

УДК 621.315.592 : 548.55 + 519.244.2

Т. В. Авдеенко, В. П. Захаров, И. Л. Озерных

(Новосибирск—Обнинск)

**ОБ ОПТИМАЛЬНОМ ПЛАНИРОВАНИИ НАБЛЮДЕНИЙ
ДЛЯ ОПРЕДЕЛЕНИЯ ПОЛОЖЕНИЯ
И ФОРМЫ ФРОНТА КРИСТАЛЛИЗАЦИИ**

На основе модельной постановки построены локальные D -оптимальные точные планы размещения датчиков в технологических установках для получения монокристаллов методом направленной кристаллизации. В качестве функций отклика были приняты распределение температуры либо ее производная на стенке рабочей капсулы. В результате исследования показана принципиальная возможность осуществления термического способа пространственного контроля поверхности кристаллизации.

На совершенстве получаемых из расплавов монокристаллов полупроводниковых материалов существенно сказывается кривизна поверхности кристаллизации, реализующаяся в ходе технологического процесса [1]. В силу данного обстоятельства при создании автоматизированных систем контроля и управления технологическим процессом значительный интерес представляет разработка оптимальных по информационным характеристикам способов оперативного контроля геометрических характеристик (положение и форма) этой поверхности.

Целью настоящей работы является исследование возможностей решения данной задачи для метода направленной кристаллизации по результатам обработки показаний термодатчиков, установленных на внешней поверхности капсулы с рабочим материалом.

В качестве математической модели объекта управления при выполнении настоящего исследования была принята следующая система уравнений:

$$\rho_k C_{pk} V_* \frac{\partial T_k}{\partial z} = \frac{1}{r} \left[\frac{\partial}{\partial r} \left(\lambda_k r \frac{\partial T_k}{\partial r} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(\lambda_k r \frac{\partial T_k}{\partial z} \right) \right], \quad k = \overline{1, 3}; \quad (1)$$

$$T_1 \Big|_{z=\Phi(r)} = T_2 \Big|_{z=\Phi(r)};$$

$$\left[\left(\lambda_1 \frac{\partial T_1}{\partial z} - \lambda_2 \frac{\partial T_2}{\partial z} \right) - \frac{\partial \Phi}{\partial r} \left(\lambda_1 \frac{\partial T_1}{\partial r} - \lambda_2 \frac{\partial T_2}{\partial r} \right) \right] \Big|_{z=\Phi(r)} = L \sqrt{1 + (\partial \Phi / \partial r)^2}; \quad (2)$$

$$T_k \Big|_{r=R} = T_3 \Big|_{r=R}, \quad \lambda_k \frac{\partial T_k}{\partial r} \Big|_{r=R} = \lambda_3 \frac{\partial T_3}{\partial r} \Big|_{r=R}, \quad k = \overline{1, 2}; \quad (3)$$

$$\lambda_1 \frac{\partial T_1}{\partial z} \Big|_{z=0} \equiv \lambda_3 \frac{\partial T_3}{\partial z} \Big|_{z=0} \equiv \lambda_2 \frac{\partial T_2}{\partial z} \Big|_{z=H} \equiv \lambda_3 \frac{\partial T_3}{\partial z} \Big|_{z=H} = 0; \quad (4)$$

$$\left[\lambda_3 \frac{\partial T_3}{\partial r} - \beta_0 (T_0 - T_3) \right] \Big|_{r=R+\delta R} = 0; \quad (5)$$

$$\rho_1 V_* = J \sqrt{1 + (\partial \Phi / \partial r)^2}, \quad (6)$$

где T — температура; Φ — поверхность кристаллизации; V_* — скорость кристаллизации; $J = J(\Delta T)$ — интенсивность фазового превращения; $\Delta T = T_1|_{z=\Phi(r)} - T_*$, T_* — температура кристаллизации; ρ — плотность; C_p — теплоемкость; λ — теплопроводность; L — скрытая теплота кристаллизации; r, z — оси цилиндрической системы координат; R — внутренний радиус капсулы; δR — толщина стенки капсулы; H — размер области моделирования по оси z ; β_0 — коэффициент теплоотдачи; T_0 — температура внешней среды; нижним индексом помечены характеристики отдельной фазы (1 — кристалл, 2 — расплав, 3 — капсула).

Данная модель состояния имеет тип задачи Стефана и описывает осесимметричные стационарные режимы кристаллизации с неравновесным фазовым переходом в приближении теплопроводности (пренебрежимо малое влияние конвекции в расплаве на тепловое поле) в цилиндрической области $\Omega = [0, R + \delta R] \times [0, H]$.

