

## АППРОКСИМАЦИЯ ПОЛЯ ЗАВИХРЕННОСТИ В БЕЗГРАНИЧНОМ ОБЪЕМЕ

*М.А.Басин, Н.В.Корнев*

Санкт-Петербургский государственный морской технический университет.  
190008, Санкт-Петербург, Россия

(Поступило в Редакцию 19 января 1994 г.)

При решении пространственных задач динамики жидкости возникает проблема аппроксимации поля вектора завихренности  $\omega = \nabla \times v$ , где  $v$  — вектор скорости потока. Особенно важна эта проблема при исследовании динамики жидкости методом вихревых частиц (vortex method) [1], основанном на лагранжевом описании потока жидкости. Развитие метода вихревых частиц связано с необходимостью исследования сильного нелинейного взаимодействия вихревых структур, растяжения вихрей (vortex stretching) и перезамыкания (vortex reconnection) вихревых линий.

Вектор завихренности  $\omega$  является соленоидальным

$$\nabla \omega = 0. \quad (1)$$

Условие (1) резко сужает класс векторных функций с помощью которых можно аппроксимировать поле завихренности  $\omega$ . Традиционным направлением в аппроксимации трехмерных вихревых полей является использование замкнутых вихревых нитей, что обеспечивает выполнение условия (1) в интегральном смысле. Разновидностями этого подхода являются метод вихревой решетки (vortex lattice method) [2], метод вихревых трубок (filaments method) [3] и метод вихревых панелей [4]. Несмотря на существенные достоинства метода замкнутых вихревых нитей, он обладает рядом недостатков, обусловленных сложной внутренней динамикой нитей, проблемой выбора “зерна” нити [1] для решения вопросов устойчивости и т.п. Это серьезно усложняет использование замкнутых нитей в качестве элементарных вихревых объектов при исследовании тонких вопросов, связанных с вихревым движением жидкости (растяжение, перезамыкание и хаотизация вихревых линий).

Другим направлением в аппроксимации пространственных вихревых объемов, который стал применяться лишь в последнее время, является метод вихревых клубков (вртонов) [1,5]. В методе вртонов вихревой объем разбивается на малые объемы, каждый из которых заменяется вихревой особенностью (вртоном). Такой подход является наиболее простым с вычислительной точки зрения и аналогичен различным вариациям двумерного метода дискретных вихрей, хорошо зарекомендовавшего себя при расчетах плоских вихревых течений. Введение вртона нарушает условие соленоидальности (1). Впервые корректный способ преодоления этого недостатка был указан Е.А. Новиковым [6] применительно к частному случаю сингулярных вртонов. Дальнейшее развитие метод получил в работе [7].

В настоящей работе представлено теоретическое обоснование нового метода аппроксимации вихревых объемов и обсуждаются вопросы построения алгоритма при реализации метода на компьютере. Основная идея метода состоит в нахождении преобразования, выделяющего в безграничном объеме соленоидальную составляющую в произвольном векторном поле. Это позволяет использовать для аппроксимации завихренности жидкости любые несоленоидальные векторные функции. Искомая соленоидальная часть выделяется, причем единственным образом, с помощью описываемого ниже преобразования.

Произвольное векторное поле, аппроксимирующее поле завихренности в неограниченном трехмерном евклидовом  $E^3$ -пространстве, может быть единственным образом представлено в виде суммы соленоидальной и градиентной частей

$$\omega_\alpha = \omega + \nabla\theta_\alpha, \quad (2)$$

где  $\omega$  — соленоидальная часть, удовлетворяющая уравнению (1).

Для вектора скорости справедливо выражение [8]

$$\mathbf{v} = [\nabla, \mathbf{A}] + \nabla\phi, \quad (3)$$

где векторный потенциал  $\mathbf{A}$  — определяется из решения уравнения Пуассона

$$\begin{aligned} \Delta \mathbf{A} &= -\omega, \\ \mathbf{A} &= -\frac{1}{4\pi} \int \frac{\omega}{|\mathbf{r} - \boldsymbol{\rho}|} dv, \end{aligned} \quad (4)$$

а  $\phi$  — скалярный потенциал.

