию в произвольной точке слоя можно представить следующим образом:

$$\begin{aligned} T_\Sigma(x,y,z,t) &= T_0-\tilde{T}z/d+T(x,y,z,t) \\ S_\Sigma(x,y,z,t) &= S_0-\tilde{S}z/d+S(x,y,z,t). \end{aligned} \tag{2}$$

Плотность раствора ρ_Σ считаем линейно зависящей от температуры и концентрации:

$$\rho_\Sigma=\rho_0\{1-\tilde{\alpha}(T-\tilde{T}z/d)+\tilde{\beta}(S-\tilde{S}z/d)\}, \tag{3}$$

где $\tilde{\alpha}$, $\tilde{\beta}$ - соответствующие коэффициенты расширения при постоянных других параметрах, притом выбранные так, что они положительны, когда температура или концентрация увеличивается.

Для описания конвективного движения будем использовать трехмерные уравнения Навье-Стокса в классическом для задач конвекции приближении Буссинеска /I/.

Температура раствора и концентрация примеси должны, в свою очередь, удовлетворять, соответственно, уравнению теплопроводности и уравнению диффузии.

Применяя к уравнениям движения оператор rot и переходя к безразмерным переменным с учетом соотношений:

$$[t]=d^2/\nu;\ [v]=\nu/d;\ [T]=\widetilde{T};\ [S]=\widetilde{S};\ [x]=[y]=[z]=d, \quad (4)$$

получим систему уравнений, описывающую конвективное движение, температуру раствора и концентрацию примеси:

$$\begin{cases}
\left(\frac{\partial v_x}{\partial z}-\frac{\partial v_z}{\partial x}\right)'_t=\frac{\partial}{\partial x}((\vec{v}\vec{\nabla})v_z)-\frac{\partial}{\partial z}((\vec{v}\vec{\nabla})v_x)+ \\
\qquad +\Delta\left(\frac{\partial v_x}{\partial z}-\frac{\partial v_z}{\partial x}\right)+\left(-Gr_T\frac{\partial T}{\partial x}-Gr_s\frac{\partial S}{\partial x}\right) \\
\left(\frac{\partial v_y}{\partial z}-\frac{\partial v_z}{\partial y}\right)'_t=\frac{\partial}{\partial y}((\vec{v}\vec{\nabla})v_z)-\frac{\partial}{\partial z}((\vec{v}\vec{\nabla})v_y)+ \\
\qquad +\Delta\left(\frac{\partial v_y}{\partial z}-\frac{\partial v_z}{\partial y}\right)+\left(-Gr_T\frac{\partial T}{\partial y}+Gr_s\frac{\partial S}{\partial y}\right) \\
\left(\frac{\partial v_x}{\partial y}-\frac{\partial v_y}{\partial x}\right)'_t=\frac{\partial}{\partial x}((\vec{v}\vec{\nabla})v_y)-\frac{\partial}{\partial y}((\vec{v}\vec{\nabla})v_x)+ \\
\qquad +\Delta\left(\frac{\partial v_x}{\partial y}-\frac{\partial v_y}{\partial x}\right) \\
\frac{\partial v_x}{\partial x}+\frac{\partial v_y}{\partial y}+\frac{\partial v_z}{\partial z}=0 \\
T'_t=v_z-(\vec{v}\vec{\nabla})T+1/Pr\,\Delta T \\
S'_t=v_z-(\vec{v}\vec{\nabla})S+1/Sc\,\Delta S,
\end{cases} \quad (5)$$

где 1) $Pr=\nu/k_T$ - число Прандтля, $Sc=\nu/k_S$ - число Шмидта - характеристики физических свойств среды,

2) $Gr_T=\frac{g\alpha\widetilde{T}d^3}{\nu^2}$ - тепловое число Грасгофа;

$Gr_s=\frac{g\beta\widetilde{S}d^3}{\nu^2}$ - диффузионное число Грасгофа - характеристики внешнего воздействия.

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

$$\frac{\partial v_x}{\partial z} = \frac{\partial v_y}{\partial y} = v_z = T = S = 0 \ . \qquad (6)$$

Система уравнений (5) с граничными условиями (6) позволяет исследовать пространственное конвективное движение в плоском горизонтальном слое при наличии потоков тепла и вещества, определяемых направлениями заданных градиентов температуры и концентрации.

Теперь опишем последовательность решения задачи о трехмерной потери устойчивости двухмерных конвективных структур:

1) решаем линейную задачу устойчивости, находим границу монотонной неустойчивости, то есть значения параметров задачи, при которых существует двухмерное стационарное конвективное движение;

2) решаем нелинейную двухмерную задачу, находим характеристики двухмерного стационарного движения;

3) решаем нелинейную трехмерную задачу, находим значения волновых чисел при которых двухмерные структуры неустойчивы по отношению к трехмерным возмущениям.

Решение линейной задачи о конвективной устойчивости плоского горизонтального слоя двухкомпонентной жидкости описано, например, в работе /5/. Граница монотонной неустойчивости имеет вид:

$$Gr_T^c = \frac{Gr_S \cdot Sc}{Pr} + \frac{(1+\alpha^2)^3 \pi^4}{\alpha^2 Pr} \ , \qquad (7)$$

где α - волновое число.

Задачу будем решать при значениях параметров использованных в работе /6/ с целью дальнейшего изучения влияния магнитного поля на конвективные движения и их устойчивость:

$$Pr = 0.2 \ ; \ Sc = 0.247 \ ; \ Gr_S = 5 \cdot 10^4 \ .$$

Для них приведем значения критических чисел Грасгофа:

$\alpha = 0.353 \qquad Gr_T^c \approx 60008$

$\alpha = 0.707 \qquad Gr_T^c \approx 55158.$

Нелинейная задача (5,6) решалась методом Бубнова-Галеркина, применение которого для таких задач описана, например, в работе /7/. Был выбран вид решения, учитывающий взаимодействие возмущений, определяемых волновыми векторами $\vec{\alpha}_j$, параллельными плоскости OXY и образующими угол δ_j с плоскостью OXZ:

$$Q_i = \sum_{n=0}^{N} \sin\left(\varkappa_i \frac{\pi}{2} + \pi z \cdot n\right) \sum_{m_1=0}^{M_1} \sum_{m_2=-M_2}^{M_2} A_{i,n,m_1,m_2}(t) *$$

$$* \sin\left(\eta_i \frac{\pi}{2} + \pi x \cdot \sum_{j=1}^{2} m_j \alpha_j \cos\delta_j + \pi y \cdot \sum_{j=1}^{2} m_j \alpha_j \sin\delta_j\right), \tag{8}$$

где Q_i при i = 1,2,3,4,5 соответствуют искомым функциям v_x, v_y, v_z, T, S, причем $\varkappa_1 = \varkappa_2 = \eta_3 = \eta_4 = \eta_5 = 1$, $\varkappa_3 = \varkappa_4 = \varkappa_5 = \eta_1 = \eta_2 = 0$ и $\alpha_j = |\vec{\alpha}_j|$. Двумерная задача решалась при $N = 4$, $M_1 = 4$. Трехмерная задача решалась при $N = 4$, $M_1 = 4$, $M_2 = 4$. Полученная система обыкновенных дифференциальных уравнений решалась с помощью стандартной программы, автоматически выбирающей метод решения (в зависимости от степени жесткости системы) и шаг интегрирования. Полученные значения амплитуд использовались для вычисления возмущений температуры, концентрации, плотности и компонент скорости в различных точках слоя, а также для определения интенсивности тепломассопереноса, характеризуемой тепловым и диффузионным числами Нуссельта, которые считались основной характеристикой полученного режима.

Теперь рассмотрим результаты численных расчетов.

Задача решалась при следующих значениях параметров: Pr =0.2; Sc = 0.247; $Gr_S = 5 \cdot 10^4$; $Gr_T = 7 \cdot 10^4$.

При $\delta_1 = 0^0$, $\alpha_1 = 0.353$ получен стационарный режим с

$T_{NI} = 2.9960$, $S_{NI} = 3.2893$.

При $\delta_1 = 0^{\circ}$, $\alpha_1 = 0.707$ получен стационарный режим с $T_{NI} = 3.6583$, $S_{NI} = 3.9336$.

Изолинии возмущений плотности для этих режимов приведены на рис.I.

Таким образом, получены стационарные режимы, устойчивость которых будем в дальнейшем изучать, то есть решать трехмерную задачу, начальные условия которой будут эти двумерные режимы конвективного движения.

Теперь рассмотрим результаты для варианта с $\delta_1 = 0^{\circ}$, $\alpha_1 = 0.707$.

При $\delta_2 = 90^{\circ}$ и $\alpha_2 = 0.353$ получен колебательный режим с $T_{NI} = 1.7082$, $S_{NI} = 1.9059$.

При $\delta_2 = 90^{\circ}$ и $\alpha_2 = 0.707$ двухмерный режим оказался устойчивым.

При $\delta_2 = 90^{\circ}$ и $\alpha_2 = 1.414$ получен новый стационарный режим с $T_{NI} = 3.5588$, $S_{NI} = 3.8401$.

Следующие результаты получены для варианта с $\delta_2 = 0^{\circ}$, $\alpha_2 = 0.353$.

При $\delta_2 = 90^{\circ}$ и $\alpha_2 = 0.353$ получен колебательный режим с $T_{NI} = 1.7438$, $S_{NI} = 1.9372$.

При $\delta_2 = 90^{\circ}$ и $\alpha_2 = 0.707$ получен колебательный режим с $T_{NI} = 1.8887$, $S_{NI} = 2.1042$.

При $\delta_2 = 90^{\circ}$ и $\alpha_2 = 1.414$ получен колебательный режим с $T_{NI} = 2.6820$, $S_{NI} = 2.9580$.

На рис.2 приведены графики спектров теплового числа Нуссельта для этих режимов.

Как мы видим здесь реализуются три разные возможности:

I) двухмерный режим устойчив и трехмерным возмущениям;

2) двухмерный режим неустойчив к трехмерным возмущениям и возникает другой стационарный режим;

3) двумерный режим неустойчив к трехмерным возмущениям и возникает колебательный режим.

В дальнейшем предполагается исследовать более широкую область определяющих параметров задачи и изучить влияние поперечного магнитного поля на эти процессы.

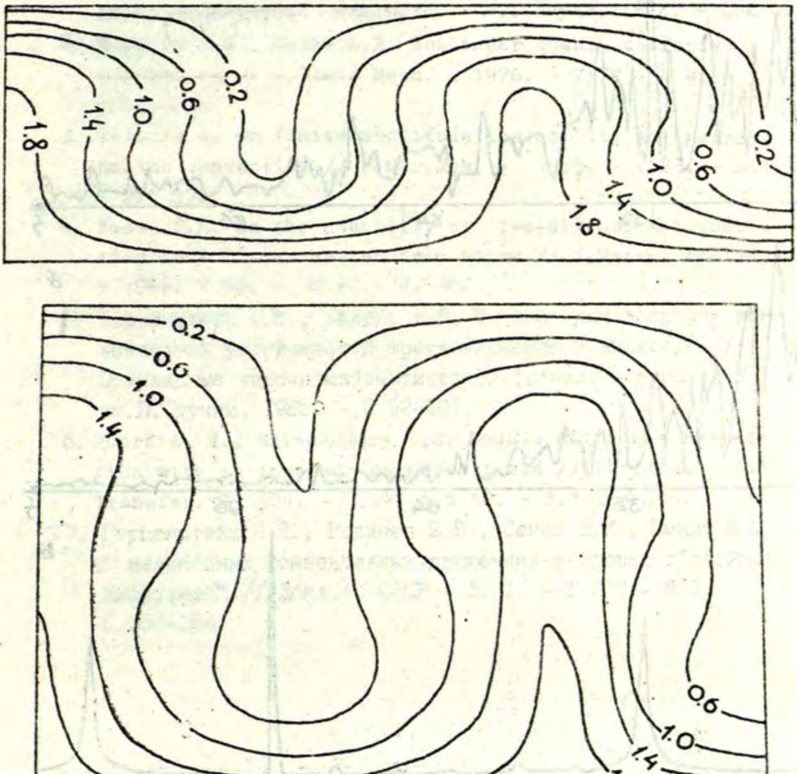


Рис.I Изолинии возмущений плотности при $Pr = 0.2$;
$Sc = 0.247$; $Gr_S = 5\ 10$; $Gr_T = 7\ 10$; $\delta_1 = 0^o$;
а) $\alpha_1 = 0.353$, б) $\alpha_1 = 0.707$.

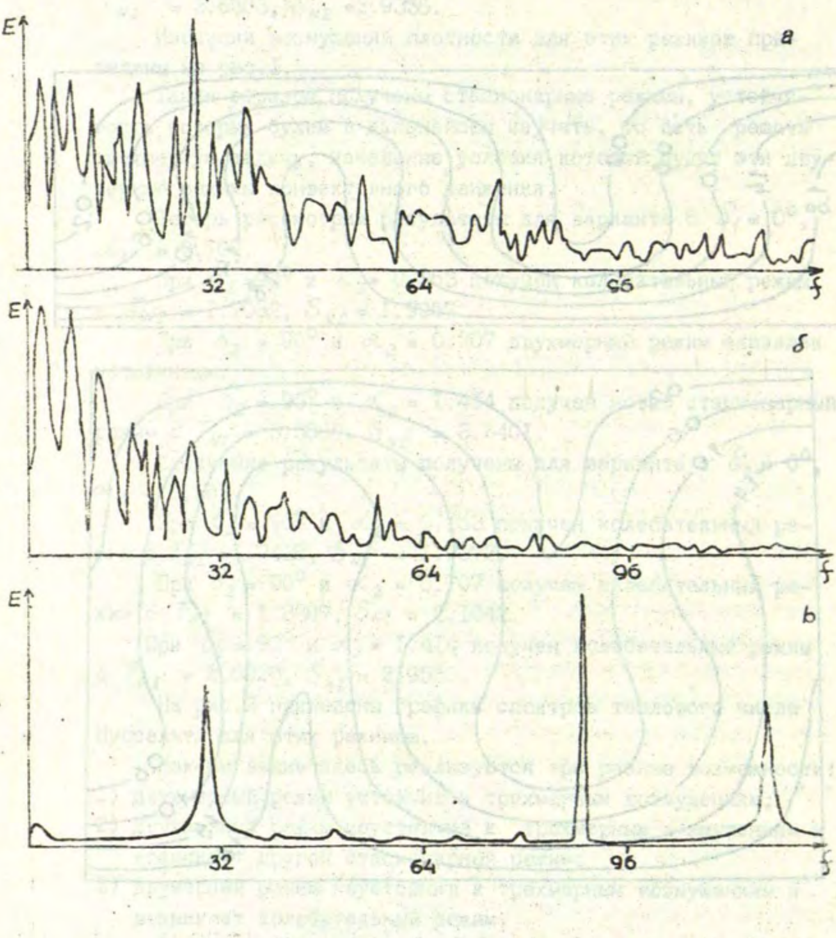


Рис.2. Спектр T_N при Pr = 0.2; Sc = 0.247;
Gr_S = $5\cdot 10^4$; Gr_T = $7\cdot 10^4$; $\delta_1 = 0^o$; α_1 = 0.353;
$\delta_2 = 90^o$
а) 0.353, б) α_2 = 0.707, в) α_2 = 1.414.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Гершуни Г.З., Жуховицкий Е.М. Конвективная устойчивость несжимаемой жидкости. - М.: Наука, 1972. - 392 с.
2. Huppert H.E., Moore D.R. Nonlinear double diffusive convection // J.Fluid Mech. - 1976. - V.78 - N 4. - P.821-854.
3. Veronis G. On finite amplitude instability in thermohaline convection // J.Mar.Res. - 1965. - V.23. - N 1. - P.1-17.
4. Busse F.H. On the stability of two-dimensional convection in a layer heated from below // J.Match. and Phys. - 1967. V.46. - N 2. - P.140.
5. Герценштейн С.Я., Калейс А.Я. О некоторых вопросах конвективной устойчивости трехкомпонентной жидкости // Прикладные задачи математической физики. - Рига: ЛГУ им.П.Стучки, 1985. - С.92-101.
6. Rudraiah N., Shiwakumara I.S. Double diffusive convection with an imposed magnetic field // Int.J.Heat Mass Transfer. - 1984. - V.27. - N 10. - P.1825-1836.
7. Герценштейн С.Я., Родичев Е.Б., Семин В.Н., Шмидт В.М. О нелинейных конвективных движениях в средах с"двойной диффузией" // Докл.АН СССР - 1981. - Т.257 - № 3. - С.350-354.

Сборник научных трудов
ПРИКЛАДНЫЕ ЗАДАЧИ МАТЕМАТИЧЕСКОЙ ФИЗИКИ
Рига: ЛГУ им.П.Стучки, 1989

А.Ю.Гельфгат

УДК 532.516.5+536.25 ВЦ при ЛГУ им.П.Стучки

РЕШЕНИЕ ЗАДАЧ ТЕПЛОВОЙ КОНВЕКЦИИ МЕТОДОМ ГАЛЕРКИНА: ТЕСТОВЫЕ РАСЧЕТЫ

В работе /I/ излагается вариационный метод решения задач динамики вязкой несжимаемой жидкости в прямоугольных областях. Этот метод применялся в /2,3/ для исследования устойчивости стационарных и расчета нестационарных конвективных течений в нагреваемой сбоку квадратной полости. В настоящей работе результаты, полученные изложенным в /I/ методом, сравниваются с известными численными и экспериментальными данными. Рассматриваются следующие тестовые задачи: задача устойчивости равновесия жидкости, нагреваемой снизу; задача о стационарной термогравитационной конвекции в квадратной полости с изотермическими боковыми стенками; задача о стационарной термокапиллярной конвекции в квадратной полости с изотермическими боковыми стенками; задача определения порога устойчивости стационарного термогравитационного конвективного течения.

I. Решение системы уравнений свободной конвекции в приближении Обербека-Буссинеска

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

$$\frac{\partial \theta}{\partial t} + (\vec{v}\nabla)\theta = -\Delta\theta/Pr\,; \quad div\,\vec{v} = 0\,,$$

где $\vec{v}$ - скорость жидкости, θ - температура, p - давление, Gr - число Грасгофа, Pr - число Прандтля, ищется в прямоугольной области $0 \leq x \leq 1$, $0 \leq y \leq A$, $A = h/\ell$ h - высота, ℓ - длина полости) в виде

$$\vec{v} = \vec{u} + \sum_{i,j=0}^{N} C_{ij}(t)\,\vec{\varphi}_{ij}(x,y), \tag{2}$$

$$\theta = G + \sum_{i,j=0}^{K} d_{ij}(t)\, q_{ij}(x,y). \tag{3}$$

Функции $\vec{u}$ и G подбираются так, чтобы удовлетворить всем (однородным и неоднородным) граничным условиям. При этом если все краевые условия линейны, то граничные условия для координатных функций $\vec{\varphi}_{ij}$ и $\vec{q}_{ij}$ становятся однородными. Функции $\vec{\varphi}_{ij}$ и $\vec{q}_{ij}$ строятся из линейных комбинаций полиномов Чебышева I и П рода $T_i(x)$ и $U_i(x)$ в виде:

$$q_{ij}(x,y) = \sum_{\ell=0}^{2} \alpha_{i\ell} T_{i+\ell}(x) \sum_{\ell=0}^{2} \beta_{j\ell} T_{j+\ell}(y/A), \tag{4}$$

$$\vec{\varphi}_{ij}(x,y) = \begin{pmatrix} \sum\limits_{\ell=0}^{4} \frac{f_{\ell i}}{2i} T_{i+\ell}(x) \sum\limits_{\ell=0}^{4} g_{\ell j} U_{j+\ell-1}(y/A) \\ -A \sum\limits_{\ell=0}^{4} f_{\ell i} U_{i+\ell-1}(x) \sum\limits_{\ell=0}^{4} \frac{g_{\ell j}}{2j} T_{j+\ell}(y/A) \end{pmatrix}. \tag{5}$$

Коэффициенты $\alpha_{i\ell}, \beta_{j\ell}, f_{\ell i}, g_{\ell j}$ определяются с точностью до умножения на константу с помощью подстановки выражений (4-5, в граничные условия. Из соотношения $T'_{i+1}(x) = 2(i+1)\,U_i(x)$ следует $div\, \vec{\varphi}_{ij} = 0$. Во всех излагаемых ниже расчетах, подробно описанных в /I/, проекционная система функций совпадала с координатной, то есть использовалась классическая формулировка метода Галеркина /4/.

После подстановки сумм (2-3) в систему уравнений (I) и вычисления соответствующих скалярных произведений задача сводится к следующей системе обыкновенных дифференциальных уравнений (ОДУ) первого порядка:

$$\dot{X}_i = a_{ij} X_j + b_{ijk} X_j X_k + F_i , \qquad (6)$$

где X_i - один из коэффициентов C_{ij} или d_{ij}.

2. При исследовании устойчивости равновесия нагреваемой снизу жидкости рассматривались плоский слой со свободными или твердыми границами и двумерная прямоугольная полость с четырьмя твердыми стенками. Число Прандтля во всех расчетах принималось равным единице ($Pr=1$).

Для задачи устойчивости равновесия неоднородно нагретой жидкости в плоском слое с изотермическими границами существует аналитическое решение /5/. При проведении численных расчетов рассматривались прямоугольные области, на вертикальных границах которых задавались условия пространственной периодичности. Длина области определялась известным из аналитического решения пространственным периодом наиболее опасного возмущения. В табл.I показаны критические числа Рэлея, полученные для плоских слоев с твердыми и свободными границами при различном числе координатных функций в суммах (2-3). По обоим направлениям использовалось одинаковое количество функций.

Таблица I

Число координатных функций	Критическое число Рэлея	
	твердые границы	свободные границы
2	I751,I97733	664,8694I67
4	I708,550224	654,5I85382
6	I707,762049	657,5II39I3
8	I707,76I807	657,5II3982
I0	I707,76I807	657,5II3982

Сравнение вычисленных критических чисел с известными результатами, приведенными в /5/ ($Ra_{кр}$ = 657,5II для слоя со свободными и $Ra_{кр}$ = I707,762 для слоя с твердыми границами), показывает, что использование четырех координатных функций дает вполне удовлетворительный результат. В вариантах с восемью и десятью координатными функциями по каждому направлению совпадают десять первых значащих цифр, что практически означает достижение полной сходимости.

В табл.2 показаны результаты исследования устойчивости конвективного равновесия в двумерной прямоугольной полости с четырьмя твердыми стенками. Горизонтальные стенки считались изотермическими, вертикальные - теплоизолированными. Расчеты проводились для полостей с различной относительной длиной. Полученные результаты хорошо согласуются с результатами работы /6/ (см.табл.2). Следует отметить, что расчеты в вытянутых полостях требуют существенного увеличения числа координатных функций. Так, при расчете с $l/h=5$ использовалось 4 функции по направлению y и 16 функций по направлению x.

Таблица 2

Относительная длина полости	Результаты настоящей работы	Результаты работы (6)
0,5	12113,16	12113,10
1	2585,02	2585,03
2	2013,24	2013,24
3	1870,60	1870,72
4	1810,28	1810,48
5	1778,56	1779,00

3. Расчет стационарных термогравитационных конвективных течений в квадратной полости с твердыми стенками проводился для тех же параметров, что и в работах /7, 8/. В табл.3 приведены результаты решения международного теста по тепловой конвекции /9,10,11/: расчет конвекции воздуха ($Pr = 0,71$) в двумерной квадратной области с изотермическими вертикальными и адиабатическими горизонтальными границами. Вычисления проводились для шести и восьми координатных функций по каждому направлению. В этой же таблице приведены результаты работы /5/, полученные методом коллокаций на сетке из 33 х 33 коллокационных узлов. Как видно из таблицы, результаты для $Ra \leq 10^5$ $(Ra = Gr \cdot Pr)$ совпадают полностью как для различного числа координатных функций, так и для различных численных методов. При $Ra = 10^6$

Таблица 3

Параметры течения	Результаты работы /8/				Результаты настоящей работы							
					6 6 функций				8 8 функций			
Число Рэлея	10^3	10^4	10^5	10^6	10^3	10^4	10^5	10^6	10^3	10^4	10^5	10^6
$\psi(1/2,1/2)$	1,65	7,14	12,8	23,0	1,66	7,13	12,9	25,2	1,66	7,15	12,9	21,2
ψ_{max}	-	-	13,5	23,6	-	-	13,6	34,8	-	-	13,6	23,7
X_{max}	-	-	0,285	0,151	-	-	0,28	0,25	-	-	0,28	0,15
Y_{max}	-	-	0.601	0,547	-	-	0,6	0,8	-	-	0,6	0,75
U_{max}	5,14	22,79	48,94	91,13	5,13	22,8	49,1	101	5,13	22,8	49,1	96,3
ω_{max}	5,21	27,63	96,65	309,8	5,21	27,6	94,0	298	5,21	27,6	94,0	292

Решение международного теста по тепловой конвекции и сравнение с результатами работы /8/.

ψ_{max} – максимальное значение функции тока,

$\psi(1/2,1/2)$ – значение функции тока в центре полости,

X_{max}, Y_{max} – координаты максимума функции тока,

U_{max}, ω_{max} – максимальные значения x- и y-составляющих скорости.

Таблица 4

Число Грасгофа	Число Прандтля	Максимальное значение функции тока			
		Результаты Е.Л.Тарунина /7/	Результаты В.А.Мальцева /9/	Результаты настоящей работы	
				6 6 функций	8 8 функций
I0^{4}	I	6,37	-	6,35	6,37
I0^{5}	I	I3,I	I3,06	I3,0	I3,I
I,4I·I0^{6}	0,73	30,54	-	39,I	30,0
I0^{6}	I	-	22,6	29,9	2I,6
4·I0^{5}	0,I	-	I22,I	III	I06
2,4·I0^{6}	0,73	-	34,2	48,2	35,0
5,6·I0^{6}	0,73	-	41,6	57,3	49,4

Сравнение результатов расчетов стационарных конвективных течений с результатами работ /7,9/.

наблюдаются небольшие расхождения в величинах, характеризующих интенсивность течения. В то же время пространственная форма течений качественно не меняется. Наибольшие расхождения наблюдаются в положении максимума функции тока, что свидетельствует об усложнении структуры течения вблизи центра полости с ростом числа Рэлея.

Результаты расчетов в случае полости с теплопроводящими горизонтальными границами при различных числа Грасгофа и Прандтля показаны в табл.4. В табл.4 приведены также результаты работ /7,9/. И в этом случае наблюдаются небольшие расхождения при $Gr > 10^5$, однако в целом и в этой задаче полученные результаты совпадают с результатами других работ.

4. Результаты расчета стационарных термокапиллярных течений в квадратной полости с изотермическими вертикальными и теплоизолированными горизонтальными стенками при $Pr = 1$ сравниваются в табл.5 с результатами, полученными методом конечных разностей в /12/. Для преодоления трудностей, которые связаны с аппроксимацией граничного условия, содержащего термокапиллярную силу, необходимо увеличивать число координатных функций по направлению x . Лучшее совпадение с результатами /12/ было достигнуто при использовании 9 функций по направлению x и 4 функций по направлению y . Как видно из табл.5, при больших числах Марангони (Ma = 6400, Ma =12800) результаты совпадают лучше, чем при малых. Это может быть связано с тем, что при указанных значениях Ma в /12/ использовалась более мелкая сетка.

Таблица 5

Число Марангони	Максимальное значение функции тока		
	Результат из /12/	Результат настоящей работы	
		4х4 функций	9х4 функций
100	1,062	1,11	1,11
200	1,728	1,82	1,82
400	2,667	2,78	2,80
1600	7,03	6,14	6,74

3200	12,87	10,6	12,2
6400	22,57	20,8	22,4
12800	37,57	32,0	38,1

5. Для тестирования решений задачи устойчивости стационарных термогравитационных конвективных течений использовались результаты работ /13,14,15/. В работе /13/ экспериментально и в /14/ экспериментально и численно определялся порог колебательной неустойчивости для стационарной конвекции воздуха в квадратной полости с теплопроводящими горизонтальными границами. Результаты этих работ следующие: экспериментальные значения критического числа Грасгофа - $Gr_{кр} = 4 \cdot 10^6$ в /13/ и $Gr_{кр} = 3,2 \cdot 10^6$ в /14/; вычисленное в /14/ на основе решения системы нестационарных уравнений конвекции методом конечных разностей - $Gr_{кр} = 2,7 \cdot 10^6$. Критическое число Грасгофа, полученное в настоящей работе путем вычисления собственных значений матрицы Якоби системы ОДУ /16/ при 6 координатных функциях по каждому направлению - $Gr_{кр} = 2,77 \cdot 10^6$. В работе /15/ определялось критическое число Грасгофа для расплава арсенида галлия (Pr = 0,015), находящегося в прямоугольной полости со свободной поверхностью. Рассматривалась полость с адиабатическими горизонтальными, изотермическими вертикальными границами и отношением высоты к длине, равным 1/4. Рассчитанное в /15/ на основе решения нестационарных уравнений конвекции методом конечных элементов критическое число Грасгофа $Gr_{кр} = 2,03 \cdot 10^7$. В настоящей работе получено значение $Gr_{кр} = 1,88 \cdot 10^7$; при этом использовалось 9 функций в направлении x и 4 функции в направлении y.

Таким образом, предложенный в /1/ способ исследования устойчивости стационарных режимов конвекции приводит к результатам, хорошо согласующимся с полученными ранее численными и экспериментальными данными. Получаемые в эксперименте значения критического числа Грасгофа несколько больше получающихся в численном расчете. Этот факт объясняется в /14/ зависимостью вязкости от температуры и недостаточно точным выполнением граничных условий. С другой стороны, численный расчет позволяет выявить колебания с очень небольшой амплитудой, а метод, применяемый в настоящей работе, определяет значение критического числа, при котором амплитуда колебаний бесконечно мала. Малые амплитуды могут быть недоступны для экспериментальных измерений и, поэтому, рассчитанный порог устойчивости оказывается меньше получаемого в эксперименте.

Результаты проведенных тестовых расчетов свидетельствуют о том, что изложенный в /I/ численный метод позволяет получать вполне удовлетворительные результаты при сравнительно небольшом числе координатных функций в суммах (2-3). Это позволяет исследовать устойчивость стационарных режимов и рассчитывать нестационарные режимы конвективных течений с помощью динамических систем (6) сравнительно небольшой размерности.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

I. Гельфгат А.Ю. Вариационный метод решения задач динамики вязкой несжимаемой жидкости в прямоугольных областях// Прикладные задачи математической физики. - Рига: ЛГУ, 1987. - С.14-24.
2. Гельфгат А.Ю., Мартузан Б.Я. Устойчивость и колебательные режимы естественной конвекции в нагреваемой сбоку прямоугольной полости// Прикладные задачи математической физики. - Рига: ЛГУ, 1988. - С.31-40.
3. Гельфгат А.Ю. Влияние величины и направления магнитного поля на колебательные режимы термогравитационной конвекции в прямоугольной полости// Магнитная гидродинамика.- 1988. - № 3. - С.70-75.
4. Флетчер К. Численные методы на основе метода Галеркина.- М.: Мир, 1988. - 352 с.
5. Гершуни Г.З., Жуховицкий Е.М. Конвективная устойчивость несжимаемой жидкости.-М.: Наука, 1972. - 362 с.
6. Luijkx J.M., Platten J.K. On the onset of free convection in a rectangular channel// J.Non-Equilibr.Thermodyn.- 1981. - V.6.- No.3.- P.141-158.

7. Тарунин Е.Л. Двухполевой метод решения задач гидродинамики вязкой жидкости.—Пермь, 1985. - 88 с.
8. Quere P. le, Roquefort T.A. Computation of natural convection in two-dimensional cavities with Chebychev polynomials//J.Comput.Phys.- 1985.- V.57.- P.210-228.
9. Мальцев В.А. Решение задачи конвективного теплообмена методом полиномов Лагранжа-Чебышева// Уральский ГУ.- Свердловск, 1987.- С.2-16. - Деп.ВИНИТИ.- №1652-В87.
10. Vahl Davis G., Jones I.P. Roache P.J. Natural convection in a square cavity: a comparison exercise//Comput, and fluids.- 1979.- V.7.- No.4.- P.315-316.
11. Vahl Davis G., Jones I.P. Natural convection in a square cavity: a comparison exercise//Int.J.Numer.Meth.Fluids.- 1983.- V.3.- P.227-248.
12. Математическое моделирование конвективного теплообмена на основе уравнений Навье-Стокса// Полежаев В.И., Буне А.В., Верезуб Н.А., Глушко Г.С. и др. - М.: Наука, 1987.- 272 с.
13. Бригс Д.Г., Джонс Д.Н. Двумерная периодическая естественная конвекция в замкнутой прямоугольной полости с отношением сторон, равным единице// Труды амер.об-ва инж.-мех.сер.Теплопередача. - 1985. - Т.107. - № 4. - С.93-98.
14. Тарунин Е.Л., Шайдуров В.Г., Шарифуллин А.Н. Экспериментальное и численное исследование устойчивости замкнутого конвективного пограничного слоя// Конвективные течения и гидродинамическая устойчивость. - Свердловск, 1979. - С.3-16.
15. Crochet M.J., Geyling F.T., Van Schaftingen J.J. Finite element method for calculating the growth of semi-conductor crystals// Finite element methods in flow problems.- Austin, 1984.- P.1-5.
16. Хэссард Б., Казаринов Н., Вэн И. Теория и приложения бифуркации рождения цикла.-М.: Мир, 1985. - 280 с.

Сборник научных трудов
ПРИКЛАДНЫЕ ЗАДАЧИ МАТЕМАТИЧЕСКОЙ ФИЗИКИ
Рига: ЛГУ им. П.Стучки, 1989

УДК 536.25

А.Ф.Глухов
Пермский фарминститут

КОНВЕКЦИЯ БИНАРНОЙ СМЕСИ В ЯЧЕЙКЕ ХЕЛЕ-ШОУ

Конвективные течения однокомпонентной жидкости в ячейке Хеле-Шоу хорошо описываются системой обыкновенных дифференциальных уравнений, получаемых из уравнений конвекции методом Галеркина /I/. Получаемые на основе этих уравнений результаты согласуются с экспериментом /I, 2/. С другой стороны, имеются экспериментальные наблюдения течений в ячейке и конвективной петле /3, 4, 5/, не описываемые в рамках принятой модели. Как показано в данной работе, эти расхождения могут быть объяснены наличием в основной жидкости неоднородно распределенной примеси другой жидкости с иной плотностью.

Рассмотрим полость, имеющую форму прямоугольного параллелепипеда, один из горизонтальных размеров которого $2d$ много меньше двух других размеров - высоты Hd и ширины Ld (ячейка Хеле-Шоу). Полость заполнена бинарной смесью двух жидкостей. Для решения задачи используем уравнения конвекции в приближении Обербека-Буссинеска /6/.

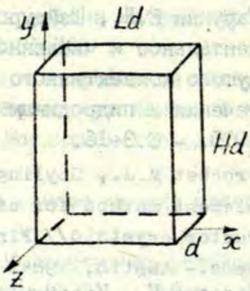


Рис.I

На широких гранях ячейки зададим постоянные вертикальные градиенты температуры ∇T и концентарации тяжелой компоненты ∇C . На узких гранях обязательного условия непроницаемости граничные условия, как это показано в /I/, можно ставить из соображений удобства вычислений, т.к. малая относительная площадь узких боковых границ приводит к столь же малой относительной доле диссипации на этих границах.

Если оси координат расположить, как это показано на рис.I, то граничные условия запишутся в виде:

$$\vec{v}=0, \quad T=0, \quad c=0 \qquad (z=\pm d)$$

$$\frac{\partial v_y}{\partial x}=0, \quad v_x=0, \quad \frac{\partial T}{\partial x}=0, \quad \frac{\partial c}{\partial x}=0 \qquad (x=0, Ld)$$

$$\frac{\partial v_x}{\partial y}=0, \quad v_y=0, \quad T=0, \quad c=0 \qquad (y=0, Hd).$$

Малая толщина полости $H, L \gg 1$ позволяет положить $v_z=0$ и ввести функцию тока $\psi=\psi(x,y)$ так, что $v_x=-\frac{\partial\psi}{\partial y}, \; v_y=\frac{\partial\psi}{\partial x}$.

Уравнения в этих условиях имеют следующий вид:

$$S^{-1}(\omega_t+\psi_x\omega_y-\psi_y\omega_x)=\Delta\omega+R_1S^{-1}PT_x-R_2c_x$$

$$PS^{-1}(T_t+\psi_xT_y-\psi_yT_x)=\Delta T+PS^{-1}\psi_x$$

$$c_t+\psi_xc_y-\psi_yc_x=\Delta c-\psi_x \qquad \text{(I)}$$

$$\omega=-\Delta_1\psi, \quad \Delta_1=\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{\partial^2}{\partial y^2}, \quad \Delta=\Delta_1+\frac{\partial^2}{\partial z^2}.$$

Здесь $P=\frac{\nu}{\varkappa}$ и $S=\frac{\nu}{\mathcal{D}}$ - числа Прандля и Шмидта, $R_1=\frac{g\beta_1Ad^4}{\nu\varkappa}$ и $R_2=\frac{g\beta_2Bd^4}{\nu\mathcal{D}}$ - тепловое и концентрационное число Рэлея. В качестве единиц длины, времени, скорости, температуры и концентрации выбраны соответственно

$$d, \; d^2/\mathcal{D}, \; \mathcal{D}/d, \; Ad, \; Bd.$$

Граничные условия к системе перепишутся следующим образом:

$$\psi = T = C = 0 \qquad (z = \pm 1)$$

$$\psi = \frac{\partial^2 \psi}{\partial y^2} = T = C = 0 \qquad (y = 0, H) \qquad (2)$$

$$\psi = \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} = \frac{\partial T}{\partial x} = \frac{\partial C}{\partial x} \qquad (x = 0, L)$$

Линеаризованная задача (I-2) допускает точное решение:

$$\psi \sim \sin\frac{n\pi x}{L}\,\sin\frac{m\pi y}{H}\,\cos\frac{\pi z}{2} \qquad (3)$$

$$T \sim C \sim \cos\frac{n\pi x}{L}\,\sin\frac{m\pi y}{H}\,\cos\frac{\pi z}{2}.$$

Границей монотонной неустойчивости механического равновесия является прямая $R_1 = R_2 + R_{nm}$,
где $R_{nm} = \pi^4(n^2 + \varepsilon m^2)[4p(n^2 + \varepsilon m^2) + 1]/16n^2$

$$n, m = 1, 2, 3 \ldots, \quad p = 1/L^2, \quad \varepsilon = L^2/H^2.$$

Граница колебательной неустойчивости описывается формулой

$$R_1 = \frac{P^2(S+1)}{S^2(P+1)} + R_{nm}\frac{(S+P)(S+1)}{S^2}.$$

Частота колебаний на границе устойчивости равновесия –

$$\omega^2 = \left(\frac{n^2\pi^2}{L^2} + \frac{m^2\pi^2}{H^2} + \frac{1}{4}\right)\frac{S-P}{P+1}\left(R_2 - R_{nm}\frac{P+1}{S-P}\right).$$

При $S > P$ пороговые прямые монотонной и колебательной неустойчивости пересекаются в точке $R_2^* = R_{nm}(P+1)/(S-P)$. поэтому в случае $S > P$ колебательная неустойчивость (при фиксированном R_2) должна наступать раньше (при меньших R_1), чем монотонная, т.е., как и в вертикальном слое бинарной смеси /6/, в ячейке Хеле-Шоу при $R_1 > R_2^*$ переход от механического равновесия к конвекции должен совершаться колебательным образом.

