



ΕΘΝΙΚΟ ΜΕΤΣΟΒΙΟ ΠΟΛΥΤΕΧΝΕΙΟ
ΣΧΟΛΗ ΧΗΜΙΚΩΝ ΜΗΧΑΝΙΚΩΝ
Τομέας II: Ανάλυσης, Σχεδιασμού και Ανάπτυξης
Διεργασιών και Συστημάτων

Διδακτορική διατριβή

**ΟΛΟΚΛΗΡΩΜΕΝΗ ΠΡΟΣΟΜΟΙΩΣΗ ΕΞΕΛΙΞΗΣ
ΤΟΠΟΓΡΑΦΙΑΣ ΚΑΤΑ ΤΗΝ ΕΓΧΑΡΑΞΗ ΜΙΚΡΟ- ΚΑΙ
ΝΑΝΟ-ΔΟΜΩΝ ΜΕ ΠΛΑΣΜΑ**

ΓΕΩΡΓΙΟΣ Π. ΚΟΚΚΟΡΗΣ

ΑΘΗΝΑ 2005



ΕΘΝΙΚΟ ΜΕΤΣΟΒΙΟ ΠΟΛΥΤΕΧΝΕΙΟ
ΣΧΟΛΗ ΧΗΜΙΚΩΝ ΜΗΧΑΝΙΚΩΝ
Τομέας II: Ανάλυσης, Σχεδιασμού και Ανάπτυξης
Διεργασιών και Συστημάτων

Διδακτορική διατριβή

**ΟΛΟΚΛΗΡΩΜΕΝΗ ΠΡΟΣΟΜΟΙΩΣΗ ΕΞΕΛΙΞΗΣ
ΤΟΠΟΓΡΑΦΙΑΣ ΚΑΤΑ ΤΗΝ ΕΓΧΑΡΑΞΗ ΜΙΚΡΟ- ΚΑΙ
ΝΑΝΟ-ΔΟΜΩΝ ΜΕ ΠΛΑΣΜΑ**

ΓΕΩΡΓΙΟΣ Π. ΚΟΚΚΟΡΗΣ

ΑΘΗΝΑ 2005

ΕΘΝΙΚΟ ΜΕΤΣΟΒΙΟ ΠΟΛΥΤΕΧΝΕΙΟ
ΣΧΟΛΗ ΧΗΜΙΚΩΝ ΜΗΧΑΝΙΚΩΝ
Τομέας II: Ανάλυσης, Σχεδιασμού και Ανάπτυξης
Διεργασιών και Συστημάτων

Συμβουλευτική επιτροπή

- Ε. Γογγολίδης, Διευθυντής Ερευνών, ΕΚΕΦΕ Δημόκριτος
Α. Μπουντουβής, Αναπληρωτής Καθηγητής ΕΜΠ (Επιβλέπων)
Α. Παπαϊωάννου, Αναπληρωτής Καθηγητής ΕΜΠ

Εξεταστική επιτροπή

- Θ. Θεοδώρου, Καθηγητής ΕΜΠ
Δ. Ματαράς, Επίκουρος Καθηγητής, Πανεπιστήμιο Πατρών
Α. Μπουντουβής, Αναπληρωτής Καθηγητής ΕΜΠ
Α. Παπαϊωάννου, Αναπληρωτής Καθηγητής ΕΜΠ
Σ. Τσαγγάρης, Καθηγητής ΕΜΠ
Δ. Τσουκαλάς, Αναπληρωτής Καθηγητής ΕΜΠ
Κ. Χιτζανίδης, Καθηγητής ΕΜΠ

Η έγκριση της διδακτορικής διατριβής από την Ανώτατη Σχολή Χημικών Μηχανικών του Εθνικού Μετσόβιου Πολυτεχνείου δεν υποδηλώνει αποδοχή των γνώμων του συγγραφέα (Ν. 5343/1932, άρθρο 202)

Ευχαριστίες

Φτάνοντας να γράψω το τυπικό (;) αυτό κομμάτι της εργασίας, η αλήθεια είναι ότι δυσκολεύτηκα. Αναρωτήθηκα μήπως αδικήσω ή υπερετιμήσω τη συμβολή των ανθρώπων που ήταν δίπλα μου με τα λόγια που θα χρησιμοποιήσω ή με τη σειρά των «ευχαριστώ». Με αυτή την αφορμή, ξαναγύρισα πίσω στο χρόνο και ξαναείδα όλη τη διαδρομή. Αναρωτήθηκα τι θα άλλαζε αν είχα αποφύγει ή είχα κάνει κάτι. Αναρωτήθηκα πως θα ήταν η ζωή μου αν δεν είχα μπει σε αυτό το ταξίδι και αν θα το ξαναέκανα. Η πρώτη σκέψη ήταν ότι θα ήμουν κάπου και θα έκανα κάτι, ίσως το ίδιο κάθε μέρα.

Ευχαριστώ το Βαγγέλη Γογγολίδη και τον Ανδρέα Μπουντουβή για την ευκαιρία που μου έδωσαν να ασχοληθώ με κάτι διαφορετικό κάθε μέρα. Ευχαριστώ τη σύζυγό μου, τους γονείς και τα αδέρφια μου που μου «επέτρεψαν» να αφιερώσω πολλές ώρες κάθε μέρα σε κάτι διαφορετικό.

Κατά τη διάρκεια της διατριβής ήμουν υπότροφος στο Ινστιτούτο Μικροηλεκτρονικής του ΕΚΕΦΕ Δημόκριτος. Η προσπάθεια μου ενισχύθηκε οικονομικά από σειρά ερευνητικών προγραμμάτων και οφείλω να ευχαριστήσω θερμά το Βαγγέλη Γογγολίδη. Και όχι μόνο για αυτό. Ήταν ο καθοδηγητής της διατριβής. Η εμπειρία του σε θέματα εγχάραξης ήταν πολύτιμη, οι παρατηρήσεις του ήταν οξυδερκείς, και η αισιοδοξία του με στήριξε σε δύσκολες στιγμές.

Επιβλέπων της διατριβής ήταν ο Ανδρέας Μπουντουβής. Τον ευχαριστώ θερμά για την υποστήριξη που μου παρείχε. Η εμπειρία του σε αριθμητικούς υπολογισμούς και η ευστοχία των παρατηρήσεών του ήταν σύμμαχοι στην προσπάθειά μου.

Ευχαριστώ την Αγγελική Τσερέπη, Ερευνήτρια του Ινστιτούτου Μικροηλεκτρονικής, για τη συμπαράσταση και τις χρήσιμες συζητήσεις σε θέματα πλάσματος. Τέλος, ευχαριστώ τον Κώστα Σπετσιέρη και τον Αλέξανδρο Κουλίδη, Χημικούς Μηχανικούς, για τη βοήθεια που μου προσέφεραν στο πλαίσιο των διπλωματικών τους εργασιών.

Περίληψη

Για την κατασκευή δομών μικροηλεκτρονικής και μικρο-ηλεκτρο-μηχανικών συστημάτων (Micro-Electro-Mechanical Systems, MEMS) χρησιμοποιείται τεχνολογία μεταφοράς σχήματος (λιθογραφία και εγχάραξη με πλάσμα ή με υγρά αντιδραστήρια) η οποία βασίζεται στην απόθεση και σχηματοποίηση διαδοχικών επίπεδων στρωμάτων.

Ο έλεγχος του σχήματος των εγχαρασσόμενων δομών είναι αναγκαίος για την ορθή λειτουργία των αντίστοιχων μικροηλεκτρονικών διατάξεων και μικρο-ηλεκτρο-μηχανικών συστημάτων. Σημαντικά προβλήματα κατά την εγχάραξη δομών με πλάσμα, τα οποία δυσχεραίνουν τον έλεγχο του σχήματος των κατασκευαζόμενων δομών, είναι η απώλεια μικροσκοπικής ομοιομορφίας (π.χ. υστέρηση εγχάραξης) και οι αποκλίσεις από απόλυτα κάθετα τοιχώματα στις εγχαρασσόμενες δομές. Στην κατανόηση των μηχανισμών που προκαλούν τα προβλήματα κατά την εγχάραξη δομών με πλάσμα, και γενικότερα στον έλεγχο του σχήματος των εγχαρασσόμενων δομών, μπορεί να συμβάλει, εκτός από την πειραματική μελέτη, και η προσομοίωση της εξέλιξης τοπογραφίας των εγχαρασσόμενων δομών.

Ο σκοπός της εργασίας είναι η ανάπτυξη πλαισίου ολοκληρωμένης προσομοίωσης εξέλιξης τοπογραφίας δομών (π.χ. αυλάκια, οπές) που εγχαρασσονται με πλάσμα. Το επίπεδο ολοκλήρωσης αφορά στη σύνδεση της αέριας φάσης στον κύριο όγκο του αντιδραστήρα πλάσματος με την τοπογραφία, το σχήμα της εγχαρασσόμενης δομής. Το πλαίσιο προσομοίωσης αποτελείται από:

- 1) Μοντέλο υπολογισμού των τοπικών ροών των συστατικών μέσα στις εγχαρασσόμενες δομές που λαμβάνει υπόψη τα φαινόμενα σκίασης και επανεκτομπής. Συνδέει τις ροές των συστατικών στον κύριο όγκο του αντιδραστήρα πλάσματος με τις τοπικές ροές στο εσωτερικό των εγχαρασσόμενων δομών.
- 2) Μοντέλο εγχάραξης επιφανειών που περιγράφει τις διεργασίες που συμβαίνουν σε εγχαρασσόμενη επιφάνεια SiO_2 και Si σε πλάσμα φθοριωμένων υδρογονανθράκων. Το μοντέλο, το οποίο λαμβάνει υπόψη ανταγωνιστικά φαινόμενα εγχάραξης και απόθεσης, είναι φαινομενολογικό και βασίζεται σε ισοζύγια θέσεων ρόφησης στην εγχαρασσόμενη επιφάνεια. Συνδέει τις τοπικές ροές στο εσωτερικό των εγχαρασσόμενων δομών με την τοπική ταχύτητα εγχάραξης.
- 3) Αλγόριθμο εξέλιξης τοπογραφίας της εγχαρασσόμενης δομής. Υλοποιείται η μέθοδος των ισοϋψών. Ο αλγόριθμος εξέλιξης τοπογραφίας χρησιμοποιεί την τοπική ταχύτητα εγχάραξης για τη μετακίνηση της τοπογραφίας των εγχαρασσόμενων δομών.

Το τρίτο συστατικό του πλαισίου προσομοίωσης, ο αλγόριθμος εξέλιξης τοπογραφίας, είναι ένας γενικός αλγόριθμος εξέλιξης κινούμενου συνόρου, που μπορεί να

εφαρμοστεί σε αρκετές περιοχές (π.χ. εξέλιξη διεπιφάνειας ρευστών στη ρευστομηχανική). Η σύζευξη των δύο μοντέλων του πλαισίου προσομοίωσης [συστατικά (1) και (2)], με βάση την οποία υπολογίζεται η τοπική ταχύτητα εγχάραξης, είναι αυτή που ειδικεύει την εφαρμογή του αλγόριθμου εξέλιξης κινούμενου συνόρου στο πρόβλημα εγχάραξης δομών.

Τα κύρια σημεία της εργασίας συνοψίζονται στα εξής με τη σειρά που παρουσιάζονται στην εργασία:

A) Διατυπώνονται εξισώσεις για τον υπολογισμό της τοπικής ροής ουδέτερων συστατικών στο εσωτερικό οπών με κυλινδρική συμμετρία καθώς και μέθοδος αριθμητικής επίλυσης του προβλήματος υπολογισμού τοπικής ροής στο εσωτερικό δομών (ολοκληρωτική εξίσωση Fredholm 2^{ου} είδους). Αντιμετωπίζεται η ιδιομορφία του πυρήνα της ολοκληρωτικής εξίσωσης και παρουσιάζονται για πρώτη φορά συγκριτικά αποτελέσματα τοπικής ροής στο εσωτερικό αυλακιού και οπής.

B) Αναπτύσσεται πρωτότυπο φαινομενολογικό μοντέλο εγχάραξης επιφάνειας SiO₂ και Si σε πλάσμα φθοριωμένων υδρογονανθράκων.

Γ) Προτείνεται αλγόριθμος σύζευξης του μοντέλου υπολογισμού των τοπικών ροών των συστατικών στο εσωτερικό δομών και του μοντέλου εγχάραξης επιφάνειας. Το κεντρικό σημείο της σύζευξης είναι ο ταυτόχρονος υπολογισμός των τοπικών ροών και φαινομένων συντελεστών προσκόλλησης των συστατικών. Το αντίστοιχο αριθμητικό πρόβλημα αφορά στην επίλυση συστήματος μη γραμμικών ολοκληρωτικών εξισώσεων.

Δ) Περιγράφονται αναλυτικά και αντιμετωπίζονται αυτοτελώς όλα τα υπολογιστικά προβλήματα που περιλαμβάνει η υλοποίηση της μεθόδου των ισοϋψών: επίλυση εξισώσεων ισοϋψών και Eikonal, εύρεση ισοϋψούς συνάρτησης και προεκβολή ταχύτητας συνόρου μακριά από αυτό. Για την επίλυση της εξίσωσης ισοϋψών, δοκιμάζονται διαφορετικά αριθμητικά σχήματα διακριτοποίησης στο χώρο και στο χρόνο, μερικά από τα οποία εφαρμόζονται για πρώτη φορά σε προβλήματα εξέλιξης συνόρου. Διαπιστώνεται ότι το σφάλμα που οφείλεται στη διακριτοποίηση στο χώρο είναι πολύ σημαντικότερο από το αντίστοιχο της διακριτοποίησης στο χρόνο. Για την επίλυση της εξίσωσης Eikonal, αξιολογούνται διαφορετικές μέθοδοι επίλυσης. Η ταχύτερη είναι η μέθοδος ταχυ-βηματισμού (fast marching method), η οποία επιλύει άμεσα, χωρίς επαναληπτική διαδικασία, το μη γραμμικό πρόβλημα που περιγράφει η εξίσωση Eikonal. Υλοποιείται αλγόριθμος εύρεσης ισοϋψούς συνάρτησης που βασίζεται στον υπολογισμό του κάθετου διανύσματος στις ισοϋψείς της συνάρτησης. Το αντίστοιχο αριθμητικό πρόβλημα συστήματος συνήθων διαφορικών εξισώσεων επιλύεται με ζεύγος μεθόδων Runge-Kutta υψηλής τάξης ακρίβειας. Μέσα από τη μελέτη των υπολογιστικών προβλημάτων που περιλαμβάνει η υλοποίηση της μεθόδου των ισοϋψών, εξετάζεται η σκοπιμότητα χρήσης αριθμητικών σχημάτων υψηλής τάξης ακρίβειας.

Ε) Το πλαίσιο προσομοίωσης εφαρμόζεται στην εγχάραξη δομών SiO₂ σε πλάσμα φθοριωμένων υδρογονανθράκων. Από πρώτες αρχές και χωρίς προσαρμόσιμες παραμέτρους, προβλέπονται και ερμηνεύονται τα προβλήματα απώλειας μικροσκοπικής ομοιομορφίας (π.χ. υστέρηση εγχάραξης και αντίστροφη υστέρηση εγχάραξης). Προτείνονται χάρτες εγχάραξης δομών SiO₂ και Si οι οποίοι συνδέουν την αέρια φάση στον κύριο όγκο ενός αντιδραστήρα πλάσματος με τα προβλήματα απώλειας μικροσκοπικής ομοιομορφίας. Το πλαίσιο προσομοίωσης εφαρμόζεται και στη διεργασία πολυβηματικής εγχάραξης δομών Si με εναλλαγή αερίων πλάσματος (ΠΕΜΕΑΠ) που χρησιμοποιείται για την εγχάραξη βαθιών αυλακιών Si (multiple step deep Si etch process ή gas chopping deep reactive ion etch process ή Bosch process). Χρησιμοποιείται για πρώτη φορά η μέθοδος των ισούψων ως αλγόριθμος εξέλιξης τοπογραφίας στη διεργασία ΠΕΜΕΑΠ. Τέλος, αναδεικνύονται οι δυνατότητες του πλαισίου για προσομοίωση κι άλλων προβλημάτων κατά την εγχάραξη δομών, όπως α) οι νανο-πτυχώσεις στη βάση των εγχαρασσόμενων δομών και β) η εξέλιξη τραχύτητας εγχαρασσόμενης επιφάνειας. Σημειώνεται επίσης η ευελιξία του πλαισίου μέσα από εφαρμογές του σε άλλες διεργασίες, όπως α) η απόθεση και β) η εμφάνιση κατά τη λιθογραφία.

ΣΤ) Γίνεται επαλήθευση κώδικα (code verification) με τη μέθοδο κατασκευασμένων λύσεων (method of manufactured solutions) για κάθε αριθμητικό υπολογισμό του πλαισίου προσομοίωσης.

Ζ) Το πλαίσιο προσομοίωσης είναι σημαντικό και ως προς την υποδομή που προσφέρει στο μελλοντικό χρήστη, η οποία του επιτρέπει να εστιάσει κυρίως στην εφαρμογή και στο εξεταζόμενο πρόβλημα και να καταγίνεται λιγότερο με τον τρόπο και τις μεθόδους προσομοίωσης.

Summary

The technology used for the fabrication of microelectronics devices and micro-electro-mechanical systems (MEMS) is based on the successive deposition or growth of planar layers and the subsequent transfer of the desired pattern onto these layers. Lithography and plasma or wet etching are the essential steps of this technology.

Profile control of the etched structures is necessary for the efficient operation of the corresponding microelectronics devices and MEMS. The loss of microscopic uniformity (e.g. reactive ion etching lag) and deviations from the perfectly anisotropic profiles of the structures (e.g. microtrenching, sidewall bowing, roughness) are etching artifacts that make the profile control difficult. There is a need to understand the mechanisms causing these artifacts and suppress them. Besides experimental study, topography evolution simulation of the etched structures can contribute to this direction.

The goal of this work is the development of an integrated simulation framework for the topography evolution of structures etched with plasma. This framework links the bulk plasma gas phase with the profile of the etched structure and consists of:

- 1) A local flux calculation model. Shadowing and reemission of flux are taken into account. This model links the species fluxes in the bulk plasma gas phase with the local species fluxes inside features.
- 2) A surface etch model. This model includes the processes during the etching of SiO_2 and Si surface with fluorocarbon plasma. The surface model is a phenomenological model that takes into account the competitive phenomena of etching and deposition occurring during etching with fluorocarbon plasma. The model is based on site balances on the etched surface and links the species local fluxes with the local etching rate.
- 3) An algorithm for the topography evolution of the etched features. The level set method is implemented. The algorithm uses the local etching rate to move the topography of the etched structures.

The third component of the simulation framework, the topography evolution algorithm, is a general boundary evolution algorithm, which can be applied in several areas, such as the evolution of an interface between two fluids in fluid mechanics. The coupling of the first two models of the simulation framework [components (1) and (2)] that yields the local etching rate, defines the boundary evolution problem that the boundary evolution algorithm, namely the level set method, solves.

The main points of this work are summarized below (in the order that appear in the text):

A) The equations for the calculation of local fluxes of neutral species inside long trenches and holes with cylindrical symmetry are formulated. Several methods are used for the solution of the respective numerical problem, which is a Fredholm integral equation of the second kind. The singularity of the kernel of the integral equation is resolved. Comparative results for the local flux inside trenches and holes are presented.

B) An original surface model for the etching of SiO_2 and Si with fluorocarbon plasmas is developed.

C) An algorithm for the coupling between the local flux calculation model and the surface etch model is formulated. The central point of this coupling is the simultaneous calculation of the species local fluxes and effective sticking coefficients. The respective numerical problem is the solution of a system of nonlinear integral equations.

D) The following computational tasks included in the level set method implementation are addressed in detail and resolved: i) The solution of the level set equation, ii) the solution of the Eikonal equation, iii) the calculation of zero contour of the level set function (or generally the calculation of the contours of a function) and iv) the extension or the extrapolation of the velocity of the moving boundary away from the moving boundary. Several discretization schemes in space and time are applied for the solution of the level set equation. Some of these schemes are used for the first time in boundary evolution problems. It is ascertained that the error due to space discretization is more important than the error due to time discretization. Three different methods are used for the solution of the Eikonal equation. The fast marching method, which solves the nonlinear boundary value problem described by the Eikonal equation directly (without an iterative procedure), is the fastest. The formulated algorithm for the calculation of the zero contour of the level set function is based on the calculation of the normal vector to this contour. The respective computational task is the solution of a system of nonlinear ordinary differential equations, which is solved with explicit Runge-Kutta pairs of high orders. In all numerical tasks included in the implementation of the level set method, the need of using high order numerical schemes is investigated.

E) The simulation framework is applied in SiO_2 feature etching with fluorocarbon plasmas. The problems of microscopic uniformity loss [e.g. reactive ion etching lag (RIE lag), inverse RIE lag] are predicted and explained from first principles and without fitted parameters. Feature etching maps that link the bulk plasma gas phase with the problems of microscopic uniformity loss are constructed. The simulation framework is also applied to the multiple step, deep Si etch process (Bosch process). The level set method is used for the first time for the topography evolution simulation of the Bosch process. It is shown that the simulation framework can be used for the simulation and prediction of other problems during feature etching such as i) microtrenching and ii) surface roughness. Finally, the flexibility of the

simulation framework is accentuated through its application to processes such as i) deposition and ii) photoresist development during lithography.

F) The code verification for every numerical calculation of the simulation framework is accomplished through the method of manufactured solutions.

G) The simulation framework is an important substratum, as its future user can focus on the application rather than on the numerical calculations and the simulation methods.