В соответствии с целью предпринятого исследования и опираясь на аппарат теории оптимального эксперимента [2], решим задачу вычисления координат наиболее информативных (т. е. таких, измерения в которых дают максимум информации о переменной состояния Φ) точек на поверхности Γ , определяемой уравнением $r = R + \delta R$, при ограниченном их числе.

Аппроксимируем истинную (в рамках принятой модели (1)–(6)) поверхность кристаллизации Φ регрессией

$$\tilde{\Phi}(\theta, r) = \sum_{i=1}^m \theta_i b_i(r) \quad (7)$$

в полиномиальном базисе $B_1^m = \left\{ 1, 1 - \left(\frac{r}{R}\right)^2, \dots, 1 - \left(\frac{r}{R}\right)^m \right\}$ (линейная базисная функция исключена в силу естественного требования $\partial \Phi / \partial r|_{r=0} = 0$).

Коэффициенты разложения (7) будем рассматривать в качестве параметров, оценки которых, полученные по результатам обработки измерений откликов объекта в точках оптимальных планов (т. е. в наиболее информативных точках), позволяют приближенно характеризовать положение и форму фронта кристаллизации.

В качестве наблюдаемых функций отклика в настоящем исследовании примем значения температуры и осевой компоненты ее градиента на поверхности Γ .

Для достижения поставленной цели нами были разработаны алгоритмы построения D -оптимальных точных планов наблюдений.

Критерий D -оптимальности формулируется следующим образом:

$$\varepsilon^* = \underset{\varepsilon}{\operatorname{argmax}} |M(\varepsilon)|,$$

где ε — точный план наблюдений, под которым понимается совокупность точек χ_i , $i = 1, \dots, n$, в которых проводятся однократные измерения: $\varepsilon = \{\chi_1, \chi_2, \dots, \chi_n\}$, $|M(\varepsilon)|$ — определитель информационной матрицы точного плана

$$M(\varepsilon(\chi)) = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n M(\chi_i) = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n f(\chi_i) f^T(\chi_i),$$

$f(\chi) = \left(\frac{\partial y}{\partial \theta_1}, \dots, \frac{\partial y}{\partial \theta_m} \right)$ — вектор чувствительностей (производных функции отклика y по параметрам $\theta_1, \theta_2, \dots, \theta_m$).

Применительно к вышеизложенной постановке задачи были опробованы прямой и двойственный алгоритмы построения точных D -оптимальных планов. Прямой метод предполагает непосредственный поиск максимума определителя информационной матрицы по координатам точек плана. Решение экстремальной задачи производится методом градиентного спуска. На каждом шаге итерационного алгоритма для текущего плана $\varepsilon = \{\chi_1, \chi_2, \dots, \chi_n\}$ вычисляются координаты вектор-градиента по формуле [3]

$$g_i = \frac{\partial}{\partial \chi_i} (\ln |M(\varepsilon)|) = \text{Sp} D(\varepsilon) \left(f(\chi_i) \frac{\partial}{\partial \chi_i} f^T(\chi_i) + \frac{\partial}{\partial \chi_i} f(\chi_i) f^T(\chi_i) \right).$$

Затем производится одномерная максимизация функционала $|M(\varepsilon)|$ в направлении вектора $g = (g_1, \dots, g_n)^T$ и переход к новому плану $\tilde{\varepsilon} = \{\tilde{\chi}_1, \tilde{\chi}_2, \dots, \tilde{\chi}_n\}$: $\tilde{\chi}_i = \chi_i + g_i s$, $i = \overline{1, n}$, где s — величина, доставляющая максимум функционалу.

Двойственный подход предполагает решение некоторой другой, как правило, более простой задачи, приводящей к тому же результату, что и прямой поиск экстремума. При этом удается избавиться от геометрической прогрессии зависимости времени решения задачи от размерности (числа точек в плане).