Используя систему функций (2) в качестве базиса для описания координатной зависимости решения и применяя процедуру Галеркина, можно получить систему обыкновенных дифференциальных уравнений для амплитуд. Структура получаемых уравнений такова, что из нее выделяется замкнутая подсистема из пяти уравнений для Ψ_{11}, T_{11}, T_{02}, C_{11}, C_{02}, т.е. координатная зависимость выделенной подсистемы имеет вид:

$$\Psi = \Psi_{11}(t)\sin\frac{\pi x}{L}\sin\frac{\pi y}{H}\cos\frac{\pi z}{2},$$

$$T = T_{11}(t)\cos\frac{\pi x}{L}\sin\frac{\pi y}{H}\cos\frac{\pi z}{2} + T_{02}(t)\sin\frac{\pi y}{H}\cos\frac{\pi z}{2},$$

$$c = c_{11}(t)\cos\frac{\pi x}{L}\sin\frac{\pi y}{H}\cos\frac{\pi z}{2} + c_{02}(t)\sin\frac{\pi y}{H}\cos\frac{\pi z}{2}$$

и описывает одновихревое течение, а уравнения для соотвествующих амплитуд записываются следующим образом:

$$\begin{aligned}
\dot\Psi_{11} &= -fS\Psi_{11} - \frac{R_1 S^2}{\pi^4 a P}T_{11} + \frac{R_2 S}{\pi^4 a}c_{11},\\
\dot T_{11} &= -(4T_{02}+1)\Psi_{11} - f\frac{S}{P}T_{11},\\
\dot T_{02} &= 2T_{11}\Psi_{11} - bST_{02}/P,\\
\dot c_{11} &= -(4c_{02}+1)\Psi_{11} - fc_{11},\\
\dot c_{02} &= 2c_{11}\Psi_{11} - bc_{02},\\
a &= 1+\varepsilon,\quad b = 4p\varepsilon + \frac{1}{4},\quad f = pa + \frac{1}{4}.
\end{aligned} \qquad (4)$$

Единицы времени, функции тока, температуры и концентрации в системе (4) отличаются от старых соотвественно множителями

$$1/\pi^2, \; 3LH\pi/2, \; 3H/2, \; 3H/2 .$$

Аналогичная система получена в работе /7/ при изучении конвекции в подогреваемом снизу плоском слое жидкости с неоднородной соленостью.

Отметим также, что при $R_2 = 0$ (в случае однородной жидкости) и при соответствующем выборе единиц система превращается в известный триплет Лоренца,

Система (4) имеет стационарное решение

$$\Psi_{II} = \pm\sqrt{-\frac{h}{2} \pm \sqrt{\frac{h^2}{4} - \ell}}\,, \qquad T_{II} = -\frac{\Psi_{II}\, b P}{\Psi_{II}^2\, 8P^2 + bfS^2}$$

$$T_{02} = \frac{2\Psi_{II} T_{II} P}{bs}\,, \qquad C_{II} = -\frac{\Psi_{II}\, b}{\Psi_{II}^2\, 8 + bf} \qquad (5)$$

$$C_{02} = \frac{2\Psi_{II} T_{II}}{b}\,, \qquad \ell = \frac{b^2 f^2 S^2}{64 P^2}(\mu_2 + 1 - \mu_1)$$

$$h = \frac{bf}{8}\left[\frac{S^2}{P^2}(1-\mu_2) + 1 + \mu_1\right], \quad \mu_1 = R_1/R_0\,, \quad \mu_2 = R_2/R_0\,,$$

здесь R_0 - нижнее критическое тепловое число Рэлея.

На рис.2 приведена зависимость функции тока Ψ_{II} от относительного теплового числа Рэлея μ_1 при фиксированном μ_2 .

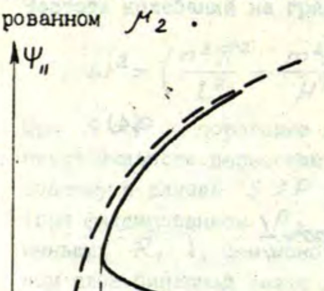


Рис.2

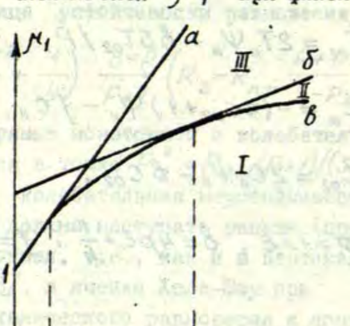


Рис.3

Анализ решения (4) показывает, что, если $P<S\sqrt{\mu_2/(\mu_2+1)}$ то зависимость ψ_{11}, T_{11}, T_{02}, C_{11}, C_{02} от μ_1 для фиксированных μ_2 является неоднозначной в интервале значений μ_1 от μ_{1min} до $\mu_1 = 1+\mu_2$. При $P>S\sqrt{\mu_2/(\mu_2+1)}$ гистерезис отсутствует (этот случай показан на рис.2 пунктиром). Координата концевой точки μ_{1min} находится из формул (5) и зависит от параметров P, S, μ_2 следующим образом:

$$\mu_{1\,min} = 1+\frac{P^2}{S^2}(\mu_2-1)+\frac{2P}{S}\sqrt{\mu_2\left(1-\frac{P^2}{S^2}\right)} . \quad (6)$$

Результаты линейной теории и анализа нелинейной системы (3) сведены на карте устойчивости рис.3, где в координатах μ_2, μ_1 (для случая $\mu_2, \mu_1 > 0$) приведены нейтральная монотонная неустойчивость (а) $\mu_1 = \mu_2 + 1$, нейтральная линия колебательной неустойчивости (б)

$$\mu_1 = \frac{(S+P)(S+1)}{S^2} + \mu_2\,\frac{P^2(S+1)}{S^2(P+1)}, \quad (7)$$

и линия, отвечающая концевой точке (в) (формула (6)). Линия, описывающая координату концевой точки, касается нейтральной кривой колебательной неустойчивости при $\mu_2 = \frac{P^2(S+1)}{S^2(P+1)}$ и утыкается в нейтральную линию монотонной неустойчивости, когда $\mu_2 = P^2/(S^2-P^2)$.

Когда эти кривые делят плоскость управляющих параметров задачи μ_1 и μ_2 на три области: в области I наблюдается абсолютная устойчивость механического равновесия; в области II возможно равновесие или конечноамплитудное возбуждение конвекции (гистерезис). В области III механическое равновесие неустойчиво и относительно малых монотонных (при $\mu_2 < \frac{P+1}{S-P}$) или колебательных (при $\mu_2 > \frac{P+1}{S-P}$) возмущений.

Нестационарные процессы, описываемые системой (4), изучались путем ее интегрирования на ЭВМ методом Рунге-Кутта-Мерсона. В расчетах использовались значения геометрических параметров, близкие к экспериментальным

/2, 3/ H =20 , L =10 . Число Прандтля P и Шмидта S имели величины P = 7, S =35 . Некоторые вычисления выполнены для S =350. Эти расчеты подтвердили гистерезиса в интервале от μ_{1min} до μ_1 , принадлежащего линии колебательной неустойчивости. При переходе линии колебательной неустойчивости возмущения, которые вносились в систему, начинали осциллировать, а их амплитуда экспоненциально нарастала. Результатом такого переходного процесса является, в зависимости от μ_2 и начальных условий, либо стационарное течение, либо режим периодических колебаний всех гармоник. На рис. 4 приведен график переходного процесса и установившиеся в итоге пери-

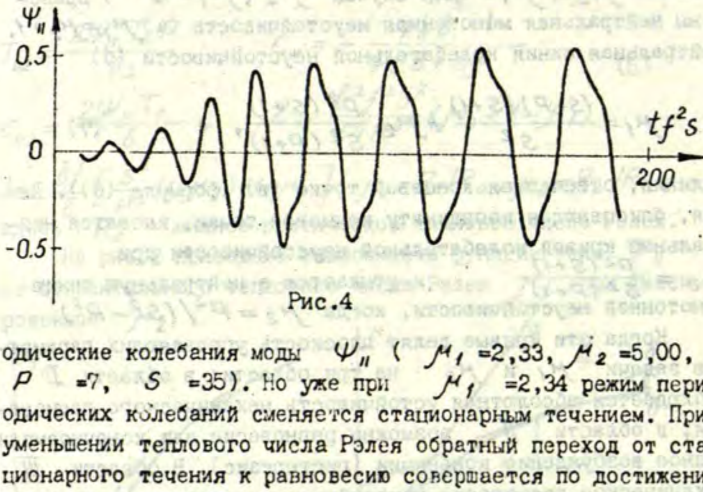


Рис.4

одические колебания моды Ψ_{11} (μ_1 =2,33, μ_2 =5,00, P =7, S =35). Но уже при μ_1 =2,34 режим периодических колебаний сменяется стационарным течением. При уменьшении теплового числа Рэлея обратный переход от стационарного течения к равновесию совершается по достижении концевой точки μ_1 =2,03 , при этом амплитуды всех гармоник испытывают затухающие колебания.

Описанные результаты качественно совпадают с наблюдениями конвекции магнитной жидкости или смеси двух жидкостей (декан и четыреххлористый углерод) /4, 5/. Это позволяет объяснить наблюдавшиеся там эффекты (колебательный переходный процесс, гистерезис, периодические колебания вблизи порога неустойчивости равновесия) наличием концентрационных неоднородностей.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

I. Любимов Д.В., Путин Г.Ф., Чернатынский В.И. О конвективных движениях в ячейке Хеле-Шоу // ДАН СССР т.235, № 3. - 1977. - С.554-556.

2. Путин Г.Ф., Ткачева Е.А. Экспериментальное исследование надкритических конвективных движений в ячейке Хеле-Шоу // Изв. АН СССР МЖГ. - 1979. - № II. - С.3-8.

3. Глухов А.Ф., Путин Г.Ф. Лабораторное моделирование конвективных процессов в бинарных системах // Всесоюзная конференция "Моделирование роста кристаллов". - Рига, 1987.

4. Глухов А.Ф., Путин Г.Ф. О возникновении конвекции в ячейке Хеле-Шоу // Конвективные течения. - Пермь, 1979.- Вып.I.

5. Глухов А.Ф., Путин Г.Ф. О влиянии гравитационного расслоения примеси на термоконвекцию // Всесоюзная конференция по активным воздействиям на гидрометеорологические процессы. - Обнинск, 1987. - С.196-197.

6. Гершуни Г.З., Жуховицкий Е.М. Конвективная неустойчивость несжимаемой жидкости. - М.: Наука, 1972. - С.217-222.

7. Knobloch E., Weis N.O. Period doubling and chaos in partial differential equationa for thermosolutal convection // NATURE. - 1983. - N 23. - V.303. - P.663-667.

Сборник научных трудов
ПРИКЛАДНЫЕ ЗАДАЧИ МАТЕМАТИЧЕСКОЙ ФИЗИКИ
Рига: ЛГУ им.П.Стучки, 1989

УДК 536.25

Б.Я.Мартузан
М.Я.Опманис
ВЦ ЛГУ им.П.Стучки,
г.Рига

АНАЛИТИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ЦЕНТРОБЕЖНОЙ ТЕРМОКОНВЕКТИВНОЙ УСТОЙЧИВОСТИ ЖИДКОСТИ МЕЖДУ ДВУМЯ БЕСКОНЕЧНЫМИ ВРАЩАЮЩИМИСЯ ЦИЛИНДРАМИ В НЕВЕСОМОСТИ

При математическом моделировании технологических процессов в невесомости важно выяснить сравнительное влияние различных физических явлений на потоки в неравномерно нагретой жидкости. В частности, определенный интерес представляет изучение устойчивости симметрично нагретой вращающейся массы жидкости. При исследовании подобных задач в условиях нормальной гравитации используют приближение Обербека-Буссинеска /I/, в котором пренебрегается градиентом центробежной силы, возникающим из-за изменения плотности жидкости при нагреве. Однако в условиях невесомости такое пренебрежение уже становится неправомерным.

В настоящей статье исследуется задача о термоконвективной устойчивости неравномерно нагретого слоя жидкости между двумя цилиндрами под действием центробежной силы.

Рассматривается следующая модель:
Пространство между двумя коаксиальными бесконечными цилиндрами заполнено вязкой несжимаемой жидкостью с плотностью ρ и кинематической вязкостью ν . Внутренний цилиндр имеет радиус R_1 , вращается с постоянной угловой скоростью Ω_1 и на нем поддерживается постоянная температура T_1 . Внешний цилиндр имеет радиус R_2 $(R_2 > R_1)$, вращается с постоянной угловой скоростью Ω_2 и на нем

поддерживается постоянная температура T_2. Цилиндры непроницаемые.

Для исследования данной проблемы выписывается система уравнений Навье-Стокса в цилиндрических координатах вместе с уравнением переноса тела:

$$
\begin{cases}
\dfrac{\partial v_r}{\partial t} + v_r \dfrac{\partial v_r}{\partial r} + \dfrac{v_\varphi}{r}\dfrac{\partial v_r}{\partial \varphi} + v_z \dfrac{\partial v_r}{\partial z} - (1-\beta T)\dfrac{v_\varphi^2}{r} = \\
\qquad = -\dfrac{1}{\rho}\dfrac{\partial p}{\partial r} + \nu\left(\Delta v_r - \dfrac{v_r}{r^2} - \dfrac{2}{r^2}\dfrac{\partial v_\varphi}{\partial \varphi}\right) \\
\dfrac{\partial v_\varphi}{\partial t} + v_r \dfrac{\partial v_\varphi}{\partial r} + \dfrac{v_\varphi}{r}\dfrac{\partial v_\varphi}{\partial \varphi} + v_z \dfrac{\partial v_\varphi}{\partial z} + \dfrac{v_r v_\varphi}{r} = \\
\qquad = -\dfrac{1}{\rho r}\dfrac{\partial p}{\partial \varphi} + \nu\left(\Delta v_\varphi - \dfrac{v_\varphi}{r^2} + \dfrac{2}{r^2}\dfrac{\partial v_r}{\partial \varphi}\right) \\
\dfrac{\partial v_z}{\partial t} + v_r \dfrac{\partial v_z}{\partial r} + \dfrac{v_\varphi}{r}\dfrac{\partial v_z}{\partial \varphi} + v_z \dfrac{\partial v_z}{\partial z} = -\dfrac{1}{\rho}\dfrac{\partial p}{\partial z} + \nu \Delta v_z \\
\dfrac{\partial T}{\partial t} + v_r \dfrac{\partial T}{\partial r} + \dfrac{v_\varphi}{r}\dfrac{\partial T}{\partial \varphi} + v_z \dfrac{\partial T}{\partial z} = \varkappa \Delta T \\
\dfrac{\partial v_r}{\partial r} + \dfrac{v_r}{r} + \dfrac{1}{r}\dfrac{\partial v_\varphi}{\partial \varphi} + \dfrac{\partial v_z}{\partial z} = 0 ,
\end{cases}
\qquad (I)
$$

где v_r, v_φ, v_z - радиальная, угловая и аксиальная компонента скорости, T - температура, β - коэффициент теплового расширения, $\varkappa$ - коэффициент температуропроводности, $\Delta = \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2}\frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}$. Краевые условия для компонент скорости v_r, v_φ, v_z:

$$v_r(R_1) = v_r(R_2) = 0, \quad v_\varphi(R_1) = \Omega_1, \quad v_\varphi(R_2) = \Omega_2,$$
$$v_z(R_1) = v_z(R_2) = 0$$

и температуры:

$$T(R_1) = T_1, \quad T(R_2) = T_2.$$

Предполагается, что изменения плотности из-за неоднородности давления малы по сравнению с изменениями, обусловленными неоднородностью температуры. При линейной зависимости плотности от температуры имеет место $\rho = \rho_0(1-\beta(T-T_1))$, где ρ_0 - плотность при температуре T_1.

В дальнейшем предполагается, что слагаемое $\beta(T-T_1)$ имеет существенное значение лишь в члене, характеризующем величину центробежной силы.

Для перехода к безразмерным переменным в качестве единицы длины выберем расстояние между цилиндрами R_2-R_1, единицы времени $1/\Omega_1$ $(\Omega_1 \neq 0)$ и введем число Рейнольдса $Re=\Omega_1(R_2-R_1)^2/\nu$.
Температура записывается в виде: $T(R)=T_1+\Theta(R)(T_2-T_1)$, где $\Theta(R)$ - безразмерная функция, $\Theta\left(\frac{R_1}{R_2-R_1}\right)=0$, $\Theta\left(\frac{R_2}{R_2-R_1}\right)=1$.

Решение вышеизложенной задачи известно и приводится, например, в работе /2/:

$$\begin{cases} v_r^{\circ}=v_z^{\circ}=0 \\ v_\varphi^{\circ}=AR+\frac{B}{R} \\ \theta^{\circ}=\ln\left(\frac{R_1}{R}\right)/\ln(R_{12}), \end{cases} \tag{2}$$

где R - безразмерная радиальная координата, R_{12} - отношение R_1 к R_2, а константы A и B легко определяются из краевых условий.

Далее исследуется устойчивость решения (2) по отношению к малым возмущениям, периодическим по z и удовлетворяющим однородным краевым условиям:

$$\begin{cases} v_r=u_r(R)\cdot e^{i\lambda z} \\ v_z=u_z(R)\cdot e^{i\lambda z} \\ v_\varphi=v_\varphi^{\circ}+u_\varphi(R)\,e^{i\lambda z} \\ \Theta=\Theta^{\circ}+\theta(R)\,e^{i\lambda z} \end{cases} \tag{3}$$

, где λ - вещественное волновое число

Фактически исследуется возможность возникновения течения сходного с вихрями Тейлора, хорошо известными при исследовании течения между двумя вращающимися изотермическими цилиндрами.

Выражения (3) подставляются в систему уравнений (I). Все слагаемые, содержащие произведения возмущений и их производных, считаются пренебрежимо малыми. Кроме того, исследуется только стационарное поведение возмущенного течения и, следовательно, отбрасываются производные по t. В результате получается следующая система:

$$\begin{cases} i\lambda\left\{-\frac{1}{Re}\frac{\partial}{\partial R}\left[\frac{1}{R}\frac{\partial}{\partial R}(Ru_r)\right]+\frac{u_r\lambda^2}{Re}+\frac{V_\varphi^\circ}{R}\left[V_\varphi^\circ\Theta\beta_0-2u_\varphi(1-\beta_0\Theta^\circ)\right]\right\}+ \\ +\frac{1}{Re}\left(\frac{\partial^3 u_z}{\partial R^3}+\frac{1}{R}\frac{\partial^2 u_z}{\partial R^2}-\frac{1}{R^2}\frac{\partial u_z}{\partial R}+\frac{\partial u_z}{\partial R}\lambda^2\right)=0 \\ Re\,u_r\frac{\partial}{\partial R}(V_\varphi^\circ R)+R\left\{u_\varphi\lambda^2-\frac{\partial}{\partial R}\left[\frac{1}{R}\frac{\partial}{\partial R}(Ru_\varphi)\right]\right\}=0 \\ \frac{\partial\Theta^\circ}{\partial R}u_r R\,Pr\,Re-\frac{\partial^2\Theta}{\partial R^2}R-\frac{\partial\Theta}{\partial R}+\Theta R\lambda^2=0 \\ \frac{\partial u_r}{\partial R}R+u_z iR\lambda+u_r=0, \end{cases} \tag{4}$$

где $\beta_0=\beta(T_2-T_1)$.

После исключения u_r, u_z и Θ получается уравнение и краевые условия для функции u_φ. Уравнение имеет вид:

$$\sum_{i=0}^{8} W_i u_\varphi^{(i)}=0. \tag{5}$$

Согласно идее Резнера /3/ u_φ разлагается в степенной ряд по $r=R-\frac{R_1}{R_2-R_1}$:

$$u_\varphi=\sum_{i=0}^{N} C_i r^i. \tag{6}$$

Из краевых условий для u_φ получаются следующие соотношения для коэффициентов C_i:

$$\begin{cases} C_0=0 \\ C_1+2\frac{R_1}{R_2-R_1}C_2=0 \\ \left[\lambda^2\left(\frac{R_1}{R_2-R_1}\right)^2+3\right]C_1-6\left(\frac{R_1}{R_2-R_1}\right)^2 C_3=0 \\ \left[\left(\lambda^2\left(\frac{R_1}{R_2-R_1}\right)^2+2\right)^2-22\right]C_1+12\left(\frac{R_1}{R_2-R_1}\right)^3\left[\lambda^2\left(\frac{R_1}{R_2-R_1}\right)^2+2\right]C_4- \\ -60\left(\frac{R_1}{R_2-R_1}\right)^4\left[C_5+2\frac{R_1}{R_2-R_1}C_6\right]=0. \end{cases} \tag{7}$$

Коэффициенты W_i в (5) имеют вид $W_i = \sum_{j=0}^{n} C_o(i,j) r^j$. Выражение (5) можно переписать в виде:

$$\sum_{i=0}^{8} \left(\sum_{j=0}^{n} C_o(i,j) r^j \right) \left(\sum_{\ell=i}^{N} A_\ell^i C_\ell r^{\ell-i} \right) = 0, \tag{8}$$

где $A_\ell^i = \frac{\ell!}{(\ell-i)!}$.

После сгруппирования коэффициентов при одинаковых степенях r, сумма (8) переписывается в виде:

$$\sum_{m=0}^{n+N} C_p(m) r^m = 0, \tag{9}$$

где $C_p(m)$ - коэффициент при r^m.

Для того, чтобы соотношение (9) выполнялось для всех r, необходимо, чтобы коэффициенты $C_p(m)$ для всех m равнялись 0.

На другом конце интервала $\left(R = \frac{R_2}{R_2 - R_1} \right)$ функцию u_φ можно разложить в степенной ряд по $r = R - \frac{R_2}{R_2 - R_1}$:

$$u_\varphi = \sum_{i=0}^{N} D_i r^i \tag{10}$$

и получить соотношения, аналогичные (7), (9).

Для того, чтобы связать значения коэффициентов C_i и D_i на противоположных концах интервала, воспользуемся квадратурной формулой, описанной в работе /4/:

$$\int_0^1 f(r)\,dr = \sum_{k=0}^{n-1} \varepsilon_k^n y_k + \eta_n, \tag{11}$$

где $\varepsilon_k^n = \frac{(2n-k-1)!\, n!}{(2n)!\,(n-k-1)!\,(k+1)!}$,

$$y_k = f^{(k)}(0) + (-1)^k f^{(k)}(1),$$

η_n - погрешность аппроксимации, $n = 1, 2, 3,$

Как следует из (II), в данной формуле используются значения самой функции и ее производных до $n-1$ степени включительно лишь в концах интервала.

Если в (II) вместо $f(r)$ подставить $u_\varphi^{(i)}$ где $i = 1,2,\ldots,8$, то имея в виду, что

$$\int_0^1 u_\varphi^{(i)} dr = u_\varphi^{(i-1)}(1) - u_\varphi^{(i-1)}(0), \qquad (12)$$

получим 8 соотношений для коэффициентов C_i и D_i .

Эти уравнения, вместе с уравнениями (7) и их аналогами для другого конца интервала, а также необходимым количеством уравнений вида(9) для того и другого конца интервала, позволяют сформировать линейную систему алгебраических уравнений для нахождения коэффициентов C_i и D_i , $i = 1,\ldots, N$. Для определения нейтральных кривых устойчивости следует искать те значения параметров, при которых определитель системы равен 0 .

Все аналитические выкладки вплоть до определения определителя системы уравнений для коэффициентов C_i и D_i были проведены на языке REDUCE -3 /5/ на ЭВМ ЕС-1060. В формуле (II) значение n взято 3. Для того, чтобы построить нейтральные кривые устойчивости, использовалась возможность генерировать FORTRAN -программы средствами языка REDUCE . Были использованы также программы библиотеки графических подпрограмм ГРАФОР.

Далее изложенные результаты соответствуют случаю, когда $\Omega_2 = \Omega_1$, т.е. угловые скорости вращения цилиндров совпадают и отличны от нуля.

Во всех графиках использован логарифмический масштаб, по оси абсцис отложены значения квадрата числа Рейнольдса, по оси ординат - квадрат волнового числа λ .

Рассмотрим зависимость вида нейтральной кривой устойчивости от величины параметра β_0 при $R_{12} = 0.3$ и $Pr = 1$ (Рис.I). С ростом значения β_0 уменьшается значение $Re^2_{крит}$, при котором может возникнуть неустойчивость. Так, для $\beta_0 = 10^{-4}$ $Re^2_{крит} = 4.179 \cdot 10^4$, для $\beta_0 = 10^{-2}$ $Re^2_{крит} = 4.144 \cdot 10^4$, а для

$\beta_0 = 10^{-4}$ $Re^2_{крит} = 3.845 \cdot 10^4$. С ростом β_0 возрастает также и значение $\lambda^2_{крит}$, при котором достигается критическое значение $Re^2_{крит}$.

Далее рассмотрим зависимость вида нейтральной кривой устойчивости от величины R_{12} при $Pr = 10$ и $\beta_0 = 10^{-1}$ (рис.2). С увеличением R_{12}, увеличивается значение числа $Re^2_{крит}$, при котором может возникнуть неустойчивость. Так, для $R_{12} = 0.19$ $Re^2_{крит} = 3218.94$ для $R_{12} = 0.25$ $Re^2_{крит} = 4963.2$, а для $R_{12} = 0.31$ $Re^2_{крит} = 269396$. С увеличением R_{12} уменьшается значение $\lambda^2_{крит}$, при котором достигается значение $Re^2_{крит}$.

Изменения значения числа Прандтля слабее влияет на вид кривой. Так, для $R_{12} = 0.01$ и $\beta_0 = 0.1$ существенные изменения происходят лишь при значениях Re^2 больших чем 10^6 (рис.3)

Результаты расчетов показывают, что потеря устойчивости вращающегося слоя вполне возможна уже при сравнительно низких значениях скорости вращения.

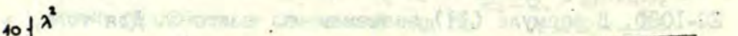


Рис.I. Нейтральные кривые устойчивости при $R_{12} = 0.3$, $Pr = 1$
$1 - \beta_0 = 10^{-4}$, $2 - \beta_0 = 10^{-2}$, $3 - \beta_0 = 10^{-1}$.

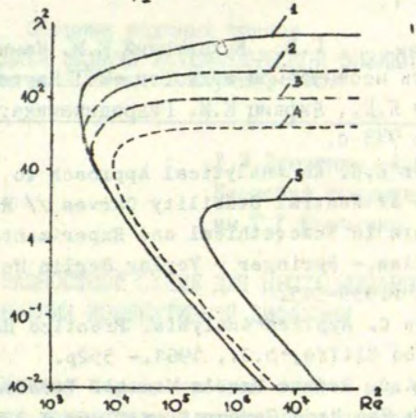


Рис.2. Нейтральные кривые устойчивости при $Pr = 10$, $\beta_0 = 0.1$.
$1 - R_{12} = 0.19$, $2 - R_{12} = 0.22$, $3 - R_{12} = 0.25$
$4 - R_{12} = 0.28$, $5 - R_{12} = 0.31$

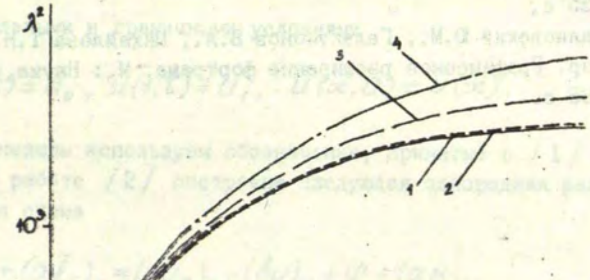


Рис.3. Нейтральные кривые устойчивости при $R_{12} = 0.01$, $\beta_0 = 0.1$
$1 - Pr = 0.5$, $2 - Pr = 1$, $3 - Pr = 5$, $4 - Pr = 10$.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Гершуни Г.З., Жуховицкий Е.М. Конвективная устойчивость несжимаемой жидкости.-М.: Наука, 1972.- 392 с.
2. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Гидродинамика.-М.: Наука, 1986.- 733 с.
3. Roesner K.G. An Analytical Approach to the Determination of Neutral Stability Curves // Recent Developments in Theorethical and Experimental Fluid Mechanics.- Springer - Verlag Berlin Heidelberg.- 1979.- P.339-345.
4. Lanczos C. Applied Analysis. Prentice Hall Inc.; Englwood Cliffs.-N.J., 1961.- 552p.
5. Hearn A.C. Reduce User's Manual. Version 3.1.-Santa Monica: The Rand Corporation, 1984.- 123p.
6. Джозеф Д.Д. Устойчивость движений жидкости.- М.: Мир, 1981.- 638 с.
7. Найфэ А. Введение в методы возмущений.- М.: Мир, 1984.- 535 с.
8. Баяковский Ю.М., Галактионов В.А., Михайлова Т.Н. Графор. Графическое расширение фортрана.- М.: Наука, 1985.- 288 с.

Сборник научных трудов
ПРИКЛАДНЫЕ ЗАДАЧИ МАТЕМАТИЧЕСКОЙ ФИЗИКИ
Рига: ЛГУ им. П.Стучки, 1989

УДК 518:517.949

Л.И.Демченко, А.С.Тригуб
Киевский госуниверситет
им.Т.Г.Шевченко

ОБ ОДНОЙ РАЗНОСТНОЙ СХЕМЕ ДЛЯ НЕСТАЦИОНАРНОГО УРАВНЕНИЯ КОНВЕКТИВНОЙ ДИФФУЗИИ

Рассматривается первая краевая задача для нестационарного уравнения конвективной диффузии с постоянными коэффициентами

$$c\frac{\partial u}{\partial t} = \kappa\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} - v\frac{\partial u}{\partial x} + f \qquad (1)$$

с начальными и граничными условиями

$$u(0,t)=u_0\,,\ u(1,t)=u_1\,,\ u(x,0)=\overset{\circ}{u}(x). \qquad (2)$$

В дальнейшем используем обозначения, принятые в /1/.

В работе /2/ построена следующая однородная разностная схема

$$\rho y_{\bar t} + (a\bar f_c)_x = (a y_{\bar x})_x - (b y)_x + \varphi + (a\mu)_x \qquad (3)$$

$$y_0 = u_0\,,\ y_1 = u_1\,,\ \overset{\circ}{y}_i = \overset{\circ}{u}(x_i),\ i=\overline{1,N-1}, \qquad (4)$$

где

$$a_i = \left[\frac{1}{h}\int_{x_{i-1}}^{x_i} b(x) r_i(x)dx\right]^{-1},\ b(x)=\kappa^{-1}(x),$$

$$r_i(x) = exp\left(-\int_{x_{i-1}}^{x_i} x(s)ds\right),$$

$$\varkappa(x)=b(x)v(x), \quad b_i=\frac{1}{h}(1-\beta_i)a_i, \quad \beta_i=r_i(x_i),$$

$$\varphi_i=\frac{1}{h}\int\limits_{x_i-0,5}^{x_i+0,5} f(x)dx, \quad \mu_i=\frac{1}{h}\int\limits_{x_{i-1}}^{x_i}\Big(b r_i\int\limits_{x_i-0,5}^{x_i} f(s)ds\Big)dx, \qquad (5)$$

$$\rho_i=\frac{1}{h}\int\limits_{x_i-0,5}^{x_i+0,5} c(x)dx, \quad \mathcal{F}_c=\frac{1}{h}\int\limits_{x_{i-1}}^{x_i} b\exp\Big(-\int\limits_{x_{i-1}}^{x_i}\varkappa dx'\Big)\int\limits_{x_i-0,5}^{x_i} c\frac{\partial u}{\partial t}ds dx\Big).$$

Разностная схема (3)-(5) имеет первый порядок точности на обобщенном решении задачи (I)-(2) в классе коэффициентов $c(x)$, $\kappa(x)$, $v(x)\in L_\infty(0,1)$, $f(x)\in L_2(0,1)$.

Схема (3)-(5) при $c=0$, $f=const$ является точной разностной схемой и совпадает с известной схемой А.М.Ильина.

В классе постоянных коэффициентов, полагая $\kappa(x)=const$, $v(x)=const$, $c(x)=I$, $f(x)=0$ схема (3)-(5) запишется в виде:

$$y_{\bar t}^{(k+1)}-\frac{\kappa}{v}(R\,cth R-1)y_{\bar t \mathring{x}}^{(k+1)}=\kappa R\,cth R\,y_{\bar x x}^{(k+1)}-v y_{\mathring{x}}^{(k+1)}, \qquad (6)$$

где $R=0,5hv\ell$.

При численном решении подобного рода задач основную трудность представляют эффекты схемной диффузии и схемной конвекции.

Появление численной диффузии обусловлено, как известно, не только аппроксимацией на сетке конвективного члена в уравнении (I), но и аппроксимацией первого порядка частной производной по времени. С этой точки зрения представляется целесообразным исследовать свойства разностной схемы (6) и схемы (7), рассматриваемых в работе /2/ и имеющей вид:

$$y_{\bar t}^{(k+1)}=\kappa R\,cth R\,y_{\bar x x}^{(k+1)}-v y_{\mathring{x}}^{(k+1)}. \qquad (7)$$

Схема (6) учитывает влияние дополнительного слагаемого $(a\mathcal{F}c)_x$ при аппроксимации временной производной, которое в случае постоянных коэффициентов имеет вид

$$(a\mathcal{F}_c)_x = -\frac{\kappa}{v}(R\,cth R - 1)\, y_{\bar{t}\overset{\circ}{x}}^{(\kappa+1)} . \tag{8}$$

Схема (7) является монотонной, а для монотонности схемы (6) требуется выполнение условия:

при $Ku < \frac{1}{2}$ $\quad Pe < \frac{2}{(1-2Ku)(1+cth R)-1}$.

Численный анализ точности разностных схем (6), (7) проведем на тестовом примере из /3/. Рассмотрим модельную задачу

$$\frac{\partial u}{\partial t} + v\frac{\partial v}{\partial x} = \kappa\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}, \; x\in[0,\infty), \; t\in[0,T], \tag{9}$$

$$u(0,t)=1, \quad \lim_{x\to\infty} u(x,t)=0; \quad u(x,0)=0,$$

где $v=const>0$, $\kappa=const>0$.

Точное решение этой задачи имеет вид

$$u(x,t)=\frac{1}{2}\left\{ erfc\left[\frac{x-vt}{2\sqrt{\kappa t}}\right] + exp\left(\frac{vx}{\kappa}\right) erfc\left[\frac{x+vt}{2\sqrt{\kappa t}}\right]\right. . \tag{10}$$

При численном решении длина отрезка ℓ выбиралась таким образом, чтобы $\forall t\in[0,T]$ $u(\ell;t)\leq 1\cdot 10^{-6}$. Граничное условие при $x=\ell$ формулировалось в виде $u(\ell,t)=0$.

Точность численного решения оценивалась по величине среднеквадратической погрешности, взятой в процентах:

$$z_{cp\kappa в}^{(\kappa+1)} = \frac{1}{\sqrt{\ell}}\left(\sum_{i=1}^{N-1} h\left(U(x_i,t_{\kappa+1}) - y_i^{(\kappa+1)}\right)^2\right)^{1/2}\cdot 100, \tag{11}$$

где $U(x_i,t_{\kappa+1})$ - точное решение, $y_i^{(\kappa+1)}$ - приближенное.

Параметры, фигурирующие в задаче (9), выбирались следующими: t = 5 сек, κ = 0,I $\frac{см}{сек}$, v = I $\frac{см}{сек}$.

В таблице I представлены результаты сравнения каждой из схем (6),(7) с точными аналитическим решением (I0). Анализ точности разностных схем проводился для диапазона чисел Pe , Ku от 0 до 3.

Таблица I

Ku \ Pe	0.2	0.4	0.8	I	2	3
0.2	I.7092 I.7099	I.7694 I.7548	I.9736 I.8603	2.I334 I.9I32	3.4I02 2.2698	5.0729 2.7I75
0.4	I.7579 I.7537	I.8930 I.8703	2.3083 2.I58I	2.587I 2.3I69	4.3379 3.2084	6.269I 4.I52I
0.8	I.8746 I.8684	2.I970 2.I638	3.0453 2.87I4	3.5267 3.2339	6.02I8 5.0I8I	8.3923 6.662I
I	I.9444 I.9376	2.3709 2.3349	3.423I 3.2487	3.9850 3.6943	6.7883 5.8450	9.3386 7.7569
2	2.34I4 2.3352	3.2863 3.2455	5.2030 5.0499	6.I087 5.8554	I0.0749 9.3693	I3.3229 I2.2329
3	2.7869 2.7764	4.2048 4.I672	6.7909 6.6654	7.9449 7.7289	I2.7533 I2.I872	I6.5I46 I5.7052

В таблице I в каждом квадрате первое число - среднеквадратическая погрешность, выраженная в процентах, для разностной схемы (7), второе число - то же для схемы (6).