Περιεχόμενα

Μέρος I: Εισαγωγή	1
Κεφάλαιο 1: Εισαγωγή	1
1.1 Ο ρόλος της διεργασίας εγχάραξης	2
1.2 Τεχνολογία μεταφοράς σχήματος	4
1.3 Εγχάραξη	5
1.3.1 Κατηγορίες εγχάραξης	5
1.3.2 Εγχάραξη με πλάσμα ή ξηρή εγχάραξη	6
1.3.2.1 Το πλάσμα	6
1.3.2.2 Ο αντιδραστήρας πλάσματος	8
1.3.2.3 Μηχανισμοί εγχάραξης με πλάσμα	11
1.4 Οι δομές και η τοπογραφία	12
1.5 Η ανάγκη για προσομοίωση της εξέλιξης τοπογραφίας εγχαρασσόμενων δομών	13
1.6 Ο σκοπός της εργασίας	17
1.7 Το σημερινό επίπεδο γνώσεων	19
Μέρος II: Υπολογισμός ταχύτητας συνόρου στα προβλήματα εγχάραξης	25
Κεφάλαιο 2: Μοντέλο υπολογισμού τοπικής ροής στο εσωτερικό δομής	27
2.1 Εισαγωγή	28
2.2 Τα βασικά φαινόμενα	29
2.2.1 Σκίαση της ροής	29
2.2.2 Επανεκπομπή της ροής	30
2.2.3 Φαινόμενο φόρτισης	30
2.2.4 Διάχυση στην εγχαρασσόμενη επιφάνεια	31
2.3 Το πλαίσιο και οι βασικές παραδοχές του μοντέλου υπολογισμού της τοπικής ροής	32
2.4 Η απευθείας ροή. Επίδραση της σκίασης στη ροή	36
2.4.1 Στερεά γωνία Ω για τυχαία δομή	38
2.4.2 Στερεά γωνία Ω για αυλάκι	41

2.4.3 Στερεά γωνία Ω για οπή κυλινδρικής συμμετρίας	49
2.4.4 Κατανομή της ροής	58
2.4.4.1 Κατανομή της ροής για ουδέτερα συστατικά	59
2.4.4.2 Κατανομή της ροής για ιόντα	60
2.4.5 Εξισώσεις υπολογισμού απευθείας ροής	62
2.4.6 Αριθμητική μέθοδος υπολογισμού απευθείας ροής	63
2.5 Ροή από επανεκπομπή και συνολική τοπική ροή	64
2.5.1 Υπολογισμός συνολικής και ροής από επανεκπομπή	64
2.5.2 Η ροή στην k -επανεκπομπή και η τάξη επανεκπομπής	68
2.5.3 Μηχανισμοί επανεκπομπής για ουδέτερα και φορτισμένα συστατικά	69
2.5.4 Υπολογισμοί ορατότητας	74
2.5.5 Τοπική ροή ουδέτερου συστατικού στο εσωτερικό αυλακιού	76
2.5.6 Τοπική ροή ουδέτερου συστατικού στο εσωτερικό οπής με κυλινδρική συμμετρία	79
2.6 Αριθμητική μέθοδος υπολογισμού της συνολικής ροής στο εσωτερικό δομής	82
2.6.1 Η ολοκληρωτική εξίσωση	82
2.6.2 Η μέθοδος ταξιθεσίας	83
2.6.3 Η μέθοδος Nystrom	84
2.6.4 Τρόπος επίλυσης του γραμμικού συστήματος	86
2.6.5 Ζητήματα κατά την αριθμητική επίλυση	87
2.6.5.1 Η επίδραση της απευθείας ροής στη συνέχεια της λύσης ...	88
2.6.5.2 Η αντιμετώπιση της ιδιομορφίας του πυρήνα της ολοκληρωτικής εξίσωσης	90
2.6.5.3 Αξιολόγηση των μεθόδων επίλυσης της ολοκληρωτικής εξίσωσης	94
2.6.5.4 Η επίδραση του τρόπου διαμέρισης	94
2.6.5.5 Η επίδραση του φαινομένου συντελεστή προσκόλλησης και του λόγου ασυμμετρίας	95
2.7 Αποτελέσματα υπολογισμού της ροής στο εσωτερικό δομών	98
2.8 Αξιολόγηση	109

Κεφάλαιο 3: Μοντέλο εγχάραξης επιφανειών SiO₂ και Si σε πλάσμα φθοριωμένων υδρογονανθράκων	113
3.1 Εισαγωγή	114
3.2 Οι βασικές διεργασίες στην εγχαρασόμενη επιφάνεια	114
3.3 Μοντέλο εγχάραξης Si, SiO ₂ σε πλάσμα φθοριωμένων υδρογονανθράκων	116
3.4 Παρατηρήσεις	122
3.4.1 Οι ανεξάρτητες μεταβλητές του μοντέλου	122
3.4.2 Σταθερό πλήθος θέσεων ρόφησης και τραχύτητα	122
3.4.3 Η σταθερά χρόνου και η επίλυση στη μόνιμη κατάσταση	123
3.4.4 Περιορισμός στα όρια ισχύος του πλαισίου προσομοίωσης	123
3.5 Αποτελέσματα	125
3.6 Ανάλυση ευαισθησίας	132
3.7 Αξιολόγηση	134
Κεφάλαιο 4: Αλγόριθμος υπολογισμού τοπικής ταχύτητας εγχάραξης	137
4.1 Εισαγωγή	138
4.2 Αλγόριθμος σύζευξης του μοντέλου υπολογισμού των τοπικών ροών στο εσωτερικό δομών με το μοντέλο εγχάραξης επιφάνειας	138
4.3 Αποτελέσματα	140
4.4 Αξιολόγηση	143
Μέρος III: Αλγόριθμος εξέλιξης τοπογραφίας. Εξέλιξη συνόρου με τη μέθοδο των ισοΨών	145
Κεφάλαιο 5: Η μέθοδος των ισοΨών	147
5.1 Εισαγωγή	148
5.2 Άμεση και πεπλεγμένη απεικόνιση συνόρου	150
5.3 Προσημασμένη απόσταση από σύνορο	154
5.4 Η εξίσωση ισοΨών	156
5.5 Το «στατικό» πρόβλημα εξέλιξης συνόρου	159
5.6 Σύνδεση με τις εξισώσεις Hamilton-Jacobi	163
5.7 Νόμοι διατήρησης και σύνδεση με τις εξισώσεις Hamilton-Jacobi	165

5.8 Η συνθήκη εντροπίας στα προβλήματα εξέλιξης συνόρου	167
5.9 Η μέθοδος και οι προβολές των χαρακτηριστικών καμπυλών	168
5.10 Αλγόριθμος επίλυσης του προβλήματος εξέλιξης συνόρου με τη μέθοδο των ισοϋψών	170
Κεφάλαιο 6: Επίλυση της εξίσωσης ισοϋψών	175
6.1 Εισαγωγή	176
6.2 Αριθμητικά σχήματα για την επίλυση της εξίσωσης ισοϋψών	177
6.2.1 Αριθμητικό σχήμα για την ολοκλήρωση στο χρόνο	177
6.2.2 Προσέγγιση της Χαμιλτονιανής	178
6.2.3 Προσέγγιση χωρικών παραγώγων	181
6.3 Ευστάθεια των αριθμητικών σχημάτων	186
6.4 Κυρτή και μη Χαμιλτονιανή	189
6.5 Συνοριακές συνθήκες	191
6.6 Παρατηρήσεις – Αξιολόγηση αριθμητικών σχημάτων	192
6.6.1 Πρόβλημα 6.A: Ισοτροπική διαστολή κύκλου	193
6.6.2 Πρόβλημα 6.B: Εξέλιξη συνόρου με ασυνέχεια στην κλίση	199
6.6.3 Πρόβλημα 6.Γ: Κυρτή και μη Χαμιλτονιανή	202
6.6.4 Συμπεράσματα	204
6.7 Αξιολόγηση	205
Κεφάλαιο 7: Επίλυση της εξίσωσης Eikonal	207
7.1 Εισαγωγή	208
7.2 Επίλυση της εξίσωσης Eikonal με τη μέθοδο εξάλειψης ιξώδους όρου και σχήμα Galerkin-πεπερασμένων στοιχείων	210
7.2.1 Η μέθοδος εξάλειψης ιξώδους όρου	210
7.2.2 Το αριθμητικό σχήμα Galerkin-ΠΣ	211
7.2.3 Διαδικασία επίλυσης	211
7.2.3.1 Το σύστημα μη γραμμικών εξισώσεων	211
7.2.3.2 Ο δείκτης κατάστασης του Ιακωβιανού πίνακα και η σύγκλιση της NR	213
7.2.3.3 Διαδικασία εξάλειψης ιξώδους όρου	216
7.2.4 Αξιολόγηση της μεθόδου	216
7.3 Επίλυση της εξίσωσης Eikonal επαναληπτικά με σχήμα πεπερασμένων διαφορών	

τύπου Godunov	220
7.3.1 Το αριθμητικό σχήμα πεπερασμένων διαφορών	220
7.3.2 Διαδικασία επίλυσης	222
7.3.3 Αξιολόγηση – Σύγκριση με τη μέθοδο εξάλειψης ιξώδους όρου	225
7.4 Επίλυση της εξίσωσης Eikonal με τη μέθοδο ταχυ-βηματισμού	230
7.4.1 Ο αλγόριθμος ταχυ-βηματισμού	231
7.4.2 Γιατί η μέθοδος ταχυ-βηματισμού μπορεί να χρησιμοποιηθεί στην επίλυση της εξίσωσης Eikonal	233
7.4.3 Υπολογισμός δοκιμαστικής τιμής	234
7.4.4 Εύρεση ελαχίστης δοκιμαστικής τιμής με φίλτρο ελαχίστου	238
7.4.5 Πολυπλοκότητα της μεθόδου ταχυ-βηματισμού	239
7.4.6 Προσαρμογή τυχαίου συνόρου σε αριθμητικό πλέγμα και επιβολή των συνθηκών Dirichlet της εξίσωσης Eikonal	240
7.4.6.1 Αλγόριθμος προσαρμογής συνόρου σε αριθμητικό πλέγμα	241
7.4.6.2 Εντοπισμός των κόμβων του πλέγματος στους οποίους αποδίδονται οι συνθήκες Dirichlet	244
7.4.6.3 Προεκβολή των συνθηκών Dirichlet	246
7.4.7 Παράδειγμα υπολογισμού με τη μέθοδο ταχυ-βηματισμού. Βηματισμός στο εξωτερικό και εσωτερικό του συνόρου	249
7.4.8 Σύγκριση της μεθόδου ταχυ-βηματισμού με τις άλλες μεθόδους επίλυσης	251
7.5 Επίδραση της αριθμητικής επίλυσης της εξίσωσης Eikonal στην ακρίβεια υπολογισμών στο «γενικό» πρόβλημα εξέλιξης συνόρου (§5.4)	253
7.6 Αξιολόγηση	254
Κεφάλαιο 8: Εύρεση ισοψούς συνάρτησης	259
8.1 Εισαγωγή	260
8.2 Αλγόριθμος	260
8.3 Υπολογισμός του κάθετου διανύσματος	263
8.4 Μελέτη ακρίβειας	265
8.5 Αξιολόγηση	270

Κεφάλαιο 9: Προεκβολή ταχύτητας συνόρου στο υπολογιστικό χωρίο επίλυσης της εξίσωσης ισοϋψών	271
9.1 Εισαγωγή	272
9.2 Μέθοδοι προεκβολής της ταχύτητας του συνόρου	273
9.3 Αλγόριθμος προεκβολής ταχύτητας συνόρου των Adalsteinsson και Sethian ..	276
9.4 Επίδραση της προεκβολής της ταχύτητας του συνόρου στους υπολογισμούς ..	279
9.4.1 Πρόβλημα 9.A	279
9.4.2 Πρόβλημα 9.B	282
9.5 Αξιολόγηση	284
Μέρος IV: Εφαρμογές	285
Κεφάλαιο 10: Εφαρμογές	285
10.1 Εισαγωγή	286
10.2 Εφαρμογή σύζευξης των μοντέλων υπολογισμού των τοπικών ροών μέσα σε δομές και εγχάραξης επιφάνειας	286
10.2.1 Εγχάραξη εξαρτώμενη από το λόγο ασυμμετρίας των δομών	286
10.2.2 Χάρτες εγχάραξης δομών SiO ₂ και Si	288
10.2.3 Ερμηνεία απώλειας μικροσκοπικής ομοιομορφίας	293
10.2.4 Σύγκριση με πειραματικές παρατηρήσεις	296
10.3 Εφαρμογή του αλγόριθμου εξέλιξης συνόρου σε διεργασίες με προκαθορισμένη ταχύτητα συνόρου	300
10.4 Εφαρμογή συνολικού πλαισίου προσομοίωσης	307
10.4.1 Υστέρηση εγχάραξης και αντίστροφη υστέρηση εγχάραξης σε οπές SiO ₂	307
10.4.2 Προσομοίωση διεργασίας πολυβηματικής εγχάραξης αυλακίων Si με εναλλαγή αερίων πλάσματος	309
10.4.3 Πρόβλεψη πτυχώσεων στη βάση εγχαρασσόμενων δομών	313
10.5 Προσεχώς: Τραχύτητα	315
10.6 Αξιολόγηση	318
Συμπεράσματα	319

Μέρος V: Παραρτήματα	325
Παράρτημα A: Επαλήθευση κώδικα. Η μέθοδος των κατασκευασμένων λύσεων	327
A.1 Εισαγωγή	328
A.2 Επαλήθευση υπολογιστικού και μαθηματικού μοντέλου	328
A.3 Μεθοδολογία επαλήθευσης κώδικα	330
A.4 Η μέθοδος των κατασκευασμένων λύσεων	333
A.4.1 Γενικές αρχές	333
A.4.2 Το μέτρο ελέγχου	334
A.4.3 Οδηγίες για την κατασκευή της λύσης	335
A.5 Εφαρμογές της μεθόδου των κατασκευασμένων λύσεων	336
A.5.1 Επαλήθευση κώδικα επίλυσης της εξίσωσης ισοϋψών	336
A.5.2 Επαλήθευση κώδικα επίλυσης της εξίσωσης Eikonal	341
A.5.2.1 Επαλήθευση κώδικα της μεθόδου EIO/Galerkin-ΠΣ/NR	341
A.5.2.2 Επαλήθευση κώδικα της μεθόδου Godunov/NR	343
A.5.2.3 Επαλήθευση κώδικα της μεθόδου Godunov/TB	345
A.5.3 Επαλήθευση κώδικα επίλυσης της εξίσωσης προεκβολής της ταχύτητας του συνόρου	345
A.5.4 Επαλήθευση κώδικα επίλυσης της ολοκληρωτικής εξίσωσης Fredholm 2 ^{ου} είδους	347
A.6 Αξιολόγηση	350
 Παράρτημα B: Βασικές έννοιες αριθμητικών σχημάτων	 351
B.1 Βασικές ιδιότητες αριθμητικών σχημάτων	352
B.2 Τάξη ακρίβειας προσέγγισης συνάρτησης	353
B.3 Είδη σφαλμάτων	353
B.3.1 Σφάλμα αποκοπής	353
B.3.2 Σφάλμα διακριτοποίησης και η σχέση του με το σφάλμα αποκοπής .	357

B.3.3 Σφάλμα στρογγυλοποίησης	359
B.4 Θεωρητική και παρατηρούμενη τάξη ακρίβειας σφάλματος	359
B.5 Εφαρμογή: Υπολογισμός της θεωρητικής τάξης ακρίβειας της αριθμητικής λύσης της εξίσωσης ισοϋψών	361
Παράρτημα Γ: Νόρμες απόκλισης μεταξύ λύσεων	363
Γ.1 Νόρμες απόκλισης για βαθμωτές συναρτήσεις	364
Γ.2 Νόρμες απόκλισης για διανυσματικές συναρτήσεις	364
Παράρτημα Δ: Ζεύγη μεθόδων Runge-Kutta για την επίλυση συστήματος συνήθων διαφορικών εξισώσεων	367
Δ.1 Οι μέθοδοι και τα ζεύγη μεθόδων Runge-Kutta	368
Δ.2 Η θεωρητική τάξη των μεθόδων	372
Δ.3 Επαλήθευση κώδικα επίλυσης συστήματος διαφορικών εξισώσεων με τα ζεύγη μεθόδων Runge-Kutta	375
Παράρτημα Ε: Φίλτρο ελαχίστου και δυαδικό δένδρο	383
E.1 Εισαγωγή	384
E.2 Δένδρο	384
E.3 Δυαδικό δένδρο	385
E.4 Εντοπισμός ελαχίστου ή μεγίστου στοιχείου συλλογής δεδομένων. Ουρά προτεραιότητας	386
E.5 Υλοποίηση ουράς προτεραιότητας σε φίλτρο ελαχίστου	388
E.5.1 Εισαγωγή στοιχείου στο φίλτρο ελαχίστου	389
E.5.2 Διαγραφή στοιχείου σε φίλτρο ελαχίστου	391
E.5.3 Εντοπισμός ελαχίστου στοιχείου	393
E.6 Υλοποίηση της καταχώρισης N στοιχείων σε δυαδικό δένδρο	393
E.7 Αξιολόγηση φίλτρου ελαχίστου	394
Παράρτημα ΣΤ: Η στερεά γωνία	397
ΣΤ.1 Η στερεά γωνία και εξισώσεις υπολογισμού της	398
Βιβλιογραφία	401

Μέρος I – Κεφάλαιο 1

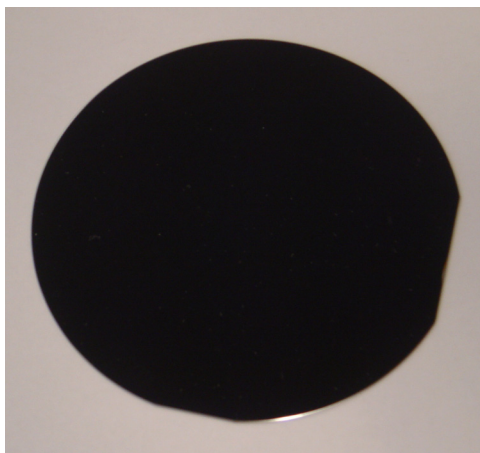
Εισαγωγή

Εισάγονται οι βασικές έννοιες της εργασίας. Αρχικά περιγράφεται ο ρόλος της διεργασίας εγχάραξης στη μικροηλεκτρονική και την κατασκευή μικρο-ηλεκτρο-μηχανικών συστημάτων και στη συνέχεια οι κατηγορίες εγχάραξης, ο αντιδραστήρας πλάσματος, δηλαδή ο χώρος όπου λαμβάνει χώρα η εγχάραξη με πλάσμα, και οι μηχανισμοί εγχάραξης. Διευκρινίζονται οι έννοιες δομή και τοπογραφία δομής και αναφέρονται τα προβλήματα εγχάραξης δομών που δικαιολογούν την ανάγκη για προσομοίωση της εξέλιξης τοπογραφίας των εγχαρασσόμενων δομών. Τέλος, περιγράφεται το πλαίσιο προσομοίωσης καθώς και το σχετικό σημερινό επίπεδο γνώσεων.

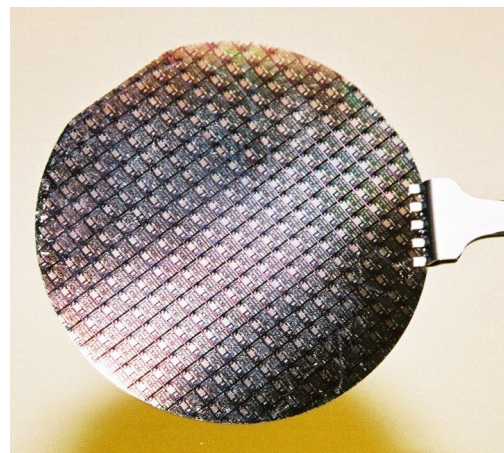
1.1 Ο ρόλος της διεργασίας εγχάραξης

Η εγχάραξη με πλάσμα είναι σημαντικό βήμα στην αλυσίδα της παραγωγικής διαδικασίας κατασκευής ενός ολοκληρωμένου κυκλώματος (ΟΚ) στη μικροηλεκτρονική. Οι διεργασίες πλάσματος αποτελούν το 1/3 των δεκάδων έως εκατοντάδων βημάτων στην παραγωγική διαδικασία κατασκευής ΟΚ [Lieberman & Lichtenberg (1994), σ. 2] και η εγχάραξη με πλάσμα είναι η συχνότερη από αυτές τις διεργασίες.³¹

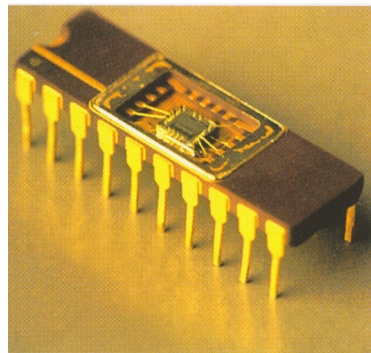
Τα ΟΚ είναι η βάση κάθε ηλεκτρονικής συσκευής. Περιλαμβάνουν πλήθος ηλεκτρικών στοιχείων, όπως δίοδοι, πυκνωτές, αντιστάσεις, τρανζίστορ κατάλληλα συνδεδεμένων ώστε να σχηματίζουν ένα ηλεκτρικό κύκλωμα, το οποίο επιτελεί συγκεκριμένη λειτουργία.



(α)



(β)

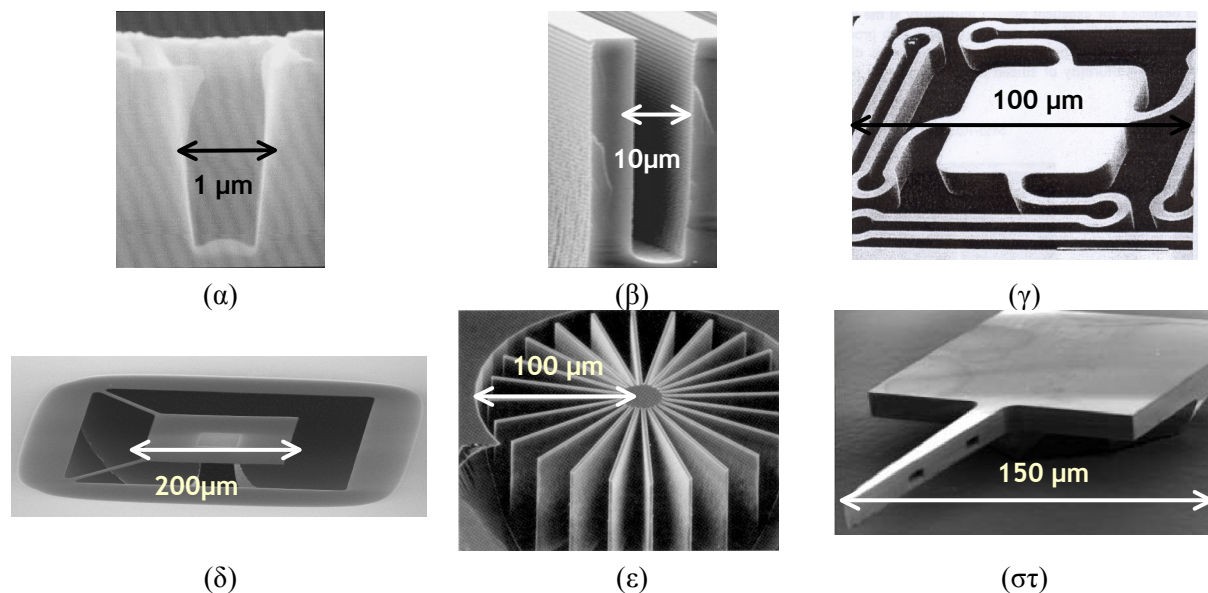


(γ)

Σχήμα 1.1 (α) Δισκίο Si διαμέτρου 10 cm (Ινστιτούτο Μικροηλεκτρονικής, ΕΚΕΦΕ Δημόκριτος). (β) Εκατοντάδες ΟΚ τεχνολογίας CMOS 2 μm πάνω σε δισκίο Si (Ινστιτούτο Μικροηλεκτρονικής, ΕΚΕΦΕ Δημόκριτος). (γ) Πακεταρισμένο ΟΚ, κατασκευασμένο στο Ινστιτούτο Μικροηλεκτρονικής του ΕΚΕΦΕ Δημόκριτος.

³¹ Η εγχάραξη με πλάσμα δεν είναι η μόνη διεργασία πλάσματος κατά την κατασκευή ΟΚ. Ένα παράδειγμα διεργασίας πλάσματος είναι η υποβοηθούμενη από πλάσμα χημική απόθεση από ατμό (plasma enhanced chemical vapor deposition). Με αυτή τη διεργασία μπορεί να γίνει απόθεση στρωμάτων Si₃N₄ σε Al [Lieberman & Lichtenberg (1994), σ. 5].

Το υπόστρωμα στο οποίο κατασκευάζονται τα ολοκληρωμένα κυκλώματα (ΟΚ) είναι το δισκίο Si (Σχήμα 1.1α). Πρόκειται για δισκίο με πάχος μερικά δέκατα του χιλιοστού και διάμετρο που μπορεί να κυμαίνεται από 7.5 έως και 30 εκατοστά. Πάνω σε ένα δισκίο κατασκευάζονται εκατοντάδες ΟΚ³¹ (Σχήμα 1.1β) με επίπεδη τεχνολογία. Η επίπεδη τεχνολογία γενικά βασίζεται στη διαδοχική και επαναλαμβανόμενη απόθεση αγώγιμων και διηλεκτρικών στρωμάτων, μεταφορά των επιθυμητών σχημάτων σε αυτά τα στρώματα και νόθευση (doping) σε τμήματα αυτών κατάλληλων προσμίξεων. Η κατασκευή ολοκληρώνεται με τη δημιουργία ηλεκτρικών συνδέσεων μεταξύ του ίδιου αλλά και διαφορετικών επιπέδων του ΟΚ. Ακολουθεί η κοπή και το πακετάρισμα (packaging) κάθε ΟΚ (πακεταρισμένο ΟΚ, Σχήμα 1.1γ).



Σχήμα 1.2 Δομές μικροηλεκτρονικής και μικρο-ηλεκτρο-μηχανικών συστημάτων. (α) Οπή επαφής (πλάτος δομής 1.25 μm) μεταξύ διαφορετικών επιπέδων ΟΚ [Doemling et al. (1996)]. (β) Αυλάκι Si πλάτους 10 μm (εργαστήριο πλάσματος Ινστιτούτου Μικροηλεκτρονικής του ΕΚΕΦΕ Δημόκριτος). Τα αυλάκια Si στα ΟΚ χρησιμοποιούνται ως πυκνωτές ή για απομόνωση μεταξύ συσκευών του ΟΚ. (γ) Μικροελατήριο από Si (οριζόντια διάσταση δομής λίγο περίπου 100 μm) [Pandhumsoporn et al. (1998)]. (δ) Μικρομεμβράνη από SiO₂ (επιφάνειας 200×200 μm²) που χρησιμοποιείται σε αισθητήρες [Tsereri et al. (2003)]. (ε) Μικροανεμιστήρας από Si (ακτίνα ανεμιστήρα 100 μm) [Pandhumsoporn et al. (1998)]. (στ) Τμήμα μικρο-ηλεκτρο-μηχανικού συστήματος (οριζόντια διάσταση δομής περίπου 150 μm) βιολογικής εφαρμογής (ALCATEL). Χρησιμοποιείται σε αισθητήρα γλυκόζης στο αίμα (blood glucose sensor).

