

О.В.Блакиевська, А.Б.Гуць, М.М.Полатайко
МАТЕМАТИЧНЕ МОДЕЛЮВАННЯ ПРОЦЕСУ НАГІСННЯ
НАПІВПРОВІДНИКОВИХ ПЛІВОК

Напівпровідникові плівки на пластини часто наносяться при горінні реагуючих газів. Швидкість зростання плівок і їх однорідність визначається характером протікання процесів тепломасопереносу в газових сумішах.

При математичному моделюванні цих процесів приймаємо, що реагуюча суміш складається із газоподібних реагентів і продуктів хімічної реакції, що дає змогу використати загальну систему рівнянь механіки реагуючих газів, тобто систему рівнянь аеротермохімії [1].

Додатково приймаємо наступні припущення:

1. У газовій суміші нема іншого макроскопічного руху крім того, який може бути викликаний наявністю градієнтів температури та концентрації. Тоді у рівняннях аеротермохімії можуть бути опущені доданки, що містять швидкість.

2. Можна знехтувати переносом енергії випромінювання, а також дифузійним термoeфектом.

3. Теплофізичні коефіцієнти системи постійні.

Нехай реакційноздатна суміш знаходиться в області $-\infty < x < \infty$; $0 < y < \infty$; $-l < z < l$. Тут x, y, z - декартові координати, $2l$ - товщина шару суміші, яка запалюється у площині $y=0$. Потік тепла викликає хімічну реакцію та поширення хвилі горіння по суміші газів. Після виходу з реакції реагенти та продукти реакції, що не згоріли, охолоджуються за рахунок теплообміну з пластинами $z = \pm l$. При цьому важкі молекули дифундують у напрямку пониження температури, а більш легкі - у протилежному напрямку.

Враховуючи цю інтерпретацію процесу, запишемо його математичну модель. Позначимо через t_0 час протікання процесу. Розіб'ємо цей час на два інтервали: початковий, тривалість якого $t_1 < t_0$, протягом якого відбувається хімічна реакція, та інтервал, на якому домінуючим тепломасообмінним процесом є термофорез.

При математичному моделюванні першого етапу процесу нехтуємо концентраційно- і термодифузійю, теплообміном з підкладками, а також нестационарністю поля тисків. Вважаємо, що суміш стехіометрична.

© Блакиевська О.В., Гуць А.Б., Полатайко М.М., 1992

Зміна компонентного стану суміші на цьому етапі може відбуватися внаслідок хімічної реакції в теплопровідності. Цей процес описується також системою рівнянь:

$$\rho_H \frac{\partial C_\alpha}{\partial t} = R_\alpha, \quad \alpha = 1, 2, \dots, \mu-1; \quad /1/$$

$$\rho_H C_p \frac{\partial T}{\partial t} = \lambda \frac{\partial^2 T}{\partial y^2} - \sum_{\alpha=1}^{\mu} C_p R_\alpha T; \quad /2/$$

$$\sum_{\alpha=1}^{\mu} C_\alpha = 1. \quad /3/$$

Тут ρ_H, T - початкова густина суміші та її температура, C_α - масова концентрація реагентів і продуктів реакції, загальною число яких дорівнює μ ; R_α - масова швидкість утворення; α - компонента в результаті хімічної реакції, яка визначається за законом Арреніуса, тобт

$$R_\alpha = k M_\alpha \exp\left(-\frac{E}{RT}\right) (\tilde{\nu}_\alpha - \nu_\alpha) \prod_{\beta=1}^{\mu} \left(\frac{C_\beta}{M_\beta}\right)^{\nu_\beta};$$

k - передекспоненціальний множник; M_α - молярна маса α - речовини; E - енергія активації; R - молярна газова стала; ν_α і $\tilde{\nu}_\alpha$ - стехіометричні коефіцієнти реакції; $C_p = \sum C_\alpha C_{p\alpha}$; $C_{p\alpha}$ - ізобарична теплоємність α - компонента, λ - коефіцієнт теплопровідності суміші.

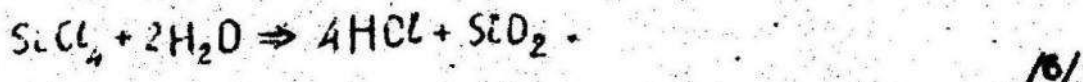
Дукані функції C_α і T повинні задовольняти умови:

$$C_\alpha|_{t=0} = C_{\alpha H}, \quad \alpha = 1, \mu-1; \quad T|_{t=0} = T_H; \quad /4/$$

$$-\lambda \frac{\partial T}{\partial y}|_{y=0} = Q(t); \quad \lim_{y \rightarrow \infty} \frac{\partial T}{\partial y} = 0, \quad /5/$$

де Q - задана величина теплового потоку; $C_{\alpha H}, T_H$ - початкові концентрації та температура.