В качестве двойственного метода построения точных D -оптимальных планов был использован итерационный метод, опирающийся на следующую теорему [4]:

Теорема. В точках χ_i^* ($i = 1, \dots, n$) спектра точного D -оптимального плана $\varepsilon^*(n)$ выполняется неравенство

$$\lambda(\chi_i^*) d(\chi_i^*) \geq \lambda(\chi) d(\chi) - \lambda(\chi) \lambda(\chi_i^*) (d(\chi_i^*) d(\chi) - d^2(\chi_i^*, \chi)),$$

где

$$d(\chi) = d(\chi, \varepsilon^*(n)) = f^T(\chi) D(\varepsilon^*(n)) f(\chi),$$

$$d(\chi_i, \chi_j) = d(\chi_i, \chi_j, \varepsilon^*(n)) = f^T(\chi_i) D(\varepsilon^*(n)) f(\chi_j);$$

$D(\varepsilon^*(n))$ — дисперсионная матрица ненормированного точного плана:

$$D(\varepsilon^*(n)) = M^{-1}(\varepsilon^*(n)), \quad M(\varepsilon^*(n)) = \sum_{i=1}^n M(\chi_i^*); \quad \chi \text{ принадлежит области, в которой возможны измерения; } \lambda(\chi) \text{ — функция эффективности.}$$

Разработанный на основании данной теоремы итерационный алгоритм состоит в следующем. На очередном шаге для каждой точки χ_i текущего плана $\varepsilon(n)$ осуществляется поиск величины

$$\Delta_{\max}(\chi_i) = \max_{\chi} \Delta(\chi_i, \chi),$$

где

$$\Delta(\chi_i, \chi) = \lambda(\chi) d(\chi, \varepsilon(n)) - \lambda(\chi) \lambda(\chi_i) (d(\chi, \varepsilon(n)) d(\chi_i, \varepsilon(n)) - d^2(\chi_i, \chi, \varepsilon(n))) - \lambda(\chi_i) d(\chi_i, \varepsilon(n)), \quad i = \overline{1, n}.$$

Затем отыскивается максимальное значение среди $\Delta_{\max}(\chi_i)$, $i = \overline{1, n}$:

$$\Delta_{\max \max} = \max_{i=1, \dots, n} \{\Delta_{\max}(\chi_i)\}.$$

Переход к следующему плану осуществляется путем переноса одного измерения из точки $\chi_{i'}$, где i' доставляет максимум $\Delta_{\max \max}$, в точку $\tilde{\chi}$, доставляющую максимум $\Delta_{\max}(\chi_{i'})$. Остальные точки плана χ_i , $i \neq i'$, остаются неизменными. Итерационный процесс заканчивается, если $\Delta_{\max \max}$ достаточно мал.

Заметим, что определение точек переноса измерения $\tilde{\chi}$ и $\chi_{i'}$ обеспечивает максимальное увеличение определителя информационной матрицы на очередном шаге алгоритма.

Сравнение обоих подходов поиска точных планов показывает, что более эффективным является двойственный метод. Это определяется в первую очередь тем, что он сходится к оптимальному плану почти при любом начальном приближении ε^0 . Градиентный же метод довольно чувствителен к выбору начального плана, так как функционал не является выпуклым по координатам точек плана. Другим достоинством двойственного подхода является меньшая по сравнению с прямым зависимость времени решения от числа точек плана.

Реализация разработанных алгоритмов предполагает знание функций чувствительности, которые в решаемой задаче ввиду нелинейности модели состояния могут быть рассчитаны исключительно численным путем. В силу указанной причины имеется и зависимость функций чувствительности, а следовательно, и координат точек оптимальных планов, от значений оцениваемых параметров, что придает оптимальным планам локальный (справедливый в окрестности оценок параметров) характер.

Будем строить локально D -оптимальные планы в окрестности МНК-оценок параметров θ^* , рассчитываемых по результатам решения модельной системы уравнений (1) — (6):

$$\theta^* = \operatorname{argmin}_{\theta} \sum_{k=1}^N (\tilde{\Phi}(\theta, r_k) - \Phi^*(r_k))^2,$$

где Φ^* — компонента решения системы (1) — (6); k — номер узла дискретизации по r .

Для расчета переменных состояния (функций $T(r, z)$ и $\Phi(r)$) модели (1) — (6) разработана численная итерационная процедура, базирующаяся на принципе расщепления вычислений по физическим факторам, согласно которой распределение температуры рассчитывается из уравнения (1) с краевыми условиями (2) — (5) при известном (вычисленном на предшествующей итерации) положении координат поверхности раздела кристалл—расплав. Затем рассчитанная температура служит для вычисления J , и наконец, осуществляется очередной шаг метода установления для расчета следующего приближения Φ из кинематического уравнения (6).

Дискретизация подсистемы уравнений (1) — (5) выполняется по методу конечных элементов [5] в форме Галеркина в базисе из линейных функций на треугольниках.