Полученные результаты свидетельствуют о том, что учет дополнительного слагаемого при аппроксимации временной производной существенно улучшает точность схемы при возрастании числа Pe .

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

I. Самарский А.А. Теория разностных схем.- М.: Наука, I977.- 656 с.

2. Ляшко И.И., Демченко В.Ф., Демченко Л.И. Численное моделирование процессов тепломассоперенсса: Учеб.пособие. Киев: УМК ВО, I988.- I64 с.

3. Карлслоу Г., Егер Д. Теплопроводность твердых тел. М.: Наука, I964.- 488 с.

Сборник научных трудов
ПРИКЛАДНЫЕ ЗАДАЧИ МАТЕМАТИЧЕСКОЙ ФИЗИКИ
Рига: ЛГУ им.П.Стучки,1989

Ю.В.Апанович, С.П.Юшанов
ВЦ при ЛГУ им.П.Стучки,Рига

УДК 536.33:536.42

ВЛИЯНИЕ РАДИАЦИОННОГО ТЕПЛООБМЕНА НА ПРОЦЕСС ВЫРАЩИВАНИЯ ПОЛУПРОЗРАЧНЫХ КРИСТАЛЛОВ МЕТОДОМ ЧОХРАЛЬСКОГО

В полупрозрачных кристаллах существенную роль в формировании температурного поля играют радиационные потоки внутри кристалла, учет которых может привести к качественному изменению формы границы раздела фаз. Целью данной работы является исследование влияния поглощения радиационного излучения на процесс кристаллизации при выращивании гадолиний-галлиевых гранатов (ГГГ) методом Чохральского.

Поскольку спектральные оптические характеристики (главным образом коэффициент поголощения) для ГГГ при высоких температурах экспериментально плохо исследованы, то в модель тепловой задачи заложены осредненные по спектру частот радиационные свойства материала. Варьирование среднего коэффициента поглощения позволяет установить вклад радиационных потоков в формирование температурного поля кристалла и их влияние на положение и форму фронта кристаллизации.

I. Исходные уравнения радиационно-кондуктивного теплообмена

Уравнение энергии радиационно-кондуктивного теплообмена при отсутствии внутренних источников тепла имеет вид:

$$c\rho \frac{\partial T}{\partial t} + \nabla\cdot\vec{q}_T + \nabla\cdot\vec{q}_R = 0, \tag{I}$$

где c - удельная теплоемкость; ρ - плотность; $\vec{q}_T = -\lambda^{(T)} \nabla T$ - вектор потока кондуктивной теплопроводности; $\lambda^{(T)}$ - коэффициент теплопроводности; $\vec{q}_R$ - вектор полного потока результирующего излучения.

В приближении Милна-Эддингтона /I/ уравнение переноса для спектрального вектора потока результирующего излучения $\vec{q}_\nu$ имеет вид:

$$\nabla(\alpha_\nu^{-1} \nabla \cdot \vec{q}_\nu) - 3\alpha_\nu \vec{q}_\nu - 4\nabla E_{T,\nu} = 0, \qquad (2)$$

где α_ν - спектральный коэффициент поглощения; $E_{T,\nu}$ - спектральная поверхностная плотность равновесного излучения. Приближение Милна-Эддингтона основано на допущении, что среда находится в состоянии термодинамического равновесия, так что интенсивность излучения в объеме и у границ не зависит от направления. Если предположить, что среда находится в состоянии локального радиационного равновесия, то из (2) следует однозначная связь между температурой и плотностью излучения в каждой точке рассматриваемого объема:

$$\vec{q}_\nu = -\frac{4}{3} \alpha_\nu^{-1} \nabla E_{T,\nu}. \qquad (3)$$

Формально (3) может быть получено из (2) в предположении, что $\alpha_\nu \gg 1$. Уравнение (3) является уравнением для переноса излучения в приближении Росселанда. Проводя осреднение по всем частотам, из (3) получаем выражение для полного потока результирующего излучения

$$\vec{q}_R = -\Lambda(T) \nabla T; \; \Lambda(T) = \frac{16}{3} n^2 \alpha_R^{-1} \sigma T^3, \qquad (4)$$

где Λ - коэффициент радиационной теплопроводности; n - усредненный по спектру частот показатель преломления кристалла; σ - постоянная Стефана-Больцмана; α_R - средний по Росселанду коэффициент поглощения, вычисляемый через спектральный коэффициент поглощения по формуле

$$\alpha_R^{-1} = \frac{\int \alpha_\nu^{-1} \frac{\partial E_{T,\nu}}{\partial T} d\nu}{\int \frac{\partial E_{T,\nu}}{\partial T} d\nu} .$$

2. Модель расчета температурного поля

Схема установки и обозначения расчетных областей показаны на рис.I. Область Ω_1 занята расплавом, Ω_2 - кристаллом. Межфазная граница S_8 заранее не известна и находится в процессе решения. Будем предполагать, что боковая поверхность кристалла S_4 плавно по дуге окружности радиуса R_0 переходит в поверхность расплава S_3. Начало цилиндрической системы координат (r, z) поместим на центр дна тигля. Распределение температуры внутри кристалла и в расплаве описывается уравнением (I), которое с учетом (4) принимает вид:

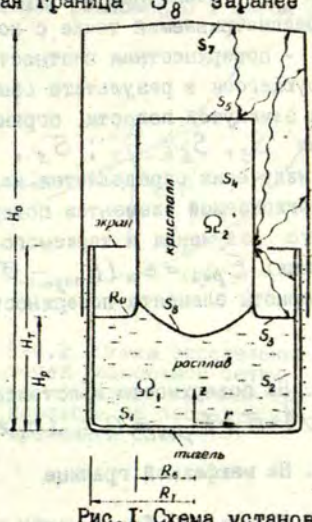


Рис.I Схема установки и расчетной области

$$c_\kappa \rho_\kappa \frac{\partial T}{\partial t} = \nabla \cdot (\lambda_\kappa \nabla T); \quad (r,z) \in \Omega_1 + \Omega_2 , \qquad (5)$$

где $\lambda_\kappa = \lambda_\kappa^{(T)} + \lambda_\kappa^{(R)} T^3$ - коэффициент кондуктивно-радиационной теплопроводности. Индекс κ обозначает принадлежность соответствующей величины к жидкой ($\kappa = \ell$) или твердой ($\kappa = s$) фазе. Жидкая фаза принимается непрозрачной для радиационного излучения $\lambda_\ell^{(R)} = 0$, а для твердой фазы в соответствии с (4) $\lambda_s^{(R)} = \frac{16}{3} n^2 \alpha_R^{-1} \sigma$.

Краевые условия задаются следующим образом.

I. На поверхности тигля, имеющей контакт с расплавом $T = T_0$; $(r, z) \in S_1, S_2$.

2. На поверхности расплава

$$-\lambda_\ell \nabla T \cdot \vec{n} + E_{рез} = 0; \ (r, z) \in S_3, \qquad (6)$$

где $\vec{n}$ - единичный вектор внешней нормали к поверхности в рассматриваемой точке с координатами (r , z); $E_{рез}$ - поверхностная плотность результирующего излучения, формирующегося в результате обмена энергией излучения внутри замкнутой полости, ограниченной диффузными поверхностями S_3, S_6, S_7, S_5, S_4. Энергия результирующего излучения определяется как разность тепловых энергий, поглощаемой элементом поверхности в виде падающего внешнего излучения и теряемого им в виде собственного излучения: $E_{рез} = \varepsilon_\kappa (E_{пад} - \sigma T^4)$, где ε_κ - степень черноты элемента поверхности.

3. На поверхности кристалла

$$-\lambda_s \nabla T \cdot \vec{n} + E_{рез} = 0; \quad (r, z) \in S_4, S_5.$$

4. На межфазной границе

$$\lambda_s \nabla T \cdot \vec{n} - \lambda_\ell \nabla T \cdot \vec{n} = \rho_s \varkappa v_n; \ (r, z) \in S_8, \qquad (7)$$

где $\varkappa$ - удельная скрытая теплота фазового перехода; v_n - нормальная скорость кристаллизации. Предполагается, что $v_n = \mu (T_{пл} - T)$, т.е. скорость кристаллизации пропорциональна переохлаждению и $v_n > 0$ в случае роста кристалла; μ - кинетический коэффициент.

В качестве начального распределения температуры задается значение $T = T_н$ в расплаве и кристалле. Уравнение межфазной границы в начальный момент $z = H_p$, где H_p - уровень расплава.

3. Методика решения

Уравнение (5) аппроксимируется консервативной разностной схемой на нерегулярной сетке из ячеек Дирихле. Стационарное решение находится методом установления. Разностная сетка строится таким образом, чтобы она была согласована с внешними границами области и с межфазной границей. Точки разностной сетки, попадающие на фронт кристаллизации, расставлены на нем равномерно с шагом h. Сетка перестраивается каждый шаг по времени. Уравнение движения этих точек получается из закона движения межфазной границы $v_n = \mu(T_{пл} - T)$ и имеет вид:

$$r_i^{n+1} = r_i^n + \tau v_n \cdot \sin\alpha,$$

$$z_i^{n+1} = z_i^n - \tau v_n \cdot \cos\alpha,$$

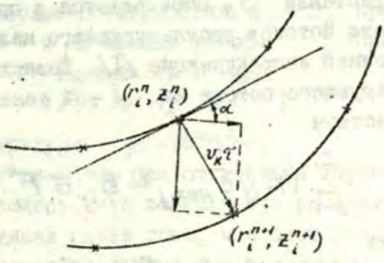


Рис.2. Схема определения точек разностной сетки на межфазной границе при переходе на последующий временной слой.

где (r_i^n, z_i^n) - координата точки i на фронте в момент времени $n\tau$;

τ - шаг времени; α - угол между касательной к фронту и осью Or (рис.2). Точки, находящиеся на фронте кристаллизации стремятся к изотерме $T = T_{пл}$. В качестве характерного масштаба времени и скорости примем соответственно величины $t^* = R_к/\nu$ и $v^* = R_к/t^*$ ($R_к$ - радиус кристалла; ν - коэффициент кинематической вязкости расплава). Введем безразмерный кинетический коэффициент $\tilde{\mu} = \mu^{T_{пл}}/v^*$. Счет стационарной задачи можно вести при умеренных значениях коэффициента $\tilde{\mu}$. Как показали расчеты, при $\tilde{\mu} \in [10 \div 20]$ фронт получается практически совпадающий с изотермой $T = T_{пл}$, поэтому расчеты при больших

$\tilde{\mu}$ не проводились.

Тепло фазового перехода выделяется внутри находящихся на межфазной поверхности ячеек Дирихле таким образом, чтобы выполнился разностный аналог граничного условия (7) Подробности методики расчетов с использованием ячеек Дирихле изложены в /2/.

Распределение температуры на поверхности тигля S_6', стенке камеры S_6'', крышке камеры S_7 считаются заданными. Температура на свободной поверхности расплава S_3, на боковой поверхности кристалла S_4 и на верхней части кристалла S_5 определяется в процессе решения. Для расчета потоков результирующего излучения используется метод зонной аппроксимации /I/. Поверхностная плотность результирующего потока на i-ой зоне $E_{рез,i}$ находится из системы

$$\sum_{j=1}^{M}\left(A_{ij}E_{рез,j}-B_{ij}\sigma T_j^4\right)=0\,;\; i=1,\ldots,M, \qquad (8)$$

где

$$A_{ij}=\delta_{ij}\left(1+\frac{r_i}{\varepsilon_i}\right)-\frac{r_j}{\varepsilon_j}\varphi_{ij}\,;\quad B_{ij}=\varphi_{ij}-\delta_{ij}\,.$$

Здесь M - число зон, на которое разбивается полость, ограниченная поверхностями S_6, S_7, S_5, S_4, S_3; ε_i - степень черноты i-ой поверхностной зоны; r_i - отражательная способность; φ_{ij} - угловой коэффициент между i-ой и j-ой зонами; T_i - средняя температуры i-ой зоны; δ_{ij} - символ Кронекера, Из (8) находятся плотности результирующего потока излучения на S_5, S_4 и S_3. С помощью сплайн-интерполяции эти потоки интерполируются и подставляются в условия типа (6), которые далее используются для нахождения температуры на поверхности и внутри кристалла и расплава.

4. Анализ численных результатов

Для расчета использовались следующие численные значения параметров. Геометрические (рис.I): R_K =4 см;

$R_T = 1{,}75\,R_K$; $H_p = 1{,}5\,R_K$; $H_T = 3{,}75\,R_K$; $H_0 = 7{,}5\,R_K$; $R_0 = 0{,}25\,R_K$. Теплофизические /3,4/: $c_\ell = 0{,}6$ $Дж/Г\cdot{}^\circ K$; $c_s = 0{,}43$ $Дж/Г\cdot{}^\circ K$; $\lambda_\ell^{(T)} = 0{,}01\,Вт/см\cdot{}^\circ K$; $\lambda_s^{(T)} = 0{,}03\,Вт/см\cdot{}^\circ K$; $\varepsilon_\ell = 0{,}8$; $\varepsilon_s = 0{,}6$; $\varepsilon_T = 0{,}93$ (для тигля); $\varepsilon_c = 0{,}8$ (для стенок камеры). $\rho_\ell = \rho_s = 5{,}65\,Г/см^3$; $\nu = 10^{-2}\,см^2/сек$; $\varkappa = 0$; $\mu = 10\text{–}25$; $T_H = 1{,}0\,T_{пл}$; $\tau = (0{,}1 \div 0{,}2)\,t^*$; шаг по пространственным координатам $h = 0{,}1\,R_K$. $T_{пл} = 2013^\circ K$.

На поверхности тигля, контактирующей с расплавом, задавалась температура $T_0 = 1{,}04\,T_{пл}$, что соответствует перегреву расплава у поверхности тигля $\approx 80^\circ K$. Распределение температуры на боковых поверхностях $S_6' + S_6''$ при $r = R_K$, $H_p \leqslant z \leqslant H_0$ и на крышке камеры S_7 при $z = H_0$, $0 \leqslant r \leqslant R_T$ задавалось в виде

$$T(r,z) = T_0 - \gamma z; \quad (r,z) \in S_6, S_7$$

с осевым градиентом температуры $\gamma = 15^\circ K/см$.

Была проведена серия расчетов при отсутствии экрана над тиглем. При этом оказалось, что поверхность расплава около кристалла переохлаждена из-за того, что этот участок обменивается излучением с относительно холодными частями системы - крышкой S_7, верхней частью кристалла S_4, и верхней частью стенки камеры S_6''. Чтобы выравнять температуру около точки выхода фронта кристаллизации на поверхность, был введен тепловой экран, температура которого менялась в пределах $0{,}9975\,T_{пл} \leqslant T_э \leqslant 0{,}999\,T_{пл}$. Экран располагался на расстоянии $z = 2R_K$ от дна тигля. В граничных условиях типа (6) на тех участках при $z < 2R_K$, которые обмениваются излучением с экраном, плотность результирующего излучения принималась равной $E_{рез} = \sigma(\varepsilon_K T_э^4 - \varepsilon_K T^4)$. Результаты расчетов температурного поля в расплаве и кристалле приведены на рис.3 и 4. Исходя из литературных данных по исследованию поглащательной способности гранатовых кристаллов /5,6/, средний по Росселанду коэффициент поглощения варьировался в пределах $0 \leqslant \alpha_R \leqslant 5\,см^{-1}$. Как следует из приведенных рисунков, поглощение кристаллом радиационного излучения приводит к изменению положения фронта кристаллизации и к качественному изменению его формы. При чисто кондуктивном теплообмене граница раздела фаз выпукла в сторону кристалла. Дополнительный поток за счет радиационного теплопереноса внутри кристалла приводит к тому, что в зависимости от величины коэффициента поглощения фронт кристаллизации становится плоским, либо выпуклым в сторону расплава. С увеличением коэффициента поглощения изотермы в кристалле в районе фронта кристаллизации располагаются более редко, что означает уменьшение осевых температурных градиентов.

При отсутствии экрана над расплавом на поверхности расплава вблизи кристалла образуется переохлажденная область. Введение теплового экрана приводит к более устойчивому росту кристалла.

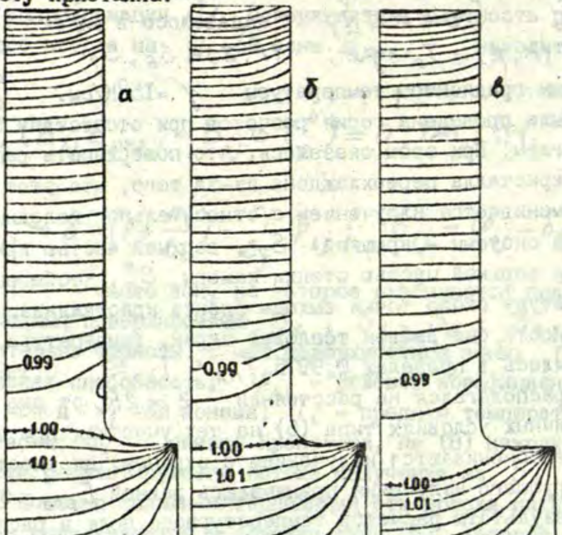


Рис. 3. Изотермы в системе расплав-кристалл построенные с шагом 0,005 $T_{пл}$. $T_{экр}/T_{пл}$ =0,9975. α_R =0 (а); I,25 см$^{-1}$ (б) 5 см$^{-1}$ (в)

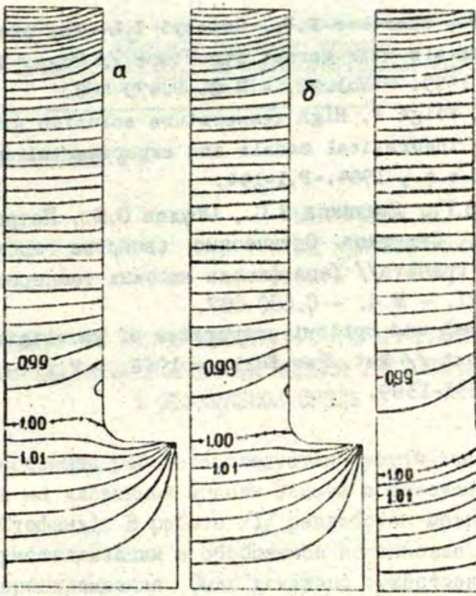


Рис.4. Изотермы в системе расплав-кристалл, построенные с шагом 0,005 $T_{пл}$. $T_э / T_{пл}$ =0,999. α_R =0(а); I,25 $см^{-1}$ (б); 5 $см^{-1}$ (в)

Из сопоставления рис.3 и 4 следует, что изменение температуры на экране приводит к смещению вдоль оси межфазной границы и не сказывается на ее форме.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

I. Адрианов В.Н. Основы радиационного и сложного теплообмена. - М.: Энергия, I972. - 464 с.

2. Апанович Ю.В., Люмкис Е.Д. Применение разностных схем на ячейках Дирихле для решения задач теплообмена с фазовыми переходами // Дифференциальные уравнения. - I988. - Т.24. - № 7. - С.III3-II2I.

3. Kitaeva V.F., Zharikov E.V., Chistyi I.L. The properties of crystals witr garnet structure // Phys. Stat. Sol.(a). - 1985. - Vol.92. - N 2.-P.475-488.
4. Görnert P., Voigt F. High temperature solution growth of garnets: theoretical models and experimental results. - Amsterdam e.a., 1984.-P.1-144.
5. Адрианова В.Г., Дождиков В.С., Обухов О.Ю., Петров В.А. Резник В.Ю., Севрюков. Оптические свойства гадолиний-галлиевого граната// Теплофизика высоких температур. - 1983. - Т.21. - № 4. - С.680-687.
6. Ahn J. Thermal and optical properties of gadolinium gallium garnet // Mat. Res.Bull. - 1982. - V.17.- N 11. - P.1393-1399.

Сборник научных трудов
ПРИКЛАДНЫЕ ЗАДАЧИ МАТЕМАТИЧЕСКОЙ ФИЗИКИ
Рига: ЛГУ им.П.Стучки,1989

УДК 536.421.1+536.24

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

ИССЛЕДОВАНИЕ УСТОЙЧИВОСТИ ФРОНТА КРИСТАЛЛИЗАЦИИ НА ОСРЕДНЕННОЙ РАСЧЕТНОЙ МОДЕЛИ ТЕПЛОПЕРЕНОСА В ДВУХФАЗНОЙ СРЕДЕ

В настоящей работе исследуется устойчивость роста кристалла на численной модели задачи о фазовом переходе (задачи Стефана). В работе /I/ разработан метод решения задачи кристаллизации в обобщенной постановке не допускающей переохлаждения. Было доказано существование устойчивого решения задачи во всем диапазоне параметров. Решение определяло двухфазную зону в случае возникновения дендритного роста.

Однако, в классической постановке задачи, если допустить существование гладкого фронта кристаллизации (поверхности фазового перехода) возможно возникновение переохлаждения в жидкой фазе и как следствие - потеря устойчивости плоского фронта.

I. Прежде чем перейти к построению численного метода проведем локальное осреднение уравнений задачи кристаллизации в классической постановке.

Задачу кристаллизации описывает уравнение теплопереноса в двухфазной среде

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

и условия на границе раздела фаз

$$[\lambda\, grad\, u]_{S_t}\cdot\vec{n} = \gamma v_n(t); \quad u(x,t) = u_n . \qquad (2)$$

Здесь c - удельная теплоемкость; γ - удельная скрытая теплота фазового перехода; u_n - температура фазового перехода; λ - коэффициент теплопроводности, терпящий разрыв при переходе из твердой в жидкую фазу; вводя функцию η, равную I в твердой фазе и 0 в жидкой, можем записать $\lambda(\eta)=\lambda_1\eta+\lambda_2(1-\eta)$. $[\Phi]_{S_t}$ - обозначает скачок величины Φ при переходе через границу S_t ; S_t - граница раздела фаз; $v_n(t)$ - скорость движения границы раздела фаз по направлению нормали $\vec{n}$, направленной в сторону жидкой фазы.

Для определения скорости $v_n(t)$ запишем известное кинетическое условие для нормального закона скорости роста /2/:

$$v_n(t)=\mathcal{K}\cdot\Delta u_{S_t}\ , \tag{3}$$

так что при $\mathcal{K}\to\infty$ $\Delta u_{S_t}\to 0$;
$\Delta u=u_n-u$ - переохлаждение.
Известно, что уравнения (I) и (2) можно записать в обобщенном виде в смысле теории распределений /3/:

$$c\frac{\partial u}{\partial t}=div(\lambda\, grad\, u)+\gamma v_n(t)\delta(S_t)+f\ , \tag{4}$$

где $\delta(S_t)$ - обобщенная функция Дирака, сосредоточенная на поверхности S_t . Численная реализация уравнения (4) вызывает большие трудности, т.к. требует выделения в явном виде неизвестной границы раздела фаз S_t и реализации δ -функции на ней. Введем локальное осреднение функций в произвольной точке x по локальному объему V_ρ:

$$\tilde{u}=\frac{1}{V_\rho}\int_{V_\rho}u(s,t)\,dv\ . \tag{5}$$

Если коэффициенты c , λ являются гладкими и непрерывными функциями по пространственным переменным, уравнение (4) можно осреднить непосредственно. Интегрируя (4) по указанному объему V_ρ , получаем:

$$\tilde{c}\frac{\partial\tilde{u}}{\partial t}=div(\tilde{\lambda}\, grad\,\tilde{u})+\gamma\tilde{v}_n(t)\frac{1}{V_\rho}\int_{V_\rho}\delta(s_t)\,dv+\tilde{f}\ . \tag{6}$$

По определению поверхностной δ -функции

$$\int\limits_{V_\rho} \delta(s_t)\,dv = mes\, s_{t,\rho} \quad . \tag{7}$$

Кроме того, согласно (3), полагаем:

$$\tilde{v}_n(t) \approx \mathcal{K} \cdot \Delta\tilde{u} \,. \tag{8}$$

С учетом (7),(8) уравнение (6) можно записать в виде

$$\tilde{c}\,\frac{\partial \tilde{u}}{\partial t} = div(\tilde{\lambda}\, grad\,\tilde{u}) + \gamma\beta\,\Delta\tilde{u}\cdot\theta_1(\rho - |x - x^*|) + \tilde{f} . \tag{9}$$

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

- единичные функции; x^* - точка на границе раздела фаз s_t ;

$$\beta = \frac{\mathcal{K}\cdot mes\, s_{t,\rho}}{V_\rho} \,. \tag{10}$$

С другой стороны,

$$\frac{1}{V_\rho}\int\limits_{V_\rho} \tilde{v}_n(t)\,\delta(s_t)\,dV = \frac{1}{V_\rho}\int\limits_{s_{t\rho}} \tilde{v}_n(t)\,ds = \frac{\partial\tilde{\eta}^\rho}{\partial t} \,, \tag{11}$$

где $\tilde{\eta}^\rho$ - относительная доля твердой фазы в объеме V_ρ . Таким образом, осредненное уравнение (6) можно записать в виде

$$\tilde{c}\,\frac{\partial\tilde{u}}{\partial t} = div(\tilde{\lambda}\, grad\,\tilde{u}) + \gamma\,\frac{\partial\tilde{\eta}^{\rho,\beta}}{\partial t} + \tilde{f} \,, \tag{12}$$

причем

$$\frac{\partial\tilde{\eta}^{\rho,\beta}}{\partial t} = \beta\cdot\Delta\tilde{u}\cdot\theta_1(\rho - |x - x^*|). \tag{13}$$

Теперь к уравнению (12) можно применять разностные методы со сквозным счетом без выделения границы раздела фаз.

Покажем, что решение уравнения (12) $\tilde{u}^\beta$ сходится к решению исходной задачи при $\beta \to \infty$ в норме пространства $W_2^{1,0}(Q_T)$. Для этого получим соответствующую априорную оценку. Уравнение (12) умножим на $\tilde{u}^\beta$ и проинтегрируем по исходной области Q_T , приняв на границе области однородные условия первого рода. Тогда получим:

$$\frac{1}{2}\int_{Q_T}\tilde{c}\frac{\partial(\tilde{u}^\beta)^2}{\partial t}dvdt+\int_{Q_T}\tilde{\lambda}\left(\frac{\partial\tilde{u}^\beta}{\partial x_i}\right)^2=\int_{Q_T}\tilde{f}\,\tilde{u}^\beta dvdt-$$
$$-\gamma\beta\int_{Q_T}(\tilde{u}^\beta)^2\theta(\tilde{\eta}^{\rho,\beta})\theta(1-\tilde{\eta}^{\rho,\beta})dvdt. \qquad (14)$$

Используя неравенства Коши и Гронуола /4/, получим неравенство:

$$\int_{Q_T}(\tilde{u}^\beta)^2dvdt+\lambda_0\int_{Q_T}\left(\frac{\partial\tilde{u}^\beta}{\partial x_i}\right)^2dvdt+\gamma\beta\int_{Q_T}(\tilde{u}^\beta)^2\theta(\tilde{\eta}^{\rho,\beta})\times$$
$$\times\theta(1-\tilde{\eta}^{\rho,\beta})dvdt\le\frac{1}{2}\int_{Q_T}(\tilde{u}^\beta)^2\Big|_{t=0}dv+M_1\int_{Q_T}\tilde{f}^2dvdt. \qquad (15)$$

Получаем оценку, равномерную по β в пространстве $W_2^{1,0}(Q_T)$ Указанная оценка позволяет перейти к пределу при $\beta\to\infty$ в интегральном тождестве, соответствующем уравнению (12):

$$\int_{Q_T}\left[-\tilde{c}\tilde{u}^\beta\frac{\partial\psi}{\partial t}+\tilde{\lambda}\frac{\partial\tilde{u}^\beta}{\partial x_i}\cdot\frac{\partial\psi}{\partial x_i}+\gamma\tilde{\eta}^{\rho,\beta}\theta(\tilde{\eta}^{\rho,\beta})\theta(1-\tilde{\eta}^{\rho,\beta})\frac{\partial\psi}{\partial t}-\psi\tilde{f}\right]dvdt=0. \qquad (16)$$

Действительно, функции $\dfrac{\partial\tilde{u}^\beta}{\partial x_i}$ сходятся слабо, а осредненные функции $\tilde{\eta}^{\rho,\beta}$ и $\tilde{\lambda}=\lambda_1\tilde{\eta}^{\rho,\beta}+\lambda_2(1-\tilde{\eta}^{\rho,\beta})$ – сильно в классе $L_2(Q_T)$ при $\beta\to\infty$. В пределе получаем тождество, соответствующее осредненному уравнению (6).

Ниже, при построении разностной схемы будем исходить из осредненного уравнения (12) и условия (13).

2. Рассмотрим задачу с фазовым переходом в следующей постановке. Цилиндрический слиток радиуса R движется со скоростью v_0 вдоль муфеля печи с заданной температурой $u_b(x)$. Тогда осредненное уравнение (12) в цилиндрической неподвижной системе координат (x, r) запишется в виде (знак осреднения опускаем):

$$c\frac{\partial u}{\partial t}=\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}\left(r\frac{\partial u}{\partial r}\right)+\frac{\partial}{\partial x}\left(\lambda\frac{\partial u}{\partial x}\right)+cv_0\frac{\partial u}{\partial x}-\alpha_0(u-u_0)+\gamma\frac{\partial\eta}{\partial t}. \qquad (17)$$

На боковой поверхности выполняется условие излучения по закону Стефана-Больцмана:

$$\lambda \frac{\partial u}{\partial r}\Big|_{r=R} = -\alpha_3 \varepsilon \sigma_0 (u^4 - u_t^4(x)). \tag{18}$$

На торцах слитка потребуем выполнения условий:

$$\frac{\partial u}{\partial x}\Big|_{x=0} = \alpha_1 (u - u_1); \quad \frac{\partial u}{\partial x}\Big|_{x=l} = -\alpha_2 (u - u_2); \tag{19}$$

$$u(x, r, 0) = u_н(x, r). \tag{20}$$

Вводим неравномерную сетку в пространстве

$$\omega_h = \{(x_i, r_j) : 1 \le i \le N,\ 1 \le j \le M,\ x_{i+1} - x_i = h_i, \\ r_{j+1} - r = g_j,\ x_1 = r_1 = 0,\ x_N = l,\ r_M = R\} \tag{21}$$

и дифференциальное уравнение (17) заменяем разностным. В направлении t берем равномерный шаг τ, $t = t_0 + k\tau$:

$$\frac{c}{\lambda}\,\frac{u_{ij}^{k+1} - u_{ij}^{k}}{\tau} = \frac{u_{i+1j}^{k+1} - 2u_{ij}^{k+1} + u_{i-1j}^{k+1}}{\ } + \frac{u_{ij+1}^{k+1} - 2u_{ij}^{k+1} + u_{ij-1}^{k+1}}{g_j \cdot g_{j+1}} +$$

$$+ \frac{1}{r_j}\,\frac{u_{ij+1}^{k+1} - u_{ij-1}^{k+1}}{g_j + g_{j+1}} - \frac{c v_0}{\lambda}\,\frac{u_{i+1j}^{k+1} - u_{i-1j}^{k+1}}{h_i + h_{i+1}} - \alpha_0 (u_{ij}^{k+1} - u_0) + \tag{22}$$

$$+ \frac{f}{\lambda}\left(\frac{\partial \eta}{\partial t}\right)^{k+\frac{1}{2}}.$$

Так как мы рассматриваем задачу в классической постановке, то скрытая теплота выделяется только на фронте кристаллизации, точнее в ρ -окрестности фронта. Соответственно разностную аппроксимацию члена $\frac{\partial \eta}{\partial t}$ в уравнении (22) записываем в виде

$$\left(\frac{\partial \eta}{\partial t}\right)_{ij}^{k+\frac{1}{2}} = \beta \cdot \Delta u_{ij}^{k+1} \Big[\theta(\Delta u_{ij}^{k}) \cdot \theta(1 - \eta_{ij}^{k}) \cdot \theta_1(\eta_{i\pm1\, j\pm1}^{k} - 1) + \tag{23}$$

$$+ \theta(\eta_{ij}^{k}) \cdot \theta(-\Delta u_{ij}^{k})\Big]$$

и функцию η определяем из уравнения

$$\frac{\eta_{ij}^{k+1} - \eta_{ij}^{k}}{\tau} = \beta \cdot \Delta u_{ij}^{k+1} \Big[\theta(\Delta u_{ij}^{k+1})\theta(1 - \eta_{ij}^{k})\theta_1(\eta_{i\pm1 j\pm1}^{k} - 1) + \theta(-\Delta u_{ij}^{k+1})\theta(\eta_{ij}^{k})\Big], \tag{24}$$

где $\eta \pm 1$ - значения функции $\eta(x,r,t)$ в точках, сдвинутых на шаг аппроксимации в любом направлении по пространству. Граничные условия (18)-(20) аппроксимировались обычным образом. Для расчетов применялся эффективный итерационный метод неполного LU-разложения сопряженных градиентов /5,6/.

3. Проведем еще дополнительный анализ устойчивости (по времени) в отдельной ячейке сетки. Для изучения вопроса об устойчивости границы раздела фаз во времени рассмотрим задачу кристаллизации отдельной ячейки (ρ - окрестности) границы раздела фаз, выделенной нами методом локального осреднения. Процесс кристаллизации этой ячейки начинается с некоторого переохлаждения Δu_0. Полагая $\alpha_0 = 0$ и пренебрегая суммарным потоком на границе ячейки, процесс кристаллизации этой ячейки упрощенно можно описать как

$$
\begin{aligned}
& c\frac{\partial u}{\partial t} = \gamma \frac{\partial \eta}{\partial t}, \qquad u\big|_{t=0} = -\Delta u_0 , \\
& \frac{\partial \eta}{\partial t} = \beta \cdot \Delta u, \qquad \eta\big|_{t=0} = 0, \quad \Delta u = -u .
\end{aligned}
\tag{25}
$$

Прямым интегрированием получаем решение задачи (25) в виде

$$
u = -\Delta u_0 e^{-\frac{\gamma}{c}\beta t}, \qquad \eta = \frac{c}{\gamma}\Delta u_0 \left(1 - e^{-\frac{\gamma}{c}\beta t}\right). \tag{26}
$$

Из аналитического выражения (26) видим, что как температура $u(t)$, так и доля твердой фазы $\eta(t)$ во времени меняются монотонно. Соотношение параметров γ, c, β влияет только на скорость убывания температуры и роста функции η, но никак не влияет на монотонный характер их изменений, и тем самым на устойчивость движения границы раздела фаз во времени.

Доказанная только что устойчивость решения во времени приводит нас к ограничениям при выборе численного метода. Если использовать явную итерационную схему, то заведомо при $\frac{\gamma}{c}\beta\tau > 1$ получаем неустойчивое решение, т.е. выбор явной схемы требует ограничения шага τ. В то же время при выборе неявной схемы

$$\frac{U^{k+1}-U^{k}}{\tau}=-\frac{\gamma}{c}\beta U^{k+1}, \quad U^{k+1}=\frac{-\Delta U_0}{(1+\frac{\gamma}{c}\beta\tau)^{k+1}} \qquad (27)$$

видим, что решение устойчиво при любом τ.

4. В начале приведем результаты решения задачи о кристаллизации слитка, охлаждаемого с поверхности и имеющего внутренние объемные источники, т.е. $\alpha_3=1$ и $\alpha_0\neq 0$. Также проводились расчеты и случая, когда на границе раздела фаз задаются конечные начальные возмущения. На рис.I представлена форма границы раздела фаз. Видим, что начальные возмущения сохраняют форму в процессе роста, но рост во всех случаях происходит устойчиво даже при $\beta\to\infty$. Далее рассмотрим результаты решения задачи с заданным начальным переохлаждением, $\alpha_0=0$, $U_H=-\Delta U_0$, и заданными начальными конечными возмущениями границы раздела фаз.

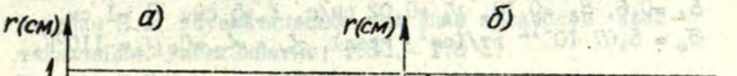


Рис.I. Граница раздела фаз решения задачи кристаллизации с внутренними источниками тепла
а) I - β=0.5, 2 - β=100, 3 - β = I000.
б) случай с начальными возмущениями, β=I000;
I- t=0, 2- t=I, 3- t=2.

На рис.2 представлено решение задачи без охлаждения боковой поверхности, $\alpha_3 = 0$, а на рис.3 - с охлаждением, $\alpha_3 = 1$. Из представленных результатов видим, что в этом случае начинается дендритный рост кристалла. В случае без охлаждения с боковой поверхности сильно разрастается внутренний дендрит, образовавшийся от начального возмущения. При охлаждении слитка с боковой поверхности активнее разрастается боковой дендрит, рост которого опережает и тормозит рост внутреннего дендрита. Отметим, что во всех указанных случаях численное решение отражает процесс устойчивого роста дендритов. Следует еще отметить устойчивость при любом τ неявной итерационной схемы (22), подтверждающей теоретический вывод (27).