Розглянемо процес, який ґрунтується на реакції



Тоді $\mu = 4$, $\nu_1 = 1$, $\nu_2 = 2$, $\nu_3 = \nu_4 = \tilde{\nu}_1 = \tilde{\nu}_2 = 0$, $\tilde{\nu}_3 = 4$, $\tilde{\nu}_4 = 1$. У цьому випадку з рівнянь /1/ та умов /4/ одержимо

$$C_2 = 1 - C_{1H} + \frac{2M_2}{M_1} (C_1 - C_{1H}); \quad C_3 = \frac{4M_3}{M_1} (C_{1H} - C_1); \quad C_4 = \frac{M_4}{M_1} (C_{1H} - C_1).$$

Отже, система рівнянь /1/-/3/ легко зводиться до системи рівнянь відносно двох невідомих функцій C і T .

Аналіз числового розв'язку задачі /1/-/3/ показує, що за винятком невеликого околу торця $y=0$ в суміші встановлюється на першому етапі процесу постійна гранична температура T_n і концентрація C_{4n} .

Розглянемо тепер математичну модель процесу після виходу суміші зі зони реакції в тій частині реактора, де шукані функції не залежать від поперечної координати y , тобто виключаючи околі торця. Цей процес описується системою двох рівнянь відносно температури і концентрації досліджуваного продукту реакції:

$$\frac{\partial \bar{T}}{\partial \bar{t}} = \bar{\alpha} \frac{\partial^2 \bar{T}}{\partial \bar{z}^2};$$

/7/

$$\frac{\partial \bar{C}}{\partial \bar{t}} = \bar{D} \left[\frac{\partial^2 \bar{C}}{\partial \bar{z}^2} + K^T \frac{\partial}{\partial \bar{z}} \left(\frac{1}{1+\bar{T}} \frac{\partial \bar{T}}{\partial \bar{z}} \right) \right].$$

/8/

Тут

$$\bar{T} = \frac{T - T_n}{T_n}; \bar{t} = \frac{t}{t_0}; \bar{z} = \frac{z}{l}; \bar{\alpha} = \frac{\lambda}{\rho_n C_{4n}}; K^T = \frac{D^T}{\rho_n D}; \bar{D} = \frac{D t_0}{l^2};$$

D - ефективний коефіцієнт дифузії досліджуваної речовини;

D^T - коефіцієнт термодифузії.

Шукані функції задовольняють умови

$$\bar{T}|_{\bar{t}=0} = \frac{T_n - T_n}{T_n} \equiv \bar{T}_0;$$

/9/

$$\frac{\partial \bar{T}}{\partial \bar{z}} \Big|_{\bar{z}=\pm 1} = \pm Bi \cdot \bar{T} \Big|_{\bar{z}=\pm 1},$$

/10/

$$C|_{\bar{t}=0} = C_{4n};$$

/11/

$$\frac{\partial C}{\partial \bar{z}} \Big|_{\bar{z}=\pm 1} = \pm C_0(t).$$

/12/

Тут $Bi = \alpha l / \lambda$; α - коефіцієнт тепловіддачі.

Функцію $C_0(t)$ вибираємо так, щоб виконувалась умова

$$\int_0^1 [(C(z,t) - C_{4n})] dz = 0.$$

/13/

Остання умова еквівалентна тому, що сумарна зміна маси розглядуваного продукту реакції дорівнює нулю, оскільки на даному етапі відсутні хімічні перетворення.