Подставляя в (3) выражение (2) и (4), получим тождество

$$\mathbf{v} = \nabla \times \left( -\frac{1}{4\pi} \int \frac{\omega}{|\mathbf{r} - \boldsymbol{\rho}|} dv \right) + \nabla\phi \equiv \nabla \times \left( -\frac{1}{4\pi} \int \frac{\omega_\alpha}{|\mathbf{r} - \boldsymbol{\rho}|} dv \right) + \nabla\phi. \quad (5)$$

Таким образом, поля скоростей от обобщенной несоленоидальной завихренности и ее соленоидальной части эквивалентны.

Применив операцию ротора к левой и правой частям выражения (5), после ряда преобразований получим

$$\omega(\mathbf{r}) = \omega_\alpha(\mathbf{r}) + \frac{1}{4\pi} \nabla_r \int_E \omega_\alpha(\boldsymbol{\rho}) \nabla_r \frac{1}{|\mathbf{r} - \boldsymbol{\rho}|} dv. \quad (6)$$

Интеграл в выражении (6) является несобственным с особенностью такого же вида, как и особенность, имеющая место при двукратном дифференцировании объемного ньютоновского потенциала [8]. Выделяя главное значение интеграла, получим следующую формулу:

$$\omega = \frac{2}{3} \omega_\alpha + \frac{1}{4\pi} \int_{E^3} \frac{3(\mathbf{r} - \boldsymbol{\rho})(\omega_\alpha(\mathbf{r} - \boldsymbol{\rho})) - \omega_\alpha |\mathbf{r} - \boldsymbol{\rho}|^2}{|\mathbf{r} - \boldsymbol{\rho}|^6}, \quad (7)$$

где чертой сверху отмечено главное значение интеграла.

Функция  $\omega_\alpha$  может рассматриваться как несоленоидальная аппроксимация соленоидальной функции  $\omega$ , а соотношение (7) как соотношение эквивалентности между  $\omega$  и  $\omega_\alpha$ . Назовем  $\omega_\alpha$  первичной (несолоноидальной) завихренностью, а  $\omega$  — вторичной (соленоидальной) завихренностью. Все векторные поля  $\omega_\alpha$ , удовлетворяющие соотношению (7), образуют класс несоленоидальных ротонных векторных полей, эквивалентных в смысле удовлетворения (5)–(7) заданному полю ротора вектора скорости  $v$ . При этом поле вектора скорости, индуцируемое любым ротонным полем данного класса, одно и то же и не зависит от вида функции  $\nabla\phi$ .

Формулы (6), (7) позволяют решить задачу аппроксимации соленоидального поля  $\omega$  по заданным в ряде точек пространства значениям этого вектора с использованием несоленоидальных фундаментальных функций.

Если представить  $\omega_\alpha$  в виде

$$\omega_{\alpha k}(\mathbf{r}) = \sum_{i=1}^n \omega_{\alpha ik} \phi_{ik}(\mathbf{r}) \quad (8)$$

(по  $k$  суммирование не производится,  $k = 1 \dots 3$ ), где  $\omega_{\alpha i}$  — неизвестный вектор,  $\phi_i(\mathbf{r})$  — фундаментальная векторная функция,  $n$  — число вихревых элементов, то, подставляя (8) в (6), получим

$$\sum_{k=1}^3 \sum_{i=1}^n \omega_{\alpha ik} \left\{ \phi_{ik}(\mathbf{r}_j) \mathbf{e}_k + \frac{1}{4\pi} \nabla_{\mathbf{r}} \int_{E^3} \phi_{ik}(\boldsymbol{\rho}) \mathbf{e}_k \nabla_{\mathbf{r}} \frac{dv}{|\mathbf{r}_j - \boldsymbol{\rho}|} \right\} = \omega_j(\mathbf{r}_j), \quad (9)$$

где  $\omega_j$  — вектор, заданный в  $N$  узлах аппроксимации.