Линеаризация краевого условия Стефана (2) проводится по следующей схеме:

$$\begin{aligned} & \left[\left(\lambda_1 \frac{\partial T_1^l}{\partial z} - \lambda_2 \frac{\partial T_2^l}{\partial z} \right) - \frac{\partial \Phi^{l-1}}{\partial r} \left(\lambda_1 \frac{\partial T_1^l}{\partial r} - \lambda_2 \frac{\partial T_2^l}{\partial r} \right) \right] \Big|_{z=\Phi^{l-1}(r)} = \\ & = L \left(J(\Delta T^{l-1}) + \frac{\partial J}{\partial \Delta T} (T_1^l - T_1^{l-1}) \right) \sqrt{1 + (\partial \Phi^{l-1} / \partial r)^2}, \end{aligned}$$

где l — номер шага установления.

Решение дискретного аналога (СЛАУ) (1)–(5) отыскивается методом сопряженных градиентов [6] с предварительным предобуславливанием (приведением значений элементов главной диагонали к единице), причем ради сохранения симметричности СЛАУ член левой части уравнения (1) учитывается явно.

Решение Φ' отыскивается в виде разложения по системе кусочно-линейных функций с конечным носителем:

$$\Phi'(r) = \sum_{i=1}^N \Phi'_i \gamma_i(r),$$

где

$$\gamma_i(r) = \begin{cases} 0, & r \notin [r_{i-1}, r_{i+1}], \\ \frac{r - r_{i-1}}{r_i - r_{i-1}}, & r \in [r_{i-1}, r_i], \\ \frac{r_{i+1} - r}{r_{i+1} - r_i}, & r \in [r_i, r_{i+1}], \end{cases}$$

r_i — узлы дискретизации отрезка $[0, R]$, N — их количество. Коэффициенты разложения отыскиваются из требования минимальности нормы невязки линеаризованного уравнения (6):

$$\Phi' = \operatorname{argmin}_{\Phi} \int_0^R \left(\rho_1 \frac{\Phi' - \Phi'^{-1}}{\tau} + J(\Delta T') \sqrt{1 + (\partial \Phi'^{-1} / \partial r)^2} - \rho_i V_* \right)^2 r dr,$$

где τ — шаг по времени.

Как указывалось выше, ввиду численного способа получения нами значений переменных состояния объекта дифференцирование откликов объекта по параметрам при вычислении функций чувствительности производится также численно. В расчетах нами применялась схема центральных разностей:

$$\frac{\partial y}{\partial \theta_j} \approx \frac{y(\theta + \Delta \theta_j) - y(\theta - \Delta \theta_j)}{2\Delta \theta_j}.$$

Приращение $\Delta \theta_j$ j -й координаты вектора параметров θ подбиралось таким, чтобы составляющие ошибок аппроксимации и вычислительного шума в численных решениях (1)–(5) (в качестве Φ при этом фигурируют проекции функции $\tilde{\Phi}(\theta \pm \Delta \theta_j, r)$ на подпространство кусочно-линейных функций γ) становились несоизмеримо малыми по сравнению с реакцией отклика y на это приращение.

Поскольку в алгоритмах оптимального планирования имеется потребность в вычислении значений функций чувствительности в произвольных точках, не совпадающих с узлами расчетных сеток, нами применялось кусочно-кубическое эрмитово восполнение сеточного распределения температуры T_p на поверхности капсулы, полученного численно.

При этом способе восполнения температура представляется в виде

$$T_{T3}(z) = \sum_{i=1}^n u_i \varphi_i(z) + \sum_{i=1}^n v_i \psi_i(z),$$

где функции φ и ψ на интервале $[z_j, z_{j+1}]$ имеют вид [7]:

$$\varphi_j(z) = \left(1 + 2 \frac{z - z_j}{h} \right) \left(\frac{z_{j+1} - z}{h} \right)^2; \quad \psi_{j+1}(z) = \left(\frac{z - z_j}{h} \right)^2 \left(1 + 2 \frac{z_{j+1} - z}{h} \right);$$

$$\psi_j(z) = h \frac{z - z_j}{h} \left(\frac{z_{j+1} - z}{h} \right)^2; \quad \psi_{j+1}(z) = -h \left(\frac{z - z_j}{h} \right)^2 \frac{z_{j+1} - z}{h},$$

причем вне интервала $[z_{i-1}, z_{i+1}]$ каждая из функций φ_i, ψ_i обращается в нуль, а коэффициенты u_i и v_i имеют смысл значений температуры и ее производной по z (в точке z_i) соответственно.