Задача численно решалась при следующих значениях теплофизических констант:

$\lambda_1 = 0{,}173$ вт/(см.град), $\lambda_2 = 0{,}412$ вт/(см град),
$C_1 = C_2 = 0{,}34$ вт $\cdot$ c/(г $\cdot$ град), $\rho_1 = \rho_2 = 5{,}6$ г/см^3
$\varepsilon_1 = 0{,}6$, $\varepsilon_2 = 0{,}18$, $v_0 = 0{,}02$ см/с, $\ell = 5$ см, $R = 1$ см,
$\sigma_0 = 5{,}67\ 10^{-12}$ вт/(см$^2\cdot$ град), $\alpha_1 = \alpha_2 = 0$, $u_0 = -110^0$K,

Рис.2 Граница раздела фаз случая с начальным переохлаждением без бокового охлаждения, $\beta = 1000$,
I - $t = 0$, 2- $t = 0.05$, 3- $t = 0{,}15$

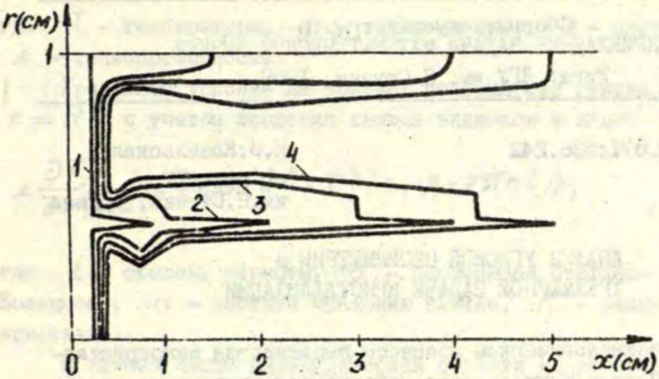


Рис.3. Граница раздела фаз случая с начальным переохлаждением и с боковым охлаждением, $\beta = 1000$, I- $t=0$, 2- $t=0,05$, 3- $t=0,I5$, 4- $t=0,25$

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

I. Авдонин Н.А. Математическое описание процессов кристаллизации.-Рига:Зинатне, I980.- I75 с.
2. Борисов В.Т., Матвеев Ю.Е. Кристаллизация тонких слоев переохлажденного галлия //Кристаллография.-I969.-Т.I5. - Вып.5.-С.895-899.
3. Владимиров В.С. Уравнения математической физики. - М.: Наука, I97I.- 5I2 с.
4. Ладыженская О.А., Солонников В.А., Уральцева Н.Н. Линейные и квазилинейные уравнения параболического типа. - М.:Наука, I967. - 736 с.
5. David S.Kersaw. The incomplate Cholesky-conjugate gradient methods for the iterative solution of system of linear equations//J.of Comput.Phys.-1978.-V.26.P.43-65
6. Гончаров А.Л. Реализация метода неполной LU-композиции сопряженных градиентов для решения сеточных уравнений на различных шаблонах // Препринт ИПМ им.М.В.Келдыша АН СССР - М. - I984. № I74.

Сборник научных трудов
ПРИКЛАДНЫЕ ЗАДАЧИ МАТЕМАТИЧЕСКОЙ ФИЗИКИ
Рига: ЛГУ им. П.Стучки, 1989

УДК 519.671:536.242

Н.В.Козельская
ВЦ при ЛГУ
им.П.Стучки, г.Рига

АНАЛИЗ УГЛОВОЙ НЕСИММЕТРИИ В ТРЕХМЕРНОЙ ЗАДАЧЕ КРИСТАЛЛИЗАЦИИ

В технологическом процессе выращивания монокристаллов по методу Чохральского наблюдается отклонение от симметрии по угловой координате φ внешнего температурного воздействия, что может быть вызвано как аппаратурными отклонениями, так и внутренними свойствами теплопереноса. В настоящей статье исследуется вопрос, как повлияет указанное отклонение на распределение температурных градиентов в кристалле и в конечном счете-на напряжение и плотность дислокаций в кристалле. Рассматривается задача определения влияния отклонения по углу φ температуры на стенках тигля заданной амплитуды на распределение температурного поля и градиентов в кристалле при различных частотах вращения кристалла и тигля. Для этого дается постановка трехмерной задачи теплопереноса и численный метод ее решения. Приводятся примеры расчета для кристаллов кремния при различных частотах вращения кристалла.

В подвижной системе координат, связанной с вращающимся слитком, температура кристалла в предположении изотропности переноса тепла в цилиндрических координатах (r, φ, z), описывается следующим уравнением:

$$c\rho\frac{\partial T}{\partial t}=\lambda\left[\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}\left(r\frac{\partial T}{\partial r}\right)+\frac{1}{r^2}\frac{\partial^2 T}{\partial\varphi^2}+\frac{\partial^2 T}{\partial z^2}\right], \quad (1)$$

где T - температура, c - теплоемкость, ρ - плотность, λ - теплопроводность.

Граничное условие на боковой поверхности слитка при $r = R$ с учетом вращения слитка задается в виде:

$$\lambda \frac{\partial T}{\partial r}\bigg|_{r=R} = -\varepsilon\sigma\left(T^4 - T_1^4(z, \varphi + 2\pi n t)\right), \qquad (2)$$

где ε - степень черноты, σ - постоянная Стефана-Больцмана, n - частота вращения слитка, R - радиус кристалла.

В нижней части цилиндрической области на некотором расстоянии от фронта кристаллизации задается температура перегрева.

$$T\Big|_{z=0} = T_{пер} \qquad (3)$$

На верхнем торце слитка при $z = H$ (H - высота слитка) задается условие излучения

$$\lambda \frac{\partial T}{\partial z}\bigg|_{z=H} = -\varepsilon\sigma\left(T^4 - T_1^4(H, \varphi + 2\pi n t)\right). \qquad (4)$$

По углу φ задается условие периодичности

$$T(r, \varphi, z) = T(r, \varphi + 2\pi, z) \quad \text{при} \quad 0 \leqslant \varphi \leqslant 2\pi. \qquad (5)$$

Коэффициенты уравнения (I) при $r = 0$ имеют особенность. Нас будут интересовать ограниченные при $r = 0$ решения, такие решения удовлетворяют условию

$$r \frac{\partial T}{\partial r} = 0. \qquad (6)$$

Начальное условие задается в достаточно произвольной форме, поскольку нас будет интересовать установившееся температурное поле, а в этом случае начальное условие не влияет на решение

$$T\big|_{t=0} = T_0(z). \qquad (7)$$

Остановимся подробнее на задании функции $T_1(z, \varphi + 2\pi n t)$.
Для рассматриваемой физической задачи функция

$T = T_{11}$ при $H_0 < z \leq H$ и от угла φ не зависит.

При $0 \leq z \leq H_0$

$$T_1 = \begin{cases} T_{12} & \text{при } 0 < \varphi < 36^\circ \\ T_{13} & \text{при } 36^\circ \leq \varphi \leq 360^\circ. \end{cases}$$

В общем случае T_1 может быть произвольной функцией от φ.
Для численного решения задачи (I)-(7) аппроксимируем уравнение (I) с условиями (2)-(7).
Для написания разностного уравнения введем сетку

$$\bar{\omega} = \bar{\omega}_r \times \bar{\omega}_\varphi \cdot \bar{\omega}_z = \{(r, \varphi, z) \mid r \in \bar{\omega}_r,\ \varphi \in \bar{\omega}_\varphi,\ z \in \bar{\omega}_z\}$$

$$\bar{\omega}_r = \left\{ r_i = \sum_{i=0}^{N} (i + 0{,}5)\, h_i \right\} \qquad (8)$$

$$\bar{\omega}_\varphi = \left\{ \varphi_j = \sum_{j=0}^{M} j \cdot f_j \right\}$$

$$\bar{\omega}_z = \left\{ z_\kappa = \sum_{\kappa=0}^{L} \kappa \cdot g_\kappa \right\},$$

а также сетку по времени

$$\bar{\omega}_\tau = \tau \cdot m, \quad m = 0, 1, 2 \ldots \qquad (9)$$

Исключая точки с координатой $r = 0$ из числа точек сетки, мы избавляемся от необходимости аппроксимировать уравнение при $r = 0$, но вместе с тем должны аккуратно аппроксимировать уравнение при $r = h_0/2$.

Аппроксимация уравнения (I) на сетке $\bar{\omega}$ выглядит следующим образом.

$$L_\varphi T = \frac{1}{r^2}\frac{\partial^2 T}{\partial \varphi^2} \sim \Lambda_\varphi T = \frac{1}{r^2} T_{\bar{\varphi}\varphi} \qquad (10)$$

$$L_z T \sim T_{\bar{z}z} \, . \qquad (11)$$

При $r_0 \neq h_0/2$ оператор L_r аппроксимируется как оператор с переменными коэффициентами

$$L_r T = \frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}\left(r\frac{\partial T}{\partial r}\right) \sim \Lambda_r T = \frac{1}{r}(\bar{\rho}\, T_{\bar{r}})_r \, , \qquad (12)$$

где $\bar{\rho}(r) = r - h_0/2$.

Оператор $L_r T$ при $r = h_0/2$ согласно /I/ имеет вид

$$L_r T = \frac{1}{r h_0}\bar{\rho}^{(+1r)} T_r \, , \quad \bar{\rho}^{(+1r)}(r_0) = r_1 - h_0/2 \, . \qquad (13)$$

Для погрешности аппроксимации имеет место оценка

$$\tilde{\psi} = O\left(\frac{h_r^2 + h_\varphi^2}{r} + h_z^2\right), \qquad (14)$$

где h_r, h_φ, h_z – равномерные шаги по r, φ и z

Запишем уравнение (I) в разностном виде:

$$c\rho\frac{T_{ijk}^{m+1} - T_{ijk}^{m}}{\tau} = \lambda\Big[\frac{1}{r_i \hbar_i}\Big(r_{i+1/2}\frac{T_{i+1jk}^{m+1} - T_{ijk}^{m+1}}{h_{i+1}} - r_{i-1/2}\frac{T_{ijk}^{m+1} - T_{i-1jk}^{m+1}}{h_i}\Big) +$$

$$+ \frac{1}{r_i^2 \bar{f}_j}\left(\frac{T_{ij+1k}^{m+1} - T_{ijk}^{m+1}}{f_{j+1}} - \frac{T_{ijk}^{m+1} - T_{ij-1k}^{m+1}}{f_j}\right) + \qquad (15)$$

$$+ \frac{1}{\bar{g}_k}\left(\frac{T_{ijk+1}^{m+1} - T_{ijk}^{m+1}}{g_{k+1}} - \frac{T_{ijk}^{m+1} - T_{ijk-1}^{m+1}}{g_k}\right)\Big] .$$

В этом уравнении:

$$
\begin{aligned}
&r_{i-1/2} = r_i - 0{,}5h_i \\
&r_{i+1/2} = r_i + 0{,}5h_i \\
&\hbar_i = (\hbar_i + h_{i+1})/2 \\
&\bar{f}_j = (f_j + f_{j+1})/2 \\
&\bar{g}_\kappa = (g_\kappa + g_{\kappa+1})/2 .
\end{aligned}
\tag{16}
$$

Условие (2) примет вид

$$\lambda \frac{T^{m+1}_{N+1j\kappa} - T^{m+1}_{Nj\kappa}}{h_{N+1}} = -\varepsilon\sigma\left(T^{m+1^4}_{Nj\kappa} - T_1^4(z_\kappa, \varphi_j + 2\pi n t)\right). \tag{17}$$

Условие (3) запишется в виде:

$$T_{ij1} = T_{пер} \tag{18}$$

Условие (4) примет вид

$$\lambda \frac{T^{m+1}_{ijL+1} - T^{m+1}_{ijL}}{g_{L+1}} = -\varepsilon\sigma\left(T^{m+1^4}_{ijL} - T_1^4(H, \varphi_j + 2\pi n t)\right). \tag{19}$$

Условие периодичности (5) запишется как

$$T_{ij\kappa} = T_{ij+M\kappa} . \tag{20}$$

Ограниченность решения (6) при $r = 0$ заложена в выборе сдвинутой сетки по r и в аппроксимации уравнения.

Наконец, начальное условие (7) примет вид:

$$T^{0}_{ij\kappa} = T_0(z) . \tag{21}$$

Следует отметить, что при численной реализации условий (17), (19) излучения была произведена линеаризация 4-ой степени температуры

$$T^{m+1^4} \approx 4T^{m^3} T^{m+1} - 3T^{m^4} . \tag{22}$$

Таким образом, аппроксимация эллиптических уравнений второго порядка с самосопряженным оператором привела к системе 3-х мерных сеточных уравнений. Для уравнений эллиптического типа в работе /2/ был предложен метод неполного разложения Холецкого с сопряженными градиентами. Реализация этого метода для решения сеточных уравнений на различных шаблонах была осуществлена в работе /3/. Для решения рассматриваемой задачи использовался семиточечный шаблон

$$A1_{i-1jk}T_{i-1jk}+A2_{ij-1k}T_{ij-1k}+A3_{ijk-1}T_{ijk-1}+A0_{ijk}T_{ijk}+$$

$$+A1_{ijk}T_{i+1jk}+A2_{ijk}T_{ij+1k}+A3_{ijk}T_{ijk+1}=R_{ijk}$$

где $A1, A2, A3<0,\ A0>0$.

Численная реализация метода осуществлялась с помощью пакета программ $ICCG57$/3/, модифицированного для расчетов задач в цилиндрической системе координат. Варианты рассматривались на сетке (16,10,16) для следующих значений: R =50 мм, H =300 мм, H_0 =100 мм, T_{11} = =100°C, T_{12} =1450°C, T_{13} =1400°C, λ =21,6 вт/м К°, C =981 дж/кг.°к, ρ =2300 кг/м³, ε =0,7, σ =0,567×$\times 10^{-7}$.

Рассчеты проводились при различных частотах вращения кристалла n (об/мин). Анализ расчетов приводится для установившегося температурного поля. На рис.1 представлено распределение температуры по угловой координате φ на поверхности слитка при различных значениях частоты n . Из рис.1 видно, что при заданной амплитуде колебания на слитках тигля δT =50° в отсутствие вращения кристалла $(n=0)$ амплитуда колебания снизилась до 25°. При увеличении числа оборотов амплитуда колебания δT значительно снижается, так при n =15 об/мин амплитуда составила 8°, а при n =30 об/мин, δT =4°.

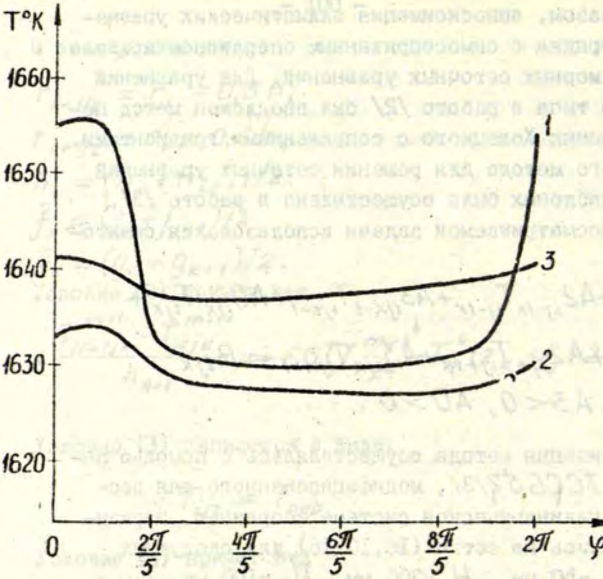


Рис.I. Распределение температуры $T^{o}C$ в зависимости от φ на поверхности слитка при z =4 см, I - при скорости $n=0$, 2 - при скорости n =15 об/мин, 3 - при скорости n =30 об/мин.

На рис.2-4 показано распределение температуры по φ на различном расстоянии r от оси кристалла и при различных скоростях оборота n . Из рисунков видно, что максимальное значение амплитуды δT и градиентов температуры достигается на поверхности кристалла, а в глубине кристалла амплитуда и градиенты резко снижаются. Следует отметить, что при увеличении частоты вращения градиент температуры по φ значительно снижается (от 7^{o}/см при $n=0$ до $0,95^{o}$ см при n =30 об/мин).

Таким образом, расчеты показали, что снижение амплитуды аппаратурных колебаний температуры и градиентов температуры достигается увеличением угловой скорости и

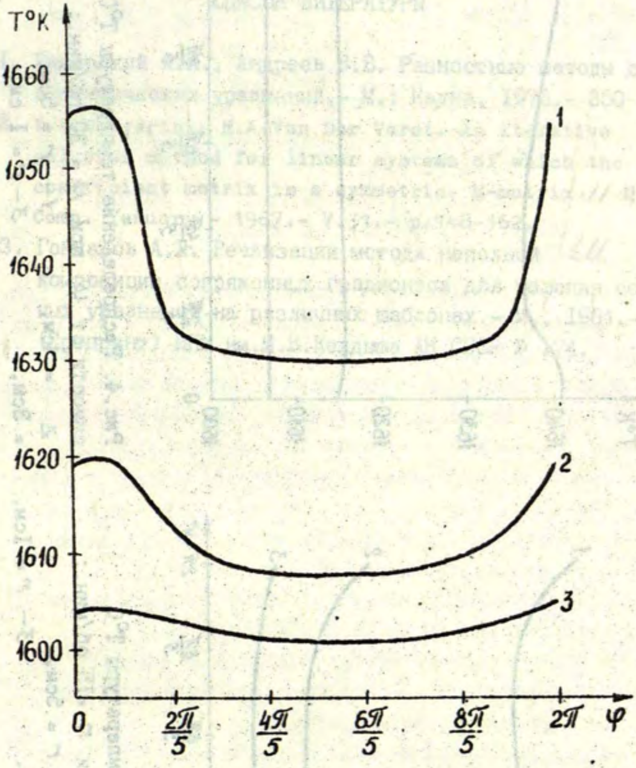


Рис.2. Распределение температуры T°C в зависимости от φ при n =0; z =4 см; 1 – r =5 см; 2 – r =3 см; 3 – r =I см.

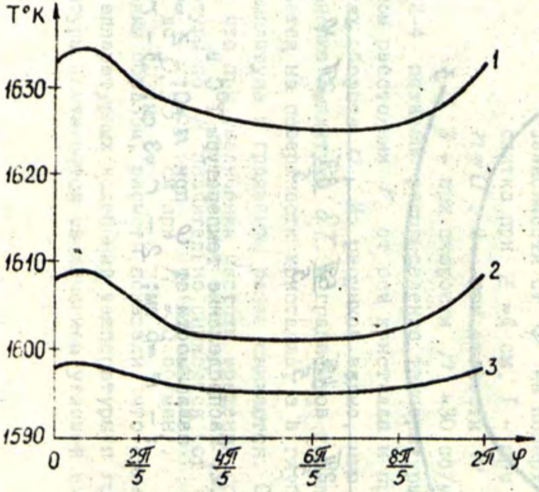


Рис.3. Распределение температуры $T^{\circ}C$ в зависимости от φ при n =15 об/мин.; z = 4см; 1 – r = 5см, 2 – r = 3см. 3 – r = 1см.

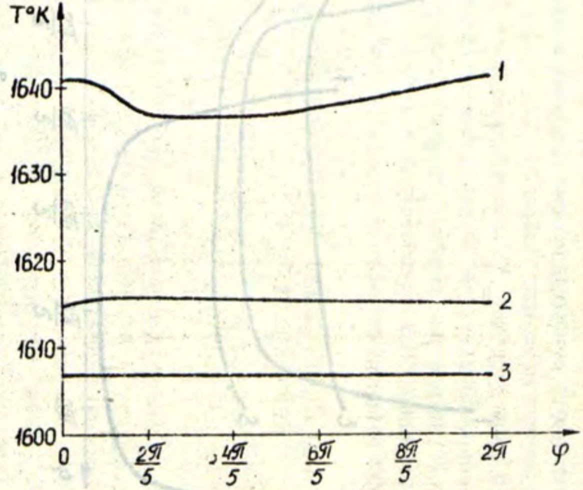


Рис.4. Распределение температуры $T^{\circ}C$ в зависимости от φ при n = 30 об/мин.; z = 4см, 1 – r = 5см, 2 – r = 3см, 3 – r = 1 см.

при n =15 об/мин. градиенты по φ становятся незначительными. Для окончательных выводов необходимы прямые расчеты напряжений и дислокаций в трехмерном случае.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Самарский А.А., Андреев В.Б. Разностные методы для эллиптических уравнений.- М.: Наука, 1976.- 350 с.
2. Y.A.Meijerink, H.A.Van Der Vorst. An iterative solurion method for linear systems of which the coefficient matrix is a symmetric. M-matrix // Math. Comp. Yanuary - 1987.- V.31.- p.148-162.
3. Гончаров А.Л. Реализация метода неполной LU -декомпозиции сопряженных градиентов для решения сеточных уравнений на различных шаблонах.- М., 1984.- 10 с. (Препринт) ИПМ им.М.В.Келдыша АН СССР № 174.

Сборник научных трудов
ПРИКЛАДНЫЕ ЗАДАЧИ МАТЕМАТИЧЕСКОЙ ФИЗИКИ
Рига: ЛГУ им.П.Стучки, 1989

УДК 536.421+536.421.4+
+536.24

Е.Д.Люмкис, Б.Я.Мартузан,
Э.Н.Мартузане
ВЦ при ЛГУ им.П.Стучки, Рига
А.С.Сенченков
Техн.центр "Сплав", Москва

МАТЕМАТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ ТЕПЛОПЕРЕНОСА ПРИ ЗОННОЙ ПЛАВКЕ В ПОЛУПРОЗРАЧНОЙ АМПУЛЕ

В работах /I,2/ изучались процессы теплопереноса, происходящие при ампульной зонной плавке германия, в условиях невесомости, когда слиток, концы которого закреплены в полых графитовых держателях, помещен в кварцевую ампулу, вдоль которой движется муфель с резистивным нагревателем. Изучалось влияние расположения нагревателя относительно слитка и наличия рифлений графитовых держателей на ширину и перегрев зоны расплава, образованной теплом, поступающим от резистивного нагревателя. При этом не исследовалось влияние полупрозрачной кварцевой ампулы.

I. Поглощение и испускание излучения кварцем может влиять на температурное поле расплава и слитка.

При проведении зонной плавки в ампуле в наземных условиях слиток помещается также в кварцевую трубочку с радиусом, близким к радиусу слитка (рис.I).

Рассмотрим приближенную модель учета полупрозрачности кварцевых ампул. На рис.2 изображено сечение рассматриваемой цилиндрически-симметричной системы.

В модели радиационного теплообмена будем учитывать только нормальное к поверхности излучение. Поверхности I и 2 будем считать диффузно-серыми и будем использовать метод сальдо /3/.

Введем следующие обозначения: r_j, $j=1,\dots,4$ - радиус

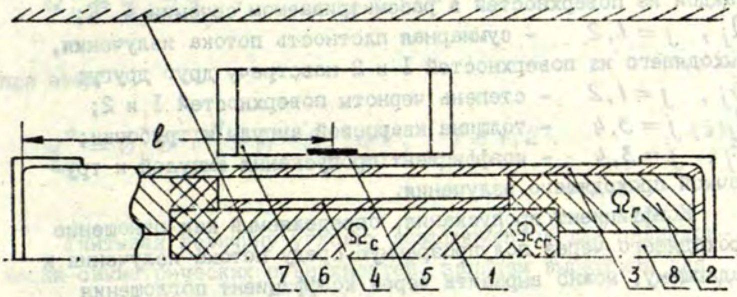


Рис.I. Схема расчетной области при зонной плавке в ампуле. I - слиток радиуса R, 2 - графитовые держатели радиуса R_1, 3 - кварцевая ампула, 4 - кварцевая трубочка, 5 - нагреватель, 6 - муфель, 7 - корпус, 8 - полый цилиндр радиуса R_0.

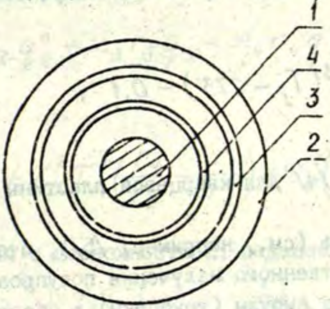


Рис.2. Сечение области. I - кристалл, 2 - поверхность нагревателя, 3 - кварцевая ампула, 4 - кварцевая трубочка.

рассматриваемой поверхности; T_j, $j=1,...,4$ - температура каждой из поверхностей в рассматриваемом сечении в °К;
Q_j, $j=1,2$ - суммарная плотность потока излучения, выходящего из поверхностей I и 2 навстречу друг другу;
ε_j, $j=1,2$ - степень черноты поверхностей I и 2;
d_j, $j=3,4$ - толщина кварцевой ампулы и трубочки;
τ_j, $j=3,4$ - коэффициент пропускания ампулой и трубочкой проходящего излучения.

Коэффициент пропускания, определяемый как отношение проходящего через полупрозрачную среду потока излучения к падающему, можно выразить через коэффициент поглощения среды χ_j (усредненный по частоте излучения):

$$\tau_j = e^{-\chi_j d_j}, \quad j=3,4. \tag{I}$$

Коэффициент τ_j для кварца в расчетах аппроксимировался формулой

$$\tau_j = 0{,}75\cdot 10^{-3}(T_j - 273) - 0{,}1, \tag{2}$$

которая предложена в /4/ для кварцевой пластины толщиной в 0,2 см.

Нетрудно показать (см., например, /5/), что величина плотности потока собственного излучения полупрозрачного материала, выходящего из ампулы (трубочки) в обе стороны, равна

$$q_j = \sigma T_j^4 (1-\tau_j), \quad j=3,4. \tag{3}$$

Суммарная плотность потока излучения Q_j равна разности эффективной плотности выходящего потока излучения q_j^o и эффективной плотности падающего потока излучения q_j^i /3/:

$$Q_j = q_j^o - q_j^i , \quad j = 1,2 , \tag{4}$$

при этом

$$q_j^o = \varepsilon_j \sigma T_j^4 + (1-\varepsilon_j) q_j^i , \quad j = 1,2 . \tag{5}$$

Учитывая величину угловых коэффициентов для цилиндрически-симметрических поверхностей, запишем выражения для q_j^i, $j = 1,2$:

$$r_1 q_1^i = r_2 \tau_3 \tau_4 q_2^o \frac{r_1}{r_2} + r_4 q_4 \frac{r_1}{r_4} + r_3 q_3 \frac{r_1}{r_3} \tau_4 , \tag{6}$$

$$r_2 q_2^i = r_1 \tau_3 \tau_4 q_1^o + r_3 q_3 + r_4 \tau_3 q_4 +$$

$$+ \varkappa_2 r_2 q_2^o + \varkappa_3 r_3 q_3 + \varkappa_4 r_4 q_4 , \tag{7}$$

где

$$\varkappa_2 = 1 - \frac{r_3}{r_2} + \tau_3^2 \tau_4^2 \left(\frac{r_4}{r_2} - \frac{r_1}{r_2} \right) + \tau_3^2 \left(\frac{r_3}{r_2} - \frac{r_4}{r_2} \right) -$$

доля излучения с поверхности 2, падающего на нее же; $\varkappa_3 = \tau_3 \left(1 - \frac{r_4}{r_3}\right) + \tau_3 \tau_4^2 \left(\frac{r_4}{r_3} - \frac{r_1}{r_3} \right)$ – доля излучения, выходящего с внутренней поверхности 3 и падающего на поверхность 2; $\varkappa_4 = \left(1 - \frac{r_1}{r_4}\right) \tau_3 \tau_4$ – доля излучения с внутренней поверхности 4 и падающего на поверхность 2; r_1 / r_j, $j = 2,3,4$ – доля излучения, выходящего с j -ой поверхности и падающего на поверхность I.

Температуру T_3, T_4 кварцевых ампулы и трубочки, из-за малости толщины d_j, $j = 3,4$ естественно считать зависящей только от аксиальной координаты x . Тогда распределение температуры описывается одномерным уравнением теплопроводности:

$$c_j \rho_j \frac{\partial T_j}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \lambda_j \frac{\partial T_j}{\partial x} + f_j\ , \quad j = 3,4\ , \tag{8}$$

где c_j, ρ_j - удельная теплоемкость и плотность сред 3,4, λ_j - их теплопроводность, f_j - объемная плотность энергии, поглощенной ампулой или трубочкой за единицу времени.

Найдем выражение для f_j.

Пусть q_K - результирующая плотность потока энергии в направлении от поверхности 4 к поверхности 3, проходящего через фиктивную цилиндрическую поверхность радиуса r_K, $r_4 \leq r_K \leq r_3$.

$$q_K = (q_K^i)^- - (q_K^i)^+\ , \tag{9}$$

где

$$(q_K^i)^+ = \frac{1}{r_K}\left(r_2 \tau_3 \frac{r_K}{r_2} q_2^o + r_3 \frac{r_K}{r_3} q_3\right), \tag{10}$$

$$(q_K^i)^- = \frac{1}{r_K}\left(r_1 \tau_4 q_1^o + r_4 q_4 + r_4 q_4 \left(1 - \frac{r_1}{r_4}\right)\tau_4 + \right.$$

$$\left. + r_3 \tilde{\varkappa}_3 q_3 + r_1 \tilde{\varkappa}_2 q_2^o \tau_3\right) - \tag{11}$$

плотности потоков, падающих на внешнюю и внутреннюю части фиктивной поверхности. Здесь r_K / r_j, $j = 2,3$ - доля излучения, падающего с j-ой поверхности на внешнюю часть фиктивной поверхности; $(1 - r_1/r_4)$ - доля излучения от внутренней части поверхности 4, падающее на внутреннюю часть фиктивной поверхности;

$$\tilde{\varkappa}_j = \frac{r_K}{r_j} - \frac{r_4}{r_j} + \tau_4^2 \left(\frac{r_4}{r_j} - \frac{r_1}{r_j}\right), \quad j = 2,3\ - \tag{12}$$

доля излучения с поверхности j, падающего на внутреннюю часть фиктивной поверхности. Тогда

$$s = r_\kappa q_\kappa = r_1 \tau_4 q_1^o + (r_4 + \tau_4 (r_4 - r_1)) q_4 -$$

$$-(r_4 - \tau_4^2 (r_4 - r_1)) q_3 - (r_4 - \tau_4^2 (r_4 - r_1)) q_1^o \tau_3 . \tag{I3}$$

Из (I3) видно, что S не зависит от r_κ. Таким образом, поток S является выходящим с внешней поверхности 4 и входящим для внутренней части поверхности 3.

Аналогично, рассматривая поток через фиктивную поверхность, расположенную между поверхностями 2 и 3, нетрудно показать, что на внешнюю часть поверхности 3 падает поток энергии $r_2 Q_2$, а рассматривая поток через фиктивную поверхность, расположенную между поверхностями I и 4, находим, что на внутреннюю часть поверхности 4 падает поток $r_1 Q_1$. Сумма падающих на каждую из поверхностей 3,4 потоков образует в одномерном по x приближении объемные источники энергии для уравнений (3).

$$f_3 r_3 d_3 = s + Q_2 r_2 , \tag{I4}$$

$$f_4 r_4 d_4 = Q_1 r_1 - s . \tag{I5}$$

Подставляя в (4) выражения (6) и (7), получим

$$Q_1 = q_1^o - \tau_3 \tau_4 q_2^o - q_4 - \tau_4 q_3 , \tag{I6}$$

$$Q_2 = (1 - æ_2) q_2^o - \frac{r_1}{r_2} \tau_3 \tau_4 q_1^o -$$

$$- \frac{r_3}{r_2} (1 + æ_3) q_3 - \frac{r_4}{r_2} (\tau_3 + æ_4) q_4 . \tag{I7}$$

2. Температура слитка T_1 удовлетворяет уравнению теплопроводности в цилиндрической системе координат, связанной со слитком, с учетом осевой симметрии. На фронте фазового перехода происходит выделение или поглощение скрытой теплоты. На теплоперенос влияет движение нагревателя вдоль слитка. С поверхности тепло теряется путем излучения. Условие на боковой поверхности имеет вид:

$$-\lambda(x, T_1)\frac{\partial T_1}{\partial x}\bigg|_{\Gamma(x)} = Q_1 \,, \tag{18}$$

где $\lambda(x, T_1)$ - коэффициент теплопроводности, $\Gamma(x)$ - боковая поверхность области слиток-графит.

Для качественного исследования температурного поля можно ограничиться решением одномерного уравнения, полученного осреднением двумерного уравнения по радиусу с учетом условия (18):

$$\frac{\partial}{\partial x}\left[\lambda(x,T_1)\frac{\partial T_1}{\partial x}\right] - \gamma(x)\,Q_1 = c(x,T_1)\rho(x,T_1)\frac{\partial T_1}{\partial t} \,, \tag{19}$$

где c - теплоемкость, ρ - плотность

$$\gamma(x) = \begin{cases} \dfrac{2}{R} & , x \in \Omega_c \\[2ex] \dfrac{2}{R_1} & , x \in \Omega_{cr} \\[2ex] \dfrac{2R_1}{R_1^2 - R_0^2} & , x \in \Omega_r \end{cases} \,. \tag{20}$$

Для определения температуры в слитке, кварцевой ампуле и трубочке применялся конечно-разностный метод. На каждом временном шаге решались уравнения (8) и (19), и при этом проводились итерации по нелинейности для достижения заданной точности.

3. Для приводимых результатов расчета рассмотрен образец германия (Рис.1), $R = 0.75$ см, длина - 11 см. Он помещен между графитовыми держателями, длина каждого из

которых 5,8 см., причем на I см по длине графит заходит на поверхность слитка, $R_1 = 1,3$ см, $R_0 = 0,4$ см. Кварцевая ампула расположена на расстоянии I,4 см от оси слитка, $d_3 = 0,2$ см. Кварцевая трубочка расположена на расстоянии 0.77 см от оси слитка, $d_4 = 0,2$ см.

Резистивный нагреватель длиной I.8 см, расположенный в муфеле длиной 7,5 см, продвигается вдоль слитка со скоростью v. Температура нагревательной системы $T_2(x)$ при заданном расположении нагревателя относительно слитка бралась из представленных нам результатов экспериментов. На рис.2 схематически изображены распределения по длине температуры $T_2(x)$ и степени черноты $\varepsilon_2(x)$ нагревательной системы, численные значения которых для приведенных вариантов расчета даны в таблице I.

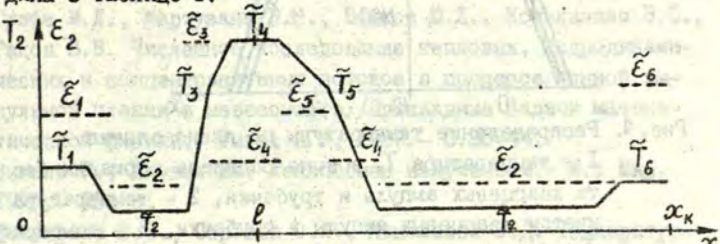


Рис.3. Схематическое распределение температуры T_2 и степени черноты ε_2 нагревательной системы по длине.

Таблица I.

Значения температуры $T_2(x)$ и $\varepsilon_2(x)$ нагревательной системы (рис.3) и положение центра резистивного нагревателя ℓ

i	I $\tilde{T}_i$ $\ell = 9,3$ см	II $\tilde{T}_i$ $\ell = 8,8$ см	III $\tilde{T}_i$ $\ell = 12,3$ см	$\tilde{\varepsilon}_i$
I	570	618	512	0,5
2	366	367	367	0,2
3	1068	1060	1085	0,8
4	1420	1436	1436	0,3
5	958	965	513	0,65
6	493	1118	594	0,5

На рис.3 представлено распределение температуры по длине слитка как без учета влияния кварцевой ампулы и трубочки (кривая I), так и с учетом этого влияния (кривая 2), а также дано распределение температуры в ампуле и трубочке для Ш варианта нагрева (кривые 3,4).

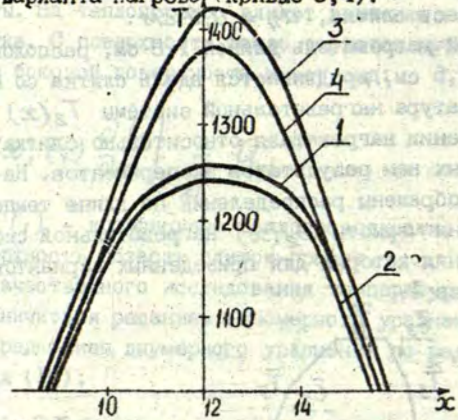


Рис. 4. Распределение температуры по длине слитка.
I - температура T_1 в зоне расплава германия без учета кварцевых ампулы и трубочки, 2 - температура T_1 с учетом кварцевых ампулы и трубочки, 3 - температура T_3 кварцевой ампулы, 4 - температура T_4 кварцевой трубочки.

Из рис. 4 видно, что наличие кварцевых ампулы и трубочки понижает температуру в расплаве и уменьшает ширину зоны.

Таблица 2.

Изменение ширины зоны и перегрева расплава в процессе зонной плавки без учета (I,2,3) и с учетом (Iат,2ат, 3ат) кварцевых ампулы и трубочки

№	Изотермы, см		Ширина зоны, см	Перегрев расплава
	плавления	кристаллизации		
I	7,65	I0,7	3,05	30,6
I ат	7,85	I0,5	2,65	20,25
П	7,00	I0,35	3,35	38,5
П ат	7,20	I0,15	2,95	26,64
Ш	I0,34	I4,25	3,9I	49,04
Шат	I0,55	I4,00	3,45	34,87

Таблица 2 позволяет проанализировать, как влияет учет полупрозрачных кварцевых ампулы и трубочки на ширину зоны проплава и температуру в расплаве для различных положений нагревателя по длине слитка и заданного распределения температуры нагревательной системы. Очевидно, что ширина зоны проплава и перегрев расплава существенно уменьшаются при наличии полупрозрачных кварцевых ампулы и трубочки.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. 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, 1985.- С.135-144.
2. Гулбе М.Л., Мартузане Э.Н., Волков Ю.Л., Копелиович Э.С., Раков В.В. Численное исследование тепловых, гидродинамических и концентрационных потоков в процессе зонной ампульной плавки в невесомости//Прикладные задачи математической физики.- Рига: ЛГУ, 1987.- С.35-44.
3. Зигель Р., Хауэлл Дж. Теплообмен излучением.- М.: Мир, 1975.- 934 с.
4. Сеттарова З.С., Сергеев О.А., Николаева З.Д. Температурная зависимость коэффициента поглощения некоторых кварцевых стекол//Теплофизика высоких температур.- 1972.- Т.10.- № 3.-
5. Зельдович Я.Б., Райзер Ю.П. Физика ударных волн и высокотемпературных гидродинамических явлений.- М.: Наука, 1966.- 686 с.