Соотношения (9) представляют собой систему  $3N$  алгебраических уравнений для неизвестных коэффициентов аппроксимации  $\omega_{\alpha ik}$  в случае, если  $n = N$ . Если  $n < N$ , то для аппроксимации могут быть использованы соотношения метода наименьших квадратов или другие вариационные методы аппроксимации функций.

После отыскания векторов  $\omega_{\alpha i}$  поле завихренности, удовлетворяющее условию (1), определяется в произвольной точке пространства по формуле

$$\omega(\mathbf{r}) = \sum_{k=1}^3 \sum_{i=1}^n \omega_{\alpha ik} \left\{ \phi_{ik}(\mathbf{r}) \mathbf{e}_k + \frac{1}{4\pi} \nabla_{\mathbf{r}} \int_{E^3} \phi_{ik}(\boldsymbol{\rho}) \mathbf{e}_k \nabla_{\mathbf{r}} \frac{dv}{|\mathbf{r} - \boldsymbol{\rho}|} \right\}. \quad (10)$$

Векторные функции  $\phi_i$  не обязательно должны быть соленоидальными и могут быть выбраны произвольно. Например в виде постоянных в заданном объеме и равных нулю вне этого объема, а также в виде рядов Фурье или ортогональных полиномов внутри заданного объема, возможны также аппроксимации в виде колоколообразных функций. Наиболее рационально выбирать их таким образом, чтобы вычисление интегралов, входящих в (9), (10), можно было проводить наиболее простым способом. Самым простым способом аппроксимации является представление функции  $\phi$  в виде обобщенной  $\delta$ -функции

Дирака с произвольным векторным коэффициентом и бесконечным значением в заданных точках  $\mathbf{r}_j$ , что соответствует вихрю Е.А. Новикова [6].

Скорость  $\mathbf{v}$  и завихренность  $\omega$ , индуцируемые вихрем, вычисляются по простым и экономичным формулам. Однако вихрь, как и все дискретные особенности, имеет сингулярность порядка  $1/r^2$  для индуцированной скорости и  $1/r^3$  для завихренности. Сингулярность вихря Новикова серьезно осложняет их использование в задачах аппроксимации (9), (10) и динамики сплошной среды. Поэтому в качестве реальных аппроксимационных функций целесообразно использовать функции, имеющие более гладкое распределение завихренности в заданном объеме.

Аналитическое вычисление интегралов в выражении (9) и получение простых формул возможно для финитных функций  $\phi_{ik}$ ,

$$\begin{aligned}\phi_{ik}(\mathbf{r}) &= 1 \quad \text{при } \mathbf{r} \in V_i, \\ \phi_{ik}(\mathbf{r}) &= 0 \quad \text{при } \mathbf{r} \notin V_i\end{aligned}\quad (11)$$

в случае, если в качестве объемов  $V_i$  выбраны отрезок, шар, эллипсоид, параллелепипед. Все эти случаи хорошо изучены в теории потенциала [9,10]. Для определения интегралов (9) можно использовать полученные в [9,10] формулы для вторых производных гравитационного потенциала. Ввиду их чрезвычайной громозкости приведем только наиболее простые выражения. Например, для прямолинейного вихревого отрезка циркуляции  $\Gamma$  единичной длины, расположенного вдоль оси  $Ox$ , имеем следующее выражение для вторичной завихренности:

$$\begin{aligned}\omega &= \Gamma \left\{ i\delta_x(\mathbf{r} - x\mathbf{i})|_{-0.5 < x < 0.5} + \right. \\ &+ \left. \frac{1}{4\pi} \left( \frac{\mathbf{j}(x + 0.5) + \mathbf{j}y + \mathbf{k}z}{((x + 0.5)^2 + y^2 + z^2)^{3/2}} - \frac{\mathbf{j}(x - 0.5) + \mathbf{j}y + \mathbf{k}z}{((x - 0.5)^2 + y^2 + z^2)^{3/2}} \right) \right\},\end{aligned}\quad (12)$$

где  $\delta_x$  — функция Дирака.