Принимая значения интерполянта T_{I3} в узлах расчетной сетки равными расчетным значениям температуры ($u_i = T_p(z_i)$), коэффициенты v_i отыскивали из условия минимальности функционала $\int_0^H \left(\frac{\partial T_{I3}}{\partial z} \right)^2 dz$, равносильного условию минимальности функционала $\int_0^H \left(\frac{\partial T_{I1}}{\partial z} - \frac{\partial T_{I3}}{\partial z} \right)^2 dz$, где T_{I1} — кусочно-линейное восполнение T_p .

В ряде случаев требование минимальности функционала $\int_0^H \left(\frac{\partial^2 T_{I3}}{\partial z^2} \right)^2 dz$ признано нами более удачным, поскольку оно избавляет функции чувствительности от паразитных осцилляций, проявляющихся вследствие влияния на решение T_p смещения расчетных узлов при варьировании значений параметров в ходе вычисления $\partial u / \partial \theta$.

На основе разработанного программно-математического обеспечения были построены оптимальные планы для ряда вариантов, отличающихся друг от друга значениями режимных величин.

При выполнении расчетов принимался следующий вид функций распределения β_0 и T_0 вдоль поверхности капсулы:

$$\beta_0 = \begin{cases} \beta_c, & \text{если } z \leq z_0, \\ \beta_h, & \text{если } z > z_0; \end{cases}$$

$$T_0 = \begin{cases} T_c, & \text{если } z \leq z_0 - \alpha/2, \\ \sigma(T_c((z_0 - \alpha/2) - z) + \\ + (z - (z_0 + \alpha/2))T_h)/\alpha, & \text{если } z_0 - \alpha/2 < z \leq z_0 + \alpha/2, \\ T_h, & \text{если } z > z_0 + \alpha/2; \end{cases}$$

$$T_0 = \begin{cases} T_c, & \text{если } z \leq z_0, \\ T_h, & \text{если } z > z_0, \text{ в случае } \alpha = 0. \end{cases}$$

В расчетах варьировались значения $V_*, z_0, \alpha, \beta_c, \beta_h, T_c, T_h$ и $\sigma \in \{0, 1\}$.

Использовалась линейная модель кинетики фазового перехода $J = C\Delta T$. Выбор значения $C = 1$ обеспечивал почти полное совпадение $T_1|_{z=\Phi(r)}$ с T_* .

Значения теплофизических констант рабочего материала соответствовали арсениду галлия, а для материала капсулы задавались следующие: $\rho_3 = 2500 \text{ кг/м}^3$; $C_{p3} = 1000 \text{ Дж/(кг} \cdot \text{К)}$; $\lambda_3 = 10 \text{ Вт/(м} \cdot \text{К)}$. Геометрические размеры принимались равными: $H = 0,1 \text{ м}$; $R = 0,05 \text{ м}$; $\delta R = 0,003 \text{ м}$.

Измерения полагались равноточными. Типичные результаты расчетов представлены на рис. 1—9.

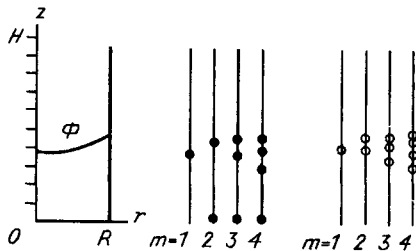


Рис. 1. Планы размещения наблюдений: темные кружки — для отклика-температуры; светлые кружки — для отклика-градиента температуры; $V_* = 0,000 \text{ мм/мин}$; $z_0 = 0,05 \text{ м}$; $\alpha = 0,00 \text{ м}$; $\beta_c = 10 \text{ Вт/(м}^2 \cdot \text{К)}$; $\beta_h = 10 \text{ Вт/(м}^2 \cdot \text{К)}$; $T_c = T_* - 202 \text{ К}$; $T_h = T_* + 200 \text{ К}$; $\sigma = 0$

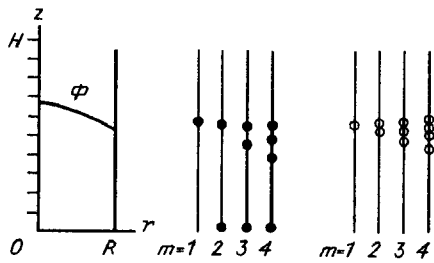


Рис. 2. Планы размещения наблюдений: темные кружки — для отклика-температуры; светлые кружки — для отклика-градиента температуры; ($T_c = T_* - 213$ К, остальные параметры те же, что и на рис. 1)