Η θέση της διεργασίας εγχάραξης στη διαδικασία κατασκευής ΟΚ είναι στη σχηματοποίηση των στρωμάτων, στη διαμόρφωση δομών πάνω σε αυτά (§1.2). Η τεχνολογία κατασκευής δομών ΟΚ στη μικροηλεκτρονική έχει μεταφερθεί και στην κατασκευή δομών μικρο-ηλεκτρο-μηχανικών συστημάτων. Για τον όρο μικρο-ηλεκτρο-μηχανικό σύστημα

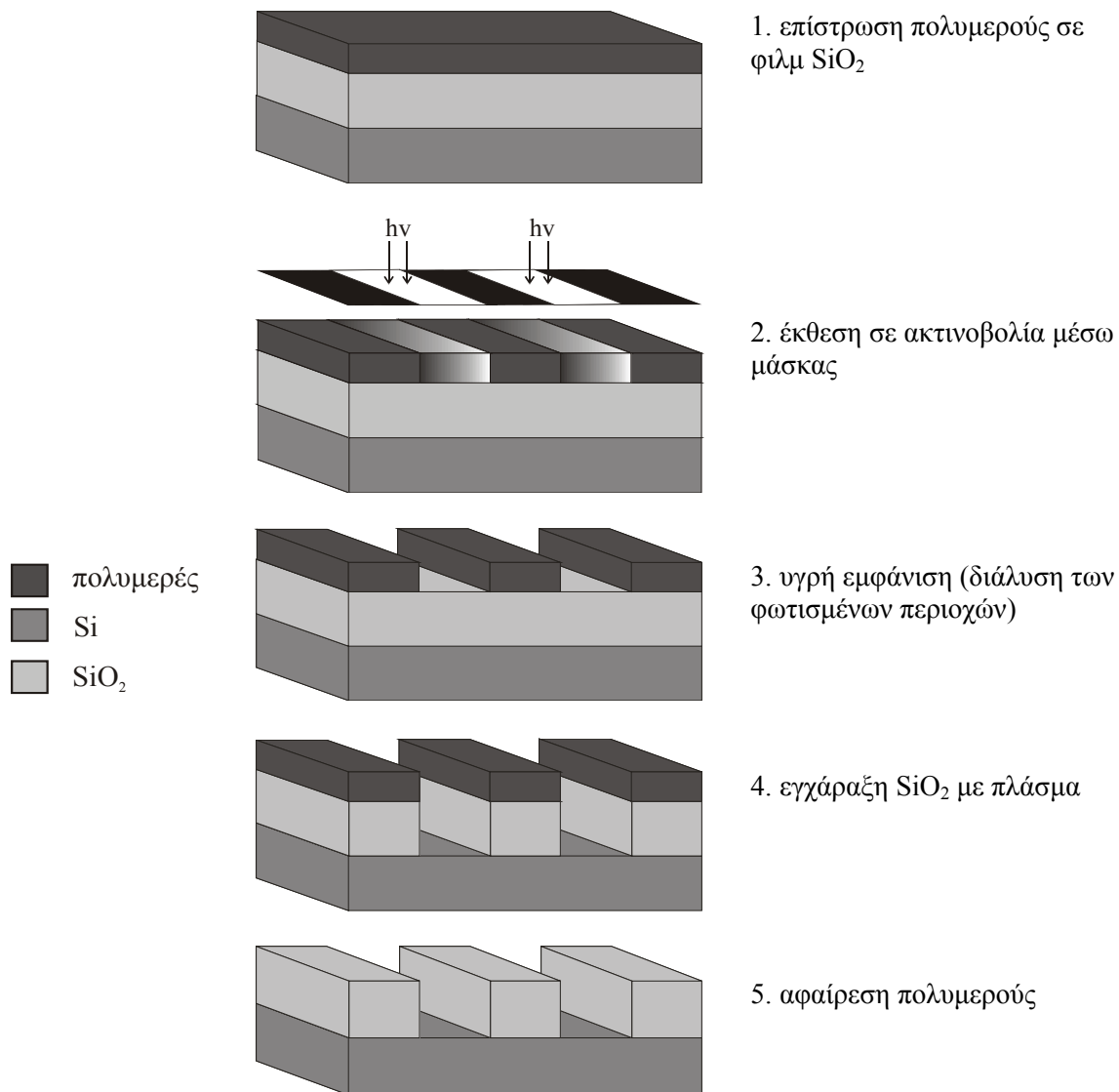
³¹ Το πλήθος των ΟΚ που μπορούν να κατασκευαστούν σε ένα δισκίο Si εξαρτάται από την πολυπλοκότητα του ΟΚ (το πλήθος και το είδος των ημιαγωγικών διατάξεων που περιέχει) και την τεχνολογία κατασκευής του.

(Micro-Electro-Mechanical System, MEMS) συναντά κανείς στη βιβλιογραφία πλήθος ορισμών. Γενικά, αφορά σε σύστημα που συνδυάζει μικροσκοπικά στοιχεία ανίχνευσης, επεξεργασίας ή/και ενεργοποίησης κατασκευασμένα πάνω σε υπόστρωμα Si με τεχνικές αντίστοιχες αυτών που εφαρμόζονται στην κατασκευή ΟΚ (www.memsnet.org/mems/what-is.html). Έχει επικρατήσει ο όρος να περιγράφει οποιαδήποτε μικροσκοπικό σύστημα, ή σύστημα που αποτελείται από πολύ μικρά στοιχεία [Gardner et al. (2001), σ. 5]. Αντί του όρου μικρο-ηλεκτρο-μηχανικό σύστημα συχνά χρησιμοποιείται ο όρος μικροσύστημα (microsystem, MST, www.nanoword.net/library/def/bldefmems.htm). Στο Σχήμα 1.2 φαίνονται παραδείγματα δομών μικροηλεκτρονικής και μικρο-ηλεκτρο-μηχανικών συστημάτων.

1.2 Τεχνολογία μεταφοράς σχήματος

Η τεχνολογία μεταφοράς σχήματος που χρησιμοποιείται στην κατασκευή δομών μικροηλεκτρονικής και μικρο-ηλεκτρο-μηχανικών συστημάτων βασίζεται στην απόθεση και σχηματοποίηση διαδοχικών επίπεδων στρωμάτων. Η τεχνολογία μεταφοράς σχήματος {patterning technology, [Γογγολίδης (1998), σ. 4-5]} συνίσταται από δύο διεργασίες: τη λιθογραφία και την εγχάραξη με υγρά χημικά ή με ηλεκτρικές εκκενώσεις πλάσματος.

Το Σχήμα 1.3 δείχνει τη μεταφορά ενός σχήματος πάνω σε ένα λεπτό στρώμα SiO₂ που έχει αποτεθεί σε ένα δίσκιο Si. Ένα λεπτό στρώμα φωτοευαίσθητου πολυμερούς (photoresist) που παίζει το ρόλο φωτογραφικού υλικού αποτίθεται πάνω στο SiO₂ με περιστροφή (spinning) διαλύματός του. Το πολυμερές εκτίθεται σε ακτινοβολία (φως) μέσω μάσκας με διαφανείς και αδιαφανείς περιοχές, η οποία φέρει το σχήμα που πρέπει να μεταφερθεί στο στρώμα SiO₂. Το φως που περνά από τις διαφανείς περιοχές προκαλεί χημικές αλλαγές στο φωτοευαίσθητο πολυμερές. Ακολουθεί η εμφάνιση (development) του πολυμερούς με κατάλληλο διαλύτη (εμφανιστής, developer) που απομακρύνει τις φωτισμένες περιοχές αφήνοντας άθικτες τις αφώτιστες (διεργασία θετικού τόνου, positive tone process), είτε το αντίθετο (διεργασία αρνητικού τόνου, negative tone process). Με το τέλος της εμφάνισης το σχήμα της μάσκας (ή το αρνητικό της) έχει αποτυπωθεί στο πολυμερές. Όλα τα παραπάνω βήματα συνιστούν τη διεργασία της λιθογραφίας (lithography). Ακολουθεί η διεργασία της εγχάραξης του SiO₂ με υγρά χημικά αντιδραστήρια ή με πλάσμα. Τέλος, ακολουθεί η αφαίρεση του πολυμερούς (photoresist stripping) με υγρούς διαλύτες ή με πλάσμα οξυγόνου που «καίει» το πολυμερές (photoresist ashing).



Σχήμα 1.3 Αποτύπωση σχήματος σε λεπτό στρώμα οξειδίου με λιθογραφία και εγχάραξη.

1.3 Εγχάραξη

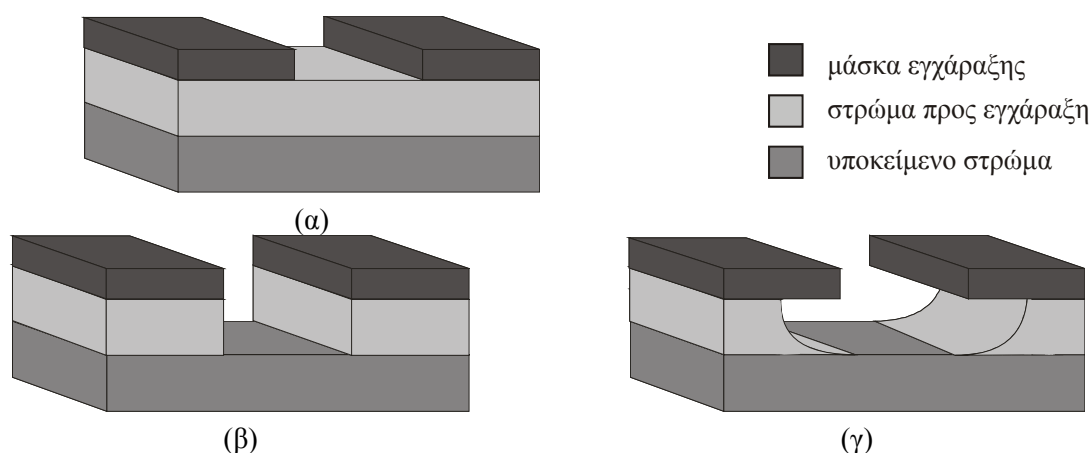
Περιγράφονται οι κατηγορίες εγχάραξης (υγρή και εγχάραξη με πλάσμα) και περιγράφονται συνοπτικά το τι είναι το πλάσμα, ο αντιδραστήρας πλάσματος, καθώς και οι μηχανισμοί εγχάραξης με πλάσμα.

1.3.1 Κατηγορίες εγχάραξης

Η εγχάραξη υποστρωμάτων SiO_2 , Si μπορεί να γίνει είτε με υγρά χημικά αντιδραστήρια {π.χ. HF για το SiO_2 , μίγμα HNO_3 και HF για το Si, [Plummer et al. (2000), σ. 618]} οπότε και καλείται υγρή εγχάραξη (wet chemical etching), είτε με αέρια

αντιδραστήρια που δημιουργούνται με ηλεκτρικές εκκενώσεις αερίων (π.χ. CF_4 , CHF_3 , SF_6 , Cl_2), οπότε και καλείται εγχάραξη με πλάσμα ή ξηρή εγχάραξη (plasma etching, dry etching).

Το κύριο πλεονέκτημα της υγρής εγχάραξης έναντι της ξηρής είναι η υψηλή επιλεκτικότητα {selectivity, [Lieberman & Lichtenberg (1994), σ. 3]}. Η επιλεκτικότητα ενός εγχαρακτή (υγρού ή αέριου) αφορά στην επιλεκτικότητα εγχάραξης υποστρώματος A προς υπόστρωμα B και ποσοτικά ορίζεται ως ο λόγος του ρυθμού εγχάραξης του υποστρώματος A προς αυτόν του υποστρώματος B. Το κύριο πλεονέκτημα της ξηρής εγχάραξης είναι η αυξημένη δυνατότητα για έλεγχο του σχήματος των εγχαρασσόμενων δομών. Η υγρή εγχάραξη γενικά δεν εμφανίζει κατεύθυνση προτίμησης,³¹ είναι ισοτροπική. Η ξηρή εγχάραξη εμφανίζει κατεύθυνση προτίμησης (αυτή των ιόντων), είναι ανισοτροπική. Στο Σχήμα 1.4 φαίνεται το αποτέλεσμα πλήρους ανισοτροπικής και ισοτροπικής εγχάραξης. Η ξηρή εγχάραξη μπορεί να είναι πλήρως ανισοτροπική. Τότε είναι δυνατή η πιστή μεταφορά του σχήματος του υπερκείμενου προστατευτικού στρώματος. Τα τοιχώματα είναι κάθετα, καθώς η εγχάραξη δεν προχωρά κάτω από αυτό το προστατευτικό στρώμα όπως συμβαίνει με την υγρή. Η ανισοτροπία είναι συνήθως το ζητούμενο στις διεργασίες κατασκευής δομών.



Σχήμα 1.4 (α) Δομή πριν την εγχάραξη. (β) Δομή μετά από πλήρως ανισοτροπική εγχάραξη. (γ) Δομή μετά από ισοτροπική εγχάραξη.

1.3.2 Εγχάραξη με πλάσμα ή ξηρή εγχάραξη

1.3.2.1 Το πλάσμα

Πλάσμα είναι ένα σχεδόν ουδέτερο ηλεκτρικά αέριο {quasineutral, [Lieberman & Lichtenberg (1994), σ. 40-43]} που αποτελείται από φορτισμένα (θετικά και αρνητικά ιόντα, ηλεκτρόνια) και ουδέτερα σωματίδια και εμφανίζει συλλογική συμπεριφορά [Chen (1984), σ.

³¹ Υπό συγκεκριμένες συνθήκες, η υγρή εγχάραξη μπορεί να είναι κρυσταλλογραφικά κατευθυνόμενη [Τσερέπη (1999), σ. 6].

3-4]. Με τον όρο συλλογική συμπεριφορά (collective behaviour) εννοείται ότι οι κινήσεις φορτισμένων σωματιδίων του αερίου εξαρτώνται όχι μόνο από τις συνθήκες στη γειτονιά των σωματιδίων αλλά και από τις συνθήκες που επικρατούν σε απομακρυσμένες σε σχέση με τα σωματίδια περιοχές.⁹¹



(α)



(δ)



(β)



(γ)



(ε)

Σχήμα 1.5 Παραδείγματα πλάσματος. (α) Αστραπή (www.plasmacoalition.org/what.htm). (β) Λαμπτήρας ηλεκτρικού τόξου της OSRAM (arc plasma, www.plasmas.org/photo.htm). (γ) Εικόνα του ήλιου με ακτίνες X (www.plasmas.org/photo.htm). (δ) Θυρίδα από αντιδραστήρα πλάσματος όπου φαίνεται το φως που εκπέμπει το αέριο στον αντιδραστήρα (www.plasmas.org/photo.htm). (ε) Ο

⁹¹ Έστω αέριο που αποτελείται από ουδέτερα σωματίδια και στο οποίο δεν ασκούνται μακροσκοπικές δυνάμεις. Τότε, η κίνηση των σωματιδίων εξαρτάται μόνο από τις συγκρούσεις μεταξύ τους. Η επιβολή μιας μακροσκοπικής δύναμης (π.χ. άσκηση πίεσης) μεταφέρεται μέσω αυτών των συγκρούσεων (το πλήθος των οποίων θα αυξηθεί λόγω της επιβολής της δύναμης) από σωματίδιο σε σωματίδιο. Η κατάσταση είναι διαφορετική όταν τα σωματίδια του αερίου είναι φορτισμένα. Η κίνηση φορτίου προκαλεί ηλεκτρικά πεδία, ηλεκτρικό ρεύμα και μαγνητικά πεδία τα οποία επηρεάζουν σωματίδια του αερίου μακριά από το φορτίο.

αντιδραστήρας πλάσματος επαγωγικής σύζευξης (Inductively Coupled Plasma reactor) του εργαστηρίου Πλάσματος Ινστιτούτου Μικροηλεκτρονικής, ΕΚΕΦΕ Δημόκριτος.

Ο όρος «πλάσμα» οφείλεται στον Irving Langmuir (1881-1957), ο οποίος πρότεινε τον όρο κατά τη διάρκεια μελέτης του για τις ηλεκτρικές εκκενώσεις σε αέρια όπως He, Ne, Ar στα εργαστήρια της General Electric. Η πρώτη δημοσιευμένη χρήση του όρου έγινε [Tonks (1967)] το 1928 στην εργασία “Oscillations in Ionized Gases”, [Proceedings of the National Academy of Sciences 14, 628 (1928)]. Ο λόγος για τον οποίο ο Langmuir διάλεξε αυτό τον όρο δεν είναι ξεκάθαρος [Rogoff (1991)]. Κατά μία εκδοχή, η επιλογή έγινε λόγω της αντιστοιχίας του ιονισμένου αερίου με το πλάσμα του αίματος (ο όρος «πλάσμα» είχε ήδη χρησιμοποιηθεί για να περιγράψει το συστατικό του αίματος): και τα δύο φέρουν σωματίδια, το πλάσμα του αίματος τα αιμοσφαίρια και τα αιμοπετάλια, το ιονισμένο αέριο τα φορτισμένα σωματίδια και τα ηλεκτρόνια. Κατά μία άλλη εκδοχή, ο Langmuir διαπίστωσε ότι οι ηλεκτρικές εκκενώσεις που μελετούσε λαμβάνουν οποιοδήποτε σχήμα, «πλάθονται» και χρησιμοποίησε την ελληνική λέξη «πλάσμα» για να περιγράψει το φαινόμενο αυτό.

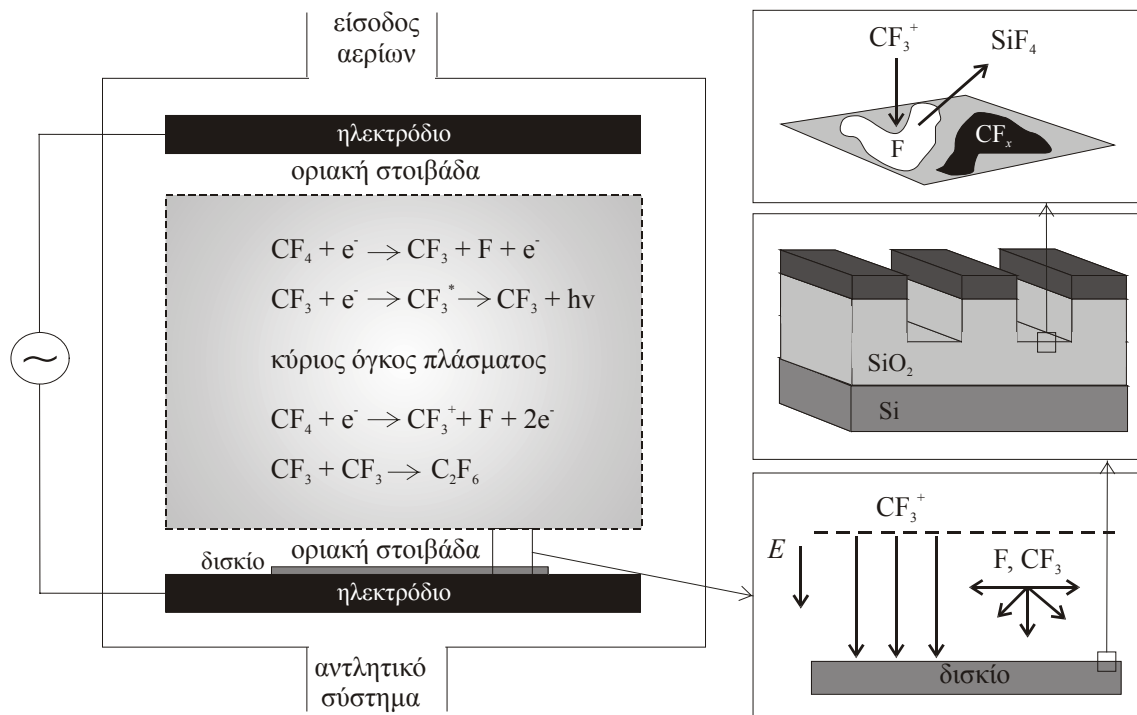
Το πλάσμα είναι διαδεδομένο στην φύση, όπως στην ιονόσφαιρα της γης και στην ηλιακή κορώνα (Σχήμα 1.5β), σε σημείο να θεωρείται ως η τέταρτη κατάσταση της ύλης [Chen (1984), σ. 2]. Απτά παραδείγματα πλάσματος αποτελούν οι λαμπτήρες (Σχήμα 1.5γ), οι φωτεινές επιγραφές των καταστημάτων και οι αστραπές (Σχήμα 1.5α). Το πλάσμα που χρησιμοποιείται στις διεργασίες εγχάραξης ξεσπά σε αντιδραστήρες πλάσματος (Σχήματα 1.5δ και 1.5ε).

1.3.2.2 Ο αντιδραστήρας πλάσματος

Μια απλουστευμένη μορφή ενός αντιδραστήρα πλάσματος⁹¹ φαίνεται στο Σχήμα 1.6. Πρόκειται για δύο παράλληλες μεταλλικές πλάκες (ηλεκτρόδια) που απέχουν 0.1-10 cm, ίσου ή άνισου εμβαδού, στις οποίες εφαρμόζεται εναλλασσόμενη τάση.

Το προς επεξεργασία δισκίο βρίσκεται πάνω στο ένα ηλεκτρόδιο. Η πίεση στον αντιδραστήρα διατηρείται πολύ χαμηλή με αντλίες κενού. Με την εφαρμογή της τάσης ξεσπά ηλεκτρική εκκένωση στο αέριο και δημιουργείται πλάσμα. Το αέριο εκπέμπει φως (Σχήμα 1.5δ). Στο πλάσμα που δημιουργήθηκε διακρίνονται δύο περιοχές: α) ο κύριος όγκος (bulk) του πλάσματος που είναι σχεδόν ουδέτερος και ανταποκρίνεται στον ορισμό του πλάσματος και β) οι οριακές στοιβάδες ή «φράκτες» ηλεκτρονίων (sheaths) που αναπτύσσονται όταν το πλάσμα έρχεται σε επαφή με επιφάνεια.

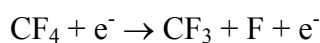
⁹¹ Το Σχήμα 1.6 απεικονίζει έναν αντιδραστήρα χωρητικής σύζευξης (Capacitively Coupled Plasma reactor). Περισσότερες λεπτομέρειες για τύπους αντιδραστήρων που χρησιμοποιούνται υπάρχουν στα βιβλία των Lieberman και Lichtenberg [Lieberman & Lichtenberg (1994), σ. 16-22], του Sugawara [Sugawara (1998)] και των Chen και Chang [Chen & Chang (2003), σ. 31-68].



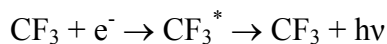
Σχήμα 1.6. Σχηματικό διάγραμμα αντιδραστήρα πλάσματος παραλλήλων πλακών καθώς και των τυπικών διεργασιών που συμβαίνουν σε αντιδραστήρα πλάσματος.

Οι λειτουργικές παράμετροι εξαρτώνται από τον τύπο του αντιδραστήρα. Στον Πίνακα 1.1 φαίνονται τυπικά όρια τιμών λειτουργικών παραμέτρων, αλλά και συγκεντρώσεων και θερμοκρασιών σε αντιδραστήρες πλάσματος. Η θερμοκρασία του αερίου είναι περίπου αυτή του περιβάλλοντος και περίπου ίση με αυτή των ιόντων στον κύριο όγκο του πλάσματος. Αντίθετα, τα ηλεκτρόνια είναι πολύ θερμά (δεκάδες χιλιάδες K). Η αυξημένη θερμοκρασία (ενέργεια) των ηλεκτρονίων οφείλεται στο ότι ενώ επιταχύνονται (κερδίζουν ενέργεια) από τα πεδία που αναπτύσσονται στο πλάσμα, μεταφέρουν πολύ λίγη ενέργεια στο αέριο κατά τις ελαστικές συγκρούσεις με τα βαρύτερα ουδέτερα σωματίδια. Από την άλλη πλευρά, τα ιόντα έχουν χαμηλή θερμοκρασία διότι μεταφέρουν σχεδόν όλους τους την ενέργεια σε μια ελαστική σύγκρουση με ουδέτερα μόρια.

Όταν η ενέργεια των ηλεκτρονίων αυξηθεί πολύ, τότε αυτά υφίστανται και μη ελαστικές συγκρούσεις κατά τις οποίες χάνουν ενέργεια με αποτέλεσμα η ενέργειά τους να μην αυξάνεται επ' άπειρον. Μερικές από τις ανελαστικές συγκρούσεις των ηλεκτρονίων φαίνονται στο Σχήμα 1.6 όταν το αέριο στον αντιδραστήρα είναι το CF_4 . Έτσι, ένα ηλεκτρόνιο συγκρουόμενο ανελαστικά με ένα ουδέτερο μόριο μπορεί να το διασπάσει σε χημικά δραστικές ρίζες :



Ένα ηλεκτρόνιο συγκρουόμενο ανελαστικά με ένα ουδέτερο συστατικό μπορεί να το διεγείρει ηλεκτρονικά, οπότε αυτό αποδιεγειρόμενο εκπέμπει φως:

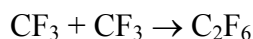


Τέλος, τα ηλεκτρόνια ιονίζουν ουδέτερα μόρια παράγοντας θετικά ιόντα και ηλεκτρόνια:



Στην παραπάνω αντίδραση παράγεται νέο ηλεκτρόνιο και σε αυτή οφείλεται η συντήρηση του πλάσματος. Η υψηλή ενέργεια των ηλεκτρονίων επιτρέπει χημικές δράσεις σε ένα ψυχρό αέριο που μόνο σε συνθήκες φλόγας θα μπορούσαν να γίνουν [Γογγολίδης (1992)].

