УДК 536.244

С. И. Гращенков

ЧИСЛЕННЫЙ РАСЧЕТ РАСПРЕДЕЛЕНИЯ ТЕМПЕРАТУРЫ В СИСТЕМЕ ТВЕРДОЕ ТЕЛО — ГАЗ ПРИ МАЛЫХ ЧИСЛАХ КНУДСЕНА

Рассмотрен подход, позволяющий использовать разрывной метод Галёркина для расчета распределения температуры в системе твёрдое тело — газ с учетом скачка температур на границе раздела газа и твердого тела.

Ключевые слова: *разрывной метод Галёркина, микроэлектромеханические системы, малые числа Кнудсена.*

В связи с расширяющимся использованием микроэлектромеханических систем [1] возрастает роль технологий расчета распределений температур в устройствах микронных размеров, находящихся в газовой среде или содержащих газовые включения малых объемов. Особую роль при этом играют различные численные методы расчета, т. к. структура таких устройств может быть достаточно сложной для применения аналитических методов. При этом достаточно часто вследствие малости характерного размера задачи распределение температуры T можно считать квазистационарным и описывать уравнением Пуассона [2, 3]:

$$-\nabla(\kappa_p \nabla T) = f\,, \tag{1}$$

где κ_p — теплопроводность вещества в рассматриваемой точке, f — плотность мощности тепловых источников.

Если размеры исследуемой области и её подобластей много больше длины свободного пробега молекул газа, то распределение температуры во всей области можно считать непрерывным, и нахождение распределения температур в рассматриваемой области, по крайней мере, при заданных значениях температуры на её границах, в настоящее время является достаточно простой задачей. Однако когда в рассматриваемой области размеры подобластей твёрдых тел, граничащих с газом, становятся сравнимыми с длиной свободного пробега молекул газа, задача осложняется тем, что распределение температур уже нельзя считать непрерывным и необходимо учитывать, что на поверхности соприкосновения неравномерно нагретого газа и твёрдого тела имеется некоторая разность температур. При этом, если число Кнудсена (отношение средней длины свободного пробега молекул газа к характерной длине системы) не превышает 0,1, при нахождении распределения температур можно использовать подход, в котором в каждой подобласти используется континуальное описание, а температуры газа и твердого тела на границе их раздела связаны уравнением [4]

$$T_g - T_s = K_T (\nabla T)_g \mathbf{n}_g\,, \tag{2}$$

где T_g — температура газа на поверхности раздела сред, T_s — температура твердого тела на этой поверхности, $(\nabla T)_g$ — градиент температуры газа на границе раздела сред, $\mathbf{n}_g$ — вектор нормали к данной поверхности, проведенный от твердого тела в газ, K_T — коэффициент скачка температуры, значение которого вычисляется методами кинетической теории газов и по порядку величины равно средней длине свободного пробега молекул газа. В том случае, когда газ полностью ограничен поверхностью твёрдого тела и ищется распределение температуры в газе при заданном распределении T_s на поверхности твёрдого тела, нахождение соответствующего решения не представляет существенных сложностей [5]. Необходимость же учёта скачков температуры на границах раздела газа и твердого тела, находящихся внутри исследуемой области, существенным образом усложняет проведение соответствующих численных расчетов, так как фактически предполагает согласование решений для отдельных областей на границах их соприкосновения. В данной работе рассматривается возможность преодоления таких проблем на основе использования для таких расчетов разрывного метода Галёркина.