Сборник научных трудов
ПРИКЛАДНЫЕ ЗАДАЧИ МАТЕМАТИЧЕСКОЙ ФИЗИКИ
Рига: ЛГУ им. П.Стучки, 1989

УДК 621.791.01 : 536.45.001.57

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

ЧИСЛЕННЫЙ РАСЧЕТ РАСПРЕДЕЛЕННЫХ ХАРАКТЕРИСТИК СТОЛБА СВАРОЧНОЙ ДУГИ

1. Введение. Свободногорящая электрическая дуга является основой целого ряда технологических процессов получения и соединения металлических материалов (вакуумно-дуговой переплав, сварка, нанесение покрытий и др.). Для совершенствования и оптимизации технологий требуется количественная оценка распределенных и интегральных характеристик дуги в зависимости от условий и режимов ведения технологического процессов.

Высокие температуры (до 30000 °K) и скорости потока плазмы (до 1000 м/с), значительные градиенты подлежащих определению распределенных характеристик - все эти факторы затрудняют экспериментальное исследование плазмы сварочной дуги, в связи с чем представляет интерес разработка расчетных методов исследования.

В настоящей работе излагается математическая модель процессов переноса тепла, вещества, импульса и заряда в плазме сварочной дуги, предлагается вычислительный алгоритм ее численной реализации, приводятся результаты вычислительных экспериментов.

2. Математическая модель. При разработке модели плазмы сварочной дуги будем исходить из одножидкостного приближения плазмы и системы следующих допущений:

1) плазма находится в состоянии локального термодинамического равновесия (ЛТР),

2) распределенные характеристики плазмы удовлетворяют условию осевой симметрии,

3) внешние магнитные поля отсутствуют,

4) плазма является оптически прозрачной средой,

5) электрод неплавящийся, без заточки,

5) сила тяжести мала по сравнению с силами электромагнитной природы,

7) вязкой диссипацией энергии и работой сил давления пренебрегаем.

При этих предположениях процессы переноса в столбе сварочной дуги могут быть описаны системой дифференциальных уравнений в частных производных:

I) уравнения неразрывности и движения вязкого газа

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + div(\rho \bar{W}) = 0, \tag{I}$$

$$\frac{\partial(\rho \bar{W})}{\partial t} + \bar{W} div(\rho \bar{W}) + (\rho \bar{W} \nabla)\bar{W} = \bar{F} - grad(P + \frac{2}{3}\eta div \bar{W}) + 2 Div(\eta \check{S}); \tag{2}$$

2) уравнение энергии

$$\frac{\partial(\rho C v T)}{\partial t} + div(\rho C v T \bar{W}) = Q + div(\lambda\, grad T), \tag{3}$$

$$Q = Q_{дж} - U_{изл},$$

3) уравнения Максвелла и закон Ома

$$rot(1/\sigma\, rot \bar{H}) = 0, \quad \bar{J} = rot \bar{H},$$

$$Q_{дж} = \bar{J}^2/\sigma, \quad \bar{F} = \bar{J} \times \bar{B}, \tag{4}$$

4) уравнение состояния

$$\rho = \rho(P, T), \tag{5}$$

где ρ - плотность, $\bar{W} = (u, v)$ - вектор скорости потока, $\bar{F}$ - массовая сила электромагнитной природы, P - давление, η - динамический коэффициент вязкости, $\dot{S}$ - тензор скоростей деформаций, $\frac{d}{dt}$ - субстанциональная производная, Cv - удельная теплоемкость при постоянном объеме, T - температура газа, Q - удельная производительность источников и стоков тепла, λ - коэффициент теплопроводности, $\bar{H}$ - вектор напряженности магнитного поля, $\bar{J}$ - плотность тока, σ - удельная электропроводность плазмы, $\bar{B}$ - вектор магнитной индукции, $Q_{дж}$ - удельная производительность джоулевых источников тепла, $U_{изл}$ - количество энергии, излучаемой единицей объема в единицу времени.

Уравнения (1)-(3) записываются в цилиндрической системе координат $\{r,z\}$; будем для краткости писать $\bar{x}=\{r,z\}$.

Коэффициенты $\eta, \lambda, \sigma, Cv$ и плотность плазмы являются функциями температуры и давления; зависят от состава плазмообразующего газа. Методика их расчета приведена в /1/.

Систему уравнений (1)-(5) будем решать в области

$$G=\{0\leqslant r\leqslant R;\ 0\leqslant z\leqslant D\}.$$

Граница $z=0$ соответствует поверхности свариваемого изделия (аноду), $z=D$ - катоду. Размер области G в радиальном направлении определяется из соображений достаточной удаленности границы $r=R$ от оси столба дуги.

В качестве граничных и начальных условий выбираем следующие:

при $r=0$: $v=0,\ \dfrac{\partial u}{\partial r}=0,\ \dfrac{\partial T}{\partial r}=0,\ \dfrac{\partial \rho}{\partial r}=0,\ \dfrac{\partial P}{\partial r}=0,\quad H=0;$

при $r=R$: $u=0,\ \dfrac{\partial \rho}{\partial r}=0,\ \dfrac{\partial (vr)}{\partial r}=0,\ \dfrac{\partial T}{\partial r}=0,\ P=P_o,\ H=I/(2\pi R);$

при $z=0$: $u=0,\ v=0,\ T=T_1(r),\ J_r=0;$ (6)

при $z=D$: $v=0,\ u=u_o(r),\ T=T_2(r),\ J_z=J_z(r),\ H=H_1(r);$

при $t=0$: $u(r,z)=0,\ v(r,z)=0,\ T(r,z)=(T_1(r)(D-z)+T_2(r)z)/D,$

$$P(r,z)=P_o,\ \bar{J}(r,z)=\bar{J}(r,D),\ \rho(r,z)=\rho(T(r,z),P_o);$$

где P_o - давление окружающей среды, I - ток дуги v и u радиальная и аксиальная составляющие вектора скорости соответственно; J_r, J_z - проекции вектора $\bar{J}$ на оси Or

и Oz.

3. Схема расщепления уравнений переноса по физическим процессам. Перенос массы, импульса и энергии происходит под воздействием нескольких физических факторов и поэтому может быть представлен в виде последовательности подпроцессов, ответственных за то или иное физическое воздействие /2/.

Основные подпроцессы можно объединить в 3 этапа:

I этап - конвективный перенос массы, импульса и энергии;

II этап - диссипация тепла (за счет теплопроводности) и импульса (под действием сил вязкости);

III этап - перенос под воздействием градиента давления и массовых сил с учетом неразрывности среды.

Введем сетку

$$\omega_\tau = \{ t_\kappa = r_\kappa \, ; \; \kappa = \overline{0,K} \} .$$

На каждом шаге по времени исходную систему уравнений представим в виде последовательности задач, описывающих каждый из этапов расщепления по физическим процессам.

Предварительно для краткости записи введем дифференциальный оператор

$$D\vec{\varphi} = \frac{\partial \vec{\varphi}}{\partial t} + \frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}(rv\vec{\varphi}) + \frac{\partial}{\partial z}(u\vec{\varphi}).$$

Условимся, что римский индекс у переменной указывает, что эта переменная определена на соответствующем этапе расщепления.

I - КОНВЕКТИВНЫЙ ЭТАП

$$D\vec{\varphi}_I = 0, \; t \in [t_\kappa, t_{\kappa+1}], \; \vec{\varphi}_I(t_\kappa) = \vec{\varphi}(t_\kappa), \quad (7)$$

где $\vec{\varphi} = \{\rho, \rho v, \rho u, \rho C v T\}^*$, '*' - символ транспонирования.

II - ДИССИПАТИВНЫЙ ЭТАП

$$\rho_{II}\frac{\partial \overline{W}_{II}}{\partial t} = -\frac{2}{3}\, grad(\eta \, div \overline{W}_{II}) + 2 Div(\eta \dot{s}_{II}), \quad (8)$$

$$t \in [t_\kappa, t_{\kappa+1}],$$

$$\rho_{II} C_v \frac{\partial T}{\partial t} = div(\lambda \, grad \, T_{II}) + Q, \tag{9}$$

$$t \in [t_\kappa, t_{\kappa+1}],$$

$$T_{II}(\bar{x}, t_\kappa) = T_I(\bar{x}, t_{\kappa+1}), \quad \lambda = \lambda(T_I(\bar{x}, t_{\kappa+1})),$$

$$C_v = C_v(T_I(\bar{x}, t_{\kappa+1})), \quad \bar{W}_{II}(\bar{x}, t_\kappa) = \bar{W}_I(\bar{x}, t_{\kappa+1}),$$

$$\rho_{II}(\bar{x}) = \rho_I(\bar{x}, t_{\kappa+1}), \quad \eta = \eta(T_I(\bar{x}, t_{\kappa+1})).$$

III - СИЛОВОЙ ЭТАП

$$\begin{cases} div(\rho_{III} W_{III}) = 0, \\ \dfrac{\partial(\rho_{III} \bar{W}_{III})}{\partial t} = -grad \, P_{III} + \bar{F}, \quad t \in [t_\kappa, t_{\kappa+1}], \\ \rho_{III} = \rho(P_{III}, T_{II}(\bar{x}, t_{\kappa+1})), \end{cases} \tag{10}$$

$$\rho_{III}(\bar{x}, t_\kappa) = \rho_{II}(\bar{x}), \quad \bar{W}_{III}(\bar{x}, t_\kappa) = \bar{W}_{II}(\bar{x}, t_{\kappa+1}).$$

Производительность джоулевых источников тепла и массовая сила $\bar{F}$ определяются интегрированием уравнений Максвелла при $\sigma = \sigma(T_{II}(t_{\kappa+1}))$.

Решением задачи в момент $t = t_{\kappa+1}$ считаем значения искомых переменных $\rho_{III}, P_{III}, \bar{W}_{III}, T_{II}$ при $t = t_{\kappa+1}$.

4. Численная реализация этапов расщепления. При численной реализации задачи (7) воспользуемся методикой расщепления уравнений конвективного переноса по пространственным переменным, предложенной в /3/.

Получаем последовательность следующих задач:

$$1) \; D_1 \bar{\varphi}^{(1)} = 0; \quad \frac{dr}{dt} = v; \quad \frac{dz}{dt} = 0, \quad t \in [t_\kappa, t_{\kappa+1}], \tag{11}$$

$$\vec{\varphi}^{(1)}(\bar{x},t_\kappa)=\vec{\varphi}(\bar{x},t_\kappa);$$

$$D_2\vec{\varphi}^{(2)}=0;\ \frac{dr}{dt}=0;\ \frac{dz}{dt}=u,\quad t\in[t_\kappa,t_{\kappa+1}]. \qquad (I2)$$

$$\vec{\varphi}^{(2)}(\bar{x},t_\kappa)=\vec{\varphi}^{(1)}(\bar{x},t_{\kappa+1}),$$

где

$$D_1\vec{\varphi}^{(1)}=\frac{\partial\vec{\varphi}^{(1)}}{\partial t}+\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}(rv^{(1)}\vec{\varphi}^{(1)}),$$

$$D_2\vec{\varphi}^{(2)}=\frac{\partial\vec{\varphi}^{(2)}}{\partial t}+\frac{\partial}{\partial z}(u^{(2)}\vec{\varphi}^{(2)}).$$

В задачах (II) и (I2) обозначено

$$\vec{\varphi}^{(i)}=\left\{\begin{array}{l}\rho^{(i)}\\ \rho^{(i)}u^{(i)}\\ \rho^{(i)}v^{(i)}\\ \rho^{(i)}C_v^{(i)}T^{(i)}\end{array}\right\},\quad i=1,2.$$

Система уравнений (II-I2) реализует последовательно конвективный перенос массы, импульса и энергии вдоль осей Or и Oz соответственно (решаются две одномерные задачи). При решении этих одномерных задач субстанциональная производная аппроксимировалась на локальной лагранжевой сетке /4/, что обеспечивает определенные преимущества /5,6/, связанные с уменьшением счетной диссипации при больших числах Куранта.

Для описания диссипации импульса под действием сил вязкости применялся двухшаговый метод, аналогичный методу Писмена-Рэкфорда. Члены, аппроксимирующие смешанные производные, считались "источниками" /2/. Для численного интегрирования уравнения теплопроводности использовался метод Писмена-Рэкфорда /7/.

Разностные задачи для определения характеристик электромагнитного поля и поля давления на силовом этапе расщепления решаются методом верхней релаксации /8-9/ с выбором оптимального итерационного параметра.

5. Вычислительный эксперимент. Изучались вольт-амперная характеристика столба сварочной дуги, влияние расхода и состава плазмообразующего газа на режим горения дуги при нормальном (10^5Па) и избыточном (10^6Па) внешнем давлении. Расчет одного варианта на сетке 40x20 узлов требует 100 минут процессорного времени ЕС 1040.

Результаты вычислительных экспериментов представлены на рис.1-3 в виде изолиний напряженности магнитного поля, линий $Q = const$, изотерм, изобар, а также двух векторных полей - скорости потока и плотности тока.

Расчеты, которые проводились для аргоновой плазмы дуги при токе I=100А, отражают основные закономерности поведения плазмы в столбе сварочной дуги. Холодный газ втягивается под катод, нагревается, ионизируется и разгоняется под действием массовых сил электромагнитной природы. Самая высокая скорость, которая достигается на оси дуги, обусловлена, прежде всего, малой плотностью плазмы в этой зоне. Затем поток нагретой до высокой температуры плазмы сталкивается с твердой подложкой (свариваемое изделие - анод) и растекается вдоль поверхности подложки. Такой конвективный перенос энергии из области вблизи оси дуги на периферию обусловливает колоколообразную форму изотерм. При столкновении потока с подложкой образуется область повышенного давления, локализованная вблизи оси потока. Отклонение давления от атмосферного составляет 0.1-0.4%. Поэтому картина распределения плотности плазмы аналогична распределению температур. Температурное поле оказывает решающее влияние на размер проводящей области. Аргон становится электропроводным при температурах выше 5000°К, и вдув холодного защитного газа вызывает сжатие проводящей области дуги.

Результаты вычислительных экспериментов находятся в хорошем качественном соответствии с известными экспериментальными данными /10-14/.

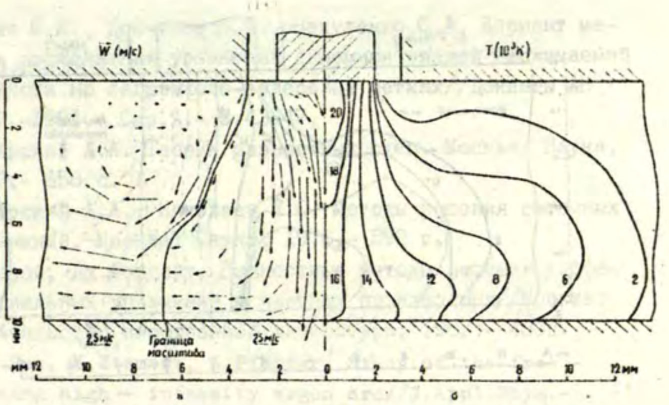


Рис.I. Поле скоростей (а) и температурное поле (б) в плазме столба сварочной дуги.

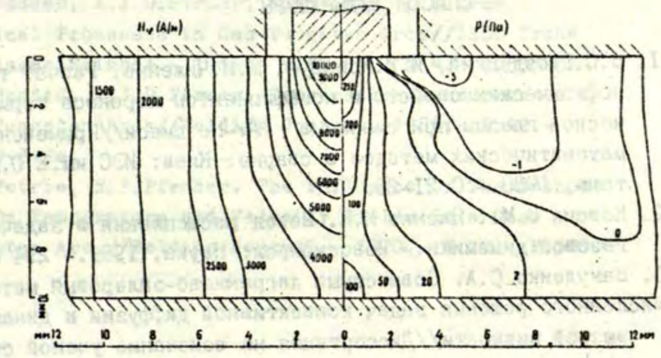


Рис.2. Изолинии напряженности магнитного поля (а) и изобары (б) в плазме столба сварочной дуги.

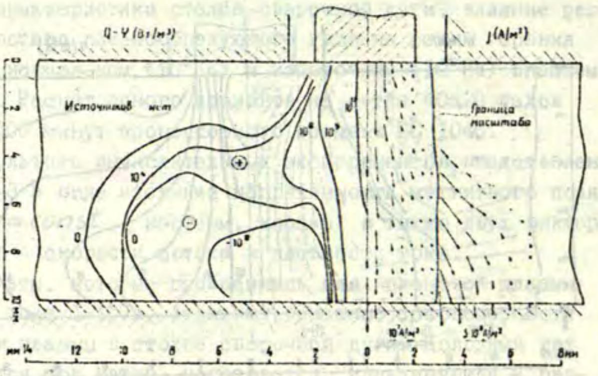


Рис.3. Изолинии источников (а) и поле плотностей тока (б) в плазме столба дуги.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

I. В.С.Гвоздецкий, И.В.Кривцун, М.И.Чиженко. Расчет теплофизических свойств и коэффициентов переноса термической плазмы при сварке в Ar-He смеси//Применение математических методов в сварке.- Киев: ИЭС им.Е.О.Патона, 1988.- С.21-28.

2. Ковеня В.М., Яненко Н.Н. Метод расщепления в задачах газовой динамики.- Новосибирск: Наука, 1981.- 294 с.

3. Вакуленко С.А. Совместный лагранжево-эйлеровый метод численного решения задач конвективной диффузии и динамики вязкой жидкости//Диссертация на соискание ученой степени кандидата физ.-мат. наук.-Киев, 1982.

4. Демченко В.Ф., Вакуленко С.А. Разностный метод решения задач конвективного переноса тепле на лагранжево-эйлеровых сетках//Материалы УI Всесоюзной конференции по тепломассообмену.-Минск, 1980.- т.IУ.- С.88-91

5. Вакуленко С.А. Неявная лагранжево-эйлеровая схема для задач газовой динамики//Проблемы динамики вязкой жидкости. Новосибирск, 1985.- С.50-55.

6. Ляшко И.И., Демченко В.Ф., Вакуленко С.А. Вариант метода расщепления уравнений динамики вязкой несжимаемой жидкости на лагранжево-эйлеровых сетках//Доклады АН УССР.-1981.- Сер.А.- С.43-47.
7. Самарский А.А. Теория разностных схем.-Москва: Наука, 1977.- 656 с.
8. Самарский А.А., Николаев Е.С. Методы решения сеточных уравнений.-Москва: Наука, 1978.- 592 с.
9. В.Вазов, Дж.Форсайт. Разностные методы решения дифференциальных уравнений в частных производных//Москва: Издательство иностранной литературы, 1963.- 488с.
10. K.C.Hsu, K.Etemadi, E.Pfender. Study of the free - burning high - intensity argon arc//J.Appl.Phys.- 1983.- V.54.- N 3.- P.1293-1301.
11. The Physics Of Welding/Ed. by J.F.Lancaster.// Oxf. etc.: Pergamont Press, 1984.- 297p.
12. G.N.Haddad, A.J.D.Farmer, P.Kovitya, L.E.Cram. Physical Processes in Gas-Tungsten Arcs//IEEE Trans. on Plasma Science.- 1986.- V.PS-14.- N 4.- P.333-336.
13. G.N.Haddad, A.J.D.Farmer. Temperature Measurements in Gas Tungsten Arcs//Welding Journal.-1985.- N 12.- P.339-342s.
14. T.W.Petrie, E.F.Pfender. The Influence Of The Cathode Tip On Temperature and Velocity Fields In a Gas-Tungsten Arc.//Welding Journal.- 1970.- N 12.- P.588-596.

Сборник научных трудов
ПРИКЛАДНЫЕ ЗАДАЧИ МАТЕМАТИЧЕСКОЙ ФИЗИКИ
Рига: ЛГУ им. П.Стучки, 1989

УДК 621.315.592.3.002.2.001.57

Ю.И.Скрыль
Вычислительный центр
при ЛГУ им. П.Стучки,
Рига

ОБ ОДНОМ МЕТОДЕ МОДЕЛИРОВАНИЯ ПЕРЕРАСПРЕДЕЛЕНИЯ ПРИМЕСИ В ПРОЦЕССЕ ЛОКАЛЬНОГО ОКИСЛЕНИЯ ПОЛУПРОВОДНИКА

Моделирование технологических процессов стало неотьемлемой частью разработки новых больших интегральных схем (БИС) /I/, что объясняется дешевизной и скоростью машинного моделирования. По сравнению с одномерными моделями в настоящее время более перспективны двумерные модели в особенности при моделировании процессов для микроэлектроники субмикронного диапазона. Улучшение алгоритмов и программ, обеспечивающих двумерное моделирование в отношении их быстродействия и качества описания моделируемых процессов, имеет первостепенное значение.

В настоящей статье рассматривается модель локального окисления кремния, широко применяемого в МОП технологии. Модель двумерна, так как необходимо учитывать боковое подкисление под маску Si_3N_4 , что проявляется в возникновении геометрической конфигурации известной под названием "птичий клюв". Рассматривается перераспределение примеси под окислом. Для решения диффузионной задачи вводится новая криволинейная система координат, позволяющая значительно упростить описание границы раздела /2/. Геометрический вид окисляющей поверхности задается аналитически.

В данной статье развивается эта методика решения диффузионной задачи. Подробно анализируется методология трансформации первоначальных уравнений в новой системе координат. Полученные разностные уравнения решаются быстрым преобразованием Фурье /3/. Метод опробован на примере перераспределения бора в кремнии после ионной имплантации.

Рассматривается следующая система уравнений в декартовой системе координат:

$$I_i = -D_{ij}\frac{\partial c}{\partial x_j} \qquad (1)$$

$$\frac{\partial c}{\partial t} = -\operatorname{div}\vec{I},$$

с граничными условиями со стороны окисляющей поверхности:

$$D\frac{\partial c}{\partial n} = c\left(\frac{1}{\mu} - \beta\right) f_t' \vec{n}, \qquad (2)$$

где c – концентрация примеси,
μ – коэффициент сегрегации примеси,
β – коэффициент расширения материала при окислении равен 0,44,
D – тензор диффузии
f_t' – производная функции $f(x,t)$, описывающей форму окисляющей поверхности, по времени t.

Пусть наряду с декартовой системой координат x, y, z (q^1, q^2, q^3) имеется криволинейная система $\eta, \varkappa, \xi$ (q'^1, q'^2, q'^3) (рис.1) с заданным законом соответствия:

$$\xi = z - f(x,t),\ \eta = x,\ \varkappa = y. \qquad (3)$$

Введем базис e_1', e_2', e_3' /4/, который выражается через старый базис e_1, e_2, e_3 (i, j, k) как

$$e_j' = a_i^j e_i, \qquad a_i^j = \frac{\partial q^j}{\partial q'^i}, \qquad (4)$$

где a_i^j – матрица прямого преобразования, которая для системы (3) имеет вид:

$$\| a_i^j \| = \begin{Vmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ f_x & 0 & 1 \end{Vmatrix}. \qquad (5)$$

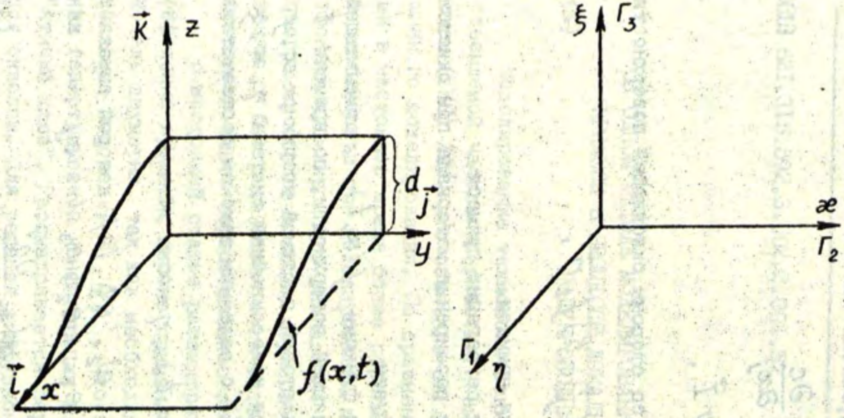


Рис.1. Старая и новая системы координат

Решая систему (4) с учетом (5), находим взаимосвязь между базисными векторами

$$e'_1 = i + f'_x k\,,\quad e'_2 = j\,,\quad e'_3 = k\,. \tag{6}$$

Полученный базис ковариантных векторов является неортогональным.

Вычислим тензор диффузии для криволинейных координат. Имеем систему:

$$\begin{aligned} D'_{ij} &= a^m_i a^n_j D_{mn} \\ \hat{D}'_{ij} &= \frac{D'_{ij}}{\sqrt{g'_{ii} g'_{jj}}}\,, \end{aligned} \tag{7}$$

где $g'_{ij} = e'_i e'_j$, $\hat{D}'_{ij}$ - физическая компонента тензора диффузии, g'_{ij} - компоненты метрического тензора, имеющего в криволинейной системе следующий вид:

$$g' = \begin{vmatrix} 1+f'^2_x & 0 & f'_x \\ 0 & 1 & 0 \\ f'_x & 0 & 1 \end{vmatrix} \tag{8}$$

В декартовой системе координат тензор диффузии кремниевой решетки равен произведению скаляра D_o на шаровой тензор:

$$D = D_o \begin{vmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{vmatrix}. \tag{9}$$

Подставляя (9) в систему (7), получим тензор диффузии в криволинейных координатах:

$$\hat{D}' = D_o \begin{vmatrix} 1 & 0 & T \\ 0 & 1 & 0 \\ T & 0 & 1 \end{vmatrix}, \tag{10}$$

где $T = f'_x / \sqrt{1 + f'^2_x}$. (11)

И, наконец, выпишем уравнения для градиента и дивергенции в криволинейной системе координат /5/:

$$grad\ c = \frac{\partial c}{\partial \eta} e_2' \times e_3' + \frac{\partial c}{\partial \text{æ}} e_3' \times e_1' + \frac{\partial c}{\partial \xi} e_1' \times e_2' \quad (12)$$

$$div \vec{R} = \frac{\partial}{\partial \eta}(\vec{R} \cdot e_2' \times e_3') + \frac{\partial}{\partial \text{æ}}(\vec{R} \cdot e_3' \times e_1') + \frac{\partial}{\partial \xi}(\vec{R} \cdot e_1' \times e_2') \quad (13)$$

Вычисленное значение вектора градиента (I2) подставляем в (I3) и, учитывая соотношение (I) и (I0), после несложных преобразований получаем окончательный вид уравнений в криволинейной системе координат:

$$\frac{\partial c}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial \eta} D_0 \frac{\partial c}{\partial \eta} + \frac{\partial}{\partial \text{æ}} D_0 \frac{\partial c}{\partial \text{æ}} + (1 + f_x'^2 - T f_x') \frac{\partial}{\partial \xi} D_0 \frac{\partial c}{\partial \xi} + \quad (14)$$

$$+ (T - f_x') \left[\frac{\partial}{\partial \xi} D_0 \frac{\partial c}{\partial \eta} + \frac{\partial}{\partial \eta} D_0 \frac{\partial c}{\partial \xi} \right] + \left[(T_x' - f_{xx}'') D_0 + f_t' \right] \frac{\partial c}{\partial \xi} .$$

Граничные условия (2) также видоизменяются и принимают следующий вид:

$$(1 + f_x'^2 - T f_x') D_0 \frac{\partial c}{\partial \xi} = (f_x' - T) D_0 \frac{\partial c}{\partial \eta} + c\left(\frac{1}{\mu} - \beta\right) f_t' . \quad (15)$$

В дальнейшем производные по æ опускаются и решение ищется для двумерного уравнения. Полученное уравнение преобразовалось в разностный вид на пятиточечном шаблоне в плоскости η, ξ. Итерационный процесс строился следующим образом /6/:

$$w \frac{\hat{c}^{\kappa+1} - \hat{c}^{\kappa}}{\ell} + L\hat{c}^{\kappa} - \frac{\hat{c}^{\kappa+1} - c}{\tau} = 0 , \quad (16)$$

где $\hat{c}$ - значение концентрации на верхнем временном слое, c - значение концентрации на нижнем временном слое, κ - номер итерации, $L\hat{c}^{\kappa}$ - правая часть уравнения (I4), w, ℓ - итерационные параметры, τ - шаг по времени.

Решалась задача о перераспределении бора при локальном окислении во влажном кислороде при атмосферном давлении в окно шириной 0,5 мкм. За исходное распределение взят профиль, соответствующий ионной имплантации бора с энергией луча $E=70$ кэв и дозе $Q=10^{15}$ $см^{-2}$ (рис.2).

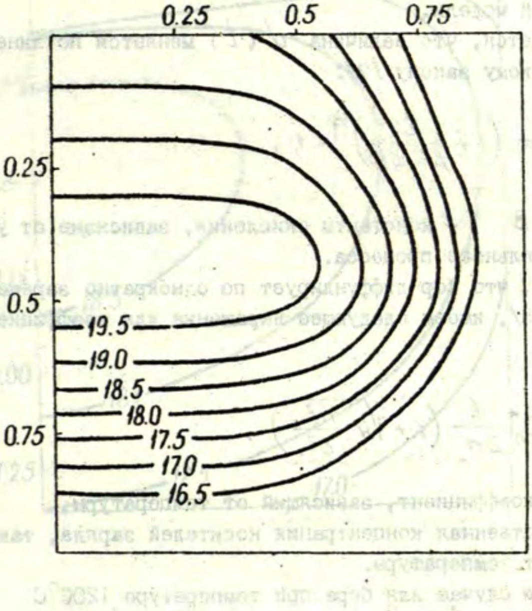


Рис.2. Распределение бора после ионной имплантации при E = 70 кэв и Q = 1E15 см-2 в окно 0,5 мкм

Окисление проводилось при температуре 1200°C. Граница раздела $Si - SiO_2$ f описывалась следующим выражением:

$$f(x,t) = bd(t)\frac{1}{\exp\left(\frac{x-a_0}{K_0 d(t)}\right)+1}, \qquad (17)$$

где a_0 - полуширина окна, K_0 - отношение горизонтальной и вертикальной скорости окисления, $d(t)$ - толщина окисла в одномерной модели.

Полагается, что величина $d(t)$ меняется по линейно-параболическому закону /7/:

$$\frac{d(t)}{A/2} = \left(1+\frac{t}{A^2/4B}\right)^{1/2} - 1, \qquad (18)$$

где A и B - константы окисления, зависящие от условий окислительного процесса.

Считая, что бор диффундирует по однократно заряженным вакансиям /8/, имеем следующее выражение для коэффициента диффузии:

$$D_0 = D_0^* \frac{1}{2n_i}\left(1+\sqrt{4\frac{n_i^2}{c^2}}\right), \qquad (19)$$

где D_0^* - коэффициент, зависящий от температуры,

n_i - собственная концентрация носителей заряда, также зависящая от температуры.

В нашем случае для бора при температуре 1200°C $D_0 = 1{,}1 \cdot 10^{-4}$ мкм^2/сек, $n_i = 2 \cdot 10^{19}$ см$^{-3}$. Значение коэффициента сегрегации μ взято равным 0,1 /9/.

Счет проводился на сетке 62x17 с итерационным параметром ℓ равным 0,25. В качестве W был взят оператор Лапласа, для обращения которого применялась программа быстрого преобразования Фурье. На каждом временном слое проводилось по 4 итерации, что позволяло снизить невязку на два порядка. Шаг по времени был 1 секунда.

Итоговое распределение после 15 минут разгонки показано на рис.3. Область решения измеряется в микрометрах.

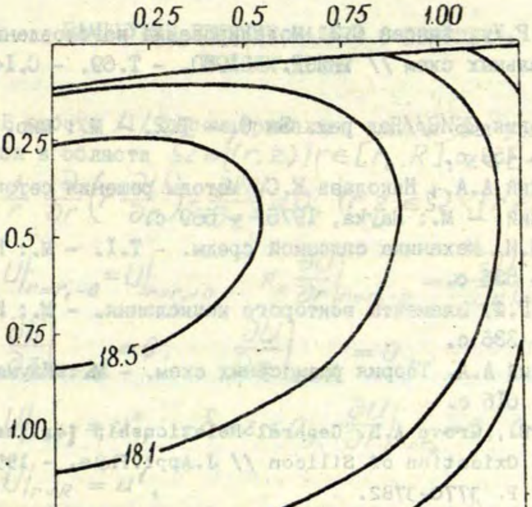


Рис.3. Распределение бора после I5 мин разгонки при I200 град С

Значения концентрации заданы в виде логарифма действительных значений. На рисунке виден изгиб эквиконцентрационных уровней, что соответствует уходу примеси в окисел.

В заключении следует отметить, что данная модель хорошо работает при скоростях роста окисла много меньше скорости диффузии. В противоположном случае приходится сильно мельчить сетку.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Даттон Р.У., Хансен С.Э. Моделирование изготовления интегральных схем // ТИИЭР. - 1980. - Т.69. - С.145-163.
2. Технология СБИС//Под ред. Зи С. - Т.2. - М.: Мир, 1986. - 453 с.
3. Самарский А.А., Николаев Е.С. Методы решения сеточных уравнений. - М.: Наука, 1975. - 589 с.
4. Седов Л.И. Механика сплошной среды. - Т.1. - М.: Наука, 1975. - 536 с.
5. Лаптев Г.Ф. Элементы векторого исчислэния. - М.: Наука, 1975. - 336 с.
6. Самарский А.А. Теория разностных схем. - М.: Наука, 1983. - 616 с.
7. Deal B.E., Grove A.S. General Relationship for the Thermal Oxidation of Silicon // J.Appl.Phys. - 1956. - V.36. - P. 3770-3782.
8. Shaw D. Self and Impurity Diffusion in Ge and Si // Phys. Status Solidi (b). - 1975. - V.72. - P.11-38.
9. Fair R.B., Tsai J.C.C. Theory and Direct Measuremant of Boron Segregation in SiO_2 during dry and wet O_2 oxidation // J.Electroh.Soc. - 1979. - V.126. - P.2050-2059.

Межвузовский сборник научных трудов
ПРИКЛАДНЫЕ ЗАДАЧИ МАТЕМАТИЧЕСКОЙ ФИЗИКИ
Рига: ЛГУ им. П.Стучки, 1989.

УДК 519.6:532.546:626.862

А.Г.Мелгалвис
Ин-т физики АН ЛатвССР

ЗАМКНУТОЕ РЕШЕНИЕ ЗАДАЧИ О ПРИТОКЕ К ЩЕЛИ ДРЕНЫ

В работе /I/ рассматривалась задача для уравнения Лапласа в области $\bar{\Omega}=\{(r,z)\,|\,r\in[r_o,R],\ z\in[-\delta,Z]\}$:

$$\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}\left(r\frac{\partial U}{\partial r}\right)+\frac{\partial^2 U}{\partial z^2}=0,\ (r,z)\in\Omega\setminus\{r=r_1\},\qquad(\mathrm{I})$$

$$U\big|_{r=r_1-0}=U\big|_{r=r_1+0},\ K_0\frac{\partial U}{\partial r}\Big|_{r=r_1-0}=K\frac{\partial U}{\partial r}\Big|_{r=r_1+0},\qquad(2)$$

$$\frac{\partial U}{\partial z}\Big|_{z=-\delta}=0,\ \frac{\partial U}{\partial z}\Big|_{z=Z}=0,\qquad(3)$$

$$U\big|_{r=r_o}=u^\circ,\ -\delta\le z<0,\ \frac{\partial U}{\partial r}\Big|_{r=r_o}=0,\ 0<z<Z,\qquad(4)$$

$$U\big|_{r=R}=u',\qquad(5)$$

основной характеристикой которой является величина потока

$$Q=2\pi K_0 r_0\int_{-\delta}^{0}\frac{\partial U}{\partial r}\Big|_{r_0+0}dz=2\pi K r_1\int_{-\delta}^{Z}\frac{\partial U}{\partial r}\Big|_{r_1+0}dz.\qquad(6)$$

Физическое содержание этой задачи и некоторая библиография по ней дана в /I/. Было показано, что при малом коэффициенте $\text{æ}=K/K_0$ задача (I)-(5) может быть достаточно хорошо аппроксимирована другими задачами в меньшей области $\bar{\Omega}_o=\{(r,z)\,|\,r\in[r_1,R],z\in[0,Z]\}$ путем осреднения по слою $r\in[r_o,r_1]$. При этом решение в слое по переменной r аппроксимируется константой, линейной функцией или полиномом 2-й степени.

В этой работе рассмотрим аппроксимацию решения логарифмической функцией, получая задачу с неклассическими краевыми условиями. После дальнейшего упрощения уравнения (I), получим аналитические выражение решения и величины потока (6). Решение осредненных задач будем обозначать через $u(r,z)$.

Введем среднюю по слою $r\in[r_0,r_1]$ функцию

$$\bar{\bar{u}}(z)=\frac{2}{r_1^2-r_0^2}\int_{r_0}^{r_1} rU\,dr \tag{7}$$

и умножим уравнение (1) на r и проинтегрируем по r. Используя (7) получаем

$$r\frac{\partial U}{\partial r}\Big|_{r_0}^{r_1}+\frac{r_1^2-r_0^2}{2}\frac{\partial^2\bar{\bar{u}}}{\partial z^2}=0. \tag{8}$$

В области $\{r\in[r_0,r_1],\,z\in[-\delta,0]\}$ функцию $U(r,z)$ для каждого z аппроксимируем функцией, удовлетворяющей первому из условий (4)

$$u(r)=u^0+\frac{u|_{r_1}-u^0}{\ln\frac{r_1}{r_0}}\ln\frac{r}{r_0}. \tag{9}$$

Вычислим среднюю по слою величину (7):

$$\bar{\bar{u}}(z)=u^0\Big(\frac{1}{2\ln\frac{r_1}{r_0}}-\frac{r_0^2}{r_1^2-r_0^2}\Big)-u|_{r_1}\Big(\frac{1}{2\ln\frac{r_1}{r_0}}-\frac{r_1^2}{r_1^2-r_0^2}\Big).$$

Полученное выражение и условие (9) подставим в (8). Используя второе условие (2), получим нужное неклассическое условие на линии $r=r_1$:

$$r_1\varkappa\ln\frac{r_1}{r_0}\frac{\partial u}{\partial r}-u+u^0-\frac{1}{4}\Big(r_1^2-r_0^2-2r_1^2\ln\frac{r_1}{r_0}\Big)\frac{\partial^2 u}{\partial z^2}=0,\ -\delta<z<0. \tag{10}$$

Перейдем к области $\{r\in[r_0,r_1],\,z\in[0,Z]\}$, в которой искомую функцию $U(r,z)$ аппроксимируем следующим образом:

$$u(r)=u|_{r_1+0}+m(r_1-r)+d\ln\frac{r_1}{r}.$$

Эта функция уже удовлетворяет первому условию (2). Коэффициенты m и d определим из второго условия (2) и (4). В итоге получаем

$$u(r)=u|_{r_1}+\frac{r_1\varkappa}{r_1-r_0}\frac{\partial u}{\partial r}\Big|_{r_1+0}\Big(r_0\ln\frac{r_1}{r}+r-r_1\Big). \tag{11}$$

Вновь вычислим среднюю по слою величину получая первое уравнение на линии $r=r_1$ для новой постановки задачи:

$$\frac{\partial u}{\partial r}\,\frac{r_1\varkappa c_1}{r_1^2-r_0^2}=u-\bar{\bar{u}}. \tag{12}$$

где $c_1 = \dfrac{r_0^3 \ln \frac{r_1}{r_0}}{r_1 - r_0} - \dfrac{7r_0^2 + r_1 r_0 - 2r_1^2}{6}$.