Στον κύριο όγκο του πλάσματος, εκτός από τις δράσεις όπου συμμετέχουν ηλεκτρόνια γίνονται και αντιδράσεις μεταξύ ουδετέρων συστατικών:



Πίνακας 1.1 Τυπικά όρια τιμών των λειτουργικών παραμέτρων, συγκεντρώσεων και θερμοκρασιών (ενεργειών) σε αντιδραστήρες πλάσματος {[Γογγολίδης (1992)], [Lieberman & Lichtenberg (1994), σ. 16]}. Τα διαστήματα τιμών προκύπτουν από ένωση διαστημάτων για διάφορους τύπους αντιδραστήρων.

Παράμετρος	εύρος τιμών
πίεση (mTorr)	0.5 – 1000
ισχύς γεννήτριας πλάσματος (W)	50 – 5000
κλάσμα ιονισμού (ιονισμένων μορίων του αερίου)	$10^{-8} - 10^{-1}$
συχνότητα εναλλασσόμενης τάσης (MHz)	0.05 – 2450
πυκνότητα ηλεκτρονίων (πυκνότητα πλάσματος, cm^{-3})	$10^8 - 10^{12}$
θερμοκρασία (μέση ενέργεια*) ουδετέρων συστατικών (K)	300 – 500
θερμοκρασία ιόντων στον κύριο όγκο του πλάσματος (K)	300 – 400
θερμοκρασία ηλεκτρονίων (K)	11600 – 116000
μέση ενέργεια ιόντων στην οριακή στοιβάδα στο δισκίο (eV)	20 – 1000

* ενέργεια 1 eV αντιστοιχεί σε θερμοκρασία 11600 K.

Τα φαινόμενα που συμβαίνουν στον κύριο όγκο είναι διαφορετικά από αυτά που συμβαίνουν στην οριακή στοιβάδα που σχηματίζεται όταν το πλάσμα έρθει σε επαφή με επιφάνεια. Τα ηλεκτρόνια κινούνται με μεγαλύτερη ταχύτητα από τα ιόντα. Έτσι, φτάνουν συντομότερα από τα ιόντα στην επιφάνεια με την οποία το πλάσμα έρχεται σε επαφή. Το αποτέλεσμα είναι η επιφάνεια να φορτιστεί αρνητικά, το δυναμικό της να γίνει χαμηλότερο από αυτό του πλάσματος και τα ηλεκτρόνια να απωθούνται από αυτή. Συνεπώς, η οριακή στοιβάδα αδειάζει από ηλεκτρόνια και το δυναμικό που αναπτύσσεται δρα σαν ένας «φράκτης» ηλεκτρονίων. Όταν στην επιφάνεια εφαρμόζεται και εξωτερικό δυναμικό, όπως συμβαίνει στα ηλεκτρόδια του αντιδραστήρα πλάσματος, η πτώση δυναμικού από το πλάσμα

στο ηλεκτρόδιο είναι σημαντική και φτάνει από δεκάδες μέχρι εκατοντάδες Volts. Το δυναμικό αυτό δημιουργεί ένα ηλεκτρικό πεδίο που κατευθύνεται κάθετα προς το ηλεκτρόδιο και συνεπώς προς το δισκίο που εγχάρασσεται. Οι τροχιές των ουδετέρων συστατικών που εισέρχονται στην οριακή στοιβάδα δεν επηρεάζονται από το πεδίο. Αντίθετα τα ιόντα που εισέρχονται στην οριακή στοιβάδα επιταχύνονται από το πεδίο, πέφτουν με ορμή και σχεδόν κατακόρυφα πάνω στο δισκίο (Σχήμα 1.6). Τα ιόντα υποβοηθούν τις χημικές δράσεις στις στοιχειώδεις επιφάνειες των δομών που βρίσκονται στο δισκίο (Σχήμα 1.6).

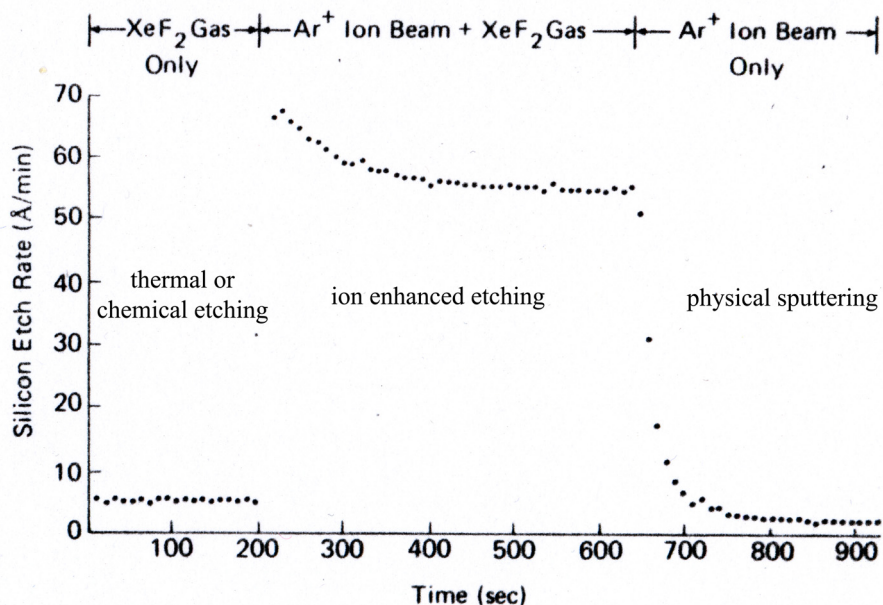
1.3.2.3 Μηχανισμοί εγχάραξης με πλάσμα

Η εγχάραξη επιφάνειας με πλάσμα μπορεί να είναι είτε μηχανική (ιονοβολή), είτε χημική, είτε υποβοηθούμενη από ιόντα, είτε συνδυασμός των προηγούμενων [Manos & Flamm (1989), σ. 18-21]:

A) Ιονοβολή [Γογγολίδης (1992)]. Πρόκειται για το φυσικό μηχανισμό εκτίναξης (physical sputtering) υλικού από την επιφάνεια λόγω του βομβαρδισμού του με υψηλής ενέργειας ιόντα. Η ιονοβολή εμφανίζει προτίμηση κατεύθυνσης (αυτής των ιόντων), δηλαδή προκαλεί ανισοτροπική εγχάραξη. Είναι ο μηχανισμός με τη μικρότερη επιλεκτικότητα.

B) Θερμική ή χημική εγχάραξη {thermal ή chemical etching, [Manos & Flamm (1989), σ. 18-21]}. Πρόκειται για τη χημική αντίδραση μεταξύ των ουδετέρων συστατικών που φτάνουν στην επιφάνεια και του προς εγχάραξη υποστρώματος κατά την οποία παράγονται πτητικά προϊόντα. Η χημική εγχάραξη προκαλεί ισοτροπική εγχάραξη. Η επιλεκτικότητα αυτού του μηχανισμού μπορεί να είναι πολύ υψηλή.

Γ) Εγχάραξη υποβοηθούμενη από ιόντα (ion enhanced etching). Πρόκειται για το αποτέλεσμα της συνεργιστικής δράσης των δύο προηγούμενων μηχανισμών εγχάραξης και οδηγεί σε σημαντικά υψηλότερους ρυθμούς εγχάραξης σε σχέση με το καθαρά αθροιστικό αποτέλεσμα της ιονοβολής και της χημικής εγχάραξης. Στο Σχήμα 1.7 [Coburn & Winters (1979)] φαίνεται ο ρυθμός εγχάραξης επιφάνειας Si σε πείραμα όπου δέσμες XeF_2 και Ar^+ προσπίπτουν στην επιφάνεια Si συναρτήσει του χρόνου εγχάραξης. Αρχικά χρησιμοποιείται μόνο δέσμη XeF_2 , οπότε συμβαίνει μόνο χημική εγχάραξη, στη συνέχεια προστίθεται δέσμη ιόντων Ar^+ (υποβοηθούμενη από ιόντα εγχάραξη) και τέλος αφαιρείται η δέσμη XeF_2 (ιονοβολή). Είναι φανερή η διαφορά στο ρυθμό εγχάραξης στα διάφορα στάδια εγχάραξης.



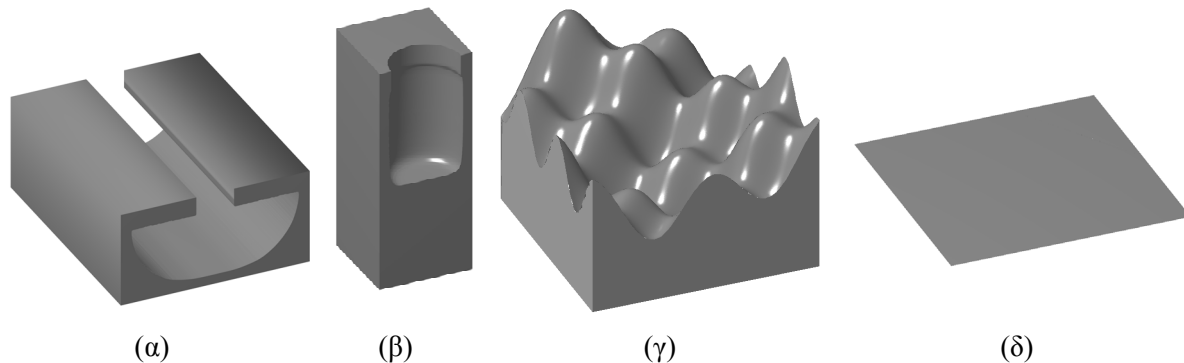
Σχήμα 1.7 Ο ρυθμός εγχάραξης επιφάνειας Si σε πείραμα όπου δέσμες XeF₂ και Ar⁺ προσπίπτουν στην επιφάνεια Si συναρτήσει του χρόνου εγχάραξης [Coburn & Winters (1979)]. Όταν $t < 200$ s, η δέσμη XeF₂ προκαλεί χημική εγχάραξη, όταν $200 \text{ s} < t < 650 \text{ s}$, οι δέσμες Ar⁺ και XeF₂ προκαλούν υποβοηθούμενη από ιόντα εγχάραξη και όταν $t > 650$ s, η δέσμη Ar⁺ προκαλεί μηχανική εγχάραξη.

Έχουν δοθεί διάφορες ερμηνείες για την εξήγηση της συνεργιστικής δράσης ιονοβολής και χημικής εγχάραξης. Σύμφωνα με μία από αυτές, τα ιόντα υψηλής ενέργειας που προσπίπτουν στην επιφάνεια την «καταστρέφουν» προκαλώντας διάρρηξη δεσμών και με αυτό τον τρόπο την καθιστούν περισσότερο ενεργή [Manos & Flamm (1989), σ. 92-93]. Επίσης, είναι πιθανό τα προσπίπτοντα ιόντα να παρέχουν την απαιτούμενη ενέργεια ώστε, είτε να επιταχυνθεί ένα στάδιο της αντίδρασης, είτε να επιταχυνθεί η εκρόφιση των προϊόντων. Υπάρχει και η περίπτωση τα ιόντα να απομακρύνουν κάποιο προστατευτικό στρώμα που σχηματίζεται επί της επιφάνειας και να καθιστούν δυνατή την έκθεση της προς εγχάραξη επιφάνειας στο χημικά δραστικό ουδέτερο συστατικό [ο.π., σ. 94]. Επειδή ο μηχανισμός υποβοηθούμενης από ιόντα εγχάραξης ελέγχεται από τη ροή ιόντων προς την επιφάνεια, εμφανίζει κατεύθυνση προτίμησης (αυτή των ιόντων), δηλαδή προκαλεί ανισοτροπική εγχάραξη.

1.4 Οι δομές και η τοπογραφία

Το αυλάκι (Σχήμα 1.8α) και η κυλινδρική οπή (Σχήμα 1.8β) είναι συνήθεις δομές κατά τη διαδικασία μεταφοράς σχήματος και κατά τη διεργασία της εγχάραξης. Ωστόσο, στον όρο δομή περιλαμβάνεται οποιαδήποτε επιφάνεια στο χώρο δεν ανήκει σε ένα επίπεδο (Σχήμα 1.8γ). Η επιφάνεια που ανήκει σε ένα επίπεδο ορίζεται ως ελεύθερη (σκίασης)

επιφάνεια (Σχήμα 1.8δ). Τοπογραφία δομής είναι η απεικόνιση ή η περιγραφή της επιφάνειας της δομής.



Σχήμα 1.8 Παραδείγματα δομών (α) αυλάκι, (β) οπή, (γ) τυχαία δομή και (δ) επίπεδη ή ελεύθερη (σκίασης) επιφάνεια. Ο λόγος ασυμμετρίας (AA) για το αυλάκι και την οπή (Σχήμα 1.8α και Σχήμα 1.8β) είναι ο λόγος του βάθους (d) προς το πλάτος (w) της οπής $AA=d/w$.

Οι συνήθεις διαστάσεις δομών κατά την κατασκευή μικρο-ηλεκτρο-μηχανικών συστημάτων είναι από μερικά μέχρι μερικές εκατοντάδες μm . Η ελάχιστη διάσταση δομής (minimum feature size) στη μικροηλεκτρονική γενικά είναι 130 nm στην παραγωγή. Η Intel έχει ήδη αρχίσει να χρησιμοποιεί τεχνολογία με ελάχιστη διάσταση δομής 90 nm (www.intel.com/research/silicon/nanometer) και η πρόβλεψη είναι η ελάχιστη διάσταση να φτάσει στα 65 nm μέχρι το 2007 και στα 45 nm μέχρι το 2010 [ITRS (2004a)].

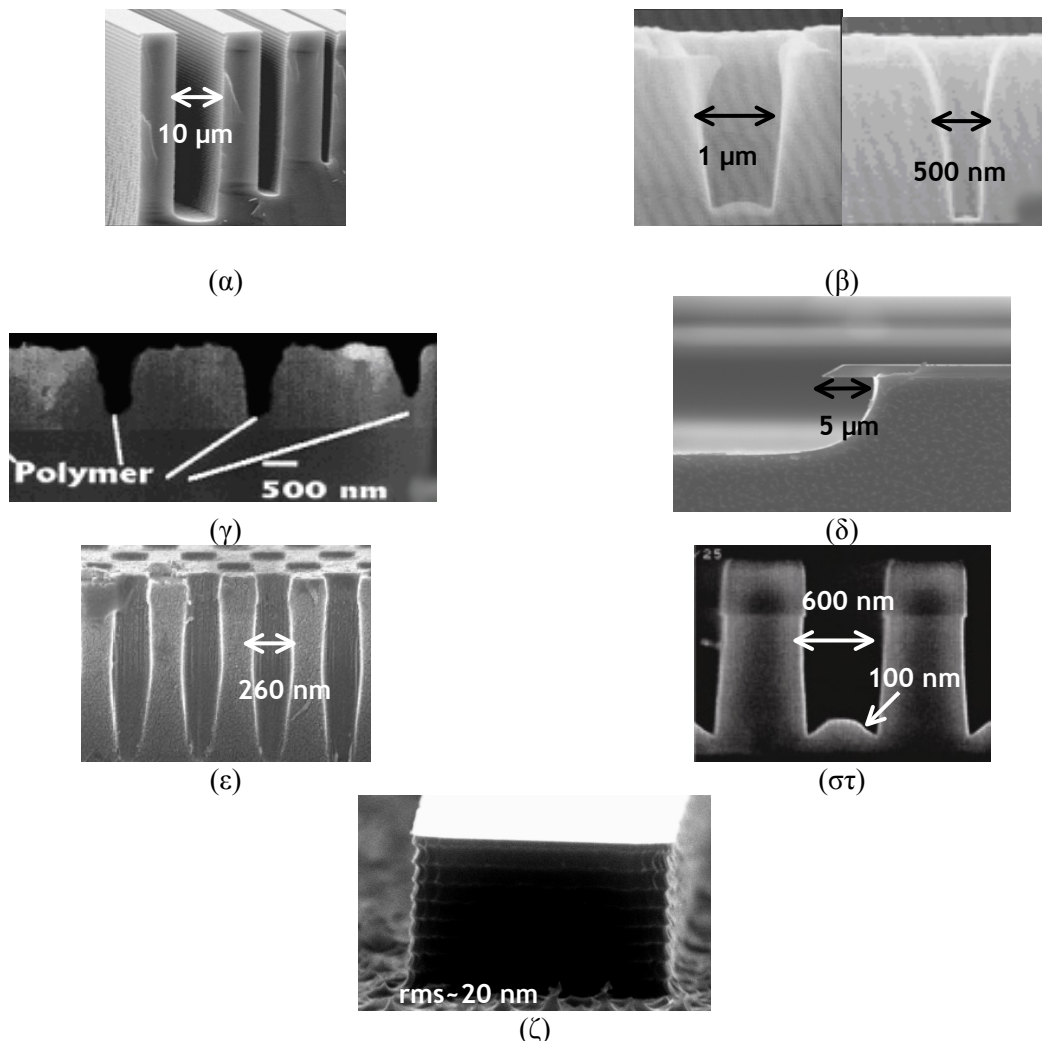
Ο όρος μικρο-δομή αφορά σε δομές με διαστάσεις [με κάποια από τις διαστάσεις της (π.χ. μήκος, πλάτος ή βάθος αυλακιού)] από 0.1 μέχρι 100 μm . Αντίστοιχα, ο όρος νανο-δομή αφορά σε δομές με διαστάσεις από 0.1 μέχρι 100 nm.

Ο λόγος ασυμμετρίας (AA , aspect ratio) δομής ορίζεται ως ο λόγος του βάθους (d) προς το πλάτος (w) της δομής, $AA = d/w$, και αποτελεί σημαντική παράμετρο στην εγχάραξη δομών. Ο μέγιστος AA δομών μικροηλεκτρονικής, αφορά στα αυλάκια – πυκνωτές της DRAM (DRAM trench capacitors) και είναι 55 (για την τεχνολογία με ελάχιστη διάσταση 90 nm) και εκτιμάται ότι θα φτάσει μέχρι 78 το 2007 και 93 το 2010 [ITRS (2004b)]. Στις δομές μικρο-ηλεκτρο-μηχανικών συστημάτων μπορεί να είναι πολύ μεγαλύτερος. Η διεργασία πολυβηματικής εγχάραξης δομών Si με εναλλαγή αερίων πλάσματος {multiple step deep Si etch process, [Rauf et al. (2002)] ή gas chopping deep reactive ion etch process, [Volland et al. (2002)]}, η οποία εφαρμόζεται ευρύτατα στην κατασκευή δομών μικρο-ηλεκτρο-μηχανικών συστημάτων, μπορεί να χρησιμοποιηθεί για την εγχάραξη δομών με AA μέχρι και 130 [Rangelow (2003)].

1.5 Η ανάγκη για προσομοίωση της εξέλιξης τοπογραφίας εγχαρασόμενων δομών

Η ανάγκη για έλεγχο του σχήματος των κατασκευαζόμενων δομών προκύπτει από την ανάγκη για αποτελεσματικότητα των αντίστοιχων διατάξεων. Ωστόσο, ακόμη και με την

εγχάραξη με πλάσμα, ο έλεγχος του σχήματος των κατασκευαζόμενων δομών είναι γενικά δύσκολος.



Σχήμα 1.9 Προβλήματα μικροσκοπικής ομοιομορφίας [(α)–(γ)] και αποκλίσεις από την απόλυτα ορθογωνική δομή [(δ)–(ζ)] κατά τη διεργασία ξηρής εγχάραξης. (α) Υστέρηση εγχάραξης σε αυλάκια Si (πλάσμα $\text{SF}_6/\text{C}_4\text{F}_8$, δείγμα μετά από εγχάραξη στον αντιδραστήρα πλάσματος του Ινστιτούτου Μικροηλεκτρονικής του ΕΚΕΦΕ Δημόκριτος). (β) Αντίστροφη υστέρηση εγχάραξης σε οπές SiO_2 [πλάσμα CHF_3 , Doemling et al. (1996)]. (γ) Διακοπή εγχάραξης και απόθεση πολυμερούς σε οπές SiO_2 (πλάσμα $\text{CHF}_3/\text{H}_2/\text{O}_2$, ετήσια αναφορά του ερευνητικού προγράμματος ADEQUAT). (δ) Εγχάραξη Si κάτω από τη μάσκα εγχάραξης (πλάσμα SF_6 , δείγμα μετά από εγχάραξη στον αντιδραστήρα πλάσματος του Ινστιτούτου Μικροηλεκτρονικής του ΕΚΕΦΕ Δημόκριτος). (ε) Καμπύλωση πλάγιων τοιχωμάτων κατά την εγχάραξη οπών SiO_2 [πλάσμα CHF_3/CF_4 , Boucher et al. (2004)]. (στ) Πτυχώσεις στα άκρα της βάσης αυλακιού Si [πλάσμα Cl_2 , Lane et al. (2000)]. (ζ) Τραχύτητα στο πλάγιο τοίχωμα και στη βάση αυλακιού Si [πλάσμα $\text{SF}_6/\text{C}_4\text{F}_8$, Μπούκουρας (2003)].

Ένα από τα παραδοσιακά προβλήματα αποτελεί η απώλεια της μικροσκοπικής ομοιομορφίας εγχάραξης [Gottscho et al. (1992)]. Η μικροσκοπική ομοιομορφία αφορά στην ομοιομορφία εγχάραξης όλων των εγχαρασσόμενων δομών (διατήρηση ίδιου ρυθμού

εγχάραξης σε όλες τις δομές). Η απώλεια μικροσκοπικής ομοιομορφίας οφείλεται⁹¹ στην εξάρτηση του ρυθμού εγχάραξης από τις διαστάσεις των εγχαρασσόμενων δομών ή καλύτερα στην επιβεβαιωμένη πειραματικά εξάρτηση του ρυθμού εγχάραξης από το LA των εγχαρασσόμενων δομών [ο.π]. Αν και οι LA των δομών που εγχαρασσονται σε ένα βήμα διαδικασίας κατασκευής ποικίλουν, η απαίτηση είναι ο ρυθμός εγχάραξης να είναι ίδιος για κάθε δομή. Η εξάρτηση του ρυθμού εγχάραξης από το LA περιγράφεται στη βιβλιογραφία από το αρκτικόλεξο ARDE {Aspect Ratio Dependent Etching, [ο.π]}.

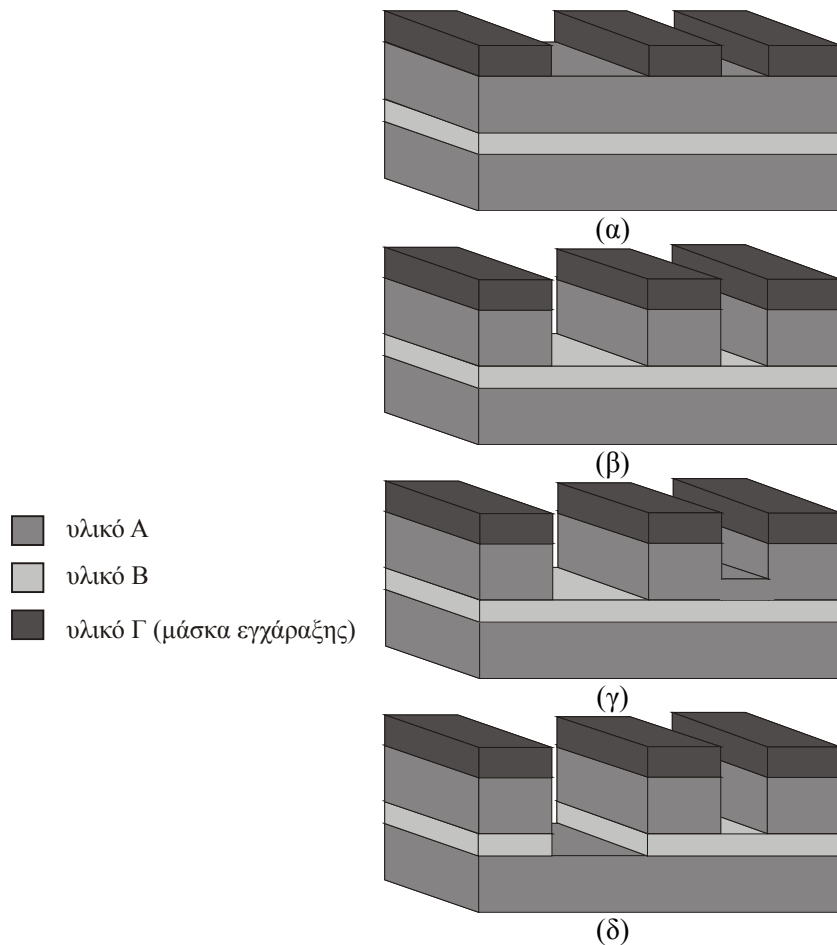
Η συνηθέστερη εκδοχή εξάρτησης του ρυθμού εγχάραξης από το LA είναι η υστέρηση εγχάραξης [reactive ion etching lag, RIE lag,⁹² Joubert et al. (1994)]: Ο ρυθμός εγχάραξης είναι μικρότερος, κατά κάποιο τρόπο «υστερεί», στις στενότερες δομές (Σχήμα 1.9α). Σε κάποιες περιπτώσεις, η υστέρηση εγχάραξης είναι πολύ έντονη και οδηγεί σε διακοπή της εγχάραξης [Joubert et al. (1994b)] και σε απόθεση πολυμερούς στην επιφάνεια (Σχήμα 1.9β). Πειραματικά έχει παρατηρηθεί και το αντίστροφο φαινόμενο της υστέρησης εγχάραξης, αυτό της αντίστροφης υστέρησης εγχάραξης [inverse RIE lag, Doemling et al. (1996)], κατά το οποίο οι στενότερες δομές εγχαρασσονται με μεγαλύτερο ρυθμό (Σχήμα 1.9γ).