Несингулярным обобщением вихря Новикова является вихревой элемент, представляющий собой шар радиуса  $R$ , заполненный однородной завихренностью  $\omega_\alpha$ . Для такого обобщенного вихря, расположенного в начале координат, имеем

$$\begin{aligned}\omega &= \frac{2}{3}\omega_\alpha \quad \text{при } |\mathbf{r}| \leq R, \\ \omega &= \frac{3\mathbf{r}(\mathbf{r}\omega_\alpha) - |\mathbf{r}|^2\omega_\alpha R^3}{|\mathbf{r}|^5} \frac{R^3}{3} \quad \text{при } |\mathbf{r}| > R.\end{aligned}\quad (13)$$

Используя результаты теории ньютоновского потенциала [9], можно показать, что вихрь Новикова интенсивностью  $\gamma = 4/3\pi R^3\omega_\alpha$  в кинематическом отношении эквивалентен непрерывно заполненному однородной завихренностью  $\omega_\alpha$  шару радиуса  $R$  вне его объема. Выражения, аналогичные (12), (13), для эллипсоида и параллелепипеда ввиду их чрезвычайной громозкости не приводятся. На границах объемов  $V_i$ , заполненных однородной завихренностью, вектор  $\omega$  имеет разрыв.

С точки зрения практических расчетов наиболее перспективным является, на наш взгляд, использование экспоненциальных вихревых.

Рассмотрим радиально-неоднородное распределение первичной завихренности типа

$$\omega = \omega_\alpha e^{-r^3/\sigma^3}, \quad (14)$$

где  $\sigma$  — радиус ядра распределения.

Суммарная завихренность в объеме равна

$$\Gamma = \frac{4}{3} \pi \sigma^3 \omega_\alpha.$$

Таким образом, завихренность распределена в пространстве по закону (14) так, что суммарная завихренность равна суммарной завихренности шара радиуса  $R$ , заполненного однородной завихренностью  $\omega_\alpha$ . Векторный потенциал такого распределения равен

$$\Pi = \left[ \frac{1}{|\mathbf{r}|} \int_0^{|\mathbf{r}|} e^{-p^3/\sigma^3} \rho^2 d\rho + \int_{|\mathbf{r}|}^\infty e^{-p^3/\sigma^3} \rho d\rho \right] \omega_\alpha.$$

Скорость, индуцируемая экспоненциальным распределением завихренности, вычисляется по простейшей формуле

$$\mathbf{v} = \nabla \times \Pi = \frac{1}{3} \sigma^3 \frac{\omega_\alpha \times \mathbf{r}}{r^3} (1 - e^{-r^3/\sigma^3}). \quad (15)$$

Вторичная завихренность

$$\mathbf{a} = \frac{3\mathbf{r}(\mathbf{r}\omega_\alpha) - |\mathbf{r}|^2 \omega_\alpha}{|\mathbf{r}|^5} \frac{\sigma^3}{3} (1 - e^{-r^3/\sigma^3}) + e^{-r^3/\sigma^3} \frac{-\mathbf{r}(\mathbf{r}\omega_\alpha) + |\mathbf{r}|^2 \omega_\alpha}{r^2}. \quad (16)$$

Назовем вихревой элемент, определяемый формулами (15), (16), экспоненциальным вихревым, отметив тем самым сходство формул