Для вывода второго условия используем проинтегрированное основное уравнение (8). Используя вторые условия (2) и (4), а также (I2), получаем

$$-\frac{c_1}{2}\,\frac{\partial^2 \bar{\bar{u}}}{\partial z^2} + u|_{r_1} - \bar{\bar{u}} = 0. \qquad (I3)$$

Итак, новая осредненная постановка имеет вид

$$\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}\left(r\frac{\partial u}{\partial r}\right) + \frac{\partial^2 u}{\partial z^2} = 0, \quad (r,z)\in\Omega_0, \qquad (I4)$$

$$\left.\frac{\partial u}{\partial z}\right|_{z=-\delta} = 0, \quad \left.\frac{\partial u}{\partial z}\right|_{z=Z} = 0, \qquad (I5)$$

$$u|_{r=R} = u' \qquad (I6)$$

с условиями (II)-(I3) на линии $r=r_1$. Поток будем вычислять по второй формуле:

$$Q = 2\pi k r_1 \int_{-\delta}^{Z} \left.\frac{\partial u}{\partial r}\right|_{r=r_1} dz. \qquad (I7)$$

Эта задача легко аппроксимируется разностной схемой с вторым порядком (см. /I/) и численно решается. Многовариантные численные расчеты показали, что при практически и теоретически интересных величинах $æ \ll 1$ решение для фиксированных $r > r_1$ слабо зависит от z. Это дает основание заменить в Ω_0 уравнение (I4) уравнением

$$\frac{\partial}{\partial r}\left(r\frac{\partial u}{\partial r}\right) = 0. \qquad (I8)$$

Для постановки (II)-(I3),(I5)-(I8) решение уже легко может быть найдено в замкнутом виде.

Общее решение уравнения (I8) с учетом условия (I6) имеет вид:

$$u(r,z) = c(z)\ln\frac{r}{R} + u'. \qquad (I9)$$

Подставляя (I9) в (II), получаем

$$c''(z) - a^2 c(z) + f = 0, \quad -\delta < z < 0, \qquad (20)$$

где

$$a^2 = b\left(æ\ln\frac{r_1}{r_0} + \ln\frac{R}{r_1}\right),$$

$$f = b(u' - u^0),$$

$$b = \frac{4}{\ln\frac{R}{r_1}\left(2r_1^2\ln\frac{r_1}{r_0} - r_1^2 + r_0^2\right)}.$$

Подстановка (I9) в уравнение (I2) дает выражение

$$\bar{u} = u' - c(z)\left(\ln\frac{R}{r_1} + \frac{æ c_1}{r_1^2 - r_0^2}\right),$$

подставляя которое в (I3) с учетом (I9), получаем уравнение для $c(z)$:

$$c''(z) - a_1^2 c(z) = 0, \quad 0 < z < Z. \tag{21}$$

Здесь

$$a_1^2 = \frac{2æ}{(r_1^2 - r_0^2)\ln\frac{R}{r_1} + æ c_1}.$$

Для нахождения $c(z)$ остается воспользоваться вытекающими из (I5) краевыми условиям:

$$\begin{aligned} &c'(-\delta) = 0, \\ &c'(Z) = 0 \end{aligned} \tag{22}$$

и условия сопряжения в точке $z=0$:

$$\begin{aligned} &c(-0) = c(+0), \\ &c'(-0) = c'(+0). \end{aligned} \tag{23}$$

Общее решение уравнения (20) имеет вид

$$c(z) = Ae^{az} + Be^{-az} + a^{-2}f, \quad -\delta \le z \le 0,$$

а уравнения (2I) - вид

$$c(z) = A_1 e^{a_1 z} + B_1 e^{-a_1 z}, \quad 0 \le z \le Z.$$

Используя (22) и (23), определим неизвестные коэффициенты:

$$A = \frac{f}{a^2}\,\frac{a_1 E_1}{(E_1+2)aE - (E+2)a_1E_1},$$

$$A_1 = \frac{f}{a^2}\,\frac{aE}{(E_1+2)aE - (E+2)a_1E_1},$$

$$B = A(1-E),$$
$$B_1 = A_1(E_1+1),$$

где

$$E = 1-e^{-2a\delta},\ E_1 = e^{2a_1 Z}-1,\ G = (2+E_1)aE+(2-E)a_1E_1 .$$

Подставляя полученные выражения для $c(z)$ в (19), найдем решение $u(r,z)$ для этой постановки:

$$u(r,z) = \frac{f}{a^2}\Big[1-\frac{a_1E_1}{G}(e^{az}+(1-E)e^{-az})\Big]\ln\frac{r}{R}+u^1,\ -\delta\leqslant z\leqslant 0,$$

$$u(r,z) = \frac{f}{a^2}\ \frac{a_1E_1}{G}(e^{a_1z}+(E_1+1)e^{-a_1z})\ln\frac{r}{R}+u^1,\ 0\leqslant z\leqslant Z .$$

Формула (17) дает аналитическое выражение для величины потока:

$$Q = \frac{2\pi\kappa f}{a^2}\Big[\delta+\frac{EE_1(a^2-a_1^2)}{aa_1G}\Big]. \qquad (24)$$

Целесообразность использования этого замкнутого решения продемонстрируем для практически интересного случая с параметрами r_0=0.04, r_1=0.041, R=0.065, Z=0.05, δ=0.002, K_0=25, K=0.5, ($\varkappa$=1/50), u^0=1, u^1=1.05. Численное решение исходной задачи (1)-(6) дает величину Q=0.0107. Решение осредненной задачи - вычисление Q по формуле (24): Q= =0.0101. Как видно, погрешность в этом случае составляет 6%. Заметим, что точность осредненных постановок возрастает с уменьшением коэффициента $\varkappa$, т.е. с возрастением коэффициента фильтрации K_0 при фиксированном коэффициенте K. Это связано с тем, что при бесконечном K_0 в исходной задаче условия (2),(4) переходят в краевое условие $u|_{r=r_1}$= $=u_0,\ -\delta\leqslant z\leqslant Z$, т.е. вместо исходной получаем одномерную по r задачу.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Молгалвис А.Г. Решение задачи о притоке к щели дрены осреднением по фильтру// Прикладные задачи мат. физики. Рига: ЛГУ им. П.Стучки, 1988.- С.89-98.

Сборник научных трудов
ПРИКЛАДНЫЕ ЗАДАЧИ МАТЕМАТИЧЕСКОЙ ФИЗИКИ
Рига: ЛГУ им.П.Стучки, 1989

УДК 519.6:539.379.4

С.С.Вахрамеев,
Н.В.Козельская
ВЦ ЛГУ им.П.Стучки, Рига

МИНИМИЗАЦИЯ НАПРЯЖЕНИЙ И ПЛОТНОСТИ ДИСЛОКАЦИЙ В КРИСТАЛЛАХ, ВЫРАЩИВАЕМЫХ ИЗ РАСПЛАВА

При выращивании высококачественных монокристаллов из расплава особую актуальность приобретают вопросы получения малодислокационных или бездислокационных кристаллов. Решающую роль в образовании и размножении дислокаций в кристаллах играют температурные напряжения, возникающие в кристалле в процессе роста из расплава.

Из теории термоупругости известно, см., например, /I/, что в заданном объеме, свободном от действия объемных и поверхностных сил, тепловые напряжения равны нулю, если температурное поле в этом объеме является линейной функцией (в декартовой системе координат).

Целью данной работы является моделирование внешних тепловых условий, вызывающих в кристалле минимальные напряжения (на уровне критических), обеспечивающие формирование малодислокационной структуры монокристалла.

Рассмотрим задачу определения напряжений и плотности дислокаций при заданном температурном поле в кристалле.

I. Для прогнозирования напряжений и плотности дислокаций следует решить совместную термоупругопластическую задачу. Постановка и численный метод решения упругопластической задачи с учетом движения и размножения дислокаций в плоскостях скольжения кристаллов изложен в работе /2/. В схематическом изложении задача заключается в следующем.

Уравнения упругопластического равновесия в перемещениях U_i , $i=1,2,3$ в декартовой системе координат x_i , записывается в следующей форме:

$$\Delta U_i + \frac{3}{1+2\mu}\frac{\partial \varepsilon}{\partial x_i} = 2\frac{1+\mu}{1-2\mu}\alpha\frac{\partial T}{\partial x_i} + 2\frac{\partial}{\partial x_j}\varepsilon^P_{ij}, \quad (1)$$

Δ - оператор Лапласа, $\varepsilon = \frac{1}{3}\frac{\partial U_i}{\partial x_i}$ - среднее объемное расширение, T - температура кристалла; μ, α - коэффициенты Пуассона и термического расширения.

Граничные условия для свободной от внешних сил поверхности кристалла являются следующими:

$$\left[\frac{1}{2}\left(\frac{\partial U_i}{\partial x_j} + \frac{\partial U_j}{\partial x_i}\right) + \left(\frac{\mu}{1-2\mu}\frac{\partial U_i}{\partial x_i} - \frac{1+\mu}{1-2\mu}\alpha T\right)\delta_{ij} - \varepsilon^P_{ij}\right]n_j = 0 \quad (2)$$

n_j - компоненты единичного вектора внешней нормали к граничной поверхности.

Тензор пластической деформации ε^P_{ij}, суммарный по всем системам скольжения (n,m), определяется соотношением

$$\varepsilon^P_{ij} = \frac{1}{2}\sum_{n=1}^{n_o}\sum_{m=1}^{m_o}(\varepsilon^P)^{n,m}\left(\alpha^{n,m}_{1i}\alpha^{n}_{3j} + \alpha^{n,m}_{1j}\alpha^{n}_{3i}\right), \quad (3)$$

где α_{1i}, α_{3j} - косинусы углов, определяющие систему скольжения. Пластическая деформация $(\varepsilon^P)^{n,m}$ в (n,m)-ой системе определяется с учетом особенностей движения и размножения дислокаций в кристалле:

$$(\varepsilon^P)^{n,m} = b\int_0^t N_D^{n,m} V^{n,m} ds, \quad N_D^{n,m} = N_o \exp\left(\beta\int_0^t V^{n,m} ds\right) \quad (4)$$

b - величина вектора Бюргерса, $N_D^{n,m}$ - плотность дислокаций, N_o - начальная плотность, β - коэффициент размножения дислокаций, $V^{n,m}$ - скорость движения дислокаций в зависимости от величины сдвиговых напряжений $|\tau^{n,m} - \tau_{кр}|$,

$$\tau^{n,m} = \alpha_{1i}^{n,m}\,\alpha_{3j}^{n}\,\sigma_{ij}\,, \tag{5}$$

$\tau_{кр}$ – величина критических сдвиговых напряжений образования дислокаций, определяемая экспериментально.

Компоненты тензора напряжений σ_{ij} рассчитываются из уравнения состояния

$$\sigma_{ij} = 2G\left[\frac{1}{2}\left(\frac{\partial U_i}{\partial x_j} + \frac{\partial U_j}{\partial x_i}\right) - \varepsilon_{ij}^{p} + \left(\frac{\mu}{1-2\mu}\frac{\partial U_i}{\partial x_i} - \frac{1+\mu}{1-2\mu}\alpha T\right)\delta_{ij}\right]. \tag{6}$$

Система нелинейных уравнений (I)-(6) решается численно на основе метода последовательных упругих решений /3/, при этом последовательность линейных задач упругости решается разностным методом. Для решения задачи используется пакет программ для ЭВМ, содержащий блоки расчета температурного поля в кристалле, расчета напряжений, в том числе сдвиговых напряжений по системам скольжения, блок расчета средней по всем системам скольжения пластической деформации и плотности дислокаций для любого направления роста кристалла. Эффективность и точность метода проверялась как на модельных примерах, так и сравнением с экспериментом, /2/.

2. Сформулируем задачу определения температурного поля в кристалле и проведем анализ внешних тепловых условий с целью минимизации напряжений и плотности дислокаций. На рис.I изображена схема процесса выращивания кристалла $\mathcal{D}_1$ из тигля Γ_2, содержащего расплав и слой флюса, достаточный для покрытия кристалла в течение всего процесса выращивания. Квазистационарное уравнение теплопроводности для кристалла (область $\mathcal{D}_1$) в цилиндрической системе координат (r, z), $0 \leq r \leq R$, $0 \leq z \leq H$ записывается в следующем виде, /4/:

$$\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r} r \frac{\partial T}{\partial r} + \frac{\partial^2 T}{\partial z^2} - \frac{c\rho W_0}{\lambda_к}\frac{\partial T}{\partial z} = 0; \tag{7}$$

T - температура, c - удельная теплоемкость, ρ - плотность, $\lambda_к$ - коэффициент теплопроводности, W_0 - скорость вытягивания слитка из расплава.

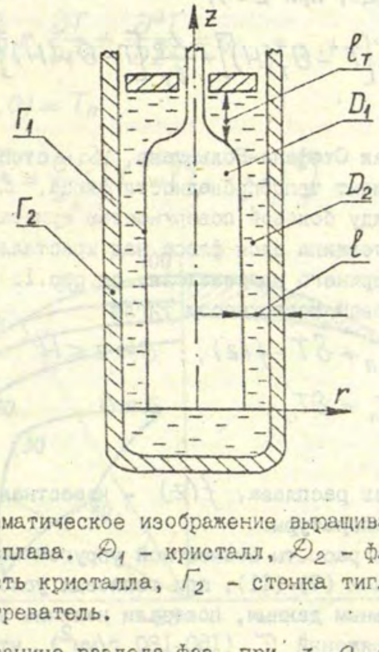


Рис.I. Схематическое изображение выращивания кристалла из расплава. $\mathcal{D}_1$ - кристалл, $\mathcal{D}_2$ - флюс, Γ_1 - поверхность кристалла, Γ_2 - стенка тигля, Γ_3 - верхний нагреватель.

На границе раздела фаз, при $z=0$ зададим температуру кристалла равной температуре плавления

$$T(r,0)=T_п . \qquad (8)$$

На остальной части поверхности кристалла граничные условия формулируются с учетом излучения по закону Стефана-Больцмана и с учетом теплообмена с флюсом.

На боковой поверхности, при $r=R$

$$-\lambda_\kappa \frac{\partial T}{\partial r} = \sigma\varepsilon\left[T^4 - \theta^4(z)\right] + \frac{\lambda_\phi}{\ell}\left[T - \theta(z)\right]. \qquad (9)$$

На верхнем торце, при $z = H$

$$-\lambda_\kappa \frac{\partial T}{\partial z} = \sigma\varepsilon\left[T^4 - \theta_T^4(H)\right] + \frac{\lambda_\phi}{\ell_T}\left[T - \theta_T(H)\right]; \qquad (10)$$

σ - постоянная Стефана-Больцмана, ε - степень черноты, λ_ϕ - коэффициент теплопроводности флюса, ℓ - толщина слоя флюса между боковой поверхностью кристалла и стенкой тигля, ℓ_T - толщина слоя флюса над кристаллом, $\theta_T(H)$ - температура верхнего нагревателя, см.рис.I. $\theta(z)$ - температура на боковой поверхности тигля

$$\theta(z) = \begin{cases} T_n + \delta T - f(z), & 0 < z \leqslant H \\ T_n + \delta T, & z = 0 \end{cases} \qquad (11)$$

δT - перегрев расплава, $f(z)$ - известная функция распределения температуры.

Численные расчеты совместной упругопластической задачи (I)-(6) и задачи (7)-(II), при тепловых условиях, близких к экспериментальным данным, показали наличие высокого уровня сдвиговых напряжений τ (I50-I80 г/мм^2), что вызывает высокую плотность дислокаций (I0^{5}см$^{-2}$) в кристалле (см.рис. 2.а).

Для снижения величины плотности дислокаций определим оптимальные тепловые условия, позволяющие снизить величину сдвиговых напряжений до уровня критических (8-I5 г/мм^2).

3. Допустим, что в уравнениях (7)-(I0) величины

$$W_o = 0, \quad \lambda_\phi = 0, \quad \delta T = 0 \qquad (12)$$

температура $\theta(z)$ задана равномерной с постоянным градиентом K

$$\theta(z) = T_n - kz\ , \qquad (13)$$

тогда исходная задача сводится к следующей:

$$\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r} r \frac{\partial T}{\partial r} + \frac{\partial^2 T}{\partial z^2} = 0 \qquad (14)$$

$$T(r,0) = T_n \qquad (15)$$

$$-\frac{\partial T}{\partial r} = \frac{\sigma \varepsilon}{\lambda_k}\left[T^4 - (T_n - kz)^4\right] \qquad (16)$$

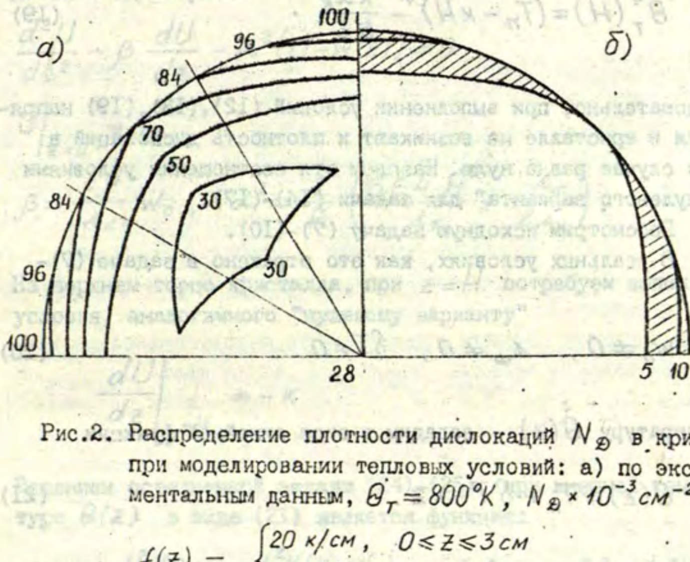


Рис.2. Распределение плотности дислокаций N_D в кристалле при моделировании тепловых условий: а) по экспериментальным данным, $\theta_T = 800°K$, $N_D \times 10^{-3}\ см^{-2}$

$$f(z) = \begin{cases} 20\ к/см, & 0 \le z \le 3\ см \\ 50\ к/см, & 3 < z \le 10\ см \end{cases}$$

б) по оптимальным условиям, $\theta_T = 1157$, $N_D \times 10^{-2}\ см^{-2}$

$k = 30\ к/см$

$$-\frac{\partial T}{\partial z}=\frac{\sigma\varepsilon}{\lambda_к}\left[T^4-\theta_т^4(H)\right]. \qquad (17)$$

Предположим, что решением задачи (14)-(17) является линейная функция

$$T(z)=T_п-\kappa z. \qquad (18)$$

Действительно, функция (18) является решением задачи, если в условии (17) внешняя температура $\theta_т(H)$ задается следующим образом:

$$\theta_т^4(H)=(T_п-\kappa H)^4-\frac{\kappa\lambda_к}{\sigma\varepsilon}. \qquad (19)$$

Следовательно, при выполнении условий (12),(13),(19) напряжения в кристалле не возникают и плотность дислокаций в этом случае равна нулю. Назовем эти соотношения условиями "нулевого варианта" для задачи (14)-(17).

Рассмотрим исходную задачу (7)-(10).

В реальных условиях, как это отражено в задаче (7)-(10),

$$w_0\neq 0, \quad \lambda_ф\neq 0, \quad \delta T\neq 0. \qquad (20)$$

Температуру $\theta(z)$ зададим в виде линейной функции

$$\theta(z)=T_п+\delta T-\kappa z. \qquad (21)$$

Определим температуру верхнего нагревателя $\theta_т$ из условия (10), предварительно линеаризовав нелинейный член $T^4-\theta_т^4\approx 4T^3(T-\theta_т)$. Получим формулу:

$$\theta_T(H) = T(H) + \frac{\partial T/\partial z}{\frac{\sigma\varepsilon 4T^3}{\lambda_K} + \frac{c\,\lambda_\phi}{\ell_T\lambda_K}} . \qquad (22)$$

Чтобы вычислить $\theta_T(H)$, нужно задать функцию $T(H)$ на верхнем торце кристалла. Функция $T(r,z)$ определяется следующим образом. Осредним уравнения (7)-(9) по переменной r , обозначая среднюю по сечению слитка температуру

$$U(z) = \frac{2}{R^2}\int_0^R rT(r,z)\,dr , \qquad (23)$$

и линеаризуем нелинейный член. Тогда исходная задача сводится к одномерной.

$$\frac{d^2U}{dz^2} - \beta\frac{dU}{dz} - \alpha^2(U-\theta(z)) = 0 \qquad (24)$$

$$U\Big|_{z=0} = T_n \qquad (25)$$

$$\beta = \frac{c\rho}{\lambda_K}W_0 , \quad \alpha^2 = \frac{2}{R}\left(\frac{\sigma\varepsilon 4\cdot\theta^3}{\lambda_K} + \frac{\lambda_\phi}{\ell\lambda_K}\right).$$

На верхнем торце кристалла, при $z=H$ потребуем выполнения условия, аналогичного "нулевому варианту"

$$\frac{dU}{dz}\Big|_{z=H} = -K . \qquad (26)$$

Решением осредненной задачи (24)-(26), при внешней температуре $\theta(z)$ в виде (21) является функция:

$$U(z) = \frac{\alpha^2 K}{K_1K_2}z + \frac{\alpha^2K(K_1+K_2)}{K_1^2K_2^2}(1-\ell^{K_2z}) + A(\ell^{K_1z}-\ell^{K_2z}) -$$
$$-\frac{\alpha^2}{K_1K_2}(T_n+\delta T)(1-\ell^{K_2z}) + T_n\ell^{K_2z} . \qquad (27)$$

$$A = \frac{K + \frac{\alpha^2 K}{K_1 K_2} - \frac{\alpha^2 K (K_1+K_2) e^{K_2 H}}{K_1^2 K_2} + \left(K_2 T_n + \frac{\alpha^2}{K_1}(T_n + \delta T)\right) e^{K_2 H}}{K_2 e^{K_2 H} - K_1 e^{K_1 H}}$$

$$K_{1,2} = \frac{\beta}{2} \pm \sqrt{\beta^2/4 + \alpha^2} .$$

Заменим теперь в соотношении (22) функцию T на U, получим следующее выражение для расчета

$$\theta_T(H) = U(H) - \frac{K}{\frac{\sigma \varepsilon 4 U^3}{\lambda_K} + \frac{\lambda_\Phi}{\ell_T \lambda_K}} . \qquad (28)$$

Итак, имеются три условия (20),(21),(28), которые задаются при численном решении исходной задачи (7)-(10).

Рассмотрим условия (20). Как видно из (27), величины W_0 и δT придают нелинейный вид функции U, нелинейность U вызывает напряжения в кристалле. В частном случае, если $W_0 = \delta T = 0$, то U становится линейной функцией и задача сводится к "нулевому варианту". Однако в реальных случаях эти величины не равны нулю, поэтому на эти величины наложим ограничения.

Как показали расчеты совместной термоупругопластической задачи при задании величин W_0 и δT в пределах $3-20$ мм/час и $\delta T \leq 5^\circ$ и при выполнении оптимальных условий (21),(28) величина сдвиговых напряжений τ в кристалле не превосходит 10-15 г/мм^2, что соответствует уровню критических напряжений. В этом случае плотность дислокаций в кристалле составляет не более 10^3 см$^{-2}$. На рис.2.б) изображено распределение плотности дислокаций N_D в радиальном сечении кристалла при направлении роста [100]. Плотность дислокаций равна нулю во всей области, за исключением узкой полоски у поверхности кристалла, в которой $N_D \approx 10^3 см^{-2}$.

Приведем теплофизические константы и геометрические размеры, принятые в расчетах.

$$R_{кр} = 4\ см,\ H = 8\ см,\ \ell = 0{,}5\ см,\ \ell_T = 5\ см.$$

$$\lambda_{кр} = 13{,}15\ вт/м^\circ к,\quad \lambda_\phi = 1{,}5\ вт/м^\circ к,\quad \varepsilon = 0{,}7$$

$$c = 0{,}42\ дж/г^\circ к,\ \rho = 5.316\ г/см^3;\ W_0 = 3\ мм/час,$$

$$T_п = 1511^\circ K,\ \mu = 1/3,\ \alpha = 0{,}64\cdot 10^{-5}\,{}^\circ K^{-1},\ b = 4\cdot 10^{-7}\ мм,$$

$$N_0 = 1\ мм^{-2},\ \beta = 4,\ G = 3400\ кг/мм^2.$$

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

I. Боли Б., Уэйнер Дж. Теория температурных напряжений. - М.: Мир, I964. - 496 с.
2. Авдонин Н.А., Вахрамеев С.С., Освенский В.Б. Постановка и численное решение термоупругопластической задачи с учетом движения дислокаций в плоскостях скольжения кристаллов, выращиваемых из расплава// Математическое моделирование. - Москва: Наука, I986.- С.I58-I7I.
3. Ильюшин А.А. Пластичность. - М.: Гостехиздат, I948. - 379 с.
4. Авдонин Н.А. Математическое описание процессов кристаллизации. - Рига: Зинатне, I980.- I80 с.

Сборник научных трудов
ПРИКЛАДНЫЕ ЗАДАЧИ МАТЕМАТИЧЕСКОЙ ФИЗИКИ
Рига: ЛГУ им.П.Стучки, 1989

УДК 539.373:661.863/868

С.П.Юшанов
Вычислительный центр
при ЛГУ им.П.Стучки
(Рига)

РАСЧЕТ ВНУТРЕННИХ НАПРЯЖЕНИЙ В МОНОКРИСТАЛЛИЧЕСКИХ ПЛАСТИНАХ

В малодислокационных кристаллах основным источником возникновения внутренних напряжений является дефектность точечного типа. Она связана с неоднородностью химического состава монокристаллического соединения, неравномерностью распределения примесей, инородных включений и т.д. Характер указанной дефектности определяется условиями выращивания кристалла. Во многих соединениях со структурой граната сильная химическая неоднородность проявляется в виде полосчатой структуры /1/, которая отражает кинетику квазипериодического изменения основных компонентов соединения в подкристальном диффузионном слое расплава. Другим источником неоднородности является огранение фронта кристаллизации, приводящее к появлению в кристалле объемных областей, при переходе через границу которых состав соединения изменяется скачкообразно /2,3/. Связанные с неоднородностью распределения состава по объему кристалла резкие изменения параметра элементарной решетки вызывают внутренние напряжения, которые помимо изменения физических свойств кристалла, могут стать причиной его растрескивания как на стадии выращивания, так и в процессе дальнейшей обработки.

В данной работе для пластин, вырезаемых из цилиндрического кристалла в продольном направлении, изложены методика и результаты численного расчета характера распределения внутренних напряжений для типичных видов полосчатой структуры кристалла с кусочно-непрерывным распределением состава вдоль фронта кристаллизации.

I. Методика расчета

Кристалл переменного состава рассматривается как среда с распределенными точечными дефектами. Тензор полной деформации представим в виде суперпозиции $\hat{\mathcal{E}}^T = \hat{\mathcal{E}} + \hat{\mathcal{E}}^P$, где $\hat{\mathcal{E}}$ - тензор упругих деформаций; $\hat{\mathcal{E}}^P$ - тензор несовместных деформаций, называемый в дальнейшем базисным полем. Поле $\hat{\mathcal{E}}^P$ описывает заданную дефектную структуру кристалла и является источником внутренних напряжений, поскольку оно вызывает упругие деформации такие, что полная деформация удовлетворяет условиям совместности $\nabla \times \hat{\mathcal{E}}^T \times \nabla = \hat{0}$. Простейшей моделью дефекта точечного типа является центр дилатации /4/. Тогда в изотропном приближении для среды с распределенными дефектами базисное поле является шаровым тензором $\hat{\mathcal{E}}^P = e^P \hat{I}$ ($\hat{I}$ - единичный тензор) и выражается через относительное изменение параметра решетки кристалла $e^P = \Delta a / a_o$ (a_o - параметр решетки конгруэнтного состава). При заданном распределении базисного поля по объему кристалла расчет внутренних напряжений сводится к решению неоднородных уравнений теории упругости относительно полных перемещений $\vec{u}^T$:

$$\nabla^2 \vec{u}^T + \frac{1+\nu}{1-\nu} \nabla\nabla\cdot\vec{u}^T = 2\frac{1+\nu}{1-\nu}\nabla e^P, \qquad (I)$$

где ν - коэффициент Пуассона. Краевыми условиями являются условия свободной поверхности кристалла.

Рассмотрим тонкую пластину шириной $2a$, вырезанную из цилиндрического кристалла в продольном направлении. Полосчатую структуру кристалла, обусловленную периодическим изменением состава соединения на фронте кристаллизации, будем описывать базисным полем

$$e^P(x_1, x_2) = \mathcal{E}(x_1)\cos\beta(x_2 - \varphi(x_1)); \quad \beta = 2\pi/T, \qquad (2)$$

где $x_2 = \varphi(x_1)$ - уравнение фронта кристаллизации; $\mathcal{E}(x_1)$- амплитуда относительного изменения параметра решетки; T - период полос роста; x_1 и x_2- поперечная и продольная декартовы координаты в плоскости пластины. Амплитуда $\mathcal{E}(x_1)$ может быть кусочно-непрерывной функцией, а $\varphi(x_1)$ - кусочно-гладкой функцией. Края пластины свободны от напряжений.

Пусть $\sigma^*_{ij}(x_1, x_2; \xi)$ - тензор Грина для напряжений, соответствующий базисному полю

$$e^*(x_1, x_2; \xi) = \delta(x_1 - \xi)\, e^{i\beta x_2}, \tag{3}$$

где $\delta(x_1 - \xi)$ - распределение Дирака. Тогда компоненты тензора напряжений, соответствующие базисному полю (2), выражаются через действительную и мнимую части тензора Грина по формуле

$$\sigma_{ij}(x_1, x_2) = \cos\beta x_2 \int_{-a}^{a} \mathcal{E}(\xi)\cos\beta\varphi(\xi)\, \mathrm{Re}\,\sigma^*_{ij}(x_1, x_2; \xi)\, d\xi +$$
$$+ \sin\beta x_2 \int_{-a}^{a} \mathcal{E}(\xi)\sin\beta\varphi(\xi)\, \mathrm{Im}\,\sigma^*_{ij}(x_1, x_2; \xi)\, d\xi. \tag{4}$$

Построим тензор напряжений Грина. Для плоского напряженного состояния уравнение равновесия (I) с базисным полем (3) путем введения потенциала перемещений $\vec{u}^* = \nabla\Phi$ приводится к неоднородному уравнению Пуассона

$$\nabla^2\Phi = (1+\nu)\,\delta(x_1 - \xi)\, e^{i\beta x_2}. \tag{5}$$

На краях пластины $x_1 = \pm a$ выполняются условия

$$\sigma^*_{11}(\pm a, x_2; \xi) = 0; \qquad \sigma^*_{12}(\pm a, x_2; \xi) = 0. \tag{6}$$

Вследствие периодичности базисного поля, решение задачи также периодично вдоль x_2 всюду, за исключением областей, прилегающих к параллельным оси x_1 краям пластины (размер зоны краевого эффекта $\sim T$). Поскольку период является существенно малой величиной по сравнению с размерами кристалла, то в дальнейшем эти области исключаются из рассмотрения и тем самым задача решается для полосыпластины. Распределение Дирака представим в виде разложения в ряд Фурье

$$\delta(x_1-\xi)=\frac{1}{a}\sum_{n=1}^{\infty}\sin_n(\xi+a)\sin\alpha_n(x_1+a);\ \alpha_n=\frac{\pi n}{2}.$$

Тогда решение уравнения (5) может быть записано в виде:

$$\Phi(x_1,x_2;\xi)=-\frac{1+\nu}{a}\sum_{n=1}^{\infty}\frac{1}{\alpha_n^2+\beta^2}\sin\alpha_n(\xi+a)\sin\alpha_n(x_1+a)e^{i\beta x_2} \tag{7}$$

Потенциал (7) с учетом тождества

$$\sum_{n=1}^{\infty}\frac{\cos nz}{n^2+\beta^2}=\frac{\pi}{2\beta}\frac{ch\beta(\pi-z)}{sh\pi z};\quad 0<z<2\pi$$

запишем в конечной форме

$$\Phi(x_1,x_2;\xi)=-\frac{1+\nu}{\beta\, sh2\beta a}\Big[sh\beta(a-\xi)sh\beta(a+x_1)H(\xi-x_1)+$$
$$+sh\beta(a+\xi)sh\beta(a-x_1)H(x_1-\xi)\Big]e^{i\beta x_2}, \tag{8}$$

где $H(x)=\int\limits_{-\infty}^{x}\delta(\xi)d\xi$ - единичная ступенчатая функция Хевисайда. Потенциалу Φ соответствуют напряжения

$$\bar{\sigma}_{ij}(x_1,x_2;\xi)=\frac{E}{1+\nu}\Big(\frac{\partial^2}{\partial x_i\partial x_j}-\delta_{ij}\nabla^2\Big)\Phi(x_1,x_2;\xi);\ i,j=1,2, \tag{9}$$

где E - модуль Юнга. Из (9) с учетом (8) находим:

$$\bar{\sigma}_{11}=-\frac{E\beta}{sh2\beta a}\Big[H(\xi-x_1)sh\beta(a-\xi)sh\beta(a+x_1)+$$
$$+H(x_1-\xi)sh\beta(a+\xi)sh\beta(a-x_1)\Big]e^{i\beta x_2}; \tag{10}$$
$$\bar{\sigma}_{22}=-\bar{\sigma}_{11}-E\delta(x_1-\xi)e^{i\beta x_2};$$
$$\bar{\sigma}_{12}=-\frac{E\beta}{sh2\beta a}\Big[H(\xi-x_1)sh\beta(a-\xi)ch\beta(a+x_1)-$$
$$-H(x_1-\xi)sh\beta(a+\xi)ch\beta(a-x_1)\Big]e^{i\beta x_2}.$$

Компоненты $\bar{\sigma}_{11}$ и $\bar{\sigma}_{12}$ всюду являются регулярными функциями, а компонента $\bar{\sigma}_{22}$ в точке $x_1=\xi$ имеет сингулярность.

Поле напряжений $\bar{\sigma}_{ij}$ не полностью удовлетворяет условиям (6) свободного края: нормальные напряжения $\bar{\sigma}_{11}$ при $x_1=\pm a$ равны нулю, а касательные $\bar{\sigma}_{12}$ отличны от нуля. Для компенсации касательных напряжений на краях пластины, на напряженное состояние с компонентами $\bar{\sigma}_{ij}$ наложим напряженное состояние с компонентами $\bar{\bar{\sigma}}_{ij}$, подобранными так, чтобы удовлетворить всем граничным условиям. Напряжения $\bar{\bar{\sigma}}_{ij}$ определим с помощью функции Эри F

$$\bar{\bar{\sigma}}_{ij}(x_1,x_2;\xi)=\left(\delta_{ij}\nabla^2-\frac{\partial^2}{\partial x_i\partial x_j}\right)F(x_1,x_2;\xi);\ i,j=1,2, \tag{11}$$

которая удовлетворяет однородному бигармоническому уравнению

$$\nabla^2\nabla^2F=0. \tag{12}$$

Поскольку нас интересует решение исходной задачи для симметричного относительно оси x_2 базисного поля $e^P(x_1,x_2)$, то достаточно ограничиться только симметричной частью решения уравнения (12):

$$F(x_1,x_2;\xi)=[A(\xi)ch\beta x_1+B(\xi)\beta x_1 sh\beta x_1]e^{i\beta x_2}. \tag{13}$$

Константы $A(\xi)$ и $B(\xi)$ находятся из краевых условий (6), которые принимают вид:

$$\bar{\bar{\sigma}}_{11}(\pm a,x_2;\xi)=0,\ \bar{\sigma}_{12}(\pm a,x_2;\xi)+\bar{\bar{\sigma}}_{12}(\pm a,x_2;\xi)=0. \tag{14}$$

Из (11) с учетом (13), (14) и (10) после вычислений получаем:

$$\bar{\bar{\sigma}}_{11}=E\beta D(\xi)(\mu th\mu ch\beta x_1-\beta x_1 sh\beta x_1)e^{i\beta x_2};$$

$$\bar{\bar{\sigma}}_{22}=-E\beta D(\xi)[(\mu th\mu-2)ch\beta x_1-\beta x_1 sh\beta x_1]e^{i\beta x_2};$$

$$\bar{\bar{\sigma}}_{12}=iE\beta D(\xi)[(\mu th\mu-1)sh\beta x_1-\beta x_1 ch\beta x_1]e^{i\beta x_2}, \tag{15}$$

где $D(\xi)=\dfrac{ch\beta\xi}{2\mu+sh2\mu}$; $\mu=\beta a$.