Στη συνέχεια εξηγείται με ένα παράδειγμα γιατί είναι επιζήμια η εξάρτηση του ρυθμού εγχάραξης από το LA . Έστω δύο στρώματα υλικού A μεταξύ των οποίων παρεμβάλλεται λεπτό στρώμα υλικού B (Σχήμα 1.10α). Έστω στρώμα από υλικό Γ το οποίο παίζει το ρόλο της μάσκας εγχάραξης (προστατεύει το υποκείμενο στρώμα από την εγχάραξη) και δημιουργεί δύο δομές (αυλάκια) διαφορετικών LA [ίδιο βάθος (πάχος μάσκας) και διαφορετικό πλάτος, Σχήμα 1.10α]. Οι δομές εγχαρασσονται σε πλάσμα και έστω ότι η εγχάραξη είναι ανισοτροπική. Ο στόχος είναι να εγχαραχθεί το άνω στρώμα του υλικού A και στις δύο δομές χωρίς να καταστραφεί το στρώμα του υλικού B. Αν η εγχάραξη γίνει με τον ίδιο ρυθμό σε κάθε δομή, τότε η εγχαρασσόμενη επιφάνεια θα φτάσει στο υποκείμενο στρώμα υλικού B την ίδια χρονική στιγμή και για τις δύο δομές (Σχήμα 1.10β). Με αυτό τον τρόπο θα κατασκευαστούν στο τέλος της διαδικασίας εγχάραξης οι επιθυμητές δομές. Αν όμως συμβεί υστέρηση εγχάραξης, τότε η φαρδιά δομή θα εγχαραχθεί γρηγορότερα από τη στενή. Για χρόνο εγχάραξης τέτοιο ώστε το υλικό στη φαρδιά δομή να έχει εγχαραχθεί πλήρως, στη στενή δομή υπάρχει υπόλειμμα (Σχήμα 1.10γ). Για την απομάκρυνση του

⁹¹ Η απώλεια ομοιομορφίας εκτός από την εξάρτηση του ρυθμού εγχάραξης από το LA των δομών, μπορεί να οφείλεται και στην τοπική πυκνότητα των δομών επί του δισκίου (pattern dependent etching ή loading). Ο όρος microloading ή macroloading χρησιμοποιείται για να περιγράψει την εξάρτηση της εγχάραξης δομών με ακριβώς ίδιες διαστάσεις που βρίσκονται σε θέσεις επί του εγχαρασσόμενου δισκίου με διαφορετική πυκνότητα δομών: συνήθως παρατηρείται ότι ο ρυθμός εγχάραξης των απομονωμένων δομών είναι μεγαλύτερος από αυτόν στις δομές που είναι συγκεντρωμένες [Gottscho et al. (1992)]. Το φαινόμενο loading (micro ή macro) οφείλεται στην εξάντληση αντιδρώντων υπό συνθήκες όπου το στάδιο μεταφοράς τους στην επιφάνεια είναι το ελέγχον. Αύξηση της πυκνότητας των δομών έχει σαν αποτέλεσμα αύξηση της προς εγχάραξη επιφάνειας και μεγαλύτερη κατανάλωση αντιδρώντων. Στην παρούσα εργασία δεν εξετάζεται αυτή η αιτία απώλειας ομοιομορφίας εγχάραξης. Εξάλλου, η ανομοιομορφία εγχάραξης για απομακρυσμένες δομές στο ίδιο δισκίο λόγω της εξάντλησης των αντιδρώντων συχνά συγκαταλέγεται στη μακροσκοπική και όχι στη μικροσκοπική ανομοιομορφία [Giapis et al. (1990)]. Ο όρος μακροσκοπική ομοιομορφία αφορά και την ομοιομορφία εγχάραξης μεταξύ διαφορετικών δισκίων στον αντιδραστήρα [ο.π].

⁹² Η ονομασία οφείλεται σε ερευνητές της IBM [Gottscho et al. (1992)].

υπολείμματος στη στενή δομή απαιτείται πρόσθετος χρόνος εγχάραξης (overetching time). Στον πρόσθετο αυτό χρόνο εγχάραξης, στη φαρδιά δομή εκτίθεται προς εγχάραξη το στρώμα του υλικού Β, το οποίο είναι πιθανό να εγχαραχθεί και συνεπώς να καταστρέψει τη δομή και την αντίστοιχη διάταξη⁹¹ (Σχήμα 1.10δ). Αυτό το πρόβλημα αντιμετωπίζεται με μείωση του πρόσθετου χρόνου εγχάραξης, δηλαδή με αντιμετώπιση του φαινομένου υστέρησης εγχάραξης, ή/και με αύξηση της επιλεκτικότητας εγχάραξης του υλικού Α προς το υλικό Β. Τόσο το φαινόμενο υστέρησης εγχάραξης, όσο και η επιλεκτικότητα στην εγχάραξη με πλάσμα επηρεάζονται από τις συνθήκες στον κύριο όγκο του αντιδραστήρα.



Σχήμα 1.10 Δομές (αυλάκια) που περιλαμβάνουν τέσσερα στρώματα υλικού. Λεπτό στρώμα υλικού Β (ανοιχτός γκρι χρωματισμός) παρεμβάλλεται μεταξύ δύο στρωμάτων υλικού Α (γκρι χρωματισμός). Ένα στρώμα υλικού Γ (έντονος γκρι χρωματισμός) παίζει το ρόλο της μάσκας εγχάραξης (προστατεύει το υποκείμενο στρώμα από την εγχάραξη) και δημιουργεί δύο αυλάκια διαφορετικού AA [ίδιος βάθος (πάχος μάσκας) και διαφορετικό πλάτος]. Τα αυλάκια εγχαράσσονται σε πλάσμα και έστω ότι η εγχάραξη είναι ανισοτροπική. (α) Τα αυλάκια πριν την εγχάραξη. (β) Τα αυλάκια στο τέλος της εγχάραξης, αν η εγχάραξη γίνει με τον ίδιο ρυθμό σε κάθε αυλάκι. Τότε κατασκευάζονται οι επιθυμητές δομές. (γ) Τα αυλάκια, υπό συνθήκες υστέρησης εγχάραξης, μετά από χρόνο εγχάραξης τέτοιο ώστε το υλικό Α στο φαρδύ αυλάκι να έχει εγχαραχθεί πλήρως. Στο στενό αυλάκι υπάρχει υπόλειμμα υλικού Α. (δ) Τα αυλάκια μετά τον πρόσθετο χρόνο εγχάραξης (overetching time) για την

⁹¹ Για παράδειγμα αν το υλικό Β ήταν μονωτικό η διάταξη στην οποία ανήκει η δομή θα χάσει τη μόνωση.

απομάκρυνση του υπολείμματος στο στενό αυλάκι. Στον πρόσθετο αυτό χρόνο εγχάραξης, στο φαρδύτερο αυλάκι εκτίθεται προς εγχάραξη το υποκείμενο στρώμα του υλικού B, το οποίο εγχαράσσεται και καταστρέφει τη δομή.

Εκτός από τη μικροσκοπική ομοιομορφία, βασική απαίτηση στις περισσότερες περιπτώσεις εγχάραξης δομών είναι κάθετα πλάγια τοιχώματα και επίπεδη βάση (απόλυτα ορθογωνική δομή). Αποκλίσεις από την απόλυτα ορθογωνική δομή αποτελούν η δημιουργία εσοχής κάτω από τη μάσκα εγχάραξης (undercut, παραδοσιακό και πρωταρχικής σημασίας πρόβλημα, Σχήμα 1.10δ), η καμπύλωση των πλάγιων τοιχωμάτων [bowing, Boufnichel et al. (2002), Σχήμα 1.10ε] και οι πτυχώσεις στα άκρα της βάσης της δομής [microtrenching,⁹¹ Jin & Sawin (2003), Σχήμα 1.10στ]. Οι νέες προκλήσεις αφορούν στον έλεγχο του σχήματος σε δομές με υψηλό *AA* χρησιμοποιώντας τη διεργασία πολυβηματικής εγχάραξης με εναλλαγή αερίων πλάσματος. Ένα από τα προβλήματα σε αυτή τη διεργασία είναι η τραχύτητα που αναπτύσσεται κατά την εγχάραξη στο πλάγιο τοίχωμα (Σχήμα 1.10ζ).

Ο στόχος είναι η κατανόηση των μηχανισμών που προκαλούν την απώλεια μικροσκοπικής ομοιομορφίας και τις αποκλίσεις από την απόλυτα ορθογωνική δομή, καθώς και ο έλεγχος των αντίστοιχων προβλημάτων κατά την εγχάραξη δομών με πλάσμα. Στην επίτευξη του στόχου μπορεί να συμβάλει, εκτός από την πειραματική μελέτη, η προσομοίωση της εξέλιξης τοπογραφίας των εγχαρασσόμενων δομών.

1.6 Ο σκοπός της εργασίας

Ο σκοπός της εργασίας είναι η ανάπτυξη πλαισίου ολοκληρωμένης προσομοίωσης εξέλιξης τοπογραφίας δομών που εγχαρασσονται με πλάσμα. Το επίπεδο ολοκλήρωσης αφορά στη σύνδεση της αέριας φάσης στον κύριο όγκο του αντιδραστήρα πλάσματος με την τοπογραφία, το σχήμα της εγχαρασσόμενης δομής. Το πλαίσιο προσομοίωσης περιγράφεται στο Σχήμα 1.11 και αποτελείται από:

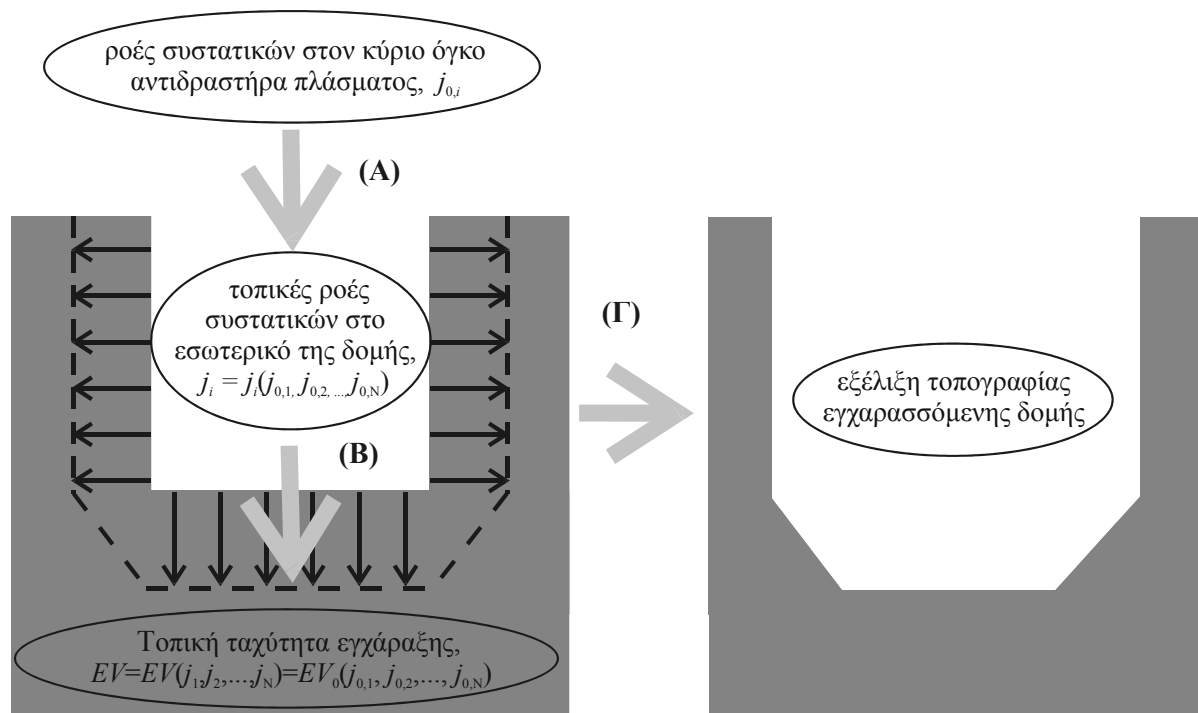
A) Μοντέλο υπολογισμού των τοπικών ροών των συστατικών μέσα στις εγχαρασσόμενες δομές. Η ροή των ουδέτερων συστατικών μέσα στις εγχαρασσόμενες δομές είναι σε συνθήκες υψηλού αριθμού Knudsen και η ροή των ιόντων καθορίζεται από το ηλεκτρικό πεδίο στην οριακή στοιβάδα. Ο υπολογισμός των τοπικών ροών των συστατικών των ροών στο εσωτερικό δομών λαμβάνει υπόψη τα φαινόμενα σκίασης και επανεκπομπής της ροής και προκύπτει από την επίλυση συστήματος ολοκληρωτικών εξισώσεων. Συνδέει τις ροές των συστατικών στον κύριο όγκο του αντιδραστήρα πλάσματος⁹² με τις τοπικές ροές στο εσωτερικό των εγχαρασσόμενων δομών.

⁹¹ Αν και οι διαστάσεις των πτυχών (αυλακιών) στα άκρα της βάσης της δομής μπορεί να είναι ακόμη και <50nm, έχει επικρατήσει ο όρος microtrenching για την περιγραφή δημιουργίας τους.

⁹² Είναι οι ροές των συστατικών που θα έφταναν από τον κύριο όγκο σε μια επίπεδη και ελεύθερη (σκίασης) επιφάνεια (§1.4).

Β) Μοντέλο εγχάραξης επιφανειών, το οποίο υπολογίζει το ρυθμό εγχάραξης της επιφάνειας και τους φαινόμενους συντελεστές προσκόλλησης των συστατικών στην επιφάνεια. Είναι φαινομενολογικό μοντέλο που βασίζεται σε ισοζύγια θέσεων ρόφησης πάνω στην επιφάνεια και αφορά εγχάραξη επιφανειών SiO₂ και Si σε πλάσμα φθοριωμένων υδρογονανθράκων. Συνδέει τις τοπικές ροές στο εσωτερικό των εγχαρασσόμενων δομών με την τοπική ταχύτητα εγχάραξης.

Γ) Αλγόριθμος εξέλιξης τοπογραφίας της εγχαρασσόμενης δομής. Υλοποιείται η μέθοδος των ισοϋψών, η οποία βασίζεται στην έννοια της πεπλεγμένης συνάρτησης: η τοπογραφία της εγχαρασσόμενης δομής είναι ένα δυναμικό σύνορο που ορίζεται έμμεσα ως η ισοϋψής μηδέν πεπλεγμένης συνάρτησης. Ο αλγόριθμος εξέλιξης τοπογραφίας χρησιμοποιεί την τοπική ταχύτητα εγχάραξης για τη μετακίνηση της τοπογραφίας των εγχαρασσόμενων δομών.



Σχήμα 1.11 Σχηματική περιγραφή του πλαισίου προσομοίωσης. Το μοντέλο υπολογισμού τοπικών ροών στο εσωτερικό δομών (Α) υπολογίζει τις τοπικές ροές (j_i , $i=1,2,\dots,N$ =πλήθος συστατικών) συναρτήσει των ροών στον κύριο όγκο του αντιδραστήρα πλάσματος ($j_{0,i}$): $j_i = j_i(j_{0,1}, j_{0,2}, \dots, j_{0,N})$. Το μοντέλο εγχάραξης επιφανειών (Β) υπολογίζει την ταχύτητα εγχάραξης (EV) συναρτήσει των τοπικών ροών των συστατικών: $EV = EV(j_1, j_2, \dots, j_N)$. Με τη σύζευξη του μοντέλου υπολογισμού τοπικών ροών στο εσωτερικό δομής με το μοντέλο εγχάραξης επιφανειών, η τοπική ταχύτητα εγχάραξης συνδέεται με τις ροές των συστατικών στον κύριο όγκο του αντιδραστήρα πλάσματος: $EV = EV[j_1(j_{0,1}, j_{0,2}, \dots, j_{0,N}), j_2(j_{0,1}, j_{0,2}, \dots, j_{0,N}), \dots, j_N(j_{0,1}, j_{0,2}, \dots, j_{0,N})] = EV_0(j_{0,1}, j_{0,2}, \dots, j_{0,N})$. Ο αλγόριθμος εξέλιξης τοπογραφίας (Γ) μετακινεί το σύνορο σύμφωνα με την τοπική ταχύτητα εγχάραξης.

Στο Μέρος II (Υπολογισμός ταχύτητας συνόρου στα προβλήματα εγχάραξης, Κεφ. 2-4) περιγράφονται τα συστατικά (Α) και (Β) του πλαισίου προσομοίωσης καθώς και ο

αλγόριθμος σύζευξής τους. Στο Μέρος III (Αλγόριθμος εξέλιξης τοπογραφίας. Εξέλιξη συνόρου με τη μέθοδο των ισοϋψών, Κεφ. 5-9) περιγράφεται ο αλγόριθμος εξέλιξης τοπογραφίας και αντιμετωπίζονται αυτοτελώς τα υπολογιστικά προβλήματα που περικλείει η υλοποίησή του. Στο Μέρος IV (Κεφ. 10) παρουσιάζονται εφαρμογές του πλαισίου προσομοίωσης και στο Μέρος V περιέχονται τα συμπληρωματικά παραρτήματα (Α-ΣΤ).

Στην παρούσα εργασία, το πλαίσιο προσομοίωσης χρησιμοποιείται για την πρόβλεψη και ερμηνεία φαινομένων που οδηγούν στην απώλεια μικροσκοπικής ομοιομορφίας κατά την εγχάραξη δομών SiO₂ σε πλάσμα φθοριωμένων υδρογονανθράκων (π.χ. υστέρηση και αντίστροφη υστέρηση εγχάραξης). Επίσης, εφαρμόζεται στη διεργασία πολυβηματικής εγχάραξης αυλακιών Si με εναλλαγή αερίων πλάσματος. Με τη χρήση του πλαισίου προσομοίωσης αναδεικνύεται πιθανός μηχανισμός για τις νανο-πτυχώσεις στη βάση εγχαρασσόμενων δομών SiO₂. Επίσης, φαίνεται ότι το πλαίσιο προσομοίωσης μπορεί να χρησιμοποιηθεί για τη διερεύνηση των μηχανισμών που προκαλούν την τραχύτητα εγχαρασσόμενης επιφάνειας. Οι εφαρμογές του πλαισίου αφορούν την εγχάραξη μικρο- και νανο-δομών. Τέλος, σημειώνεται η ευελιξία του πλαισίου μέσα από εφαρμογές του σε άλλες διεργασίες, όπως η απόθεση και η εμφάνιση κατά τη λιθογραφία.

Το πλαίσιο προσομοίωσης δεν εξαντλεί τις εφαρμογές του στα πλαίσια της εργασίας. Ο στόχος της εργασίας ήταν η ανάπτυξη πλαισίου που θα αποτελέσει την υποδομή για μελλοντικές εφαρμογές. Το ίδιο πλαίσιο προσομοίωσης μπορεί να εφαρμοστεί για την μελέτη και άλλων φαινομένων κατά την εγχάραξη δομών SiO₂ και Si που οδηγούν σε αποκλίσεις από το επιθυμητό σχήμα των δομών (π.χ η καμπύλωση των πλάγιων τοιχωμάτων). Επίσης μπορεί να εφαρμοστεί σε άλλες διεργασίες εγχάραξης και απόθεσης: αυτό που απαιτείται είναι η αντικατάσταση του μοντέλου εγχάραξης [συστατικό (B) του πλαισίου προσομοίωσης] από αντίστοιχο κατάλληλο μοντέλο. Τέλος, η μέθοδος των ισοϋψών, ο αλγόριθμος εξέλιξης τοπογραφίας, μπορεί να εφαρμοστεί και σε άλλες περιοχές, όπως στην καύση όπου το κινούμενο σύνορο είναι το μέτωπο της φλόγας και στη ρευστομηχανική όπου το κινούμενο σύνορο είναι διεπιφάνεια ρευστών. Περισσότερες λεπτομέρειες για αυτές, αλλά και για πληθώρα άλλων εφαρμογών, μπορεί κάποιος να βρει στα βιβλία των εμπνευστών της μεθόδου των ισοϋψών, Osher [Osher & Fedkiw (2003)] και Sethian [Sethian (1999)].

1.7 Το σημερινό επίπεδο γνώσεων

Το πλαίσιο προσομοίωσης που παρουσιάζεται στην εργασία συνδέει τον κύριο όγκο του αντιδραστήρα με το σχήμα των εγχαρασσόμενων δομών. Συμπληρωματικά αυτού του πλαισίου προσομοίωσης είναι α) μοντέλο για την αέρια φάση στον αντιδραστήρα πλάσματος και β) μοντέλο για την προσομοίωση εγχάραξης στην ατομική κλίμακα (<10 nm, atomic ή molecular scale simulation). Σε επίπεδο διαστάσεων, το πλαίσιο προσομοίωσης είναι μεταξύ αυτών των δύο συμπληρωματικών του μοντέλων. Στη βιβλιογραφία το πλαίσιο

προσομοίωσης που περιγράφεται στην εργασία αναφέρεται ως προσομοίωση στην κλίμακα των δομών (feature scale simulation). Η προσομοίωση στην αέρια φάση του αντιδραστήρα περιγράφεται ως προσομοίωση στην κλίμακα του αντιδραστήρα (tool ή equipment ή reactor scale simulation).

Με την προσθήκη μοντέλου για την αέρια φάση στον κύριο όγκο και στις οριακές στοιβάδες του αντιδραστήρα πλάσματος, το πλαίσιο προσομοίωσης μπορεί να συνδέσει τις λειτουργικές παραμέτρους του αντιδραστήρα με την τοπογραφία των εγχαρασσόμενων δομών. Το μοντέλο στην αέρια φάση γενικά είναι ένας συνδυασμός δύο τύπων μοντέλων: αυτά που περιγράφουν τις φυσικές και αυτά που περιγράφουν τις χημικές διεργασίες. Τα πρώτα συνδέουν τις λειτουργικές παραμέτρους του αντιδραστήρα, όπως η πίεση στον αντιδραστήρα, με τις πυκνότητες των ιόντων και ηλεκτρονίων. Από τα μοντέλα που περιγράφουν τις χημικές διεργασίες, χρησιμοποιώντας τις πυκνότητες των ιόντων και ηλεκτρονίων, υπολογίζονται οι πυκνότητες των ουδέτερων συστατικών.⁹¹ Το μοντέλο για την αέρια φάση από υπολογιστική σκοπιά είναι πολύπλοκο [Lieberman & Lichtenberg (1994), σ. 25-37]. Πρέπει να λυθεί ένα σύστημα συζευγμένων μη γραμμικών εξισώσεων (Maxwell, Boltzmann, διατήρησης). Μοντέλα για την αέρια φάση με διαφορετικό επίπεδο λεπτομέρειας και για διαφορετικού τύπου αντιδραστήρες πλάσματος έχουν αναπτυχθεί και εφαρμοστεί από αρκετές ερευνητικές ομάδες {[MPRES, Modular Plasma REactor Simulator, Wise et al. (1995), Panagopoulos & Economou (1999), Panagopoulos et al. (2002)], [HPEM, Hybrid Plasma Equipment Model, Ventzek et al. (1994), Zhang & Kushner (2001)], [Gogolides & Sawin (1992), Mantzaris et al. (1995)]}. Επίσης, υπάρχει διαθέσιμο και εμπορικό λογισμικό για υπολογισμούς στην αέρια φάση στον κύριο όγκο αντιδραστήρα πλάσματος από την εταιρεία CFDRC (www.cfdrc.com).

Η προσομοίωση εγχάραξης σε νανο- και ατομική κλίμακα γίνεται με μοντέλα μοριακής δυναμικής [Barone & Graves (1995), Abrams & Graves (1999), Graves & Humbird (2002), Humbird & Graves (2004)], με τη μέθοδο Monte Carlo [Drotar et al. (2000b)] ή ακόμη και με συνεχή μοντέλα [Zhao et al. (1999), Drotar et al. (2000)]. Η τάση⁹² προς ολοένα μικρότερες διαστάσεις των κατασκευαζόμενων δομών καθιστά τον έλεγχο της τραχύτητας (τοπογραφία σε νανο- και ατομική κλίμακα) κρίσιμο στο μέλλον, αφού όσο μικραίνουν οι διαστάσεις, η τραχύτητα θα αποτελεί σημαντικό στοιχείο της κατασκευαζόμενης δομής. Για παράδειγμα, σε μία δομή με χαρακτηριστική διάσταση 250 nm (π.χ. ένα αυλάκι με πλάτος 250 nm), πλευρική τραχύτητα 10 nm δεν είναι το ίδιο σημαντική όσο σε δομή με χαρακτηριστική διάσταση 50 nm.