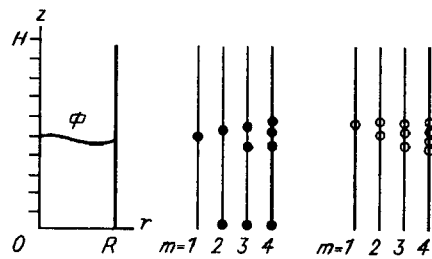


Рис. 3. Планы размещения наблюдений: темные кружки — для отклика-температуры; светлые кружки — для отклика-градиента температуры; $V_* = 0,000$ мм/мин; $z_0 = 0,05$ м; $\alpha = 0,02$ м; $\beta_c = 10$ Вт/(м² · К); $\beta_h = 10$ Вт/(м² · К); $T_c = T_* - 210$ К; $T_h = T_* + 200$ К; $\sigma = 0$

С точки зрения постановки реального эксперимента нас интересовали планы с различными χ_i . Поэтому, так как при $n > m$ (число точек в плане больше числа параметров) оказалось, что оптимальные планы содержат совпадающие точки, то при выполнении расчетов мы ограничились построением только насыщенных планов, т. е. планов, для которых $n = m$.

Для построенных точных локально D -оптимальных планов максимальная дисперсия функции отклика $\max_d(\chi, \epsilon)$ оказалась равной числу оцениваемых параметров m . Ввиду этого обстоятельства на основании теоремы о необходимом и достаточном условиях D -оптимальности непрерывного плана [3] можно сделать вывод о близости точных D -оптимальных планов к непрерывным. Таким образом, непрерывные планы для данной задачи содержат по m точек с равными весами, расположение которых совпадает с расположением точек точных планов.

Анализ результатов показывает, что планы размещения наблюдений для всех вариантов геометрически однотипны, т. е. прослеживается закономерность во взаиморасположении точек планов, что весьма немаловажно для технической реализации, а интервалы разброса точек планов тяготеют к области, занятой кристаллической фазой (вероятно, вследствие меньшего рассеяния информации средой с меньшей теплопроводностью).

Обнаруженную закономерность удалось интерпретировать на основе вспомогательного исследования по выявлению закономерности размещения экстремумов информационного функционала $|M(\epsilon)|$ для одноточечных пла-

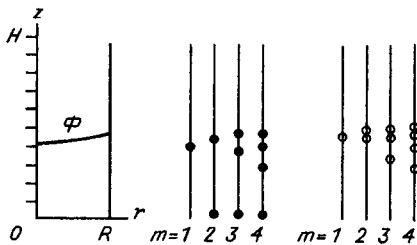


Рис. 4. Планы размещения наблюдений: темные кружки — для отклика-температуры; светлые кружки — для отклика-градиента температуры; $V_* = 0,000$ мм/мин; $z_0 = 0,044$ м; $\alpha = 0,02$ м; $\beta_c = 10$ Вт/(м² · К); $\beta_h = 10$ Вт/(м² · К); $T_c = T_* - 200$ К; $T_h = T_* + 150$ К; $\sigma = 1$

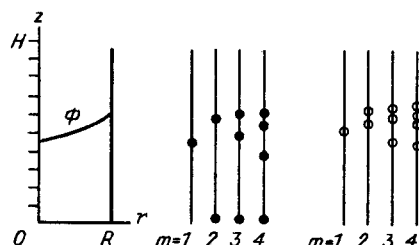


Рис. 5. Планы размещения наблюдений: темные кружки — для отклика-температуры; светлые кружки — для отклика-градиента температуры; $V_* = -0,028$ мм/мин; $z_0 = 0,05$ м; $\alpha = 0,00$ м; $\beta_c = 10$ Вт/(м² · К); $\beta_h = 10$ Вт/(м² · К); $T_c = T_* - 100$ К; $T_h = T_* + 10$ К; $\sigma = 0$

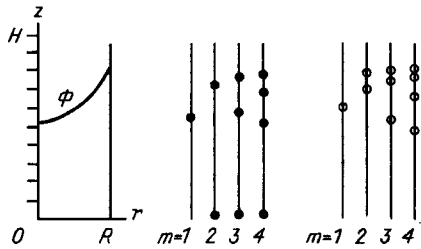


Рис. 6. Планы размещения наблюдений: темные кружки — для отклика-температуры; светлые кружки — для отклика-градиента температуры. (Параметры те же, что и на рис. 5, $\lambda_3 = 50$)