Таким образом, тензор Грина для напряжений есть суперпозиция (10) и (15)

$$\sigma^*_{ij}(x_1,x_2;\xi)=\bar{\sigma}_{ij}(x_1,x_2;\xi)+\bar{\bar{\sigma}}_{ij}(x_1,x_2;\xi).$$

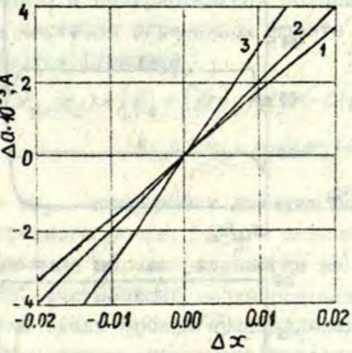
По найденному тензору Грина путем интегрирования по формуле (4) находим компоненты тензора внутренних напряжений, порождаемых базисным полем (2).

2. Результаты модельных расчетов

При выращивании некоторых тугоплавких кристаллов на фронте кристаллизации образуются области гранного роста /2,3/. На начальной стадии гранный рост захватывает всю область кристалла. На стадии роста кристалла с постоянным диаметром в зависимости от тепловых условий выращивания область гранного роста может оттесняться к периферии, либо локализоваться в центральной области. Вне области гранного роста кристалл формируется по нормальному механизму роста. Смена механизмов роста, а также встречные потоки расплава тепловой и вынужденной конвекции в подкристалльной области могут приводить к скачкообразному изменению параметра решетки вдоль фронта кристаллизации, а сама форма границы раздела фаз описывается кусочно-гладкой функцией.

Для иллюстрации характера распределения напряжений была проведена серия численных расчетов для характерных типов полосчатой структуры кристалла на различных этапах его роста. Распределение компонент тензора напряжений приводится в сечении $x_2 = \varphi(x_1)$, т.е. вдоль поверхности фронта кристаллизации, где базисное поле $e^P(x_1, x_2)$ для каждого x_2 принимает максимальное положительное значение. Напряжения нормируются к величине $\sigma_0 = E\varepsilon_0$, где $\varepsilon_0 = \Delta a / a_0$ - характерная амплитуда относительного изменения параметра решетки кристалла. На рис.I и 2 для некоторых гранатовых кристаллов с использованием литературных данных /3,5,6/ построены зависимости, позволяющие определить величину уровня номинальных напряжений σ_0 по величине вариации химического состава соединения.

На участке пластины с полностью ограненным фронтом кристаллизации базисное поле задается в виде $e^P(x_1, x_2) = \varepsilon_0 \cos\beta(x_2 - m|x_1|)$, где m - тангенс угла между направлением выращивания кристалла и нормалью к поверхности грани на фронте кристаллизации. Распределение напряжений для различных значений m показано на рис.3



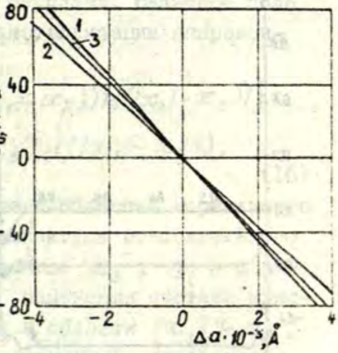
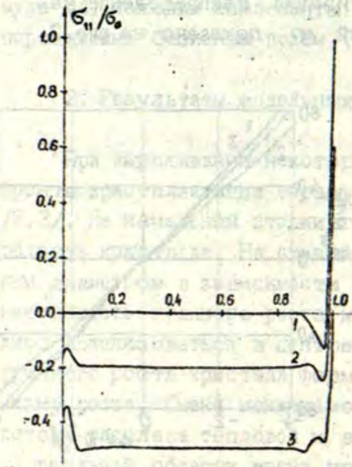


Рис. I. Зависимость изменения параметра решетки Δa от вариации состава Δx соединения.
I - $Gd_{3+x}\,Ga_{5-x}\,O_{12}$ (ГГГ);
2 - $Ca_{3+x}\,Ga_{2(1-x)}Ge_{3+x}O_{12}$ (КГГГ);
3 - $Nd_{3+x}\,Ga_{5-x}\,O_{12}$ (НГГ).

Рис.2 Зависимость уровня номинальных напряжений от изменения параметра решетки соединения по полосам роста.
I -ГГГ; 2- КГГГ;
3 - НГГ.

При неплоском фронте кристаллизации в областях у оси кристалла и у его краев имеет место концентрация поперечных σ_{11} и сдвиговых σ_{12} компонент тензора напряжений. Размер этих областей определяется величиной периода полос роста T. У оси кристалла концентрация напряжений связана с изломом полос роста, а у краев - с эффектом свободной поверхности. Причем, с точки зрения вероятности образования трещины, более опасной являются область, расположенная в непосредственной близости от оси кристалла.



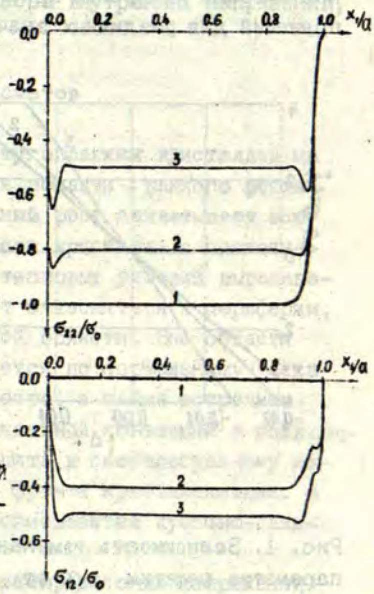


Рис.3. Распределение напряжений на участке с полностью ограненным фронтом кристаллизации. m =0(I); 0,5(2); I,0(3). T/a =0,I.

При частично ограненном фронте кристаллизации граница областей нормального и гранного роста порождает особенности в распределении базисного поля. Отклонение от равновесия, вызванное появлением грани на фронте кристаллизации, приводит к изменению коэффициента распределения. Необходимое для роста граней переохлаждение способствует также повышенному захвату инородных включений (частиц тигля и газовых пузырьков). В результате амплитуда базисного поля на границе областей нормального и гранного роста испытывает скачок. Кроме того, переохлаждение имеет разную величину в разных точках поверхности раздела фаз, что приводит к неравномерности распределения состава вдоль фронта кристаллизации. Вне области гранного роста, где кристаллизация происходит по нормальному механизму, фронт кристаллизации слабо округлен и следует за изотермой в расплаве, изменение состава в слоях роста меньше по величине и распределено более однородно по поверхности раздела фаз. Резкая неоднородность в слоях роста может быть вызвана также гидродинамическими вихрями в подкристальной области расплава. Базисное поле при частично ограненном фронте кристаллизации аппроксимируэтся функцией

$$e^P(x_1,x_2)=\{\varepsilon_0+[\varepsilon]_s\exp(-c(|x_1|-x_s))H(|x_1|-x_s))\}\times$$
$$\times\cos\beta(x_2-m(|x_1|-x_s))H(|x_1|-x_s)), \qquad (16)$$

где x_s – координата границы раздела областей нормального и гранного роста; $[\varepsilon]_s$ – скачок амплитуды относительного изменения параметра решетки на границе x_s; c – параметр, учитывающий неоднородность изменения состава кристалла вдоль фронта кристаллизации в области $|x_1|>x_s$. Распределение компонент тензора напряжений, соответствующих базисному полю (16), показано на рис.4.

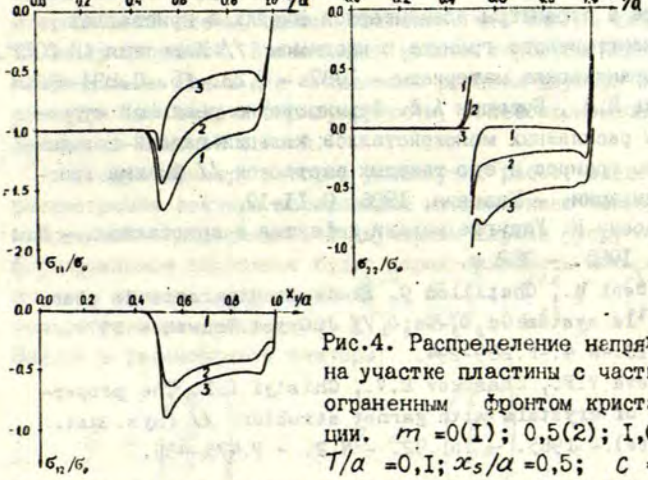


Рис.4. Распределение напряжений на участке пластины с частично ограненным фронтом кристаллизации. m =0(I); 0,5(2); I,0(3). T/a =0,I; x_s/a =0,5; c =I0.

Граница раздела областей нормального и гранного роста является наиболее напряженной и опасной для образования трещин. Поперечная σ_{11} и касательная σ_{12} компоненты тензора напряжений при переходе через поверхность раздела изменяются непрерывно, а направленная вдоль границы раздела осевая компонента σ_{22} терпит разрыв. Величина скачка равна $[\sigma_{22}]_s = E[e^P]_s$ (на рис.4 $[\varepsilon]_s/\varepsilon_0 = 1$).

Как следует из рис.3,4 огранение фронта кристаллизации плоскостями, нормаль к которым не совпадает с направлением выращивания, приводит при прочих равных условиях, к снижению уровня безразмерных напряжений для нормальных компонент σ_{11}/σ_0, σ_{22}/σ_0 и к повышению уровня для касательных компонент σ_{12}/σ_0.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Görnert P., Voigt F. Hight temperatyre solution growth of garnets: theoretical models and experimental results // Current Topics in Materials Science. - Amsterdam e. a. - 1984. - Vol.11. - P.1-144.
2. Письменный В.А., Розенберг Ю.А., Фельдман И.Л.; Киселев В.М., Киселева Т.И., Клещинский Л.И. Эффект гранного роста и параметры элементарной ячейки в кристаллах алюмоиттриевого граната с неодимом // Известия АН СССР. Неорганические материалы.- 1987.- Т.23.-№5.-С.834-836.
3. Милль Б.В., Буташин А.В. Формирование реальной структуры расплавных монокристаллов кальций-галлий-германиевого граната и его твердых растворов // Физика кристаллизации. - Калинин, 1986, С.11-19.
4. Теодосиу К. Упругие модели дефектов в кристаллах. - М.: Мир, 1985. - 352 с.
5. Allibert M., Chatillon C. Étude du diagramme de phase dans le systême $Gd_2O_3-Ga_2O_3$ // J.Cryst.Growth.- 1974. - Vol.23.-N 4.-P.289-294.
6. Kitaeva V.F., Zharikov E.V., Chistyi I.L. The properties of crystals with garnet structure // Phys.Stat. Sol.(a).- 1985. - Vol.92. - N 2. - P.475-488.

Сборник научных трудов
ПРИКЛАДНЫЕ ЗАДАЧИ МАТЕМАТИЧЕСКОЙ ФИЗИКИ
Рига: ЛГУ им.П.Стучки, 1989

УДК 519.6:539.379.4

Р.А.Якушенок,
ВЦ при ЛГУ им.П.Стучки,
Рига

НЕЯВНЫЕ ИТЕРАЦИОННЫЕ СХЕМЫ ДЛЯ СТАТИЧЕСКОЙ ЗАДАЧИ ТЕРМОУПРУГОСТИ В НАПРЯЖЕНИЯХ

В работах /I,2/ для задачи упругости с граничными условиями в напряжениях предложена и изучена новая трехмерная постановка для решения задачи в напряжениях. Эта постановка применяется для отыскания численного решения разностной задачи с использованием явной итерационной схемы. В /I/ делается также попытка построения неявной итерационной схемы, однако показано, что она по сходимости не лучше явной. В настоящей работе строится неявная итерационная схема для численного решения двумерной осесимметричной задачи термоупругости, более экономичная по сравнению с явной схемой.

Следуя примеру авторов упомянутых работ, введем в рассмотрение векторы построенные из компонент тензора напряжений и деформаций. В двумерном случае упруго-деформированное состояния будут характеризовать четыре компоненты тензора напряжений σ^{rr}; $\sigma^{\varphi\varphi}$; σ^{zz}; σ^{rz} и четыре тензора деформаций ε^{rr}; $\varepsilon^{\varphi\varphi}$; ε^{zz}; ε^{rz}.
Введем в рассмотрение векторы:

$$\vec{S} = \begin{pmatrix} S^1 \\ S^2 \\ S^3 \\ S^4 \end{pmatrix}, \quad \vec{\ell} = \begin{pmatrix} \ell^1 \\ \ell^2 \\ \ell^3 \\ \ell^4 \end{pmatrix},$$

где $S^1 = \sigma^{rr} - \sigma^{\varphi\varphi}$; $S^2 = \sigma^{\varphi\varphi}$; $S^3 = \sigma^{zz}$; $S^4 = \sigma^{rz}$; $\ell^1 = \varepsilon^{rr}$; $\ell^2 = \varepsilon^{\varphi\varphi} + \varepsilon^{rr}$; $\ell^3 = \varepsilon^{zz}$; $\ell^4 = \varepsilon^{rz}$, а также вектор перемещения

$\vec{u}$, с компонентами перемещения u^r , u^z вдоль осей r , z соответственно:

$$\vec{u} = \begin{pmatrix} u^r \\ u^z \end{pmatrix}.$$

Тогда уравнения равновесия можем записать в векторном виде:

$$R^* \vec{S} = -\vec{f}. \qquad (1)$$

Связь между деформациями и перемещениями запишется в виде:

$$\vec{\ell} = R\vec{u}; \qquad (2),$$

закон Гука с учетом изменяющегося в пространстве температурного поля

$$\vec{S} = H\vec{\ell} - \vec{\beta}\, T. \qquad (3)$$

Здесь

$$R = \begin{pmatrix} \frac{\partial}{\partial r} & 0 \\ \frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r} r & 0 \\ 0 & \frac{\partial}{\partial z} \\ \frac{1}{2}\frac{\partial}{\partial z} & \frac{1}{2}\frac{\partial}{\partial r} \end{pmatrix}; \quad R^* = \begin{pmatrix} \frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r} r & \frac{\partial}{\partial r} & 0 & \frac{\partial}{\partial z} \\ 0 & 0 & \frac{\partial}{\partial z} & \frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r} r \end{pmatrix}$$

$$H = \begin{pmatrix} 4\mu & -2\mu & 0 & 0 \\ -2\mu & \lambda+2\mu & \lambda & 0 \\ 0 & \lambda & \lambda+2\mu & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 2\mu \end{pmatrix}; \quad \vec{\beta} = \begin{pmatrix} 0 \\ \beta \\ \beta \\ 0 \end{pmatrix}; \quad \vec{f} = \begin{pmatrix} f^r \\ f^z \end{pmatrix}$$

$\beta = (3\lambda + 2\mu)\alpha$, λ , μ - коэффициенты Ламе, α - коэффициент термического расширения, $f^r = \rho F^r$; $f^z = \rho F^z$ - компоненты вектора массовых сил. Запишем еще уравнения совместности деформаций, которые в наших обозначениях примут вид:

$$\frac{\partial^2 \ell^1}{\partial z^2} + \frac{\partial^2 \ell^3}{\partial r^2} - 2\frac{\partial^2 \ell^4}{\partial r \partial z} = 0 \tag{4}$$

$$\frac{\partial}{\partial r}[r(\ell^2 - \ell^1)] - \ell^1 = 0$$

и будем считать, что на границах области заданы соответствующие напряжения:

$z = Z_2 \quad S^4\big|_{z_2} = \sigma^{rz}\big|_{z_2} \quad S^3\big|_{z_2} = \sigma^{zz}\big|_{z_2}$ - верхний торец,

$r = R \quad S^4\big|_R = \sigma^{rz}\big|_R \quad S^1 + S^2\big|_R = \sigma^{rr}\big|_R$ - боковая поверхность,

$z = Z_1 \quad S^4\big|_{z_1} = \sigma^{rz}\big|_{z_1} \quad S^3\big|_{z_1} = \sigma^{zz}\big|_{z_1}$ - нижний торец,

а на оси симметрии $U^r\big|_0 = 0$, $\sigma^{rz}\big|_0 = 0$.

В работах /I,2/ показана сопряженность операторов R^* и $-R$, и дается следующая формулировка задачи в напряжениях:

в подпространстве функций удовлетворяющих условиям совместности деформаций определить компоненты тензора упругих напряжений, удовлетворяющие уравнению

$$R(R^* \vec{S} + \vec{f}) = 0 \tag{5}$$

и граничным условиям.

В терминах перемещений задача упругости формулируется так:

$$R^* H R \vec{u} + \vec{f} = 0 \text{ ,} \tag{6}$$

где оператор $R^* H R$ есть оператор Ламе, который в случае задания граничных условий в напряжениях является вырожденным, то есть решение задачи (6) определяется с точностью до вектора жесткого перемещения. В рассматриваемой задаче этот вектор имеет одну составляющую - произвольное перемещение по оси z . В случае вырожденных задач на правую часть $\vec{f}$ также накладываются ограничения - это условия разрешимости, требующие равенство нулю суммарное воздействие всех сил и моментов. Здесь будем считать, что эти условия выполнены.

Теперь можем перейти к рассмотрению алгоритма численного решения задачи упругости в напряжениях. Обозначим через R_h ; R_h^* разностные аналоги соответствующих дифференциальных операторов. В вышеупомянутых работах предлагается и изучается следующая явная итерационная схема:

$$\frac{\vec{S}_h^{m+1}-\vec{S}_h^{m}}{\tau_{m+1}}+H_h R_h(R_h^* \vec{S}_h^{m}+\vec{f}_h)=0, \qquad (7)$$

причем доказано, что $\vec{S}_h^{m+1}$ приближение будет находиться в подпространстве функций удовлетворяющих разностному аналогу условий совместности, если $\vec{S}_h^{m}$ находится в этом подпространстве. Необходимо только согласовать аппроксимацию (4) с выбором оператора R_h . В связи с тем, что в дальнейшем будут рассматриваться только разностные операторы и сеточные функции, в их записи индекс h будем опускать.

Чтобы получить неявную итерационную схему вернемся к задаче в перемещениях (6) и запишем неявную итерационную схему в следующем виде:

$$C\,\frac{\vec{u}^{m+1}-\vec{u}^{m}}{\tau_{m+1}}+R^*HR\vec{u}^{m}+\vec{f}=0. \qquad (8)$$

Далее умножая (8) слева на HRC^{-1} с учетом, что $HR\vec{u}^m=\vec{S}^m$, получим:

$$\frac{\vec{S}^{m+1}-\vec{S}^{m}}{\tau_{m+1}}+HRC^{-1}(R^*\vec{S}^{m}+\vec{f})=0\,. \qquad (9)$$

Если предположить, что существует C^{-1} , то оказывается, что $\vec{S}^{m+1}$ итерация находится в подпространстве функций удовлетворяющих условиям совместности,. если $\vec{S}^m$ тоже из этого подпространства. Этот факт доказывается в точности также как и для схемы (7) в /2/.

Ниже рассмотрим аппроксимацию операторов и конкретные способы построения оператора C. Введем $h_{i+1}=r_{i+1}-r_i$; $g_{j+1}=z_{j+1}-z$; – шаги сетки по осям r и z соответственно, $r_0=0$; $r_N=R$; $z_0=Z_1$; $z_M=Z_2$. В точках с координатами $\left(r_i+\frac{h_{i+1}}{2};\, z_j+\frac{g_{j+1}}{2}\right)$ будем определять $\ell^1_{i+1/2\,j+1/2}$, $\ell^2_{i+1/2\,j+1/2}$; $\ell^3_{i+1/2\,j+1/2}$ и $S^1_{i+1/2\,j+1/2}$; $S^2_{i+1/2\,j+1/2}$; $S^3_{i+1/2\,j+1/2}$;

$(r_i;z_j)-\ell^4_{ij}$; S^4_{ij};

$(r_i;z_j+\frac{g_{j+1}}{2})$ и $(r_i+\frac{h_{i+1}}{2};z_j)-u^r_{ij+1/2}$ и $u^z_{i+1/2j}$ соответственно.

Тогда разностный аналог уравнения (2) запишется в виде

$$\ell^1_{i+1/2\,j+1/2}=\frac{u^r_{i+1\,j+1/2}-u^r_{i\,j+1/2}}{h_{i+1}};\quad \ell^2_{i+1/2\,j+1/2}=\frac{r_{i+1}u^r_{i+1\,j+1/2}-r_i u^r_{i\,j+1/2}}{r_{i+1/2}\,h_{i+1}}$$

$$\ell^3_{i+1/2\,j+1/2}=\frac{u^z_{i+1/2\,j+1}-u^z_{i+1/2\,j}}{g_{j+1}},\quad \text{где } 0\le i\le N-1;\ 0\le j\le M-1,$$

$$\ell^4_{ij}=\frac{1}{2}\left(\frac{u^r_{ij+1/2}-u^r_{ij-1/2}}{\tilde g_j}+\frac{u^z_{i+1/2\,j}-u^z_{i-1/2\,j}}{\tilde h_i}\right),\quad \text{где } 1\le i\le N-1;\ 1\le j\le M-1$$

$$\tilde h_i=\frac{h_{i+1}+h_i}{2};\ \tilde g_i=\frac{g_{j+1}+g_j}{2};\ \tilde h_0=\frac{h_1}{2};\ \tilde h_N=\frac{h_N}{2};\ \tilde g_0=\frac{g_1}{2};\ \tilde g_M=\frac{g_M}{2}.$$

Введем скалярное произведение для векторов с четырьмя компонентами:

$$(\vec x\,\vec y)=\sum_{k=1}^{3}\sum_{j=0}^{M-1}\sum_{i=0}^{N-1}x^k_{i+1/2\,j+1/2}\,y^k_{i+1/2\,j+1/2}\,r_{i+1/2}\,g_{j+1}\,h_{i+1}+\sum_{j=0}^{M}\sum_{i=0}^{N}x^4_{ij}\,y^4_{ij}\,r_i\,\tilde h_i\,\tilde g_j$$

и двухкомпонентных

$$(\vec\xi\,\vec\eta)=\sum_{i=0}^{N}\sum_{j=0}^{M-1}\xi^r_{ij+1/2}\,\eta^r_{ij+1/2}\,r_i\,\tilde h_i\,g_{j+1}+\sum_{i=0}^{N-1}\sum_{j=0}^{M}\xi^z_{i+1/2\,j}\,\eta^z_{i+1/2\,j}\,r_{i+1/2}\,h_{i+1}\,\tilde g_j.$$

Исходя из определения $R\vec u$, записав $(R\vec u,\vec S)=-(\vec u,R^*\vec S)$, получим аппроксимацию уравнений (I):

$$\frac{r_{i+1/2} S^1_{i+1/2\, j+1/2} - r_{i-1/2} S^1_{i-1/2\, j+1/2}}{r_i \tilde{h}_i} + \frac{S^2_{i+1/2\, j+1/2} - S^2_{i-1/2\, j+1/2}}{\tilde{h}_i} + \frac{S^4_{i\, j+1} - S^4_{ij}}{g_{j+1}} =$$

$$= -f^r_{i\, j+1/2}. \quad 1 \le i \le N-1;\ 0 \le j \le M-1.$$

$$\frac{S^3_{i+1/2\, j+1/2} - S^3_{i+1/2\, j-1/2}}{\tilde{g}_j} + \frac{r_{i+1} S^4_{i+1\, j} - r_i S^4_{ij}}{r_{i+1/2} h_{i+1}} = -f^z_{i+1/2\, j}. \quad 0 \le i \le N-1;\ 1 \le j \le M-1;$$

и граничных условий:

$$\left.\begin{aligned} & S^1_{N-1/2\, j+1/2} \frac{r_{N-1/2}}{r_N} + S^2_{N-1/2\, j+1/2} = \sigma^{rr}_{N-1/2\, j+1/2} \\ & u^r_{0\, j+1/2} = 0 \end{aligned}\right\} 0 \le j \le M-1$$

$$S^4_{Nj} = \sigma^{rz}\Big|_{Rj}; \quad S^4_{0j} = 0, \quad 0 \le j \le M$$

$$S^3_{i+1/2\ 1/2} = \sigma^{zz}_{i+1/2\ 1/2}; \quad S^3_{i+1/2\, M-1/2} = \sigma^{zz}_{i+1/2\, M-1/2} \quad 0 \le i \le N-1$$

$$S^4_{i0} = \sigma^{rz}\Big|_{z_1 i}; \quad S^4_{iM} = \sigma^{rz}\Big|_{z_2 i} \quad 0 \le i \le N$$

Если в приграничных узлах принять:

$$\sigma^{rr}_{N-1/2\, j+1/2} = \sigma^{rr}\Big|_{Rj+1/2} + \left[\left(\sigma^{rz}\Big|_{Rj+1} - \sigma^{rz}\Big|_{Rj}\right)/g_{j+1} - f^r_{N-1/2\, j+1/2}\right]\tilde{h}_N$$

$$\sigma^{zz}_{i+1/2\ 1/2} = \sigma^{zz}\Big|_{z_1 i+1/2} - \left\{\left[(r\sigma^{rz})\Big|_{z_1 i+1} - (r\sigma^{rz})\Big|_{z_1 i}\right]/r_{i+1/2} h_{i+1} - f^z_{i+1/2\ 1/2}\right\}\tilde{g}_1$$

$$\sigma^{zz}_{i+1/2\, M-1/2} = \sigma^{zz}\Big|_{z_2 i+1/2} + \left\{\left[(r\sigma^{rz})\Big|_{z_2 i+1} - (r\sigma^{rz})\Big|_{z_2 i}\right]/r_{i+1/2} h_{i+1} - f^z_{i+1/2\, M-1/2}\right\}\tilde{g}_M,$$

тогда имеем аппроксимацию второго порядка. Закон Гука в индексной записи определим так:

$$S^1_{i+1/2\, j+1/2} = 4\mu \ell^1_{i+1/2\, j+1/2} - 2\mu \ell^2_{i+1/2\, j+1/2}$$

$$S^2_{i+1/2\,j+1/2} = -2\mu \ell^1_{i+1/2\,j+1/2} + (\lambda+2\mu)\ell^2_{i+1/2\,j+1/2} + \lambda \ell^3_{i+1/2\,j+1/2} + \beta T_{i+1/2\,j+1/2}$$

$$S^3_{i+1/2\,j+1/2} = \lambda \ell^2_{i+1/2\,j+1/2} + (\lambda+2\mu)\ell^3_{i+1/2\,j+1/2} + \beta T_{i+1/2\,j+1/2}$$

$$S^4_{ij} = 2\mu \ell^4_{ij},$$

можно также записать и аппроксимацию уравнений совместности деформаций согласующуюся с построенным R :

$$\frac{1}{g_{j+1}}\left(\frac{\ell^1_{i+1/2\,j+3/2} - \ell^1_{i+1/2\,j+1/2}}{\tilde g_{j+1}} - \frac{\ell^1_{i+1/2\,j+1/2} - \ell^1_{i+1/2\,j-1/2}}{\tilde g_j}\right) +$$

$$+ \frac{1}{h_{i+1}}\left(\frac{\ell^3_{i+3/2\,j+1/2} - \ell^3_{i+1/2\,j+1/2}}{\tilde h_{i+1}} - \frac{\ell^3_{i+1/2\,j+1/2} - \ell^3_{i-1/2\,j+1/2}}{\tilde h_i}\right) -$$

$$- \frac{2}{g_{j+1} h_{i+1}}\left(\ell^4_{i+1\,j+1} - \ell^4_{i\,j+1} - \ell^4_{i+1\,j} + \ell^4_{ij}\right) = 0$$

$$\frac{r_{i+1/2}(\ell^2_{i+1/2\,j+1/2} - \ell^1_{i+1/2\,j+1/2}) - r_{i-1/2}(\ell^2_{i-1/2\,j+1/2} - \ell^1_{i-1/2\,j+1/2})}{\tilde h_i} -$$

$$- \frac{h_{i+1}\ell^1_{i+1/2\,j+1/2} + h_i \ell^1_{i-1/2\,j+1/2}}{2\tilde h_i} = 0.$$

Для построения C необходимо также записать оператор R^*HR . Для этого введем $A = PR^*HR$, где $P = \begin{pmatrix} P^r & 0 \\ 0 & P^z \end{pmatrix}$, а P^r и P^z диагональны матрицы с элементами $p^r_{ij} = r_i \tilde h_i g_{j+1}$ $P^z_{ij} = r_{i+1/2} h_{i+1} \tilde g_j$. Тогда $A = \begin{pmatrix} A^r & A^{rz} \\ A^{zr} & A^z \end{pmatrix}$ симметричная матрица, а A^r ; A^z - пятидиагональные матрицы типа двумерного разностного оператора Лапласа; A^{rz} ; A^{zr} - четырехдиагональные матрицы:

$$(A^r u^r)_{ij+1/2} = -a^r_{i-1j} u^r_{i-1\,j+1/2} - c^r_{ij-1} u^r_{ij-1/2} + b^r_{ij} u^r_{ij+1/2} - c^r_{ij} u^r_{ij+3/2} -$$

$$- a^r_{ij} u^r_{i+1\,j+1/2}$$

$$(A^{rz}u^z)_{ij+1/2}=s_{ij}(-u^z_{i-1/2j}+u^z_{i+1/2j})+t_{ij}(u^z_{i-1/2j+1}-u^z_{i+1/2j+1});$$
$$1\le i\le N \quad 0\le j\le M-1$$

$$(A^z u^z)_{i+1/2j}=a^z_{i-1j}(u^z_{i-1/2j}-u^z_{i+1/2j})-c^z_{ij-1}(u^z_{i+1/2j-1}-u^z_{i+1/2j}-$$
$$-c^z_{ij}(u^z_{i+1/2j+1}-u^z_{i+1/2j})-a^z_{ij}(u^z_{i+3/2j}-u^z_{i+1/2j})$$

$$(A^{zr}u^r)_{i+1/2j}=-t_{ij-1}u^r_{ij-1/2}+t_{i+1j-1}u^r_{i+1j-1/2}+s_{ij}u^r_{ij+1/2}-$$
$$-s_{i+1j}u^r_{i+1j+1/2};\ 0\le i\le N-1 \quad 1\le j\le M-1$$

с коэффициентами

$$b^r_{i0}=\left[\frac{4\mu(\lambda+\mu)}{\lambda+2\mu}g_1 r_i\left(\frac{1}{r_{i+1/2}h_{i+1}}+\frac{1}{r_{i-1/2}h_i}\right)+\mu\frac{\tilde h_i}{\tilde g_1}\right]r_i;$$
$$1\le i\le N-1;\quad j=0$$

$$b^r_{ij}=\left[(\lambda+2\mu)g_{j+1}r_i\left(\frac{1}{r_{i+1/2}h_{i+1}}+\frac{1}{r_{i-1/2}h_i}\right)+\mu\tilde h_i\left(\frac{1}{\tilde g_{j+1}}+\frac{1}{\tilde g_j}\right)\right]r_i;$$
$$1\le i\le N-1;\ 1\le j\le M-2;$$

$$b^r_{iM}=\left[\frac{4\mu(\lambda+\mu)}{\lambda+2\mu}g_M r_i\left(\frac{1}{r_{i+1/2}h_{i+1}}+\frac{1}{r_{i+1/2}h_i}\right)+\mu\frac{\tilde h_i}{\tilde g_{M-1}}\right]r_i;$$
$$1\le i\le N-1;\ j=M-1;$$

$$b^r_{N0}=\left[-1+\frac{4\mu(\lambda+\mu)r_N^2}{(\lambda+2\mu)r_{N-1/2}h_N}\right]g_1 \qquad i=N;\ j=0;$$

$$b^r_{Nj}=\left[-1+(\lambda+2\mu)\frac{r_N^2}{r_{N-1/2}h_N}\right]g_{j+1} \qquad i=N;\ 1\le j\le M-2;$$

$$b^r_{NM-1}=\left[-1+\frac{4\mu(\lambda+\mu)r_N^2}{(\lambda+2\mu)r_{N-1/2}h_N}\right]g_M \qquad i=N;\ j=M-1;$$

$$a^r_{ij}=\frac{4\mu(\lambda+\mu)}{\lambda+2\mu}\ \frac{r_i r_{i+1}}{r_{i+1/2}h_{i+1}}\ g_{j+1} \qquad 1\le i\le N-1;\ j=0;M-1;$$

$$a^r_{ij}=(\lambda+2\mu)\frac{r_i r_{i+1}}{r_{i+1/2}h_{i+1}}\ g_{j+1} \qquad 1\le i\le N-1;\ 1\le j\le M-2;$$

$$c^r_{ij}=\mu r_i\ \frac{\tilde h_i}{\tilde g_{j+1}} \qquad 1\le i\le N-2;\ 0\le j\le M-2;$$

$$a^z_{ij} = \mu \frac{\tilde{g}_i r_{i+1}}{\tilde{h}_{i+1}} \qquad 0 \le i \le N-2;\ 1 \le j \le M-1;$$

$$c^z_{ij} = (\lambda + 2\mu) \frac{r_{i+1/2} h_{i+1}}{g_{j+1}} \qquad 0 \le i \le N-1;\ 1 \le j \le M-2;$$

$$s_{i0} = t_{iM-1} = 0 \qquad 1 \le i \le N-1;$$

$$t_{i0} = s_{iM-1} = \mu r_i \qquad 1 \le i \le N-1;$$

$$s_{ij} = t_{ij} = (\lambda + \mu) r_i \qquad 1 \le i \le N-1;\ 1 \le j \le M-2;$$

$$s_{Nj} = t_{Nj} = \lambda r_N \qquad i = N \ ;\ 1 \le j \le M-2.$$

Будем считать, что все не указанные в списке коэффициенты равны нулю. Отметим еще, что неизвестные $u^z_{i+1/2\,0}$; $u^z_{i+1/2\,M}$ исключены из системы, ввиду того, что $S^3_{i+1/2\,1/2} = \sigma^{zz}_{i+1/2\,1/2}$ и $S^3_{i+1/2\,M-1/2} = \sigma^{zz}_{i+1/2\,M-1/2}$ на границе известные величины.

Анализ операторов A^r и A^z показывает, что $A^r = -(A^r)^* > 0$, $A^z = -(A^z)^* \geq 0$ и также $A = -A^* \geq 0$, причем видно, что $\ker A$ (ядро оператора A , пользуясь обозначениями /3/) есть вектор $u^r_{ij+1/2} = 0$, $1 \le i \le N$; $0 \le j \le M-1$, $u^z_{i+1/2\,j} = G$, $0 \le i \le N-1$; $1 \le j \le M-1$, где G - произвольная константа. Если теперь построить C удовлетворяющим условиям из /3 /:

$$C\vec{u} \in \ker A^* \quad , \text{ если } \quad \vec{u} \in \ker A \tag{10}$$

$$C\vec{u} \in \operatorname{im} A \quad , \text{ если } \quad \vec{u} \in \operatorname{im} A^*,$$

то без ограничений, кроме удовлетворения условиям разрешимости, то есть $\vec{f} \perp \ker A^*$, можно пользоваться итерационной схемой (8),(9).

Выберем

$$C = \begin{pmatrix} L^{r-} & 0 \\ L^{zr} & L^{z-} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathcal{D}^r & 0 \\ 0 & \mathcal{D}^z \end{pmatrix} \begin{pmatrix} L^{r+} & L^{rz} \\ 0 & L^{z+} \end{pmatrix} =$$

$$= \begin{pmatrix} L^{r-} \mathcal{D}^r L^{r+} & L^{r-} \mathcal{D}^r L^{r+} \\ L^{zr} \mathcal{D}^r L^{r+} & L^{zr} \mathcal{D}^r L^{rz} + L^{z-} \mathcal{D}^z L^{z+} \end{pmatrix}. \tag{11}$$

Следуя методу MAF /4/ для пятиточечных разностных уравнений, определим:

$$(L^{r+}u^r)_{ij+1/2}=\frac{1}{d^r_{ij}}u^r_{ij+1/2}-a^r_{ij}u^r_{i+1\,j+1/2}-c^r_{ij}u^r_{ij+3/2}$$

$$d^r_{ij}=1/[b^r_{ij}-a^r_{i-1j}(a^r_{i-1j}+mc^r_{i-1j})d^r_{i-1j}-$$
$$-c^r_{ij-1}(c^r_{ij-1}+ma^r_{ij-1})d^r_{ij-1}] \quad 1\le i\le N;\ 0\le j\le M-1. \tag{I2}$$

$$(L^{z+}u^z)_{i+1/2j}=\frac{1}{d^z_{ij}}u^z_{i+1/2j}-a^z_{ij}u^z_{i+3/2j}-c^z_{ij}u^z_{i+1/2j+1}$$

$$d^z_{ij}=1/[b^z_{ij}-a^z_{i-1j}(a^z_{i-1j}+mc^z_{i-1j})d^z_{i-1j}-c^z_{ij-1}(c^z_{ij-1}+ma^z_{ij-1})d^z_{ij-1}]$$
$$b^z_{ij}=a^z_{i-1j}+c^z_{ij-1}+c^z_{ij}+a^z_{ij} \quad 0\le i\le N-1;\ 1\le j\le M-2, \tag{I3}$$

$m=1$ d^r_{ij}; d^z_{ij} - элементы диагональных матриц $\mathcal{D}^r$ и $\mathcal{D}^z$. $L^{r-}=(L^{r+})^T$ и $L^{z-}=(L^{z+})^T$, где через T обозначена операция транспонирования. В /4/ показано, что $\lambda_{min}[(L^{r-}\mathcal{D}^rL^{r+})^{-1}A^r]=1$ и также $\lambda_{min}[(L^{z-}\mathcal{D}^zL^{z+})^{-1}A^z]=1$, то есть минимальные собственные числа операторов $L^{r-}\mathcal{D}^rL^{r+}$ и $L^{z-}\mathcal{D}^zL^{z+}$ совпадают с минимальными собственными числами операторов A^r и A^z соответственно, а отношение максимальных собственных чисел пропорционально числу неизвестных $O(N\cdot M)$.