Τα πλαίσια προσομοίωσης που αφορούν στην κλίμακα των δομών γενικά μπορούν να κατηγοριοποιηθούν ανάλογα με τον τύπο των μοντέλων που συνθέτουν το πλαίσιο.

⁹¹ Τα αποτελέσματα του μοντέλου που περιγράφει τις φυσικές διεργασίες εξαρτώνται από αυτά του μοντέλου που περιγράφει τις χημικές. Οι εξισώσεις των μοντέλων είναι συζευγμένες.

⁹² Μια ενδιαφέρουσα αναφορά για την τάση προς μικρότερες διαστάσεις των κατασκευαζόμενων δομών μικρο-ηλεκτρο-μηχανικών συστημάτων περιέχεται στο μάθημα CDV437 του Dr. Madou "Microfabrication Techniques for Microfluidics and BioMEMS" της SPIE (The International Society of Optical Engineering, www.spie.org).

Ειδικότερα, ο υπολογισμός της τοπικής ροής στο εσωτερικό της δομής γίνεται είτε με τη μέθοδο Monte Carlo, είτε με «συνεχή»⁹¹ μοντέλα. Τα μοντέλα εγχάραξης επιφάνειας στην πλειοψηφία τους βασίζονται σε ισοζύγια θέσεων ρόφησης στην επιφάνεια και στο κλάσμα κάλυψης της επιφάνειας. Αφορούν διαφορετικά συστήματα πλάσματος – υποστρώματος και εμφανίζουν διαφορετικό επίπεδο λεπτομέρειας. Οι αλγόριθμοι εξέλιξης τοπογραφίας που έχουν χρησιμοποιηθεί (§5.1) είναι η μέθοδος χορδής (string algorithm) και παραλλαγές της, η μέθοδος των χαρακτηριστικών (method of characteristics), η μέθοδος των ισοϋψών (level set method) και μέθοδοι κελιών (cell based methods).

Στη βιβλιογραφία έχουν προταθεί αρκετά πλαίσια προσομοίωσης. Η ερευνητική ομάδα του Dr. Kushner από το Πανεπιστήμιο του Illinois έχει αναπτύξει πλαίσιο προσομοίωσης που χρησιμοποιεί α) μέθοδο Monte Carlo για τον υπολογισμό των τοπικών ροών στο εσωτερικό δομών, β) μέθοδο κελιών για την εξέλιξη της τοπογραφίας και γ) μοντέλο εγχάραξης που βασίζεται στο κλάσμα των συστατικών στα κελιά που ορίζουν την επιφάνεια εγχάραξης. Μάλιστα αυτό το πλαίσιο προσομοίωσης περιλαμβάνει και μοντέλο για την αέρια φάση και έχει εφαρμοστεί στην εγχάραξη δομών Si με πλάσμα Cl₂ [Hoekstra et al. (1997)] και δομών SiO₂ σε πλάσμα C₂F₆ [Zhang & Kushner (2001)]. Αντίστοιχο (χωρίς μοντέλο για την αέρια φάση) είναι το πλαίσιο προσομοίωσης της ερευνητικής ομάδας του Dr. Sawin από το MIT (Massachusetts Institute of Technology), το οποίο έχει εφαρμοστεί στην εγχάραξη δομών Si με Cl₂ και HBr [Mahorowala (1998), Mahorowala & Sawin (2002), Jin & Sawin (2003)].

Αντίστοιχο με τα δύο προαναφερθέντα πλαίσια προσομοίωσης είναι αυτό που περιγράφεται στην εργασία των Marcos et al., το οποίο εφαρμόζεται στην εγχάραξη δομών Si με πλάσμα SF₆/O₂ [Marcos et al. (2003)]. Το SIMBAD [SIMulation by BALListic Deposition model, Dew et al (1991), Tait et al. (1994)] είναι ακόμη ένα πλαίσιο προσομοίωσης που βασίζεται στη μέθοδο Monte Carlo και εφαρμόστηκε κυρίως σε διεργασίες απόθεσης.⁹² Εμπορικό λογισμικό που χρησιμοποιεί μέθοδο Monte Carlo και κελιών για την προσομοίωση εξέλιξης τοπογραφίας σε διεργασίες απόθεσης και εγχάραξης είναι αυτό της εταιρείας SILVACO: ATHENA-Monte Carlo etch/depo (www.silvaco.com/products/vwf/athena/mcdeposit/mcdeposit_br.html).

Πλαίσιο προσομοίωσης περισσότερο κοντινό με αυτό της εργασίας έχει αναπτυχθεί από την ερευνητική ομάδα του Dr. Cale, αρχικά στο Πανεπιστήμιο της Πολιτείας της Αριζόνα (Arizona State University), και μέχρι σήμερα στο Rensselaer Polytechnic Institute στη Νέα Υόρκη. Από τα πρώτα στάδια ανάπτυξής του [Cale & Raupp (1990), Cale et al.

⁹¹ Ο όρος «συνεχές» δεν αφορά στα κλασσικά μοντέλα που βασίζονται στο συντελεστή διάχυσης, αλλά σε ολοκληρωτικές εξισώσεις. Οι εξισώσεις αυτές προκύπτουν από ολοκλήρωση κατανομών ταχυτήτων των σωματιδίων, λαμβάνοντας υπόψη ότι, στις συνθήκες υψηλού αριθμού Knudsen που ισχύουν για τη ροή στο εσωτερικό των εγχαρασσόμενων δομών, δεν συμβαίνουν συγκρούσεις μεταξύ των σωματιδίων.

⁹² Το αντίστοιχο λογισμικό ήταν διαθέσιμο μέχρι το 2003 από τη Reaction Design Inc. (www.reactiondesign.com) με το εμπορικό όνομα PVD-Pro. Σήμερα δεν υποστηρίζεται και δεν αναπτύσσεται πλέον από την εταιρεία.

(1991)] μέχρι και τα τελευταία, όπου α) συνδυάζεται με το πακέτο CHEMKIN⁹¹ που περικλείει μοντέλο για τις ομογενείς δράσεις στην αέρια φάση αλλά και για τις ετερογενείς στην επιφάνεια και β) χρησιμοποιεί τη μέθοδο των ισοϋψών ως αλγόριθμο εξέλιξης τοπογραφίας, αυτό το πλαίσιο έχει εφαρμοστεί κυρίως σε διεργασίες απόθεσης [Cale et al. (1998), Labun et al. (2000), Merchant et al. (2000)]. Το εμπορικό λογισμικό EVOLVE της εταιρείας Process Evolution (www.process-evolution.com) ενσωματώνει αυτό το πλαίσιο προσομοίωσης. Ένα ακόμη λογισμικό, αποτέλεσμα πρόσφατης εργασίας της ίδιας ομάδας, είναι το PLENTE [Parallel Environment for Nanoscale Topography Evolution, Bloomfield & Cale (2004), www.process-evolution.com/plentehome.html] που χρησιμοποιεί τη μέθοδο ισοϋψών ως αλγόριθμο εξέλιξης τοπογραφίας στη νανοκλίμακα.⁹²

Ένα ακόμη πλαίσιο προσομοίωσης κοντινό με αυτό της εργασίας έχει αναπτυχθεί από την ερευνητική ομάδα του Dr. McVittie στο Εργαστήριο Ολοκληρωμένων Κυκλωμάτων (Integrated Circuits Laboratory) και το τμήμα Χημικής Μηχανικής του Πανεπιστημίου του Stanford [Singh et al. (1992), Singh et al. (1994), Han et al. (1995), Hsiau et al. (1997)]. Αυτό το πλαίσιο ενσωματώθηκε στο λογισμικό SPEEDIE [Stanford Profile Emulator for Etching and Deposition in Integrated circuit Engineering, McVittie et al. (1996)]. Το λογισμικό εφαρμόστηκε σε διεργασίες εγχάραξης και απόθεσης. Περιλαμβάνει εμπειρικά και μοντέλα εγχάραξης επιφανειών που βασίζονται σε φυσικούς μηχανισμούς. Ο αλγόριθμος εξέλιξης τοπογραφίας που αρχικά χρησιμοποιήθηκε στο SPEEDIE ήταν η μέθοδος χορδής. Οι Hsiau et al. ενσωμάτωσαν σε αυτό το τη μέθοδο των ισοϋψών [Hsiau et al. (1997)].⁹³

Οι Levinson et al. επέκτειναν το πλαίσιο των Singh et al. [Singh et al. (1992)] με λεπτομερέστερο μοντέλο υπολογισμού των τοπικών ροών στο εσωτερικό των δομών και λεπτομερές μοντέλο εγχάραξης επιφάνειας Si σε πλάσμα χημείας Cl [Levinson et al. (1997), Levinson et al. (2000)]. Χρησιμοποίησαν τη μέθοδο χορδής για την εξέλιξη της τοπογραφίας. Την ίδια μέθοδο χρησιμοποίησαν και οι Tuda et al. στο δικό τους πλαίσιο προσομοίωσης, το οποίο εφάρμοσαν στην εγχάραξη δομών Si σε πλάσμα Cl₂ [Tuda et al. (1997)].

Ένα ακόμη πλαίσιο προσομοίωσης συγγενές με τα SPEDDIE και EVOLVE είναι το MODERN [Matsushita Opportune Dry Etching Simulator with a Realistic and New surface reaction model, Misaka & Harafuji (1997), Harafuji et al. (1999)], το οποίο χρησιμοποιεί τη μέθοδο χορδών για την εξέλιξη τοπογραφίας και εφαρμόζεται στην εγχάραξη δομών SiO₂ και Si. Οι Cooperberg et al. χρησιμοποιούν «συνεχές» μοντέλο για τον υπολογισμό των τοπικών ροών των ουδέτερων συστατικών και μέθοδο Monte Carlo για τον αντίστοιχο υπολογισμό για τα ιόντα [Cooperberg et al. (2002)]. Επίσης, χρησιμοποιούν τη μέθοδο των

⁹¹ Η ανάπτυξη του ξεκίνησε από τα Sandia National Laboratories (Livermore, California). Σήμερα είναι εμπορικό πακέτο που διατίθεται από τη Reaction Design Inc. [www.reactiondesign.com].

⁹² Το πακέτο είναι σε έκδοση άλφα (α version) και δεν διατίθεται.

⁹³ Στο τελευταίο διαθέσιμο εγχειρίδιο χρήσης του SPEDDIE που αφορά στην έκδοση 3.0 [McVittie et al. (1996)], ο αλγόριθμος εξέλιξης τοπογραφίας είναι η μέθοδος χορδών. Αν και το λογισμικό χρησιμοποιήθηκε και σε εργασίες μετά το 1997 [Abdollahi-Alibeik et al. (1999), μάλιστα σε αυτήν την εργασία ο αλγόριθμος εξέλιξης τοπογραφίας είναι τροποποιημένη μέθοδος χορδής, σήμερα δεν υπάρχει αντίστοιχη ιστοσελίδα. Η τελευταία διαθέσιμη έκδοση κώδικα που μπορεί κάποιος να βρει στον ftp sever του Πανεπιστημίου του Stanford είναι η 0.3 (1991).

χαρακτηριστικών ως αλγόριθμο εξέλιξης τοπογραφίας και μοντέλο εγχάραξης επιφάνειας που βασίζεται στο κλάσμα κάλυψης και εφαρμόζουν το πλαίσιο προσομοίωσης στην εγχάραξη Al σε πλάσμα Cl_2/BCl_3 . Η μέθοδος χορδής και ένα «συνεχές» μοντέλο (αποτέλεσμα προσαρμογής σε προσομοίωση με τη μέθοδο Monte Carlo) για τον υπολογισμό των τοπικών ροών υλοποιείται στο πλαίσιο που προτείνουν οι Volland et al., το οποίο εφαρμόζεται στην διεργασία πολυβηματικής εγχάραξης δομών Si με εναλλαγή αερίων πλάσματος [Volland et al. (2002)].

Οι Adalsteinsson και Sethian ήταν οι πρώτοι που εφάρμοσαν τη μέθοδο των ισοϋψών σε προβλήματα εγχάραξης δομών [Adalsteinsson & Sethian (1995b), Adalsteinsson & Sethian (1995c), Adalsteinsson & Sethian (1997)]. Εστίασαν στη μέθοδο των ισοϋψών και χρησιμοποίησαν απλά μοντέλα εγχάραξης. Από την πρώτη εφαρμογή της, υιοθετήθηκε σε αρκετές εργασίες. Οι Hsiau et al. δοκίμασαν τη μέθοδο των ισοϋψών σε διάφορα προβλήματα απόθεσης και εγχάραξης [Hsiau et al. (1997)].

Οι Hwang et al. περιγράφουν πλαίσιο προσομοίωσης, που χρησιμοποιεί τη μέθοδο των ισοϋψών για την εξέλιξη της τοπογραφίας [SPELS, Simulation of Profile Evolution using Level Sets, (Plasma Processing Modeling Group, Devices and Nanotechnology Integrated Product Team, NASA Ames Research Center)] και εφαρμόζεται στην εγχάραξη δομών Si με χημεία Cl και HBr [Hwang et al. (1999), Hwang et al. (2002)]. Τη μέθοδο των ισοϋψών ως αλγόριθμο εξέλιξης τοπογραφίας χρησιμοποιούν και οι Im et al. και εφαρμόζουν το δικό τους πλαίσιο προσομοίωσης στην εγχάραξη δομών Si με πλάσμα Cl_2 και CF_4 [SPEED, Simulation of Profile Evolution in Etching and Deposition, Im et al. (2001)]. Μάλιστα, ενσωματώνουν στο πλαίσιο τους και μοντέλο για την οριακή στοιβάδα. Η μέθοδος των ισοϋψών υλοποιείται και στο πλαίσιο προσομοίωσης των La Magna και Garozzo, το οποίο και εφαρμόζουν στην εγχάραξη αυλακιών SiO_2 με πλάσμα φθοριωμένων υδρογονανθράκων, χωρίς να λαμβάνουν υπόψη επανεκπομπή της ροής στο εσωτερικό των δομών [La Magna & Garozzo (2003)].

Οι αντίστοιχες στη βιβλιογραφία εργασίες είναι και πολλές και εξαιρετικές. Η σχετική έρευνα γίνεται στα καλύτερα Πανεπιστήμια, είναι αποτέλεσμα πολυάριθμων ομάδων και συνδέεται αμφίδρομα με τη βιομηχανία παραγωγής: τροφοδοτείται από βιομηχανικά προβλήματα και ανατροφοδοτεί με μελέτες και πιθανές λύσεις. Στη συνέχεια σημειώνονται οι βασικές διαφορές του πλαισίου προσομοίωσης της εργασίας με αυτά της βιβλιογραφίας.

A) Το μοντέλο εγχάραξης της επιφάνειας στην εργασία είναι πρωτότυπο. Τα μοντέλα εγχάραξης επιφάνειας στα περισσότερα πλαίσια προσομοίωσης, κυρίως στα εμπορικά λογισμικά, δεν είναι το ίδιο λεπτομερή και συνήθως έχουν προσαρμόσιμες παραμέτρους.

B) Ο αλγόριθμος εξέλιξης τοπογραφίας του πλαισίου προσομοίωσης της εργασίας είναι η μέθοδος ισοϋψών που εμφανίζει πλεονεκτήματα σε σχέση με τις υπόλοιπες μεθόδους (§5.1).

Γ) Σε αρκετά πλαίσια προσομοίωσης η προσοχή εστιάζεται σε ένα από τα τρία συστατικά του πλαισίου, είτε στο μοντέλο υπολογισμού των ροών, είτε στο μοντέλο επιφάνειας, είτε στον αλγόριθμο εξέλιξης τοπογραφίας. Το πλαίσιο στην εργασία μπορεί να χαρακτηριστεί ισορροπημένο με το ίδιο επίπεδο λεπτομέρειας σε κάθε μοντέλο.

Οι πρωτοτυπίες και οι διαφορές από τις αντίστοιχες εργασίες για κάθε συστατικό του πλαισίου προσομοίωσης αναφέρονται στο αντίστοιχο κεφάλαιο. Τέλος, στην εργασία γίνεται επαλήθευση για κάθε τμήμα του κώδικα⁹¹ που αντιστοιχεί σε αριθμητικό υπολογισμό (Παράρτημα Α). Η επαλήθευση κώδικα (code verification) αποτελεί το πρώτο βήμα στη διαδικασία ποσοτικοποίησης της αβεβαιότητας των υπολογισμών. Με την επαλήθευση κώδικα, γενικά εξετάζεται αν πράγματι ο κώδικας λύνει σωστά τις εξισώσεις για την επίλυση των οποίων αναπτύχθηκε.

⁹¹ Η συντριπτική πλειοψηφία των γραμμών κώδικα είναι γραμμένες σε γλώσσα C++. Οι υπόλοιπες είναι σε FORTRAN 77.

Μέρος II

Υπολογισμός ταχύτητας συνόρου στα προβλήματα εγχάραξης

Η ταχύτητα μετατόπισης του συνόρου ορίζει το φυσικό πρόβλημα εξέλιξης συνόρου που αντιμετωπίζεται. Στο Μέρος II υπολογίζεται η τοπική ταχύτητα εγχάραξης στο εσωτερικό εγχαρασσόμενων δομών (ταχύτητα μετατόπισης εγχαρασσόμενης επιφάνειας) σαν συνάρτηση των ροών των συστατικών στον κύριο όγκο του αντιδραστήρα πλάσματος. Τα αναγκαία για τον υπολογισμό της τοπικής ταχύτητας εγχάραξης είναι α) μοντέλο υπολογισμού τοπικών ροών στο εσωτερικό εγχαρασσόμενων δομών [συστατικό (A) του πλαισίου προσομοίωσης, Κεφ. 2], β) μοντέλο εγχάραξης επιφανειών [συστατικό (B) του πλαισίου προσομοίωσης, Κεφ. 3] και γ) ο αλγόριθμος σύζευξης των δύο μοντέλων (Κεφ. 4).

Κεφάλαιο 2

Μοντέλο υπολογισμού τοπικής ροής στο εσωτερικό δομής

Περιγράφεται μοντέλο υπολογισμού της τοπικής ροής συστατικού στο εσωτερικό δομής σε συνθήκες μοριακής ροής. Λαμβάνονται υπόψη φαινόμενα σκίασης και επανεκπομπής της ροής και ο υπολογισμός εστιάζεται σε δομές αυλακιού και οπής κυλινδρικής συμμετρίας. Η εξίσωση που δίνει την τοπική ροή στο εσωτερικό δομής είναι μια ολοκληρωτική εξίσωση Fredholm 2^{ου} είδους (μη ομογενής), και για την επίλυσή της δοκιμάζονται δύο μέθοδοι. Παρουσιάζονται αποτελέσματα σε πρότυπες δομές και εξετάζεται η σημασία της σκίασης και της επανεκπομπής στην τοπική ροή.

2.1 Εισαγωγή

Ο όρος ροή (flow) αφορά στην κίνηση ενός ρευστού σε μια ορισμένη περιοχή του χώρου η οποία ονομάζεται πεδίο ροής [Παπαϊωάννου (1993b), σ. 31]. Ρυθμός ροής (flux) μάζας ρευστού ονομάζεται η ποσότητα ρευστού που διέρχεται από μια ορισμένη επιφάνεια του πεδίου ροής στη μονάδα του χρόνου [ο.π, σ. 31]. Σύμφωνα με την κινητική θεωρία των αερίων [Atkins (1999), σ. 724], ο ρυθμός ροής (flux) σωματιδίων που διέρχεται από μία επιφάνεια είναι ο ρυθμός με τον οποίο τα σωματίδια συγκρούονται με αυτή την επιφάνεια, δηλαδή το πλήθος των συγκρούσεων με την επιφάνεια σε ένα χρονικό διάστημα προς το χρονικό διάστημα. Για τον υπολογισμό του ρυθμού ροής πρέπει να είναι γνωστό το πεδίο ταχύτητας του ρευστού, ή η κατανομή ταχυτήτων και η γωνιακή κατανομή των σωματιδίων, καθώς και το μέγεθος και ο προσανατολισμός της επιφάνειας (που μπορεί να είναι φυσική έξοδος ενός αγωγού αλλά και μια φανταστική διατομή εντός του ρευστού). *Στη συνέχεια του κειμένου χρησιμοποιείται, για λόγους συντομίας ο μονολεκτικός όρος ροή για να εκφράσει τον περιφραστικό όρο ρυθμός ροής ανά μονάδα επιφάνειας.*

Το μοντέλο υπολογισμού της τοπικής ροής συστατικού που περιγράφεται στο παρόν κεφάλαιο αποτελεί το (A) συστατικό του πλαισίου προσομοίωσης (§1.6). Ο στόχος είναι ο υπολογισμός της τοπικής ροής συστατικού στο εσωτερικό δομής³¹ σε σχέση με αυτή σε μια ελεύθερη επιφάνεια. Η τοπική ροή συστατικού σε στοιχειώδη επιφάνεια στο εσωτερικό δομής διαφέρει από την αντίστοιχη σε ελεύθερη επιφάνεια: η τοπογραφία της δομής και φαινόμενα μεταφοράς εντός της δομής (π.χ. σκίαση, επανεκπομπή) επηρεάζουν τη ροή. Επίσης, η τοπική ροή συστατικού σε στοιχειώδη επιφάνεια στο εσωτερικό δομής εξαρτάται α) από την κατανομή ροής του συστατικού στην είσοδο της δομής και β) από την αλληλεπίδραση του συστατικού με τις στοιχειώδεις επιφάνειες στο εσωτερικό της δομής (πιθανότητα προσκόλλησης στην επιφάνεια, μηχανισμός επανεκπομπής).

Στη συνέχεια, αφού παρουσιαστούν τα βασικά φαινόμενα που συμβαίνουν στο εσωτερικό εγχαρασσομένης δομής (§2.2), περιγράφεται μοντέλο για τον υπολογισμό της τοπικής ροής συστατικού σε κάθε στοιχειώδη επιφάνεια δομής. Ειδικότερα, περιγράφεται το πλαίσιο και οι βασικές παραδοχές του μοντέλου (§2.3), και έπειτα υπολογίζεται η απευθείας ροή από τον όγκο στο εξωτερικό της δομής (π.χ. από τον κύριο όγκο αντιδραστήρα πλάσματος) που ενσωματώνει την επίδραση της σκίασης στη ροή (§2.4), καθώς και η ροή από επανεκπομπή (§2.5). Ακολουθεί η περιγραφή και κρίσιμα σημεία της αριθμητικής μεθόδου επίλυσης της ολοκληρωτικής εξίσωσης υπολογισμού της τοπικής ροής στο εσωτερικό των δομών (§2.6). Στην §2.7 παρουσιάζονται και σχολιάζονται αποτελέσματα υπολογισμού της τοπικής ροής στο εσωτερικό των δομών και τέλος στην §2.8 γίνεται αξιολόγηση του προτεινόμενου μοντέλου και της μεθόδου επίλυσης.

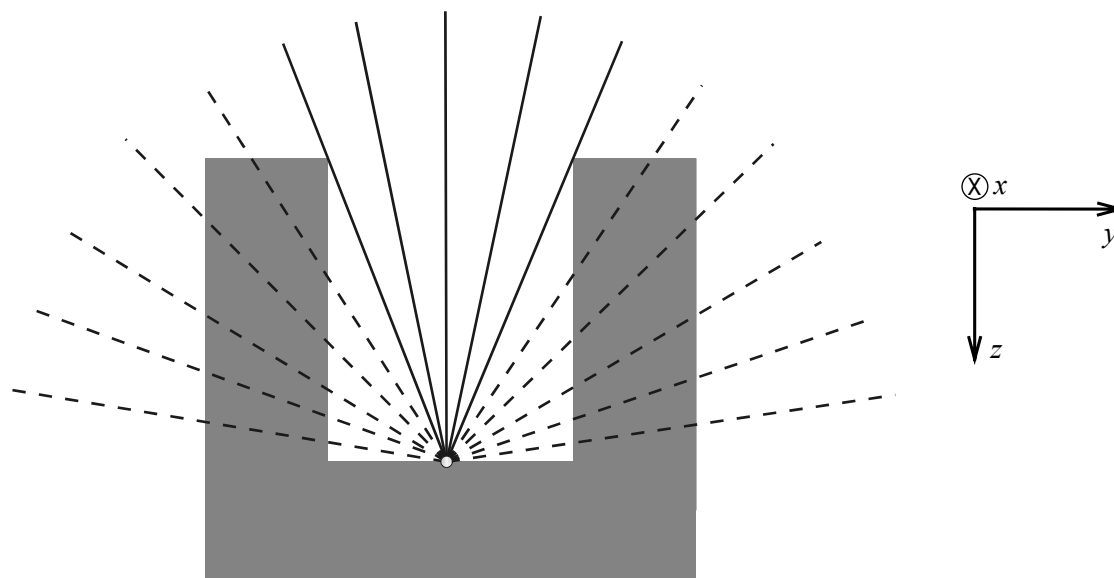
³¹ Οι έννοιες δομή, τοπογραφία δομής και ελεύθερη σκίασης επιφάνεια περιγράφονται στην §1.4 και το Σχήμα 1.8.