Рассмотрим некоторую область пространства, граница которой нигде не является границей раздела газа и твёрдого тела, и поэтому на ней скачки температуры отсутствуют. Будем считать, что на этой границе Γ_D известно распределение температуры T_D. Внутри области имеются границы Γ_S раздела сред, на которых необходимо учитывать наличие скачков температур. Будем полагать, что перепады температур внутри рассматриваемой области достаточно малы для того, чтобы теплопроводность κ_g газа можно было считать постоянной величиной. Кроме того, будем считать, что число Кнудсена достаточно мало для того, чтобы распределение температур T в рассматриваемой области можно было искать исходя из уравнения (1) с использованием условия (2) на границах разделов газа и твердого тела. Разобьем исследуемую область Ω на подобласти Ω_i (геометрические конечные элементы) в соответствии с выбранной расчетной сеткой, где i — номер области. При этом расчетная сетка должна быть выбрана так, чтобы границы разделов сред совпадали с некоторыми границами некоторых подобластей. Следуя традиционному подходу [6], умножим правую и левую части уравнения (1) на некоторую пробную гладкую в каждой из подобластей Ω_i функцию v, применим формулу Грина для каждой из подобластей и, полагая, что искомое распределение T также описывается внутри каждой подобласти гладкой функцией, получаем [7]:

$$\int_{\Omega} fv dV = \int_{\Omega} \kappa_p (\nabla T)(\nabla v) dV + \sum_i \int_{\partial\Omega_i} \left(-\kappa_p \nabla T\right)\Big|_{\Omega_i} \mathbf{n}_i v\Big|_{\Omega_i} dS\,. \tag{3}$$

Здесь $\partial\Omega_i$ — граница подобласти Ω_i, V — объём, если рассматривается трёхмерная геометрическая область, или площадь, если речь идет о двумерной задаче, S — площадь, если граница представляет собой двумерную поверхность, или длина, если речь идет о двумерной задаче, $\mathbf{n}_i$ — внешний по отношению к подобласти Ω_i вектор нормали к границе этой подобласти. Теперь осталось согласовать входящие в последнее слагаемое уравнения (3) потоки тепла так, чтобы получить искомое решение с заданными условиями на границе области, с требуемыми скачками на границах раздела газа и твёрдого тела и непрерывное на остальных границах раздела подобластей. Следуя распространенному подходу [6, 7], введем для этих целей оператор скачка и оператор среднего на границе. Пусть u некоторая гладкая в пределах каждой подобласти функция, u_{ext} — предельное значения u на границе текущего элемента области при стремлении к ней извне, т. е. предельное значение функции в соседней подобласти, а u_{int} — предельное значения u на границе текущего элемента области при стремлении к ней изнутри, т. е. предельное значение функции в текущей подобласти. Тогда оператор скачка $[]_i$ на границе $\partial\Omega_i$ подобласти Ω_i определяется выражением

$$[u]_i = u_{ext} - u_{\mathrm{int}}\,.$$

Оператор среднего $\{\}_i$ на границе $\partial\Omega_i$ определяется выражением

$$\{u\}_i = \frac{1}{2}(u_{ext} + u_{\mathrm{int}})\,.$$

Как следует из закона сохранения энергии, поток тепла через любую границу двух соседних подобластей непрерывен, поэтому на любой границе подобласти Ω_i с другой подобластью

$$[\mathbf{n}_i \kappa_p \nabla T]_i = 0\,. \tag{4}$$

Умножая правую и левую части уравнения (2) на теплопроводность κ_g газа и используя (4), получаем следующее условие на границе раздела газа и твёрдого тела:

$$\left(\kappa_p\left(\nabla T\right)\right)\Big|_{\Omega_i} \mathbf{n}_i = [T]_i \frac{\kappa_g}{K_T}\,. \tag{5}$$

Из (3)–(5), следуя подходу, изложенному в [7], получаем следующую слабую форму уравнения Пуассона с согласованными потоками на границах раздела твёрдого тела и газа:

$$\int\limits_{\Omega} \frac{fv}{\kappa_g} dV = \int\limits_{\Omega} \kappa\left(\nabla T\right)\left(\nabla v\right) dV + \sum_i \int\limits_{\partial\Omega_i / \Gamma_S} \left(-\kappa\ \nabla T\right)\Big|_{\Omega_i} \mathbf{n}_i\, v\Big|_{\Omega_i} dS +$$

$$+\frac{1}{2}\sum_i \int\limits_{(\partial\Omega_i \cap \Gamma_S)} \left[T\right]_i \left[v\right]_i \frac{1}{K_T} dS\,, \tag{6}$$

где $\kappa = \kappa_p / \kappa_g$.