В нашем случае оператор A^z вырожден, построчные суммы элементов равны нулю. Исходя из этого покажем, что (I3) превращается в следующее выражение:

$$d^z_{ij}=1/(a^z_{ij}+c^z_{ij}) \ . \tag{I4}$$

Допустим, что выполняются

$$d^z_{i-1j}=1/(a^z_{i-1j}+c^z_{i-1j}) \qquad d^z_{ij-1}=1/(a^z_{ij-1}+c^z_{ij-1}).$$

Тогда

$$d^z_{ij} = 1/(b^z_{ij} - a^z_{i-1j} - c^z_{i-1j}) = 1/(a^z_{i-1j} + c^z_{ij-1} + a^z_{ij} +$$

$$+ c^z_{ij} - a^z_{i-1j} - c^z_{ij-1}) = 1/(a^z_{ij} + c^z_{ij}).$$

Далее рассмотрим d^z_{01}. Так как $a^z_{-11} = c^z_{i0} = 0$ $0 \le i \le N-1$, то $b^z_{01} = a^z_{01} + c^z_{01}$ и в (I3) $d^z_{01} = 1/(a^z_{01} + c^z_{01})$, а это означает, что и для всех остальных значений i и j будет иметь место соотношение (I4).

В силу (I4) $d_{N-1\,M-2} = 1/0$ или $1/d_{N-1\,M-2} = 0$ и оказывается, что L^{z-} и L^{z+} (треугольные матрицы) тоже вырождены и

$$(L^{z+} u^z)_{i+1/2\,j} = (a^z_{ij} + c^z_{ij}) u^z_{i+1/2\,j} - a^z_{ij} u^z_{i+3/2\,j} - c^z_{ij} u^z_{i+1/2\,j+1}$$

матрица с равными нулю построчными суммами элементов. Это означает, что $u^z_{i+1/2\,j}$ могут быть определены с точностью до константы. Если выбрать и L^{rz} так, чтобы построчные суммы его элементов равнялись нулю, то видно, что

$$\begin{pmatrix} L^{r+} & L^{rz} \\ 0 & L^{z+} \end{pmatrix} \vec{u} \in \ker A^*, \text{ если } \vec{u} \in \ker A$$

$$\begin{pmatrix} L^{r+} & L^{rz} \\ 0 & L^{z+} \end{pmatrix} \vec{u} \in \operatorname{im} A, \text{ если } \vec{u} \in \operatorname{im} A^*,$$

а вместе с этим свойством выполняется и (I0).

Запишем:

$$(L^{rz} u^z)_{ij+1/2} = \alpha_{ij}(-u^z_{i-1/2\,j} + u^z_{i+1/2\,j}) + \beta_{ij}(u^z_{i-1/2\,j+1} - u^z_{i+1/2\,j+1}).$$

$$1 \le i \le N; \quad 0 \le j \le M-1$$

Исходя из соображений минимизации $\| A^{rz} - L^{r-} \mathcal{D}^r L^{r+} \|_{L_2}$ и численных экспериментов по уменьшению числа итераций α_{ij} и β_{ij}; были выбраны в следующем виде:

$$\alpha_{i0} = 0 \qquad 1 \le i \le N \qquad j = 0$$

$$\beta_{i0}=(s_{i0}-0.5a^r_{i-10}\beta_{i-10}d_{i-10})(1-m) \quad 1\le i\le N-1;\ j=0$$

$$\beta_{N0}=0 \qquad i=N \quad j=0$$

$$\alpha_{ij}=\beta_{ij}=[s_{ij}-0{,}5(a^r_{i-1j}\beta_{i-1j}d^r_{i-1j}+c^r_{ij-1}\beta_{ij-1}d^r_{ij-1})](1-m)$$

$$1\le i\le N-1 \qquad 1\le j\le M-2$$

$$\alpha_{Nj}=\beta_{Nj}=(s_{Nj}-a^r_{N-1j}\beta_{N-1j}d^r_{N-1j}-0{,}5c^r_{Nj-1}\beta_{Nj-1}d^r_{Nj-1})(1-m)$$

$$i=N \qquad 1\le j\le M-2$$

$$\alpha_{iM-1}=(t_{iM-1}-0{,}5a^r_{i-1M-1}\beta_{i-1M-1}d^r_{i-1M-1})(1-m)$$

$$1\le i\le N-1 \qquad j=M-1$$

$$\alpha_{NM-1}=0 \qquad i=N \qquad j=M-1$$

$$\beta_{iM-1}=0 \qquad 1\le i\le N \qquad j=M-1.$$

Отметим, что в численных экспериментах анализировался и случай $m=0$. Тогда мы получаем так называемый метод неполного LU -разложения /5/. В этом случае мы заведомо неудовлетворяем условиям (I0) и получаем $C=C^*>0$ Такой C не пригоден для использования в схеме (8), но в случае схемы (9) дает большую экономию числа итераций.

Для численных расчетов программно реализована трехслойная итерационная схема сопряженных градиентов с возможностью счета как по явной, так и по неявной ($m=1$; $m=0$) схемам. Программа написана на языке FORTRAN-IУ, а расчеты проводились на ЭВМ ЕС-I060.

В качестве теста была взята задача термоупругости со свободной границей и температурой $T=T_0 r^2$. Решение такой задачи подробно рассмотрено в /6/. Сравнение численных значений напряжений показано в таблицах I,2,3,4, где в клетке верхнее число получено при расчете на равномерной сетке при $h=g=0,2 (N\times M=6\times 11)$, следующее - $h=g=0,04$ $(N\times M = 26\times 51)$, а третье - расчетные данные работы /6/.

В таблице 5 дано число итераций при счете по явной (α) и неявной ($m=0$; $m=1$) схемам при уменьшении невязки на заданный порядок (2,3,4) в зависимости от числа узлов сетки.

Таблица I. Значения напряжений σ^{rr} на сетке 5xII, 25x5I и указанные в /6/.

0,9	4,902 5,067 5,073	4,403 4,538 4,563	3,377 3,543 3,550	2,029 2,204 2,2I0	0,528 0,7I4 0,723
0,7	4,689 4,866 4,858	4,234 4,372 4,327	3,I7I 3,44I 3,44I	I,983 2,I59 2,I6I	0,5I0 0,702 0,707
0,5	4,038 4,2I6 4,I95	3,666 3,844 3,822	2,927 3,092 3,072	I,838 2,00I I,996	0,492 0,669 0,672
0,3	2,442 2,606 2,568	2,3I7 2,478 2,436	2,0I5 2,I52 2,II9	I,442 I,550 I,53I	0,495 0,600 0,595
0,I	-0,977 -0,874 -0,9I6	-0,64I -0,537 -0,6I2	-0,I34 -0,033 -0,093	0,435 0,447 0,407	0,573 0,432 0,409
	0,I	0,3	0,5	0,7	0,9

Таблица 2. Напряжения σ^{rr} на сетке 5xII,26x5I и указанные в /6/.

	4,902	3,957	2,056	-0,833	-4,740
0,9	5,035	4,080	2,I62	-0,744	-4,67I
	5,022	4,075	2,I65	0,734	-4,659
	4,689	3,789	I,968	-0,8I4	-4,6II
0,7	4,82I	3,909	2,076	-0,722	-4,536
	4,808	3,905	2,08I	-0,709	-4,5I4
	4,038	3,237	I,607	-0,9I2	-4,43I
0,5	4,I58	3,354	I,708	-0,835	-4,362
	4,I42	3,344	I,7I4	-0,8I3	-4,32I
	2,442	I,822	0,538	-I,498	-4,434
0,3	2,54I	I,9I6	0,6I4	-I,455	-4,422
	2,583	I,89I	0,6I2	-I,424	-4,355
	-0,977	-I,323	-2,05I	-3,255	-6,I5I
0,I	-0,9I9	-I,268	-2,0I7	-3,282	-5,3I0
	-0,956	-I,328	-2,036	-3,245	-5,I25
	0,I	0,3	0,5	0,7	0,9

Таблица 3. Напряжения σ^{zz} на сетке 5xII, 26x5I и указанные в /6/

	4,599	4,04I	2,747	0,357	-3,660
0,9	4,788	4,25I	2,933	0,492	-3,59I
	4,859	4,353	2,949	0,498	-3,596
	3,960	3,50I	2,4I7	0,358	-3,228
0,7	4,I58	3,702	2,589	0,48I	-3,I75
	4,260	3,727	2,604	0,486	-3,I70
	2,766	2,477	I,765	0,330	-2,37I
0,5	2,997	2,680	I,9I4	0,432	-2,333
	2,987	2,679	I,926	0,428	-2,338
	I,248	I,I5I	0,862	0,2I5	-I,I70
0,3	I,492	I,336	0,996	0,27I	-I,2I6
	I,467	I,34I	I,0I0	0,276	-I,222
	0,00I	0,000	0,000	0,000	0,000
0,I	0,222	0,I97	0,I68	0,057	0,2I9
	0,223	0,205	0,I65	0,060	0,222
	0,I	0,3	0,5	0,7	0,9

Таблица 4. Напряжения σ^{rz} на сетке 5xII, 26x5I и указанные в /6/

I	0	0,000 0,000 0	0,000 0,000 0	0,000 0,000 0	0,000 0,000 0	0
0,8	0	-0,3I9 -0,335 -0,323	-0,564 -0,57I -0,570	-0,65I -0,654 -0,656	-0,486 -0,489 -0,488	0
0,6	0	-0,597 -0,6I9 -0,604	-I,067 -I,077 -I,073	I,256 I,260 -I,26I	-0,966 -0,969 -0,970	0
0,4	0	-0,753 -0,77I -0,760	-I,370 -I,380 -I,379	-I.666 I,665 -I,665	-I,35I -I,342 -I,343	0
0,2	0	-0,63I -0,639 -0,637	-I,I79 -I,I89 -I,I87	-I,503 -I,497 -I,496	I,3I5 I,278 I,278	0
0	0	0	0	0	0	0
	0	0,2	0,4	0,6	0,8	I

Таблица 5. Число операций, требуемое для уменьшения невязки q = 2; 3; 4 порядка, полученное при счете по явной ($\mathcal{A}$) и неявной ($m=0, m=1$) схемам на сетках $(N \times M)$

$N \times M$	q	2	3	4
6xII	 m = 1 m = 0	I3 I0 4	30 I7 8	4I 25 II
IIx2I	 m = 1 m = 0	25 25 8	70 35 I2	96 57 20
2Ix4I	 m = 1 m = 0	54 22 I4	I07 37 22	I95 54 35
26x5I	 m = 1 m = 0	67 32 I6	I30 49 27	244 93 43

Как видно из табл.I-4 достигается хорошая точность численных расчетов всех компонент напряжений. Экономичность схемы при $m=0$ возрастает при измельчении сетки и по сравнению явной схемой затраченное время уменьшается от 2-х до 4 раз.

Были также проведены расчеты на модели реального технологического эксперимента выращивания монокристалла $GaAs$ при задании расчетного температурного поля. Получено хорошее совпадение с расчетами, проведенными в работе /7/, см.рис.I. Сравнивая экономичность указанных методов, отметим, что построенная итерационная схема требует затрат машинного времени в I0-I2 раз меньше, чем метод работы /7/.

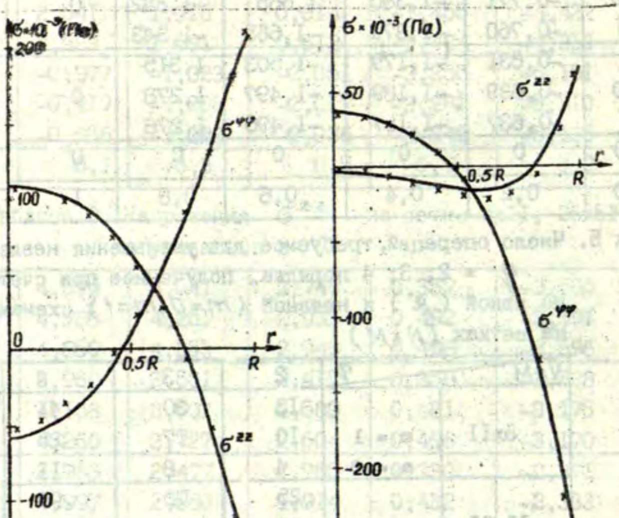


Рис.I. Сравнение расчетных данных по схеме при $m=0$(xxx) с данными работы /7/ для кристалла $GaAs$, а) $z=1,6R$; б) $z=0,4R$.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Коновалов А.Н. Решение задач теории упругости в напряжениях. - Новосибирск, 1979.
2. Коновалов А.Н., Сорокин С.Б. Структура уравнений теории упругости. Статическая задача. - Препринт ВЦ СО АН СССР. - Новосибирск, 1986, - № 665.
3. Самарский А.А., Николаев Е.С. Методы решения сеточных уравнений. - М.:Наука, 1978. - 589 с.
4. Кучеров А.Б., Макаров М.М. Метод приближенной факторизации для решения разностных смешанных эллиптических краевых задач // Разностные методы математической физики. М.: Изд-во Московского у-нта, 1984. - С.54-65.
5. 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.
6. Коваленко А.Д. Основы термоупругости. - Киев: Наукова думка, 1970. - 307 с.
7. Вахрамеев С.С. Расчет термических напряжений, связанных с процессом выращивания монокристаллов из расплава. - Числ.методы механики сплошной среды. - 1977. - Т.8. - № 5. - С.23-35.

Сборник научных трудов
ПРИКЛАДНЫЕ ЗАДАЧИ МАТЕМАТИЧЕСКОЙ ФИЗИКИ
Рига: ЛГУ им. П.Стучки, 1989

УДК 622.276.66

М.Я. Антимиров, С.Е. Неклюдов
РПИ, Рига

ОБ ЭФФЕКТИВНОСТИ ГИДРОРАЗРЫВА НЕФТЯНОГО ПЛАСТА, ОСУЩЕСТВЛЯЕМОГО ДВУМЯ КРУГОВЫМИ ТРЕЩИНАМИ

Гидроразрыв нефтяного пласта осуществляется для увеличения дебета эксплуатационных скважин. Анализ эффективности гидроразрыва, осуществляемого одной горизонтальной круговой трещиной, имеется в монографии /I/ и статье /2/. Математически задача сводится к решению уравнения Лапласа для цилиндрической области с заданными постоянными значениями функции на боковой поверхности цилиндра и на круге внутри цилиндра и с нулевым значением нормальной производной на обоих основаниях цилиндра. Задача решена численно. В данной работе приводится приближенное аналитическое решение задачи об эффективности гидроразрыва, осущестляемого двумя горизонтальными круговыми трещинами, а также указан метод решения задачи для случая произвольного числа горизонтальных круговых трещин.

Рассматривается нефтяной пласт, расположенный в области $0 \leq \tilde{r} \leq \tilde{R}$, $0 \leq \tilde{z} \leq b$. В плоскостях $\tilde{z} = \tilde{z}_1$, и $\tilde{z} = \tilde{z}_2$ в результате гидроразрыва образованы трещины радиусом $\tilde{a}$, на которых поддерживается постоянное давление p_c. На контуре питания $\tilde{r} = \tilde{R}$ поддерживается давление $p_k > p_c$. Требуется найти стационарное поле давлений и дебет скважины. Получить точное аналитическое решение задачи о поле давлений при наличии одной или нескольких круговых трещин не удается. В работе /3/ был дан эффективный приближенный метод аналитического решения задач теплопроводности со смешанными граничными условиями, погрешность которого при определении интегральных характеристик (расход, полный тепловой поток и т. д.), не превышает 5% при сравнении с немногочисленными точными решениями смешанных задач. Ниже этот метод используется для решения сформулированной в данной статье задачи. В частном случае одной круговой трещины полученное ниже решение дает полное совпадение с численным решением задачи из /1/ и /2/.

Введем безразмерные величины:

$$r=\tilde{r}/b,\ z=\tilde{z}/b,\ a=\tilde{a}/b,\ R=\tilde{R}/b,$$
$$p=(\tilde{p}-p_K)/(p_c-p_K),\ Q=\mu\tilde{Q}/bk(p_K-p_c),\ z_1=\tilde{z}_1/b,\ z_2=\tilde{z}_2/b, \tag{1}$$

где $\tilde{Q}$ - дебет эксплуатационной скважины, k - проницаемость, μ - динамическая вязкость жидкости.

Математическая постановка задачи имеет вид (см. /1/, /3/):

$$\frac{\partial^2 p}{\partial r^2}+\frac{1}{r}\frac{\partial p}{\partial r}+\frac{\partial^2 p}{\partial z^2}=0,\quad \begin{array}{l} a<r<R, \\ 0<z<1, \end{array} \tag{2}$$

$$r=a,\ 0<z<1:\ \frac{\partial^2 p}{\partial z^2}+2\frac{\partial p}{\partial r}=A_1\delta(z-z_1)+A_2\delta(z-z_2), \tag{3}$$

$$r=R:\ p=0;\ z=0,\ z=1,\ a<r<R:\ \frac{\partial p}{\partial z}=0. \tag{4}$$

Граничное условие (3) получено в предположении, что проницаемость области $0\le r\le a$, $0\le z\le 1$ равна бесконечности в радиальном направлении и конечна в вертикальном направлении (см. /3/). Кроме того, в условие (3) введены два дополнительных слагаемых $A_1\delta(z-z_1)$ и $A_2\delta(z-z_2)$, где $\delta(z)$ - дельта-функция, а A_1 и A_2 - неизвестные постоянные, которые определятся после решения задачи (2)-(4) из условий на границах трещин:

$$r=a,\ z=z_1:\ p=1;\ r=a,\ z=z_2:\ p=1. \tag{5}$$

Задача (2)-(5) решена путем применения конечного косинус-преобразования Фурье по переменной z, которое применялось и к уравнению (2) и к условию (3) (см. /3/). Решение имеет вид:

$$p(r,z)=\frac{a}{2}(A_1+A_2)\ln\frac{r}{R}+2\sum_{n=1}^{\infty}(\tilde{\Delta}(n))^{-1}\left[I_0(n\pi r)K_0(n\pi R)-\right.$$
$$\left.-K_0(n\pi r)I_0(n\pi R)\right](A_1\cos n\pi z_1+A_2\cos n\pi z_2)\cos n\pi z, \tag{6}$$

где

$$\tilde{\Delta}(n)=n\pi\{I_0(n\pi R)[n\pi K_0(n\pi a)+2K_1(n\pi a)]-K_0(n\pi R)\times$$
$$\times[n\pi I_0(n\pi a)-2I_1(n\pi a)]\},\ A_1=\frac{\Delta_1}{\Delta},\ A_2=\frac{\Delta_2}{\Delta}, \tag{7}$$

$$\Delta=f(z_1,z_1)f(z_2,z_2)-f^2(z_1,z_2), \tag{8}$$

$$\Delta_1=f(z_2,z_2)-f(z_1,z_2),\ \Delta_2=f(z_1,z_1)-f(z_1,z_2), \tag{9}$$

$$f(x,y)=\frac{a}{2}\ln\frac{a}{R}+2\sum_{n=1}^{\infty}(\tilde{\Delta}(n))^{-1}\left[I_0(n\pi a)K_0(n\pi R)-K_0(n\pi a)\times\right.$$
$$\left.\times I_0(n\pi R)\right]\cos n\pi x\cos n\pi y, \tag{10}$$

$I_\nu(z)$, $K_\nu(z)$, ($\nu=0,1$) – модифицированные функции Бесселя I-го и 2-го рода порядка ν .

Найдем дебет эксплуатационной скважины:

$$Q=2\pi R\int_0^1\frac{\partial p}{\partial r}\bigg|_{r=R}dz. \tag{11}$$

Подставляя (6) в (11), получим

$$Q=\pi a\,(A_1+A_2), \tag{12}$$

где A_1 и A_2 даются формулами (7)-(10). При симметричном расположении трещин относительно середины пласта (т. е. при $z_2=1-z_1$) формула (12) примет вид:

$$Q=\pi\left\{\frac{1}{\pi a}\sum_{n=1}^{\infty}\frac{1}{n}\left[\frac{I_0(2n\pi R)K_1(2n\pi a)+K_0(2n\pi R)I_1(2n\pi a)}{I_0(2n\pi a)K_0(2n\pi R)-K_0(2n\pi a)I_0(2n\pi R)}-\right.\right.$$
$$\left.\left.-n\pi\right]^{-1}\cos^2 2n\pi z_1+\ln\frac{a}{R}\right\}^{-1}. \tag{13}$$

Расчеты по формуле (13) показывают, что наибольший расход Q достигается при $z_1 = 0.25$, т. е. когда верхняя и нижняя трещины находятся на $1/4$ расстояния, равного мощности пласта, соответственно от верхнего и нижнего края пласта.

Результаты численных расчетов зависимости дебета Q от z_1 по формуле (13) приведены в таблице (z_1 - расстояние от нижней границы пласта до нижней трещины в симметричном случае).

Таблица

Зависимость Q от z_1 при $R = 10$, $a = 0,1$.

z_1	0.00	0.05	0.10	0.15	0.20	0.25
Q	0.54	0.57	0.60	0.62	0.63	0.64

Как видно из таблицы, при наличии двух трещин получается увеличение дебета Q на 19% (при $z_1 = 0.25$) по сравнению с одной трещиной (т. е. $z_1 = 0$, когда обе трещины сливаются в одну в плоскости $z = 0.5$, - как видно из (13), значения Q при $z_1 = 0$ и при $z_1 = 0.5$ - совпадают). Если взять $b = 100$ м, то данные таблицы соотвествуют радиусу контура питания $\tilde{R} = 1000$ м и радиусу трещины $\tilde{a} = 10$ м.

На рис. I приведена зависимость Q от z_1 по формуле (13) при разных значениях параметров. Как видно из рисунка, относительный прирост Q по сравнению с одной трещиной ($z_1 = 0$), расположенной в плоскости $z = 0.5$, с ростом R уменьшается. Значения Q при $z_1 = 0$ на рисунке полностью совпадают с результатами численного расчета в статье /2/ для случая одной трещины, расположенной в плоскости $z = 0.5$. Таким образом, наличие двух круговых трещин при гидроразрыве нефтяного пласта дает ощутимый прирост дебета эксплуатационной скважины по сравнению с одной круговой трещиной.

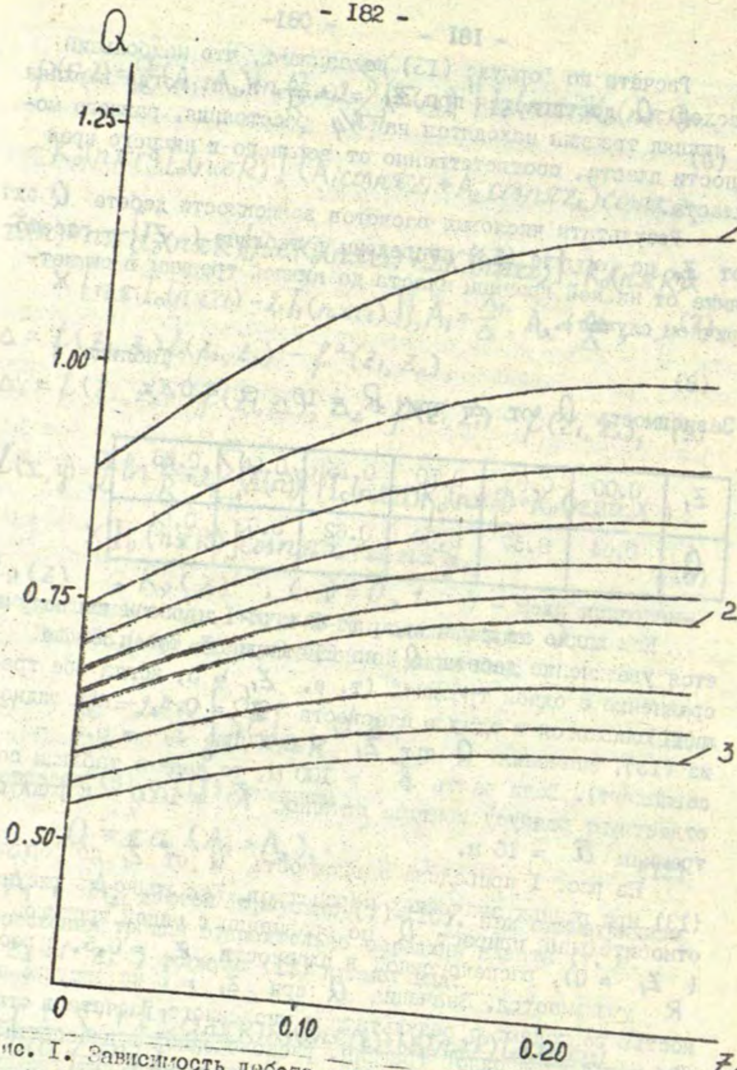


Рис. I. Зависимость дебета эксплуатационной скважины в симметричном случае от расположения трещин при $a = 0.1$: I – $R = 1$, 2 – $R = 4$, (с шагом $\Delta R = 0.5$ между кривыми), 3 – $R = 10$, (с шагом $\Delta R = 2$ между кривыми).

Замечание. Можно получить аналитическое решение данной задачи и при наличии произвольного числа n круговых горизонтальных трещин радиуса a, расположенных в плоскостях $z = z_1$, $z = z_2$, ..., $z = z_n$. Достаточно граничное условие (3) заменить условием:

$$r = a,\ 0 < z < 1:\ \frac{\partial^2 p}{\partial z^2} + 2\frac{\partial p}{\partial r} = \sum_{k=1}^{n} A_k \delta(z - z_k), \quad (14)$$

где A_k - неизвестные постоянные, которые определятся после решения задачи (2), (14), (4) из условий на границах трещин:

$$r = a,\ z = z_k,\ k = 1, 2, 3, \ldots, n:\ p = 1. \quad (15)$$

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Пыхачев Г.Б. Подземная гидравлика. - М.: Гостоптехиздат, 1961.- 387с.
2. Муравьев И.М., Журов В.И., Го-Тан-Пин. Об эффективности гидравлического разрыва пласта // Нефтяное хозяйство. - 1957.- №12.- С.31-41.
3. Антимиров М.Я. Применение интегральных преобразований для решения уравнений математической физики с граничными условиями смешанного типа // Латвийский математический ежегодник.- 1986.- Вып. 30.- С.9-24.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Результаты опубликованных в настоящем сборнике работ по математическому моделированию могут быть использованы для оптимизации выращивания полупроводниковых и полупрозрачных монокристаллов, путем повышения их химической однородности, минимизации плотности дислокаций, увеличения скорости выращивания путем применения вибрационной технологии, уменьшения времени охлаждения кристаллов. Разработанные математические модели и численные методы могут быть использованы при разработке пакетов прикладных программ для управления технологическими процессами.

СОДЕРЖАНИЕ

ПРИКЛАДНЫЕ ЗАДАЧИ МАТЕМАТИЧЕСКОЙ ФИЗИКИ

Сборник научных трудов

Рецензенты: М.Я.Антимиров, проф., д-р физ.-мат.наук;
Б.С.Польский, д-р физ.-мат.наук;
Ю.М.Гельфгат, д-р физ.-мат.наук.

Редакторы: Н.Авдонин, Н.Терентьева
Технический редактор С.Лининя
Корректор И.Балоде

Подписано к печати 07.06.I989. ЯТ 07283. Ф/б 60x84/I6.
Бумага №I. II,8 физ.печ.л. II,0 усл.печ.л. 8,8уч.изд.л.
Тираж 400 экз. Зак. № 694 Цена I р.40 к.

Латвийский государственный университет им. П.Стучки
226098 Рига, б. Райниса, I9
Отпечатано на ротапринте, 226050 Рига, ул.Вейденбаума,5
Латвийский государственный университет им. П.Стучки

РЕФЕРАТЫ

УДК 537.84 : 669.713.7

АНАЛИЗ ВТОРИЧНЫХ ТЕЧЕНИЙ В ЖИДКОСТИ ВБЛИЗИ ВИБРИРУЮЩЕЙ ПОВЕРХНОСТИ. Авдонин Н.А., Калис Х.Э., Жариков Е.В., Сторожев Н.Р.

Построена осредненная математическая модель, описывающая возможное возникновение и развитие вторичных течений вблизи вибрирующей поверхности. Описаны результаты экспериментальных исследований вторичных течений.

Ил.4, библиогр.10 назв.

УДК 519.63+536.42

МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССА ЗОННОЙ ПЛАВКИ ДВУХКОМПОНЕНТНОГО МАТЕРИАЛА. Апанович Ю.В.

В статье рассмотрена математическая модель зонной плавки квазибинарного полупроводникового соединения. Приведены результаты расчетов в условиях микрогравитации и в земных условиях.

Ил.7, библиогр.3 назв.

УДК 536.25

ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ПРОЦЕССА РАЗВИТИЯ ТЕРМОКОНВЕКЦИИ. Божко А.А.

Экспериментально исследуется развитие двух низших пространственных мод, соответствующих, с точностью до численных коэффициентов, температурным модам триплета Лоренца.

Ил.4, библиогр.4 назв.

УДК 536.25

УСТОЙЧИВОСТЬ ЗАКРИТИЧЕСКОГО ТЕЧЕНИЯ В БЕСКОНЕЧНОМ СЛОЕ С ДВОЙНОЙ ДИФФУЗИЕЙ ПРИ ТРЕХМЕРНЫХ ВОЗМУЩЕНИЯХ. Герценштейн С.Я., Калейс А.Я.

В статье рассматривается устойчивость двухмерных валов, возникающих в результате потери устойчивости неоднородного нагретого слоя двухкомпонентной жидкости. Устойчивость рассматривается по отношению к трехмерным возмущениям. Движение описывается трехмерными уравнениями Навье-Стокса в приближении Буссинеска. Задача решалась методом Бубнова-Галеркина. При численных расчетах получены три разных варианта: I) двухмерный режим устойчив; 2) двухмерный режим неустойчив и возникает другой стационарный режим; 3) возникает колебательный режим.

Ил.2, библиогр.7 назв.

УДК 532.516.5+536.25

РЕШЕНИЕ ЗАДАЧ ТЕПЛОВОЙ КОНВЕКЦИИ МЕТОДОМ ГАЛЕРКИНА: ТЕСТОВЫЕ РАСЧЕТЫ. Гельфгат А.Ю.

Метод Галеркина с координатными функциями, построенными в виде линейных комбинаций полиномов Чебышева, применяется для решения следующих тестовых задач: задачи устойчивости равновесия жидкости, нагреваемой снизу; задачи о стационарной термогравитационной конвекции в квадратной полости с изотермическими боковыми стенками; задачи о стационарной термокапиллярной конвекции в квадратной полости с изотермическими боковыми стенками; задачи определения порога устойчивости стационарного термогравитационного конвективного течения.

Полученные результаты сравниваются с численными и экспериментальными результатами других авторов.

Таб.5, библ.I6 назв.

УДК 536.25

КОНВЕКЦИЯ БИНАРНОЙ СМЕСИ В ЯЧЕЙКЕ ХЕЛЕ-ШОУ. Глухов А.Ф.

Для исследования конвекции бинарной смеси в ячейке Хеле-Шоу используется маломодовое приближение, полученное с помощью метода Галеркина.

Ил.4, библиогр.7 назв.

УДК 536.25

АНАЛИТИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ЦЕНТРОБЕЖНОЙ ТЕРМОКОНВЕКТИВНОЙ УСТОЙЧИВОСТИ ЖИДКОСТИ МЕЖДУ ДВУМЯ БЕСКОНЕЧНЫМИ ВРАЩАЮЩИМИСЯ ЦИЛИНДРАМИ В НЕВЕСОМОСТИ. Мартузан Б.Я., Опманис М.Я.

В статье рассматриваются вопросы термоконвективной устойчивости неравномерно нагретой жидкости между двумя бесконечными цилиндрами под действием центробежной силы в невесомости. Исследуется устойчивость решений двумерной системы уравнений Навье-Стокса в отношении возмущений периодических в осевом направлении. Приводятся результаты исследований, полученные с помощью системы аналитических вычислений REDUCE . Приводятся нейтральные кривые для различных толщин цилиндрического слоя и чисел Прандтля.

Ил.3, библиогр.8 назв.

УДК 518:517.949

ОБ ОДНОЙ РАЗНОСТНОЙ СХЕМЕ ДЛЯ НЕСТАЦИОНАРНОГО УРАВНЕНИЯ КОНВЕКТИВНОЙ ДИФФУЗИИ. Демченко Л.И., Тригуб А.С.

Библиогр.3 назв.

УДК 536.33:536.42

ВЛИЯНИЕ РАДИАЦИОННОГО ТЕПЛООБМЕНА НА ПРОЦЕСС ВЫРАЩИВАНИЯ ПОЛУПРОЗРАЧНЫХ КРИСТАЛЛОВ МЕТОДОМ ЧОХРАЛЬСКОГО. Апанович Ю.В., Юланов С.М.

Приводится постановка задачи выращивания полупрозрачных кристаллов гранатов методом Чохральского. Изучено влияние радиационной теплопроводности на форму фронта кристаллизации и распределение изотерм в системе расплав - кристалл.

Ил.4, библиогр.2 назв.

УДК 536.421.1+536.24

ИССЛЕДОВАНИЕ УСТОЙЧИВОСТИ ФРОНТА КРИСТАЛЛИЗАЦИИ НА ОСРЕДНЕННОЙ РАСЧЕТНОЙ МОДЕЛИ ТЕПЛОПЕРЕНОСА В ДВУХФАЗНОЙ СРЕДЕ. Гулбе М.Л., Авдонин Н.А.

В настоящей работе проведено численное исследование устойчивости роста кристалла на численной модели задачи о фазовом переходе. Использован метод введения параметра, характеризующего скорость объемного роста кристалла, и показана устойчивость процесса роста во времени даже при $\beta \to \infty$. Также найдены случаи устойчивого дендритного роста.

Ил.3, библиогр.6 назв.

УДК 519.671:536.242

АНАЛИЗ НЕСИММЕТРИИ В ТРЕХМЕРНОЙ ЗАДАЧЕ КРИСТАЛЛИЗАЦИИ. Козельская Н.В.

При выращивании монокристаллов методом Чохральского рассматривается задача определения влияния отклонения по углу φ температуры на стенках тигля на распределении температурного поля и градиентов в кристалле при различных частотах вращения кристалла и тигля. Дается постановка трохмерной задачи теплопереноса и численный метод ее решения.

Ил.4, библиогр.3 назв.

УДК 536.421+536.421.4+536.24

МАТЕМАТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ ТЕПЛОПЕРЕНОСА ПРИ ЗОННОЙ ПЛАВКЕ В ПОЛУПРОЗРАЧНОЙ АМПУЛЕ. Люмкис Е.Д., Мартузан Б.Я., Мартузане Э.Н., Сенченков А.С.

Предложена приближенная модель учета радиационного теплообмена через полупрозрачные ампулы для цилиндрически-симметричной системы. Проведены расчеты одномерной температурной задачи для модели ампульной зонной плавки. Показано, что учет поглощения излучения в кварцевой ампуле приводит к понижению максимальной температуры в зоне расплава и уменьшению ширины зоны.

Ил.3, библиогр.5 назв., табл.2.

УДК 621.791.01:536.45.001.57

ЧИСЛЕННЫЙ РАСЧЕТ РАСПРЕДЕЛЕННЫХ ХАРАКТЕРИСТИК СТОЛБА СВАРОЧНОЙ ДУГИ. Демченко В.Ф., Романенко А.В.

Излагается математическая модель процессов переноса тепла, вещества, импульса и заряда в плазме сварочной дуги, предлагается вычислительный алгоритм, приводятся результаты численных экспериментов.

Ил.3, библиогр.14 назв.

УДК 621.315.592.3.002.2.001.57

ОБ ОДНОМ МЕТОДЕ МОДЕЛИРОВАНИЯ ПЕРЕРАСПРЕДЕЛЕНИЯ ПРИМЕСИ В ПРОЦЕССЕ ЛОКАЛЬНОГО ОКИСЛЕНИЯ ПОЛУПРОВОДНИКА. Скрыль Ю.И.

Предлагается математическая модель для описания перераспределения примеси в полупроводнике при локальном окислении. Выводятся исходные уравнения для решения подобных краевых задач. Приводится пример расчета перераспределения бора в кремнии после ионной имплантации.

Ил.3, библиогр.9 назв.

УДК 519.6:532.546:626.862

ЗАМКНУТОЕ РЕШЕНИЕ ЗАДАЧИ О ПРИТОКЕ К ЩЕЛИ ДРЕНЫ. Мелгалвис А.Г.

Библиогр.1 назв.

УДК 519.6:539

МИНИМИЗАЦИЯ НАПРЯЖЕНИЙ И ПЛОТНОСТИ ДИСЛОКАЦИЙ В КРИСТАЛЛАХ, ВЫРАЩИВАЕМЫХ ИЗ РАСПЛАВА. Вахрамеев С.С., Козельская Н.В.

Производится математическое моделирование внешних тепловых условий, обеспечивающих в кристалле минимальные, на уровне критических, напряжения. Результаты расчетов совместной термо-упругопластической задачи показывают формирование малодислокационной структуры монокристаллов при задании оптимальных тепловых условий.

Ил.2, библиогр.4 назв.

УДК 539.373:661.863/868

РАСЧЕТ ВНУТРЕННИХ НАПРЯЖЕНИЙ В МОНОКРИСТАЛЛИЧЕСКИХ ПЛАСТИНАХ. Юшанов С.П.

Рассмотрена задача расчета внутренних напряжений в тонких прямоугольных пластинах, вырезаемых из цилиндрического кристалла в продольном направлении. Источником напряжений является квазипериодическое изменение состава монокристаллического соединения вдоль направления выращивания. Изложены методика и результаты численного расчета характера распределения внутренних напряжений для типичных видов полосчатой структуры монокристалла с кусочно-непрерывным распределением состава вдоль фронта кристаллизации.

Ил.4, библиогр.6 назв.

УДК 519.6:539.379.4.

НЕЯВНЫЕ ИТЕРАЦИОННЫЕ СХЕМЫ ДЛЯ СТАТИЧЕСКОЙ ЗАДАЧИ ТЕРМОУПРУГОСТИ В НАПРЯЖЕНИЯХ. Якушенок Р.А.

Предлагается построение неявной итерационной схемы и оператора для этой схемы для задачи термоупругости в напряжениях. Приводятся результаты сравнения эффективности счета по явной и неявной итерационной схемам для тестовой задачи. Приводятся также результаты уравнения эффективности счета на модели реального технологического эксперимента выращивания монокристалла GaAs при задании расчетного температурного поля.

Ил.I, библиогр.7 назв., табл.5.

80372

535

1 р. 40 к.