

WAIT – множина номерів класів, які будуть обробляться;
q – кількість класів;

ІНІЦІАЛІЗАЦІЯ:

Переглянемо всі вершини і кожній призначимо номер класу рівний номеру мітки $v.class = v.mark$. Номер вершини розмістимо в клас з індексом рівним класу вершини.

Переглянемо всі дуги графа і створимо списки попередніх вершин.

У множину WAIT розмістимо всі початкові класи.

МЕТОД:

1. Поки WAIT не пусто вибираємо та вилучаємо і клас, який знаходиться останній у списку.

2. Для всіх вершин класу $V[i]$ знаходимо списки попередніх вершин та розбиваємо їх у відповідності з класом, якому належать.

3. Для кожного отриманого з пункту 2 класу $VT[k]$ виконуємо:

3.1 Якщо $|VT[k]| < > |V[k]|$ то розбиваємо клас $V[k]$

3.2 $q=q+1$

3.3 $V[q]=VT[k]$

3.4 $V[k]=V[k]-V[q]$

3.5 Якщо k не міститься у WAIT то поміщаємо у WAIT номер того класу потужність якого по попереднім вершинам менше.

Доведено, що результатом роботи алгоритму є класи еквівалентних вершин, тобто він вирішує завдання мінімізації. Визначена часова складність алгоритму.

При підрахунку тимчасової складності алгоритму вийшло два варіанти оцінки. Варіанти відрізняються

між собою мінімальним кроком виконання алгоритму взятим за одиницю часу.

У першому випадку за одиницю часу будемо вважати операції:

- операція додавання елемента у множину;
- операція видалення елемента з множини;
- порівняння двох чисел;
- інші одиничні операції.

У такому випадку асимптотична часова складність алгоритму дорівнює $O(m*n)$, де n – кількість вершин графу, m – кількість відміток у графі.

Якщо у якості мінімальної одиниці часу брати найпростіші операції, як операція порівняння, присвоєння, то асимптотична часова складність дорівнює $O(m*n*\log(n))$.

Складність алгоритму зростає за рахунок операцій з множинами, яким необхідно $O(\log(n))$ шагів.

Список літератури

- [1] Сапунов С.В. Анализ графов с помеченными вершинами: Дисс... канд. физ.-мат. наук: 27.09.07. – Донецк.: 2007. – 150 с.
- [2] R. Gentilini, C. Piazza and A. Policriti From Bisimulation to Simulation. Coarest partition problems // Dip. Di Matematica e Informatica – Universita di Udine Via Le Scienze, 206 – 33100 Udine – Italy.
- [3] А.Ахо, Дж. Хопкрофт, Дж. Ульман. Построение и анализ вычислительных алгоритмов. –М.: «МИР». 1979. – 235с.
- [4] Чепурко В.А. Минимизация ориентированных ациклических графов с отмеченными вершинами // Материалы VI международной научно-практической конференции «Математическое и программное обеспечение интеллектуальных систем». Днепропетровск, 12-14 ноября 2008 г. Днепропетровск.: 2008. – С. 331 – 332.

Чисельне моделювання функції розподілу електронів за енергіями для рівняння Больцмана та інших параметрів плазми розряду

Василь Чигін, Павло Горун

Кафедра прикладної математики та фундаментальних наук, Національний університет “Львівська політехніка”, УКРАЇНА, м.Львів, вул. Митрополита Андрея 5, E-mail: vchygin@polynet.lviv.ua, Pawlissimo@gmail.com

Abstract – using processed numerical methods, were founded and compared the electron energy distribution functions for Boltzmann equation, that was represented in stationary case, electronic processes rates, power loss coefficients and other parameters of negative corona in the mixture of Ar-Kr-Xe and Cl₂.

Ключові слова – чисельне моделювання, коронний розряд, рівняння Больцмана.

I. Вступ

Проводилося чисельне моделювання кінетичного рівняння Больцмана для функції розподілу електронів

за енергіями (ФРЕЕ), на підставі якого отримані транспортні характеристики електронів плазми, а також питомі втрати потужності розряду при різних значеннях приведеної напруженості електричного поля. Моделювання параметрів плазми виконане для чотирьохкомпонентної суміші (Ar-Kr-Xe-Cl₂) газів, найбільш оптимальної для роботи багатохвильового джерела УФ-ВУФ випромінювання. Проведений якісний аналіз найбільш важливих електронних процесів в багатокомпонентній плазмі, які визначають механізми сумісного утворення монохлоридів аргону, ксенону і криптону в поперечному розряді.