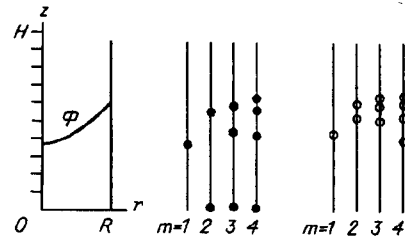


Рис. 7. Планы размещения наблюдений: темные кружки — для отклика-температуры; светлые кружки — для отклика-градиента температуры; $V_* = -0,05$ мм/мин; $z_0 = 0,06$ м; $\alpha = 0,00$ м; $\beta_c = 10$ Вт/(м² · К); $\beta_h = 10$ Вт/(м² · К); $T_c = T_* - 100$ К; $T_h = T_* + 10$ К; $\sigma = 0$

нов ϵ_j , сосредоточивающих в себе информацию о θ_j . При выполнении данного исследования в качестве параметров θ_j модели рассматривались значения Φ в узлах расчетной сетки r_j (что равнозначно использованию функций y в качестве базисных функций b при параметризации модели, причем в данном случае $m = N$).

Так, для отклика-температуры экстремумы $|M(\epsilon_j)|$ смещаются вниз по периметру при переходе от j , соответствующих пристеночным узлам, к j , соответствующим узлам, расположенным вблизи оси капсулы, причем, начиная с некоторого j_0 , экстремумы располагаются в точке $z = 0$.

Для отклика-градиента температуры экстремумы $|M(\epsilon_j)|$ имеют узкую (хотя и расширяющуюся при уменьшении j) область локализации (пикообразны) для всех j , а амплитуда смещения их координат крайне незначительна при $V_* = 0$, но увеличивается при росте $|V_*|$.

Для обоих откликов значения $\max_z |M(\epsilon_j)|$, имеющие смысл количества информации о местоположении фронта кристаллизации в точке r_j , весьма существенно уменьшаются с уменьшением j : для срединного радиуса $r_{N/2}$ величина экстремума приблизительно на два порядка меньше соответствующей величины для пристеночного радиуса r_N ($|M(\epsilon_{N/2})| \approx 0,01 |M(\epsilon_n)|$), а на оси капсулы (для $r = r_1$) справедливо $|M(\epsilon_1)| \approx 0,01 |M(\epsilon_{N/2})|$.

Поскольку варьирование параметров θ_j для $j > 1$ разложения (7) в используемом базисе B_1^m приводит к сравнительно большому изменению координат

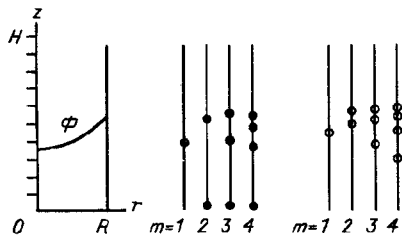


Рис. 8. Планы размещения наблюдений: темные кружки — для отклика-температуры; светлые кружки — для отклика-градиента температуры; $V_* = -0,1$ мм/мин; $z_0 = 0,04$ м; $\alpha = 0,00$ м; $\beta_c = 50$ Вт/(м² · К); $\beta_h = 10$ Вт/(м² · К); $T_c = T_* - 100$ К; $T_h = T_* + 10$ К; $\sigma = 0$

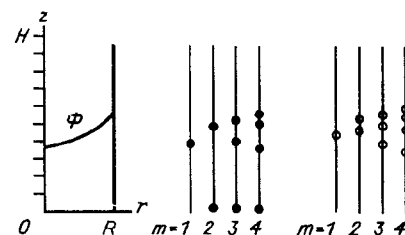


Рис. 9. Планы размещения наблюдений: темные кружки — для отклика-температуры; светлые кружки — для отклика-градиента температуры; $V_* = -0,1$ мм/мин; $z_0 = 0,045$ м; $\alpha = 0,02$ м; $\beta_c = 50$ Вт/(м² · К); $\beta_h = 10$ Вт/(м² · К); $T_c = T_* - 100$ К; $T_h = T_* + 10$ К; $\sigma = 1$

поверхности Φ в большей близости к стенке при увеличении j (что объясняется большей выпуклостью b_k по сравнению с b_l при $k > l$), а при увеличении j происходит смещение экстремумов функций чувствительности вниз, и поскольку $|M(\epsilon_1)|$ для (7) имеет наиболее ярко выраженный экстремум, то, опираясь на результаты предварительного исследования, правомочно утверждать следующее.