2.2 Τα βασικά φαινόμενα

Στις επόμενες παραγράφους (§2.2.1 – §2.2.4) περιγράφονται συνοπτικά τα βασικά φαινόμενα που συμβαίνουν στο εσωτερικό μιας εγχαρασσόμενης δομής και διαφοροποιούν τη ροή σε μια στοιχειώδη επιφάνεια στο εσωτερικό της δομής από την αντίστοιχη σε μια ελεύθερη επιφάνεια: η σκίαση και η επανεκπομπή της ροής, το φαινόμενο της φόρτισης και η διάχυση σωματιδίων πάνω στην εγχαρασσόμενη επιφάνεια.

2.2.1 Σκίαση της ροής

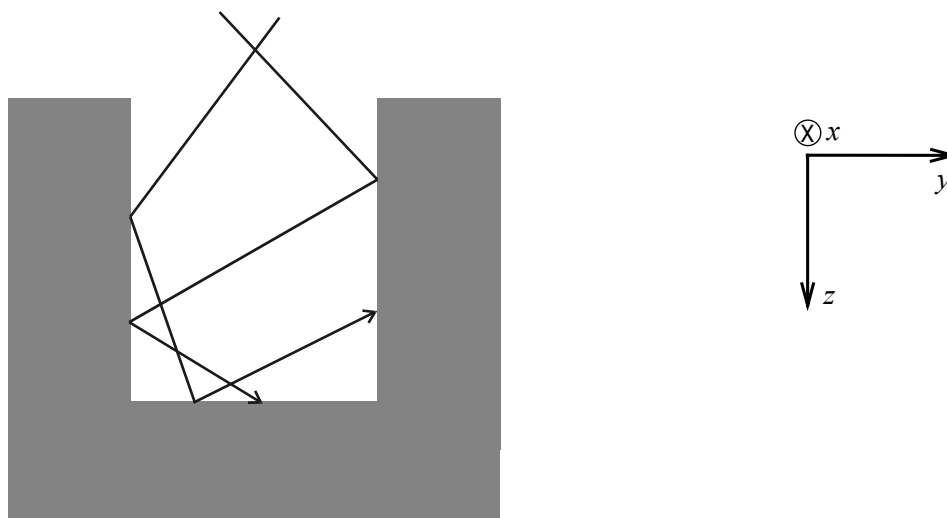
Η ροή από τον κύριο όγκο ενός αντιδραστήρα πλάσματος που φτάνει σε μια ελεύθερη επιφάνεια είναι διαφορετική από αυτή που φτάνει στη βάση ενός εγχαρασσόμενου αυλακιού ή οπής. Αν υποθεθεί ότι τα σωματίδια που εισέρχονται στη δομή δεν συγκρούονται μεταξύ τους (παραδοχή μοριακής ροής, §2.3), η επίδραση της σκίασης στην προσπίπτουσα σε επιφάνεια ροή μπορεί να γίνει κατανοητή στο Σχήμα 2.1, όπου φαίνεται το σύνολο των κατευθύνσεων (σε δύο διαστάσεις) υπό τις οποίες τα προσπίπτοντα σωματίδια (ουδέτερα ή φορτισμένα) φτάνουν στην επιφάνεια. Όταν η επιφάνεια είναι ελεύθερη (σκίασης), τότε το σύνολο των κατευθύνσεων συνθέτει ένα ημικύκλιο στις δύο διαστάσεις, ενώ όταν η επιφάνεια είναι στο εσωτερικό δομής, ένα τμήμα ημικυκλίου. Η σκίαση επιδρά μειωτικά στη ροή και η ροή που φτάνει απευθείας από όγκο στο εξωτερικό της δομής καλείται απευθείας ροή.



Σχήμα 2.1 Το σύνολο των κατευθύνσεων υπό τις οποίες σωματίδια φτάνουν στη βάση ενός αυλακιού (συνεχείς γραμμές) είναι υποσύνολο αυτών που φτάνουν σε ελεύθερη επιφάνεια (συνεχείς και διακεκομμένες γραμμές).

2.2.2 Επανεκπομπή της ροής

Η πιθανότητα προσκόλλησης ενός σωματιδίου (ουδέτερου ή φορτισμένου) σε επιφάνεια εξαρτάται από τις δράσεις που λαμβάνουν χώρα στην επιφάνεια. Το κλάσμα της ροής που δεν προσκολλάται στην επιφάνεια επανεκπέμπεται από αυτή. Έτσι, στη βάση εγχαρασσόμενου αυλακιού ή οπής, εκτός από την απευθείας ροή, φτάνει και αυτή που επανεκπέμπεται από τα πλάγια τοιχώματα.

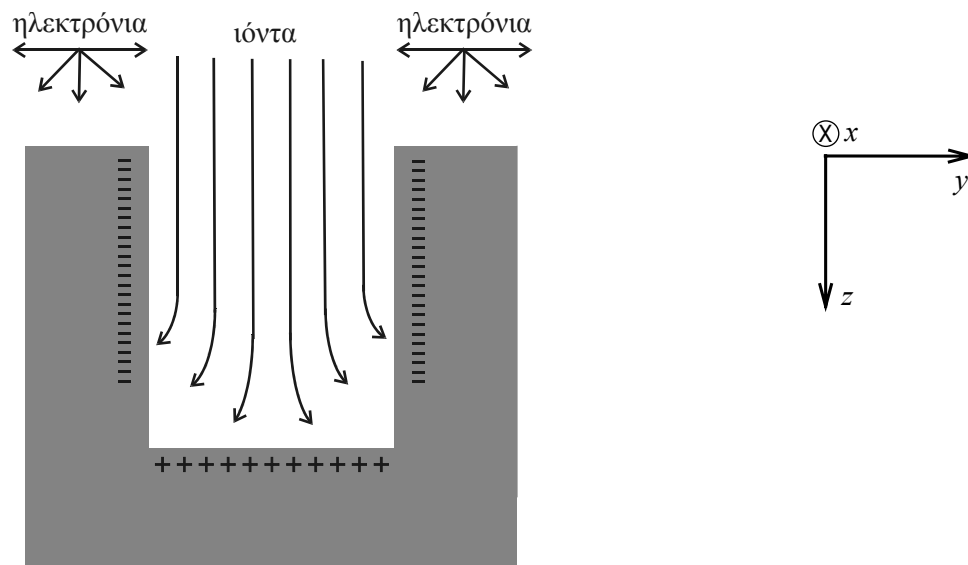


Σχήμα 2.2 Τροχιές σωματιδίων που προσπίπτουν σε στοιχειώδεις επιφάνειες ενός αυλακιού. Τα σωματίδια είναι δυνατό να επανεκπέμπονται αρκετές φορές μέχρι να προσκολληθούν.

2.2.3 Φαινόμενο φόρτισης

Κατά την ηλεκτρική εκκένωση σε αντιδραστήρα πλάσματος στον κύριο όγκο του πλάσματος παράγονται ουδέτερα είδη, ηλεκτρόνια και ιόντα (στη μεγάλη πλειοψηφία τους θετικά). Στην εγχαρασσόμενη επιφάνεια φτάνουν τα ιόντα που επιταχύνονται από το ηλεκτρικό πεδίο που αναπτύσσεται στην οριακή στοιβάδα, η οποία δρα ως «φράκτης» ηλεκτρονίων (§1.3.2.2). Το πεδίο όμως αυτό είναι εναλλασσόμενο, όπως και η τάση που εφαρμόζεται στα ηλεκτρόδια του αντιδραστήρα. Έτσι, για κάποια διαστήματα του κύκλου του εναλλασσόμενου πεδίου της οριακής στοιβάδας, φτάνουν και ηλεκτρόνια στην εγχαρασσόμενη επιφάνεια με κατανομή κατευθύνσεων που προσεγγίζει την ισοτροπική. Από την άλλη πλευρά, τα ιόντα προσπίπτουν στην εγχαρασσόμενη δομή με κατεύθυνση που επιβάλλεται από το πεδίο της οριακής στοιβάδας και είναι κατακόρυφη για την πλειοψηφία των ιόντων. Αυτή η διαφορά στις κατανομές κατευθύνσεων που φτάνουν στην επιφάνεια έχει σαν αποτέλεσμα στη δομή να φτάνουν τοπικά άνισες ροές ιόντων και ηλεκτρονίων. Η συνέπεια είναι η τοπική φόρτιση της εγχαρασσόμενης επιφάνειας. Αν η εγχαρασσόμενη δομή είναι αυλάκι μη αγώγιμου υλικού, συσσωρεύεται αρνητικό φορτίο στα πλάγια τοιχώματα και θετικό φορτίο στη βάση (Σχήμα 2.3). Πρόκειται για το φαινόμενο φόρτισης

[charging, Ingram (1990), Arnold & Sawin (1991), Kinoshita et al. (1996), Hwang & Giapis (1997)], το οποίο εξαρτάται από την αγωγιμότητα των υλικών της δομής που εγχαρασσεται και μπορεί να προκαλέσει σε ιόντα και ηλεκτρόνια απόκλιση από την αρχική τροχιά τους. Εκτός από την απόκλιση στην κατανομή κατευθύνσεων ιόντων και ηλεκτρονίων, το φαινόμενο της φόρτισης προκαλεί και μεταβολή των αντίστοιχων κατανομών ενέργειας. Η πολυπλοκότητα του προβλήματος είναι υψηλή αφού το αναπτυσσόμενο ηλεκτρικό πεδίο επιδρά στις ροές και την ενέργεια ιόντων και ηλεκτρονίων, οι οποίες επιδρούν με τη σειρά τους στην τοπική φόρτιση και άρα στο πεδίο που αναπτύσσεται.



Σχήμα 2.3 Η τοπική φόρτιση στην εγχαρασσόμενη επιφάνεια (φαινόμενο φόρτισης, charging) προκαλεί αποκλίσεις στην τροχιά των ιόντων.

2.2.4 Διάχυση στην εγχαρασσόμενη επιφάνεια

Τα σωματίδια των ουδέτερων συστατικών που προσκολλούνται στην εγχαρασσόμενη επιφάνεια είναι δυνατό να διαχυθούν σε γειτονικές θέσεις. Το φαινόμενο της διάχυσης στην επιφάνεια (surface diffusion) χαρακτηρίζεται από το μήκος διάχυσης, L , που εκφράζει τη μέση απόσταση που διανύει ένα ουδέτερο συστατικό στην επιφάνεια πριν αντιδράσει με το υπόστρωμα [Singh et al. (1992)]. Είναι [Atkins (1999) σ. 866]

$$L = \sqrt{D\tau}, \quad (2.1)$$

όπου D ο συντελεστής διάχυσης των σωματιδίων πάνω στην επιφάνεια και τ ο μέσος χρόνος διάχυσης των σωματιδίων (χρόνος από τη στιγμή της προσρόφησης μέχρι την αντίδραση). Το μήκος διάχυσης εξαρτάται από το πόσο ισχυρά προσροφάται ένα σωματίδιο στην επιφάνεια. Όσο πιο ισχυρές είναι οι δυνάμεις που συγκρατούν ένα σωματίδιο στην επιφάνεια, τόσο μικρότερο είναι το μήκος διάχυσης και ο συντελεστής διάχυσης στην επιφάνεια.

Ο συντελεστής διάχυσης των σωματιδίων είναι

$$D = D_0 e^{\frac{-E_a}{RT}}, \quad (2.2)$$

όπου D_0 και E_a προεκθετικός συντελεστής Arrhenius και η ενέργεια ενεργοποίησης για τη διάχυση στην επιφάνεια. Γενικά, η ενέργεια ενεργοποίησης για τη διάχυση ενός σωματιδίου σε επιφάνεια είναι [Atkins (1999) σ. 865] 10-20% της ενέργειας του δεσμού που κρατά προσροφημένο το σωματίδιο, αλλά η τιμή της εξαρτάται και από το κλάσμα κάλυψης της επιφάνειας. Ωστόσο, οι Reider et al. δημοσιεύουν ενέργεια ενεργοποίησης ίση με ~50% της ενέργειας του αντίστοιχου δεσμού για τη διάχυση H σε Si [Reider et al. (1991)].

Στην πράξη σε συστήματα αερίου σε ηλεκτρική εκκένωση και στερεού το μήκος διάχυσης είναι άγνωστο. Για αυτό το λόγο [Lukichev & Yunkin (1998)], στα περισσότερα μοντέλα διάχυσης στην επιφάνεια αποτελεί προσαρμόσιμη παράμετρο [Sato et al. (1991), Gerodolle & Pelletier (1991), Singh et al. (1992)]. Γενικά, η αύξηση του μήκους διάχυσης ή η μείωση των διαστάσεων των δομών εντείνει την επίδραση του φαινομένου διάχυσης στην επιφάνεια στην τοπική ροή.

2.3 Το πλαίσιο και οι βασικές παραδοχές του μοντέλου υπολογισμού της τοπικής ροής

Το μοντέλο υπολογισμού της τοπικής ροής συστατικού στο εσωτερικό δομών είναι ένα συνεχές μοντέλο. Ο όρος «συνεχές» δεν αφορά στα κλασσικά μοντέλα που βασίζονται στο συντελεστή διάχυσης, αλλά σε ολοκληρωτικές εξισώσεις. Οι εξισώσεις αυτές προκύπτουν από ολοκλήρωση κατανομών ταχυτήτων των σωματιδίων του συστατικού, λαμβάνοντας υπόψη ότι, στις συνθήκες υψηλού αριθμού Knudsen που ισχύουν για τη ροή στο εσωτερικό των εγχαρασσόμενων δομών, δεν συμβαίνουν συγκρούσεις μεταξύ των σωματιδίων.

Το μοντέλο υπολογισμού του τοπικής ροής λαμβάνει υπόψη άμεσα τη σκίαση και την επανεκπομπή της ροής και έμμεσα την επίδραση του φαινομένου φόρτισης στη ροή. Στη συνέχεια εξηγείται η επιλογή των φαινομένων που λαμβάνονται υπόψη και περιγράφεται ο τρόπος θεώρησης για κάθε φαινόμενο.

Η δημιουργία εσοχής (undercut) κάτω από τη μάσκα εγχάραξης κατά τη εγχάραξη δομών (Σχήματα 1.8α και 1.9δ) μαρτυρά ότι πρέπει να υπάρχει κάποιος μηχανισμός μεταφοράς των συστατικών στην περιοχή της εσοχής, καθώς η απευθείας ροή (ροή που φτάνει απευθείας από όγκο στο εξωτερικό της δομής) δεν μπορεί να φτάσει κάτω από τη μάσκα. Δύο μπορεί να είναι οι υπεύθυνοι μηχανισμοί: η διάχυση στην εγχαρασσόμενη επιφάνεια και η επανεκπομπή.

Το δίλημμα διάχυση στην επιφάνεια ή επανεκπομπή υπάρχει και στις διεργασίες απόθεσης και ειδικότερα στις διεργασίες χημικής απόθεσης με ατμό σε χαμηλές πιέσεις (low pressure chemical vapor deposition). Οι Wulu et al. ισχυρίζονται ότι το φαινόμενο της

διάχυσης πάνω στην επιφάνεια είναι σημαντικό όταν το μήκος διάχυσης είναι συγκρίσιμο με τις απόλυτες διαστάσεις της δομής [Wulu et al. (1991)]. Η θεωρητική μελέτη τους, όσο και αυτή των Coronell και Jensen [Coronell & Jensen (1994)], επιβεβαιώνει την κυριαρχία του φαινομένου της επανεκπομπής έναντι αυτού της διάχυσης στην επιφάνεια. Στο ίδιο συμπέρασμα καταλήγουν και οι Cheng et al. υλοποιώντας κατάλληλο πείραμα απόθεσης [Cheng et al. (1991)].

Για τη διεργασία της εγχάραξης, υπάρχουν εργασίες στις οποίες θεωρείται ότι η μεταφορά γίνεται μόνο με διάχυση στην εγχαρασσόμενη επιφάνεια [Sato et al. (1991), Gerodolle & Pelletier (1991)]. Με αυτή τη θεώρηση στάθηκε δυνατό να προσεγγιστούν πειραματικά αποτελέσματα για δομές με μικρό βάθος. Στην εργασία των Gerodolle και Pelletier, το μήκος διάχυσης είναι προσαρμόσιμη παράμετρος και υπολογίζεται 0.7 – 1.4 μm . Με τέτοιο μήκος διάχυσης είναι αμφίβολο αν μπορεί μόνο η διάχυση στην εγχαρασσόμενη επιφάνεια να εμποδίσει την υψηλή μείωση της ροής λόγω σκίασης στη βάση των δομών και να συντηρήσει την εγχάραξη δομών με μεγάλο βάθος. Σε αυτό βασίζονται οι Arnold et al. και δεν λαμβάνουν υπόψη τη διάχυση στην επιφάνεια στο μοντέλο που προτείνουν για την εγχάραξη δομών Si με πλάσμα SF_6 [Arnold et al. (1993)]. Οι Sato et al. υπολογίζουν μήκος διάχυσης για τα άτομα F πάνω στο Si μεγαλύτερο των 10 μm [Sato et al. (1991)], μια μάλλον αφύσικη τιμή καθώς σημαίνει ότι τα άτομα F διανύουν σχεδόν ολόκληρο το προφίλ της δομής πριν αντιδράσουν.

Σε αντίστοιχη τιμή για το μήκος διάχυσης (8.7 μm) κατέληξαν οι Singh et al. για να προσεγγίσουν τα πειραματικά αποτελέσματα εγχάραξης δομών Si με πλάσμα SF_6 , λαμβάνοντας υπόψη μόνο την επίδραση της σκίασης και της διάχυσης πάνω στην εγχαρασσόμενη επιφάνεια [Singh et al. (1992)]. Από την άλλη πλευρά, κατάφεραν να προσεγγίσουν τα ίδια πειραματικά δεδομένα με μεγαλύτερη μάλιστα ακρίβεια λαμβάνοντας υπόψη τα φαινόμενα σκίασης και επανεκπομπής. Το συμπέρασμά τους είναι ότι το φαινόμενο της επανεκπομπής σε σχέση με αυτό της διάχυσης στην επιφάνεια κυριαρχεί στις εγχαρασσόμενες με πλάσμα SF_6 δομές Si που εξέτασαν. Σε μεταγενέστερη εργασία [Singh et al. (1994)], η ίδια ομάδα ενισχύει το παραπάνω συμπέρασμα, παρουσιάζοντας πειραματικά αποτελέσματα εγχάραξης δομών Si με πλάσμα CF_4/O_2 , τα οποία ούτε ποιοτικά μπορούν να προσεγγιστούν, αν θεωρηθεί ότι η μεταφορά συστατικών γίνεται μόνο με διάχυση στην επιφάνεια.

Οι Lukichev και Yunkin σε μια προσπάθεια να εκτιμήσουν το συντελεστή διάχυσης ατόμων F σε επιφάνεια Si, τον προσεγγίζουν με το συντελεστή διάχυσης ατόμων H σε επιφάνεια Si [Lukichev & Yunkin (1999)]. Τότε ο προεκθετικός συντελεστής Arrhenius και η ενέργεια ενεργοποίησης για την Εξ. (2.2) είναι $D_0=10^{-3} \text{ cm}^2/\text{s}$ και $E_a=1.5 \text{ eV}$ [Reider et al. (1991)]. Υπολογίζουν το συντελεστή διάχυσης σε θερμοκρασία $\sim 700 \text{ K}$ ίσο με $D=10^{-14} \text{ cm}^2/\text{s}$ και το μήκος διάχυσης 0.03 μm για τον υψηλότερο μέσο χρόνο διάχυσης 1000 s (τυπικός συνολικός χρόνος εγχάραξης δομής). Θεωρούν το μήκος διάχυσης αμελητέο και συνεπώς αγνοούν το φαινόμενο της διάχυσης στην εγχαρασσόμενη επιφάνεια. Αν μάλιστα είχαν υπολογίσει το συντελεστή διάχυσης στους 300-400 K (το προς εγχάραξη δείγμα είναι

συνήθως σε επαφή με σύστημα ψύξης το οποίο διατηρεί τη θερμοκρασία στους 300-400 K), θα διαπίστωναν για τον ίδιο χρόνο διάχυσης ότι το μήκος διάχυσης είναι $<1 \text{ \AA}$, δηλαδή ότι πρακτικά δεν υπάρχει διάχυση στην επιφάνεια. Σημειώνεται ότι η κατάσταση της εγχαρασσομένης επιφάνειας στο περιβάλλον του πλάσματος είναι σίγουρα διαφορετική και αυτό καθιστά τους παραπάνω υπολογισμούς για τη διάχυση προσεγγιστικούς. Για παράδειγμα, είναι διαφορετική η διάχυση ατόμων F σε επιφάνεια όπου υπάρχουν αιωρούμενοι δεσμοί και υπό το βομβαρδισμό ιόντων [Verdonck et al. (2002)].

Το συμπέρασμα που μπορεί να βγει από τα παραπάνω είναι ότι η επανεκπομπή είναι το κυρίαρχο φαινόμενο μεταφοράς της ροής στο εσωτερικό δομών, χωρίς αυτό να σημαίνει ότι δεν συμβαίνει διάχυση στην επιφάνεια. Ένα ακόμη στοιχείο που συμβάλλει στην κυριαρχία της επανεκπομπής έναντι της διάχυσης στην επιφάνεια είναι ότι από διαστατική ανάλυση προκύπτει [Gottscho et al. (1992)] ότι η σκίαση, η επανεκπομπή της ροής και το φαινόμενο φόρτισης είναι φαινόμενα που εξαρτώνται από το λόγο ασυμμετρίας της δομής (λόγος του βάθους προς το πλάτος της δομής), ενώ το φαινόμενο διάχυσης στην επιφάνεια εξαρτάται από τις απόλυτες διαστάσεις της δομής. Συνεπώς, η πειραματικά επιβεβαιωμένη εξάρτηση του ρυθμού εγχάραξης από το λόγο ασυμμετρίας υποδηλώνει ότι τα φαινόμενα σκίασης, επανεκπομπής και φόρτισης παίζουν σημαντικό ρόλο στην εγχάραξη δομών [Gottscho et al. (1992)].

Αγνοώντας το φαινόμενο της διάχυσης στην επιφάνεια, η τοπική ροή που φτάνει σε μια στοιχειώδη επιφάνεια, j , είναι το άθροισμα της απευθείας ροής, j_{direct} , η οποία φτάνει στη στοιχειώδη επιφάνεια απευθείας από τον κύριο όγκο του πλάσματος, και της ροής από επανεκπομπή, j_{reem} , η οποία φτάνει στη στοιχειώδη επιφάνεια από όλες τις υπόλοιπες στοιχειώδεις επιφάνειες της εγχαρασσομένης δομής.

$$j = j_{direct} + j_{reem} \quad (2.3)$$

Οι βασικές παραδοχές του μοντέλου υπολογισμού της τοπικής ροής στο εσωτερικό δομής αφορούν τις τροχιές των σωματιδίων και το χρόνο μέσα στον οποίο λαμβάνει χώρα η επανεκπομπή της ροής.

Οι τροχιές των σωματιδίων (μόρια, άτομα, ιόντα) του συστατικού θεωρούνται ευθείες, διότι η συχνότητα συγκρούσεων μεταξύ των σωματιδίων του συστατικού με σωματίδια του ίδιου ή άλλου συστατικού είναι αμελητέα σε σχέση με τη συχνότητα συγκρούσεων των σωματιδίων με τα τοιχώματα της δομής.

Οι συγκρούσεις μεταξύ σωματιδίων ουδετέρων συστατικών μπορούν να αγνοηθούν, καθώς η ροή των ουδετέρων συστατικών είναι μοριακή {molecular flow,³¹ [Present (1958), σ.

³¹ Σε κάποιες περιπτώσεις, ο όρος μοριακή χρησιμοποιείται για να ξεχωρίσει τους τρόπους μεταφοράς μάζας: μεταφορά με μοριακή διάχυση και μεταφορά με συναγωγή [Κουμούτσος & Λυγερού (1991), σ. 1-3]. Επίσης, χρησιμοποιείται για να περιγράψει τη διάχυση σε χαμηλές τιμές του αριθμού Knudsen (<0.05). Σε αυτή την περίπτωση για τη διάχυση σε υψηλές τιμές του αριθμού Knudsen χρησιμοποιείται ο όρος διάχυση Knudsen [Μαρκόπουλος (1992), σ. 56-59]. Στην παρούσα εργασία ο όρος μοριακή ροή αφορά στη ροή σε υψηλές τιμές του αριθμού Knudsen.