Что же касается согласования потоков, позволяющего обеспечить непрерывность распределения температуры на остальных границах разделов подобластей и выполнение заданных условий на границе Γ_D, то для решения данной задачи существует целый ряд хорошо проработанных методов [6, 8] и, в принципе, мы можем воспользоваться любым из них. Для того, чтобы не усложнять изложение несущественными для цели данной работы деталями, воспользуемся методом Бауманна — Одена [9] как наиболее простым из них. Следуя этому подходу [7, 8], из (6) получаем следующую итоговую слабую форму:

$$\int_{\Omega} \frac{fv}{\kappa_g} dV = \int_{\Omega} \kappa (\nabla T)(\nabla v) dV +$$

$$+\frac{1}{2}\sum_i \int_{\partial\Omega_i / (\Gamma_D \cup \Gamma_S)} \left([v]_i \{\kappa \mathbf{n}_i \nabla T\}_i - [T]_i \{\kappa \mathbf{n}_i \nabla v\}_i \right) dS + \frac{1}{2}\sum_i \int_{(\partial\Omega_i \cap \Gamma_S)} [T]_i [v]_i \frac{1}{K_T} dS$$

$$+\sum_i \int_{(\partial\Omega_i \cap \Gamma_D)} \left(T\kappa\nabla v - \kappa v \nabla T - T_D \kappa \nabla v \right)\Big|_{\Omega_i} \mathbf{n}_i dS . \qquad (7)$$

Детальные описания различных вариантов нахождения численного решения поставленной задачи по её известной слабой форме можно найти в соответствующей литературе [10–13].

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства образования и науки Российской Федерации в рамках Государственного задания, проект 074.01.10.0210059611

Литература

1. MEMS: Introduction and Fundamentals / Ed. Mohamed Gad-el-Hak. FL: CRC Press, 2006. 488 p.
2. Малай Н. В., Плесканев А. А., Щукин Е. Р. // ЖТФ. 2006. Т. 76. Вып. 3. С. 25–29.
3. Яламов Ю. И., Хасанов А. С. // ЖТФ. 1998. Т. 68. Вып. 4. С. 1–6.
4. Лифшиц Е. М., Питаевский Л. П. Физическая кинетика. М.: Наука, 1979. С. 72.
5. Chaudhuri A., Guha C., Dutta T. K. // Chem. Eng. Technol. 2007. Vol. 30. No. 4. P. 425–430.
6. Girault V., Wheeler M. F. // Partial Differential Equations. Modelling and Numerical Simulation. Series: Computational Methods in Applied Sciences. Vol. 16. 2008. P. 3–26.
7. Carnes B. R., Copps K. D. Thermal Contact Algorithms in SIERRA Mechanics. Albuquerque: Sandia National Laboratories. 2008. 65 p.
8. Rivière B. Discontinuous Galerkin methods for solving elliptic and parabolic equations: theory and implementation. FL: SIAM. 2008. 190 p.
9. Baumann C. E., Oden J. T. // Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering. 1999. Vol. 175. No. 3. P. 311–341.
10. Hesthaven J. S., Warburton T. Nodal discontinuous Galerkin methods: algorithms, analysis, and applications. NY: Springer. 2007. 501 p.
11. Li B. Q. Discontinuous finite elements in fluid dynamics and heat transfer. London: Springer. 2006. 595 p.
12. Di Pietro D. A., Ern A. Mathematical aspects of discontinuous Galerkin methods. NY: Springer. 2011. 401 p.
13. Chen Z. Finite element methods and their applications. Berlin : Springer. 2005. 410 p.

S. Grashchenkov

NUMERICAL CALCULATION OF TEMPERATURE FIELD IN SOLID - GAS SYSTEM AT SMALL KNUDSEN NUMBER

The approach that allows to use Discontinuous Galerkin method for the calculation of the temperature field in the solid – gas system was considered taking into account temperature jump at the interface between gas and solid.

Key word: *Discontinuous Galerkin method, MEMS, small Knudsen number.*