Враховуючи симетрію задачі відносно площини $x = 0$, тобто умову

$$\left. \frac{\partial c}{\partial x} \right|_{\bar{x}=0} = 0, \quad /14/$$

одержимо з рівняння /8/ і умови /13/ наступну умову

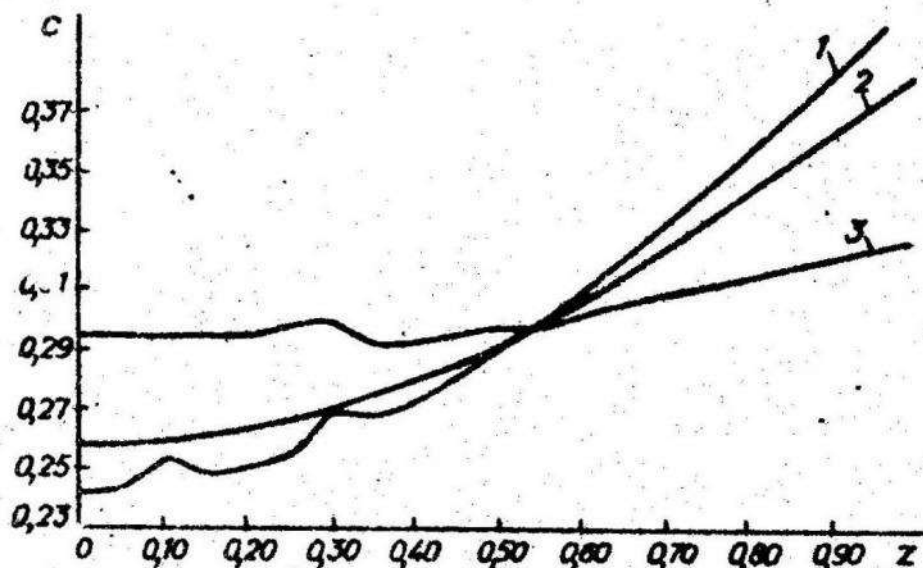
$$\left. \frac{\partial c}{\partial \bar{x}} \right|_{\bar{x}=1} = \left[\frac{\kappa^T}{1+\bar{T}} \frac{\partial \bar{T}}{\partial \bar{x}} \right]_{\bar{x}=1}. \quad /15/$$

Розв'язок задач /7/, /9/, /10/ можна знайти методом відокремлення змінних [2]. Він має вигляд

$$\bar{T} = \bar{T}_0 \sum_{n=1}^{\infty} \frac{2 \sin(n_1)}{n_1 + \sin(n_1) \cos(n_1)} \cos(n_1 \bar{x}) \exp(-n_1^2 \kappa \bar{t}).$$

Тут n_1 - корені рівняння $n = Bi \operatorname{ctg} n$.

Розв'язок задач /8/, /11/, /14/, /15/ знаходимо методом сіток з використанням стандартного математичного забезпечення ЕОМ. При інтенсивному теплообміні між пластиною і сумішшю, коли $Bi \gg 1$, швидкість осідання продукту реакції істотно залежить від термодифузійного співвідношення κ^T , яке тим більше, чим більша різниця між молекулярними масами компонентів.



Результати обчислень концентрації компонента SiO_2 при $T_0 = 1,18$; $\alpha \bar{t} = 0,5$; $\bar{D} = 1$ показані на рисунку. Криві 1,2,3 відповідають значенням $\kappa^T = 0,4$; $\kappa^T = 0,3$; $\kappa^T = 0,1$.

І. А лек сее в В.В., При шин А.М. Физическая газодинамика реагирующих сред. М., 1979. 2. И с а е в С.И. Теория теплообмена: Учебник для вузов /Под ред. А.И.Леонтьева. М., 1979.

Стаття надійшла до редколегії 12.02.91

УДК 19.92.

С.Г.Дещенко, Б.А.Остудін

ЗАСТОСУВАННЯ МЕТОДІВ ТЕОРІЇ НЕЧІТКИХ МНОЖИН ПРИ РОЗВ'ЯЗУВАННІ НЕКОРЕКТНИХ ЗАДАЧ КЛАСИФІКАЦІЇ

Існують різні способи розв'язування задач класифікації та оцінки їх якості. Алгоритми класифікації, описані в літературі, вимагають визначення наперед кількості класів і, як правило, залежать від порядку розгляду початкових даних, що, в свою чергу, ускладнює аналіз результатів. Початкові дані при цьому описують за допомогою кількісних ознак.

Ми пропонуємо алгоритм класифікації для малого об'єму початкових даних, коли не можна використати класичну теорію ймовірностей. При цьому результати виконання алгоритму не залежать від порядку перегляду початкових даних, які містять ознаки, отримані за допомогою шкали порядку та шкали найменувань. Зауважимо також, що розглядається ситуація, коли кількість класів є невідомою.

І. А н а л і з п р о б л е м и т а н е о б х і д н і в і д о м о с т і з т е о р і ї н е ч і т к и х м н о ж и н

Нехай M - множина початкових даних, яку необхідно розбити на класи подібних елементів. Припустимо, що $M = M_1 \times M_2 \times \dots \times M_n$, і $\text{card } M = \text{card } M_i = m$, $1 \leq i \leq n$ де m - потужність множини M та множини значень і-ї ознаки елементів $M - M_i$. Отже, $\forall x_p \in M$, $x_p = (x_{p_1}, x_{p_2}, \dots, x_{p_n})$, де $x_{p_i} \in M_i$. Нехай також r - міра подібності між елементами M , яка постає як відображення $M \times M \rightarrow R^+$ таке, що $r(x, y) = r(y, x)$, $\forall x, y \in M$; $r(x, x) = 1$, $\forall x \in M$.