Наблюдения отклика-температуры в верхних точках планов несут в себе информацию о значении $\Phi(R)$ (анализ расчетов показывает, что местоположение этих точек «отслеживает» выход на поверхность капсулы изотермы $T = T_0$). В наблюдениях данного отклика в нижних точках планов содержится информация о θ_2 разложения (7), а наблюдения в каждой из промежуточных точек содержат информацию о параметре с тем большим номером, чем больше координата рассматриваемой точки.

Справедливость данного утверждения сохраняется для всех рассчитанных вариантов: как с выпуклым вверх (см. рис. 2), так и с вогнутым (см. рис. 1, 5—9), а также с почти плоским (см. рис. 3, 4) фронтом кристаллизации, как с нулевой (см. рис. 1—4), так и с отличной от нуля (см. рис. 5—9) скоростью кристаллизации V_* .

Расчеты показали также геометрическую инвариантность планов и к изменению ширины α переходного линейного участка зависимости температуры T_0 , и к постановке на этом участке режима отсутствия теплообмена: $\sigma = 0$ при $\alpha > 0$ (см. рис. 3), и к увеличению значения теплопроводности материала стенки (на рис. 6 отражены результаты расчетов с $\lambda = 50$), и к наложению дополнительного теплоотвода на нижней границе области Ω (результаты варианта расчетов с ним приводятся на рис. 7).

Так как конечной целью исследования является поиск не столько оценок параметров θ , сколько оценок положения и формы фронта кристаллизации $\tilde{\Phi}(\theta, r)$, то вычисление точности получения этих оценок также входит в задачу исследования. Из формулы (7) следует, что дисперсия оценки $\tilde{\Phi}(\theta, r)$ равна

$$d(\tilde{\Phi}(\theta, r)) = \sum_{i=1}^m b_i(r) D_{ij}(\theta) b_j(r),$$

где $D_{ij}(\theta)$ — элементы дисперсионной матрицы оценок параметров $D(\theta) \cong \cong M^{-1}(\epsilon)$. Вычисленная из последней формулы точность восстановления Φ вблизи стенки капсулы ($r \rightarrow R$) достигает приблизительно 1 мм, а на оси капсулы ($r = 0$) — приблизительно 1—2 см при точности измерения температуры в точках плана 1 град. При этом уже при $r = 0,5R$ дисперсия сравнительно мала. Это логично объясняется из физических соображений (так как измерения проводятся вблизи внутренней стенки капсулы, то и точность восстановления поверхности Φ здесь наиболее высока) и подтверждается вышеприведенным анализом функций чувствительности.

Таким образом, в результате приведенного исследования:

— показана принципиальная возможность оценивания положения и формы фронта кристаллизации по результатам измерений термических характеристик на поверхности капсулы с рабочим материалом;

— выявлены закономерности перемещения точек планов при увеличении числа оцениваемых параметров;

— установлен факт локализации информативных точек в области, занятой кристаллической фазой, преимущественно вблизи положения фронта кристаллизации;

— с позиций информационной предпочтительности отмечено, что контроль местоположения на поверхности капсулы точки, имеющей температуру кристаллизации, с большой степенью достоверности обеспечивает знание точки примыкания фронта кристаллизации к внутренней поверхности капсулы.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Шашков Ю. М. Выращивание монокристаллов методом вытягивания. М.: Metallургия, 1982.
2. Федоров В. В. Теория оптимального эксперимента. М.: Наука, 1971.
3. Денисов В. И. Математическое обеспечение системы ЭВМ — экспериментатор. М.: Наука, 1977.
4. Федоров В. В. Свойства и методы построения точных оптимальных планов регрессионных экспериментов. М., 1969. (Препр. /МГУ; № 5).
5. Стренг Г., Фикс Дж. Теория метода конечных элементов. М.: Мир, 1977.
6. Численные методы и программное обеспечение /Под ред. Ю. А. Кузнецова. М.: Изд-во ОВМ АН СССР, 1990.
7. Марчук Г. И., Агошков В. И. Введение в проекционно-сеточные методы. М.: Наука, 1981.

Поступила в редакцию 29 декабря 1994 г.

Реклама продукции в нашем журнале — залог Вашего успеха!