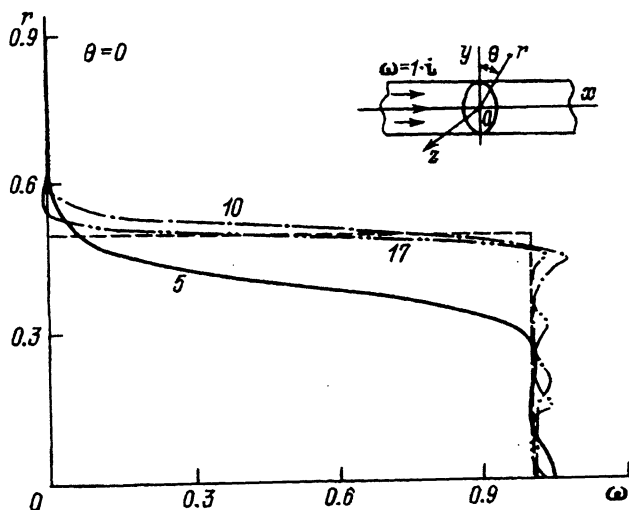


Рис. 1.

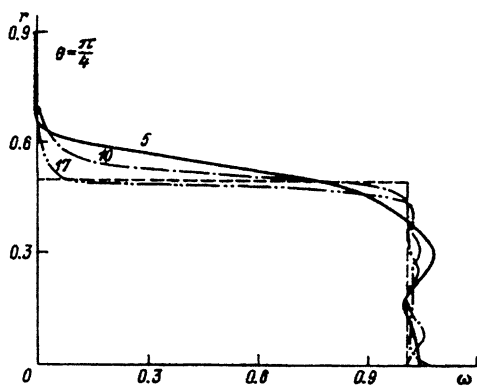


Рис. 2.

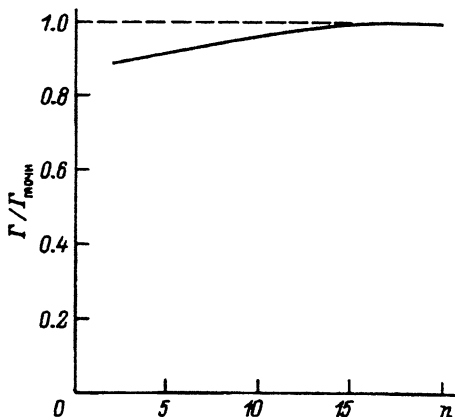


Рис. 3.

(13), (15) и (16). Поле скорости и вторичной завихренности экспоненциального вихря всюду регулярно и в отличие от рассмотренных выше элементов всюду непрерывно. Экспоненциальные вихри, не рассматривая проблему их соленоидальности, использовали Leonard, Mosher, Beale, Majda [11], [12].

На рис. 1-3 в качестве примера представлены результаты аппроксимации завихренности  $\omega = 1 \cdot r$  внутри вихревой трубки единичного диаметра. Участок трубки  $-b < x < b$  равномерно разбивался на ряд поперечных сечений. Контроль качества аппроксимации проводился в сечении  $x = 0$ , а параметр  $b$  выбирался столь большим, чтобы исключить в сечении  $x = 0$  влияние концов трубки. В каждом поперечном сечении на площади  $S = \{x = 0, r \leq 0.75, 0 \leq \theta \leq 2\pi\}$  в шахматном порядке размещались экспоненциальные вихри. В горизонтальном направлении шаг сетки был равен  $\Delta = 1.5/n$ , в вертикальном —  $\Delta\sqrt{3}/2$ , где  $n$  — параметр дискретизации. Таким образом, в плоскостях  $x = \text{const}$ , каждый вихрь, за исключением граничных, находился на одинаковом расстоянии  $\Delta$  от шести его ближайших соседей. Такая сетка использовалась в связи с тем, что, согласно формулам (15), (16), вихри обладают круговой симметрией в поперечных к его интенсивности  $\omega_\alpha$  плоскостях  $x = \text{const}$ . Расстояние между сечениями по оси  $x$  равнялось  $\sqrt{3}\Delta/2$ . Шахматная сетка в  $i$ -том сечении сдвигалась относительно сетки вихрей в  $i-1$  сечении с тем, чтобы круговая симметрия соблюдалась и в плоскостях  $y = \text{const}$ . Радиус ядра распределения  $\sigma$  был выбран равным  $\Delta/\sqrt{3}$ . Аппроксимационная соленоидальная завихренность определялась согласно выражениям (9), (10). Результаты для завихренности представлены на рис. 1, 2 при различных  $n$  (цифры у кривых). Для контроля сходимости аппроксимации в интегральном смысле определялась циркуляция вихревой трубки в сечении  $x = 0$  (рис. 3). Как следует из графиков, процесс сходится при больших  $n$  и предложенная модель удовлетворительно аппроксимирует ступенчатое распределение  $\omega$ , наиболее трудное для такого типа аппроксимации.