II. Чисельне моделювання

Інформацію про параметри плазми зазвичай отримують шляхом розв'язування кінетичного рівняння Больцмана для ФРЕЕ. Повне рівняння Больцмана для знаходження ФРЕЕ $f_0(\varepsilon)$ у двочленному наближенні та одновимірному випадку взято з [1]:

$$\frac{1}{n_e N} \sqrt{\frac{m}{2e}} \varepsilon^{1/2} \frac{\partial(n_e f_0)}{\partial t} - \frac{1}{3} \left(\frac{E}{N} \right)^2 \frac{\partial}{\partial \varepsilon} \left[\frac{\varepsilon}{\sum_j \frac{N_j}{N} Q_{Tj}} \frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon} \right] - \quad (1)$$

$$-\frac{\partial}{\partial \varepsilon} \left[2 \sum_j \frac{N_j}{N} \frac{m}{M_j} Q_{Tj} \varepsilon^2 \left(f_0 + T \frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon} \right) \right] = S_{eN}$$

де ε – енергія електрона, $T = \frac{kT_e}{e}$ – температура газу, N_j, M_j, Q_{Tj} – концентрації атомів і молекул, їх маси та ефективні перерізи транспортного розсіювання, m, e – маса та заряд електрона, E – напруженість електричного поля в розряді, N – повна концентрація часток робочої суміші при даному p – тиску газової суміші. Ця функція вказує, яка відносна частина електронів знаходиться в околі їх енергії ε .

Умова нормування функції:

$$\int_0^{\infty} \varepsilon^{1/2} f_0(\varepsilon) d\varepsilon = 1. \quad (2)$$

Права частина рівняння S_{eN} – інтеграл зіткнення, який описує непружні взаємодії електронів з атомами і молекулами.

$$S_{eN} = \sum_j \frac{N_j}{N} \left[\begin{aligned} & (\varepsilon + \varepsilon_j) Q_j(\varepsilon + \varepsilon_j) f_0(\varepsilon + \varepsilon_j) \\ & - \varepsilon Q_j(\varepsilon) f_0(\varepsilon) \end{aligned} \right] - \quad (3)$$

$$- \sum_j \frac{N_{at}}{N} \varepsilon Q_{at j}(\varepsilon) f_0(\varepsilon) + \sum_j \frac{N_{det j}}{N} \varepsilon Q_{det j}(\varepsilon) f_0(\varepsilon),$$

Відомо, що

$$f_0(\infty) = 0. \quad (4)$$

За рахунок членів непружних зіткнень (3) шукана функція $f_0(\varepsilon)$ у рівнянні (1) входить при різних значеннях аргументів. В загальному випадку рівняння (1) є нестационарним параболічним диференціальним рівнянням другого порядку в частинних похідних зі

змінними коефіцієнтами та аргументами у відхиленнях.

Для спрощення розглядався стаціонарний випадок рівняння (1).

Задача (1)–(4) розв'язувалася не на півосі $(0, \infty)$, а на відрізку $[\varepsilon_0, \varepsilon_{\max}]$, де $\varepsilon_0 > 0$,

$$\varepsilon_{\max} = \frac{M}{2m} \frac{e^2 E^2}{m v_m^2} - \text{максимальна енергія, яку може}$$

мати електрон¹.

Ввівши рівномірну сітку

$$\bar{\omega}_h = \left\{ x_i = ih - \frac{h}{2}, \quad i = \overline{0, N}, \quad h = \frac{\varepsilon_{\max}}{N} \right\} \quad (5)$$

та використовуючи такі різницеві оператори

$$y_{\bar{x},i} = \frac{y_{i+1} - 2y_i + y_{i-1}}{h^2}; \quad y_{\bar{x},i} = \frac{y_{i+1} - y_{i-1}}{2h};$$

методом заміни похідних різницевиими схемами, отримали систему рівнянь з невідомими, привівши яку до триточкового шаблону, розв'язували методом прогонки.

Однак через наявність у правій частині рівняння (1) аргументів у відхиленнях, наближений розв'язок шукався методом послідовних наближень таким чином, що на кожному кроці ітерації використовувалося знайдене на попередньому кроці значення функції (враховуючи відхилення). Ітераційний процес продовжувався доти, доки не була досягнута наперед задана точність.

Значення функцій Q_{Tj} (ефективні перерізи транспортного розсіювання), де j – j -а компонента у суміші газів, відомі з літератури (в основному отримуються експериментальним шляхом) і задаються таблично. Припускаючи, що функції Q_{Tj} є лінійними між заданими точками, отримуємо набір кусково лінійних функцій. Проте для забезпечення їх диференційовності необхідно, щоб функції Q_{Tj} мали хоча б перший порядок гладкості. Для цього задані Q_{Tj} замінювали ермітовими сплайнами [2].

III. Результати

У зв'язку з тим, що більшість програм, що використовуються для розрахунків ФРЕЕ та електронних кінетичних коефіцієнтів (ЕКК) в плазмі ексимерних лазерів (чи ламп) та доступні для вільного використання, мають значні програмні обмеження (зокрема на кількість компонент у суміші, недостатня кількість даних про ефективні перерізи електронних процесів, застарілі та неповні бази даних), була розроблена програма чисельного моделювання кінетичного рівняння Больцмана для ФРЕЕ.

¹Поняття максимальної енергії електрона дає елементарна теорія. І хоча насправді є електрони з енергіями більшими та меншими ε_{\max} , таке наближення є допустимим [1].

На Рис.1 наведено результати моделювання ФРЕЕ для суміші Ar-Kr-Xe-Cl₂ для різних значень приведеної напруженості поля E/p.

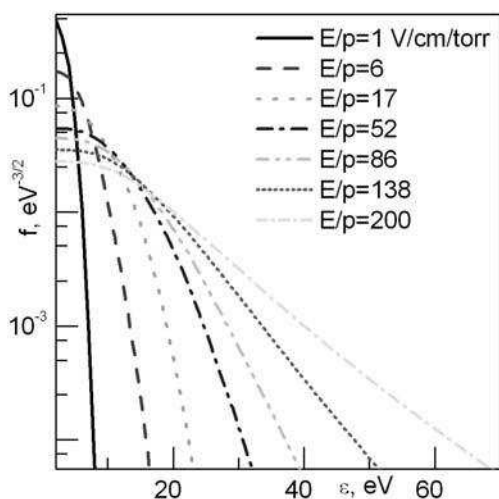


Рис. 1. ФРЕЕ для суміші Ar-Kr-Xe-Cl₂ для різних значень приведеної напруженості поля E/p.

Контрольні розрахунки проводилися з використанням програми BOLSIG+ [4], вільно поширеної в інтернеті, які порівнювалися з отриманими резуль-

татами. ЕКК розраховувалися за формулами, наведеними в огляді [5].

Висновок

Отримані в результаті чисельного моделювання параметри плазми якісно пояснюють розподіл випромінювання в спектрі та можуть бути використаними при розрахунках кінетики процесів та інших вихідних характеристик багатохвильової ексимерно-галогенної лампи. А це робить їх перспективними для використання у фотохімії, мікроелектроніці та біотехнології.

Література

- [1] Райзер Ю.П. Физика газового разряда. М.:Наука, 591с.
- [2] Самойленко А.М., Ронто Н.И. Численно-аналитические методы в теории краевых задач для ОДУ. Киев: Наукова думка, 1985. 224 с.
- [3] А.Д. Мышкис. Линейные дифференциальные уравнения с запаздывающим аргументом. М.: Наука, 1972. 352 с.
- [4] <http://www.siglo-kinema.com>.
- [5] Словецкий Д.И. Дерюгин А.А. // Химия плазмы: Сб. ст. Вып.13. под ред Смирнова Б.М. М.: Энергоатомиздат, 1987. С.240-277.

Моделювання розподілу температурного поля та дифузії ніобію при лазерному легуванні сталі 12X17T

Наталя Щербовських, Зоя Дурягіна

Кафедра інженерного матеріалознавства та прикладної фізики, Національний університет "Львівська політехніка", УКРАЇНА, м.Львів, вул.С.Бандери, 12, E-mail: shcherbovskyhnat@ukr.net

Abstract. Was simulation the distribution field temperature and the niobium diffusion for lazer alloying stainless steels 12X17T.

Ключові слова – diffusion, field temperature, computer engineering, steel.

I. Вступ

Керування розподілом температурного поля та дифузіїю легувальних елементів за глибиною зразка під час лазерної обробки сталей є одним із визначальних факторів інженерії поверхні. Найзручніший метод вивчення розподілу температурного поля та дифузіїю легувальних елементів за глибиною оплавленої зони – метод математичного моделювання.

II. Побудова математичної моделі

Метою роботи була побудова математичної моделі, яка описує процес розподілу температурного поля та дифузіїю легувального елементу у досліджуваній зразку та отримання відповідних графічних залежностей. Об'єкт дослідження – бар'єрні шари, створені на сталі 12X17T лазерним легуванням ніобієм.

Спочатку обмежилися моделюванням розподілу температурного поля за глибиною оплавленої зони при лазерному легуванні ніобієм за наступним алгоритмом: постановка задачі; формулювання припущень та граничних умов; формалізація математичної моделі; тестування комп'ютерної програми з виводом на інтерфейс графічних залежностей розподілу температурного поля за глибиною оплавленої зони та дифузіїю легувального елементу; визначення адекватності побудованої математичної моделі.

Для опису процесу теплопередачі у досліджуваному зразку приймали такі припущення:

- зразок у першому наближенні ізотропний;
- лазерний промінь сканує поверхню зразка миттєво, тобто дія зовнішнього джерела тепла здійснюється одночасно та миттєво на усі фрагменти поверхні;
- на всі фрагменти поверхні припадає однакова частка тепла;
- зразок теплоізований, тобто, теплообмін між боковими поверхнями зразка та атмосферою не відбувається.