В результате работы создан и численно апробирован метод аппроксимации соленоидальных векторных полей. Метод может использоваться для решения задач гидродинамики и электродинамики.

- [1] Сарпкая Т. // Современное машиностроение. Сер. А. 1989. С. 1-60.
- [2] Белоцерковский С.М., Ништ М.И. Отрывное и безотрывное тонких крыльев идеальной жидкостью. М.: Наука, 1978. С. 352.
- [3] Leonard A. // J. Comput. Phys. 1980. Vol. 7. P. 289-335.
- [4] Джонсон // Ракетная техника и космонавтика. 1980. № 5. С. 23.
- [5] Saffman P.G., Meiron D.I. // Phys. Fluids. Vol. 29. P. 2373-2375.
- [6] Новиков Е.А. // ЖЭТФ. 1983. Вып. 3. С. 975-981.
- [7] Басин М.А. // Гидродинамика судна. Материалы по обмену опытом. Л.: Судостроение, 1990. С. 40-62.
- [8] Тихонов А.Н., Самарский А.А. Уравнения математической физики. М.: Наука, 1977.
- [9] Сретенский Л.Н. Теория ньютоновского потенциала. М.: Гостехиздат, 1946. С. 318.
- [10] Муратов Р.В. Потенциалы эллипсоида. М.: Атомиздат, 1976. С. 144.
- [11] Beale J.T., Maida A. // Math. Comp. 1982. Vol. 39. P. 1-27.
- [12] Beale J.T., Majda A. // Math. Comp. 1982. Vol. 39. P. 29-52.

04;06;12

Журнал технической физики, т. 64, в. 11, 1994

© 1994 г.

## ИЗМЕНЕНИЕ ЭЛЕКТРИЧЕСКИХ И ЛЮМИНЕСЦЕНТНЫХ ХАРАКТЕРИСТИК GaAs ПРИ ВЗАИМОДЕЙСТВИИ С ПЛАЗМОЙ SF<sub>4</sub>

К.С.Журавлев, В.А.Колосанов, В.Г.Плюгин, Т.С.Шамирзаев

Институт физики полупроводников СО РАН,  
630090, Новосибирск, Россия  
(Поступило в Редакцию 23 февраля 1994 г.)

Травление в плазме, содержащей фтор, широко используется для селективного удаления окиси кремния и нитрида кремния с поверхности полупроводниковых структур  $A_3B_5$  при изготовлении различных приборов. Для полного удаления диэлектрических пленок структуры обычно немного перетравливают, но при этом плазма некоторое время воздействует на полупроводник и в той или иной степени повреждает его [1,2].

Результаты исследований влияния обработки в плазме SF<sub>4</sub> на свойства поверхности пленок GaAs, представленные в работах [3,4], позволяли надеяться, что кратковременное ( $\leq 10$  с) воздействие плазмы на поверхность приборных структур для транзисторов с двумерным электронным газом (НЕМТ) не будет приводить к значительному изменению их параметров. Однако представленные в данной работе исследования показали, что даже кратковременное воздействие плазмы SF<sub>4</sub> на поверхность НЕМТ структур приводит к полной деградации свойств транзисторов. Для получения информации о причинах такой деградации в данной работе были изучены электрические и люминесцентные свойства структур, используемых для изготовления НЕМТ транзисторов, транзисторов с барьером Шоттки (ПТШ) и субмикронных слоев