56], [Ryans & Roper (1986), σ. 22-24], [Coburn & Winters (1989)]} εντός των δομών: ο αριθμός Knudsen (λόγος του μήκους ελεύθερης διαδρομής προς τη χαρακτηριστική διάσταση της δομής, πλάτος για το αυλάκι, διάμετρος για την οπή) είναι πολύ μεγαλύτερος της μονάδας για τις συνήθεις συνθήκες πίεσης σε ένα αντιδραστήρα πλάσματος (μερικά έως μερικές δεκάδες mTorr) και για τη συνήθη χαρακτηριστική διάσταση των εγχαρασσόμενων δομών.³¹ Οι Coburn και Winters υπολόγισαν την αύξηση της πίεσης στη βάση μιας δομής Si (κυλινδρικής οπής Si) με λόγο ασυμμετρίας 10 (λόγος του βάθους προς το πλάτος μιας δομής) σε σχέση με την πίεση στην είσοδο της δομής. Βρήκαν ότι είναι αμελητέα (~4 mTorr) και δεν μπορεί να προκαλέσει μεταβολή στις συνθήκες μοριακής ροής [Coburn & Winters (1989)]. Σε συνθήκες μοριακής ροής δεν μπορεί να χρησιμοποιηθεί ο κλασικός συντελεστής διάχυσης για να περιγράψει τη μεταφορά μάζας [Wulu et al. (1991)].

Επίσης, μπορούν να θεωρηθούν αμελητέες και οι συγκρούσεις σωματιδίων των ουδετέρων συστατικών με τα φορτισμένα συστατικά (ιόντα) εντός της εγχαρασσόμενης δομής [Gottscho et al. (1992), Abraham & Wang (1996)]. Τέλος, θεωρείται ότι δεν υπάρχουν ηλεκτροστατικές αλληλεπιδράσεις μεταξύ των ιόντων ή μεταξύ ιόντων και εγχαρασσόμενης επιφάνειας και επομένως και τα ιόντα κινούνται σε ευθείες τροχιές [Shaqfeh & Jurgensen (1989), Abraham & Wang (1995)].

Ο ρόλος του φαινομένου φόρτισης σε δομές από μη αγώγιμα υλικά είναι σημαντικός και υπάρχει πλούσια βιβλιογραφία περί των συνεπειών του στην εγχάραξη δομών διηλεκτρικών [Arnold & Sawin (1991)] και Si σε διηλεκτρικό στρώμα [Kinoshita et al. (1996), Hwang & Giapis (1997)]. Ωστόσο, γενικά δεν λαμβάνεται υπόψη στην προσομοίωση εγχάραξης δομών διηλεκτρικών [Misaka & Harafuji (1997), Abraham (2001)], λόγω της πολυπλοκότητας ενσωμάτωσής του σε ένα ολοκληρωμένο προσομοιωτή και ίσως γιατί η σκίαση και η επανεκπομπή των ουδετέρων συστατικών αρκούν για την ερμηνεία των πειραματικών αποτελεσμάτων. Η παραδοχή ευθειών τροχιών κίνησης των ιόντων εμμέσως συνεπάγεται ότι η μεταβολή στην κλίση της τροχιάς των ιόντων που μπορεί να προκαλέσει το φαινόμενο φόρτισης (Σχήμα 2.3) δε λαμβάνεται υπόψη. Στο μοντέλο υπολογισμού που περιγράφεται στη συνέχεια η πιθανή επίδραση του φαινομένου φόρτισης στις τροχιές των ιόντων προσεγγίζεται με αυξημένο εύρος της γωνιακής κατανομής των ιόντων που εισέρχονται στη δομή [Kokkoris et al. (2002)].

Μια ακόμη παραδοχή για το μοντέλο υπολογισμού της ροής στο εσωτερικό δομών είναι ότι τα φαινόμενα μεταφοράς (σκίαση και επανεκπομπή) της ροής λαμβάνουν χώρα σε

³¹ Το μήκος ελεύθερης διαδρομής ενός σωματιδίου αερίου (μόριο ή άτομο), δηλαδή η μέση απόσταση που διανύει ένα σωματίδιο μεταξύ δύο διαδοχικών συγκρούσεων, σύμφωνα με την κινητική θεωρία των αερίων (ικανοποιητική παραδοχή λόγω χαμηλής πίεσης) είναι [Atkins (1999) σ. 724]:

$$\lambda = \frac{kT}{\sqrt{2}\sigma p},$$

όπου k η σταθερά Boltzman, p η πίεση του αερίου, T η θερμοκρασία του αερίου και σ η ενεργή διατομή σύγκρουσης. Προσεγγίζοντας την ενεργό διατομή σύγκρουσης με αυτή σφαίρας, δηλαδή $\sigma = \pi r^2$ (r η ακτίνα της σφαίρας) και θεωρώντας ότι $r=5$ Å, $T=400$ K και $p=20$ mTorr, προκύπτει ότι $\lambda=1.866$ cm. Υπό αυτές τις συνθήκες, για δομές από 100 μm μέχρι 50 nm, ο αριθμός Knudsen κυμαίνεται από 18.66 έως 373200.

ψευδομόνιμη κατάσταση {pseudosteady state, [Cale & Raupp (1990)]}. Ο χρόνος που χρειάζεται για να αλλάξει σημαντικά η δομή (λόγω εγχάραξης της) θεωρείται ότι είναι πολύ μεγαλύτερος από το χρόνο που χρειάζεται η ροή να διασκορπιστεί στο εσωτερικό της δομής [Singh et al. (1992), Hsiau et al. (1997)].

Μια εκτίμηση της κλίμακας χρόνου του φαινομένου επανεκπομπής μπορεί να γίνει με τη βοήθεια της κινητικής θεωρίας των αερίων σύμφωνα με την οποία η μέση ταχύτητα ενός σωματιδίου είναι

$$\bar{c} = \sqrt{\frac{8RT}{\pi M}} \text{ η οποία για τα άτομα F και για } T = 400 \text{ K είναι } \bar{c} = 6.7 \times 10^5 \text{ cm/s.}$$

Θεωρώντας ότι το άτομο F πριν κολλήσει σε επιφάνεια διανύει απόσταση μέσα στη δομή ίση με 10 φορές το βάθος της δομής, η κλίμακα χρόνου για το φαινόμενο της επανεκπομπής για μια δομή βάθους 10 μm είναι $10 \times 10 \times 10^{-4} / (6.7 \times 10^5) \text{ s} = 1.5 \times 10^{-8} \text{ s}$. Στον ίδιο χρόνο, για ένα τυπικά μεγάλο ρυθμό εγχάραξης 6 μm/min = 0.1 μm/s, η μετακίνηση της εγχαρασσόμενης επιφάνειας είναι μόλις $1.5 \times 10^{-5} \text{ A}$.

Επιπλέον παραδοχές για τις κατανομές των ροών ουδέτερων συστατικών και ιόντων και τους μηχανισμούς επανεκπομπής περιγράφονται στις αντίστοιχες παραγράφους. Στη συνέχεια περιγράφονται τα μοντέλα υπολογισμού για την απευθείας ροή και τη ροή από επανεκπομπή στο εσωτερικό δομής. *Ο όρος κύριος όγκος που χρησιμοποιείται στη συνέχεια του κειμένου αφορά στον κύριο όγκο του αντιδραστήρα πλάσματος όπου γίνεται η εγχάραξη ή γενικότερα σε όγκο ακριβώς πάνω από την είσοδο της δομής.*

2.4 Η απευθείας ροή. Επίδραση της σκίασης στη ροή

Η ροή σωματιδίων (ουδέτερων συστατικών, ιόντων) που φτάνει σε στοιχειώδη επιφάνεια δομής (Σχήμα 2.1) περιορίζεται από τη γεωμετρία τη δομής και συνεπώς δεν είναι ίδια με αυτή που φτάνει σε ελεύθερη επιφάνεια. Η θέση της στοιχειώδους επιφάνειας και η γεωμετρία της δομής στην οποία ανήκει καθορίζουν τη στερεά γωνία Ω (Παράρτημα ΣΤ) διαμέσου της οποίας ο κύριος όγκος είναι «ορατός» στη στοιχειώδη επιφάνεια. Ο υπολογισμός της απευθείας ροής, της ροής που φτάνει άμεσα από τον κύριο όγκο σε μια στοιχειώδη επιφάνεια προκύπτει με ολοκλήρωση της κατανομής της ροής στον κύριο όγκο στη στερεά γωνία Ω .

Στη στοιχειώδη επιφάνεια στη θέση \mathbf{x} της δομής, η απευθείας ροή είναι

$$j_{direct}(\mathbf{x}) = \int_{\Omega(\mathbf{x})} \mathbf{j}_{bulk} \cdot \mathbf{n}(\mathbf{x}) d\omega, \quad (2.4)$$

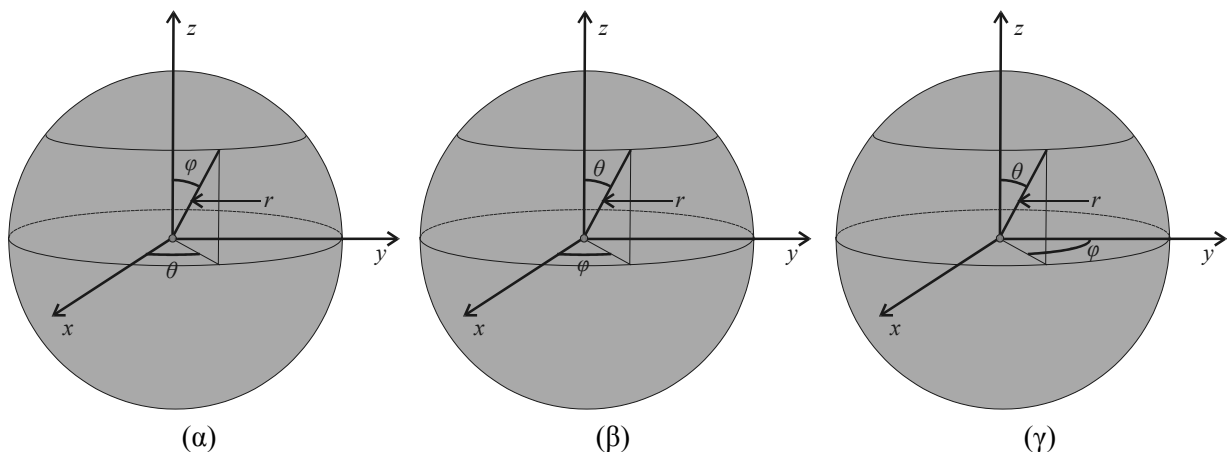
όπου \mathbf{j}_{bulk} η διανυσματική συνάρτηση κατανομής της ροής στον κύριο όγκο που έχει μονάδες ροής ανά στερεοακτίνιο, $\mathbf{n}(\mathbf{x})$ το μοναδιαίο κάθετο στην επιφάνεια στη θέση \mathbf{x} και $d\omega$ το στοιχείο στερεάς γωνίας.

Τόσο η συνάρτηση κατανομής ροής, όσο και το στοιχείο στερεάς γωνίας εκφράζονται σε σφαιρικό σύστημα συντεταγμένων (r, θ, φ) . Η τριάδα (r, θ, φ) στη βιβλιογραφία γενικά ορίζεται [Παπαϊωάννου (1993), σ. 14-16] όπως φαίνεται στο Σχήμα 2.4α: θ είναι η αζιμουθιακή γωνία ορισμένη ως προς τον άξονα x ($0 \leq \theta \leq 2\pi$), φ είναι η πολική γωνία από τον άξονα z ($0 \leq \varphi \leq \pi$), και r είναι η απόσταση από την αρχή των αξόνων. Οι σχέσεις που συνδέουν τις καρτεσιανές με τις σφαιρικές συντεταγμένες δεδομένου σημείου στο χώρο είναι:

$$x = r \cos \theta \sin \varphi, y = r \sin \theta \sin \varphi \text{ και } z = r \cos \varphi. \quad (2.5)$$

Σε κάποιες αναφορές {[Cole (1974) σ. 107-109], [Weisstein (2004)]} η χρήση των θ, φ αντιστρέφεται: θ είναι η πολική γωνία και φ η αζιμουθιακή (Σχήμα 2.4β). Στην παρούσα εργασία χρησιμοποιείται το, βολικό για τους υπολογισμούς, σύστημα συντεταγμένων του Σχήματος 2.4γ: φ είναι η αζιμουθιακή γωνία ορισμένη ως προς τον άξονα y ($0 \leq \varphi \leq 2\pi$), θ είναι η πολική γωνία από τον άξονα z ($0 \leq \theta \leq \pi$), και r είναι η απόσταση από την αρχή των αξόνων. Σε αυτή την περίπτωση, οι σχέσεις που συνδέουν τις καρτεσιανές με τις σφαιρικές συντεταγμένες δεδομένου σημείου στο χώρο είναι:

$$x = r \sin \varphi \sin \theta, y = r \cos \varphi \sin \theta \text{ και } z = r \cos \theta. \quad (2.6)$$



Σχήμα 2.4 Η τριάδα μεταβλητών του σφαιρικού συστήματος συντεταγμένων (α) που γενικά χρησιμοποιείται στη βιβλιογραφία, (β) που εναλλακτικά χρησιμοποιείται στη βιβλιογραφία και (γ) που χρησιμοποιείται στην παρούσα εργασία. Όλα τα συστήματα που παρουσιάζονται είναι δεξιόστροφα.

Το στοιχείο στερεάς γωνίας στο σύστημα συντεταγμένων του Σχήματος 2.4γ είναι (Παράρτημα ΣΤ):

$$d\omega = \sin\theta d\varphi d\theta. \quad (2.7)$$

Συνεπώς από την Εξ. (2.4) προκύπτει

$$\mathbf{j}_{direct}(\mathbf{x}) = \iint_{\Omega(\mathbf{x})} \mathbf{j}_{bulk}(\theta, \varphi) \cdot \mathbf{n}(\mathbf{x}) \sin\theta d\theta d\varphi = \iint_{\Omega(\mathbf{x})} \mathbf{j}_{bulk}(\theta, \varphi) \sin\theta d\theta d\varphi \cdot \mathbf{n}(\mathbf{x}). \quad (2.8)$$

Το διάνυσμα $\mathbf{j}_{bulk}(\theta, \varphi)$ είναι το διάνυσμα της ροής σε κάθε σημείο του κύριου όγκου στην κατεύθυνση που ορίζει το ζεύγος (θ, φ) . Είναι η ροή που διέρχεται από επιφάνεια με κάθετο διάνυσμα με διεύθυνση που ορίζεται από το ζεύγος (θ, φ) . Από τις Εξ. (2.6) προκύπτει ότι

$$\mathbf{j}_{bulk}(\theta, \varphi) = j_{bulk}(\theta, \varphi) (\sin\theta \sin\varphi \mathbf{e}_x + \sin\theta \cos\varphi \mathbf{e}_y + \cos\theta \mathbf{e}_z). \quad (2.9)$$

Συνεπώς, η απευθείας ροή σε στοιχειώδη επιφάνεια στη θέση \mathbf{x} της δομής είναι

$$\mathbf{j}_{direct}(\mathbf{x}) = \iint_{\Omega(\mathbf{x})} j_{bulk}(\theta, \varphi) (\sin^2\theta \sin\varphi \mathbf{e}_x + \sin^2\theta \cos\varphi \mathbf{e}_y + \sin\theta \cos\theta \mathbf{e}_z) d\theta d\varphi \cdot \mathbf{n}(\mathbf{x}). \quad (2.10)$$

Αν

$$\mathbf{n}(\mathbf{x}) = n_x \mathbf{e}_x + n_y \mathbf{e}_y + n_z \mathbf{e}_z, \quad (2.11)$$

τότε

$$\begin{aligned} \mathbf{j}_{direct}(\mathbf{x}) = & n_x \iint_{\Omega(\mathbf{x})} j_{bulk}(\theta, \varphi) \sin^2\theta \sin\varphi d\theta d\varphi + \\ & + n_y \iint_{\Omega(\mathbf{x})} j_{bulk}(\theta, \varphi) \sin^2\theta \cos\varphi d\theta d\varphi + n_z \iint_{\Omega(\mathbf{x})} j_{bulk}(\theta, \varphi) \sin\theta \cos\theta d\theta d\varphi \end{aligned} \quad (2.12)$$

Για τον υπολογισμό της απευθείας ροής σε στοιχειώδη επιφάνεια στη θέση \mathbf{x} χρειάζεται α) να προσδιοριστεί η στερεά γωνία $\Omega(\mathbf{x})$, δηλαδή τα όρια ολοκλήρωσης για τις θ, φ (§2.4.1 – §2.4.3) και β) να είναι γνωστή η κατανομή $j_{bulk}(\theta, \varphi)$ (§2.4.4).

2.4.1 Στερεά γωνία Ω για τυχαία δομή

Το πρόβλημα προσδιορισμού στερεάς γωνίας ανάγεται στην εύρεση των ορίων ολοκλήρωσης της Εξ. (2.12). Για σημείο στη θέση \mathbf{x} τυχαίας δομής (Σχήμα 2.5α), η στερεά γωνία $\Omega(\mathbf{x})$ είναι [Drotar et al. (2000)]

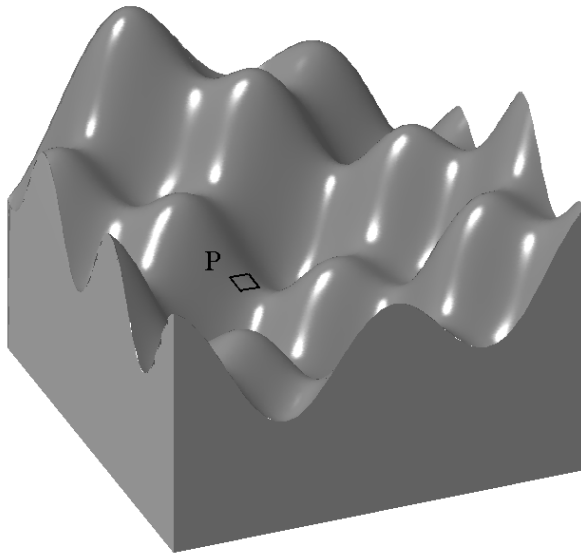
$$\Omega(\mathbf{x}) = \left\{ \begin{array}{l} 0 < \varphi < 2\pi \\ 0 < \theta < \theta_{\max}(\varphi) \end{array} \right\} \quad (2.13)$$

και η απευθείας ροή είναι

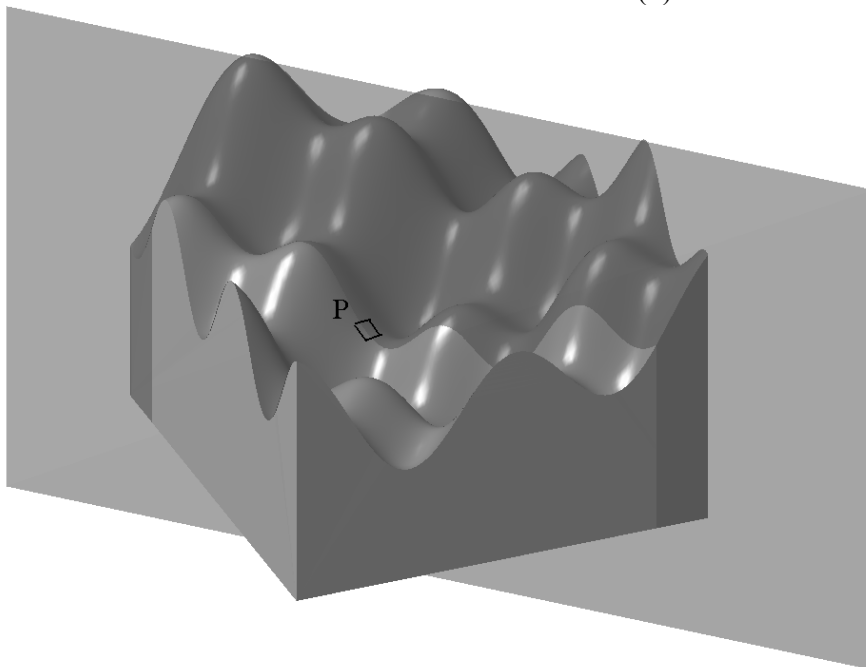
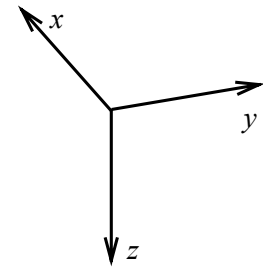
$$\mathbf{j}_{direct}(\mathbf{x}) = \int_0^{\theta_{\max}(\varphi)} \int_0^{2\pi} j_{bulk}(\theta, \varphi) (\sin^2 \theta \sin \varphi \mathbf{e}_x + \sin^2 \theta \cos \varphi \mathbf{e}_y + \sin \theta \cos \theta \mathbf{e}_z) d\varphi d\theta \cdot \mathbf{n}(\mathbf{x}). \quad (2.14)$$

Για το εξεταζόμενο σημείο στη θέση \mathbf{x} , η γωνία $\theta_{\max}(\varphi)$ είναι η μέγιστη πολική γωνία τέτοια ώστε το ζεύγος γωνιών $[\varphi, \theta_{\max}(\varphi)]$ να είναι επιτρεπτό. *Επιτρεπτό* καλείται το ζεύγος γωνιών που ορίζει ευθεία γραμμή που ενώνει το εξεταζόμενο σημείο με τον κύριο όγκο χωρίς να τέμνει τη δομή. Στο Σχήμα 2.5α φαίνεται τυχαία δομή και σημειώνεται τυχαία στοιχειώδης επιφάνεια στο σημείο $P(\mathbf{x}_P)$ αυτής. Για τον υπολογισμό της γωνίας $\theta_{\max}(\varphi=\varphi_1)$ για το σημείο P, αρχικά υπολογίζεται η τομή της δομής με επίπεδο που προκύπτει από την περιστροφή του επιπέδου yz γύρω από τον άξονα z κατά γωνία φ_1 ως προς τον άξονα y (Σχήμα 2.5β). Για αυτή την τομή της δομής (Σχήμα 2.5γ), η οποία χαρακτηρίζεται από τη γωνία φ_1 , το σύνολο των διευθύνσεων ως προς τις οποίες ο κύριος όγκος είναι «ορατός» στη στοιχειώδη επιφάνεια στη θέση \mathbf{x}_P είναι $0 \leq \theta \leq \theta_{\max}(\varphi_1)$. Στο Σχήμα 2.5γ η γωνία $\theta_{\max}(\varphi_1)$ σχηματίζεται από τον άξονα z και το τμήμα PS_1 . Το σημείο S_1 καλείται όριο σκίασης του σημείου P και αντιστοιχεί στη γωνία φ_1 . Για την περίπτωση του Σχήματος 2.5γ το S_1 είναι, σαρώνοντας τα σημεία της τομής της δομής από αριστερά προς τα δεξιά (από τα όρια της δομής προς το εσωτερικό της), το πρώτο στη σειρά σημείο το οποίο είναι ορατό στο P. Η τομή της δομής που φαίνεται στο Σχήμα 2.5γ μπορεί να χρησιμοποιηθεί και για τον υπολογισμό της $\theta_{\max}(\varphi_2=2\pi - \varphi_1)$ με αντίστοιχο με την $\theta_{\max}(\varphi_1)$ τρόπο.

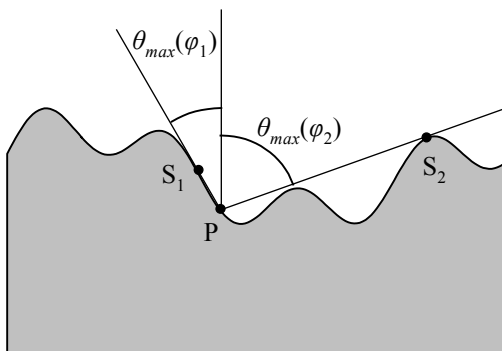
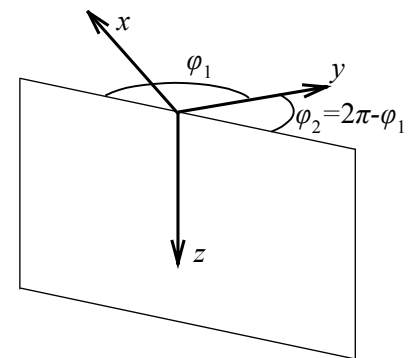
Για τον υπολογισμό της στερεάς γωνίας Ω , θα πρέπει να υπολογιστεί το θ_{\max} για όλες τις τομές της δομής, όπως αυτές προκύπτουν από τη μεταβολή της γωνίας φ από 0 έως 2π .



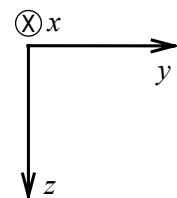
(α)



(β)



(γ)



Σχήμα 2.5 (α) Τυχαία δομή όπου σημειώνεται τυχαίο σημείο P. (β) Η δομή του Σχήματος 2.5α και επίπεδο που περιέχει το σημείο P και προκύπτει από την περιστροφή του επιπέδου yz γύρω από τον

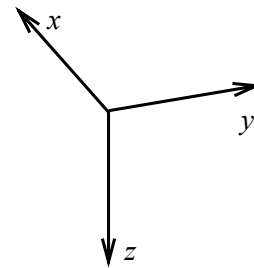
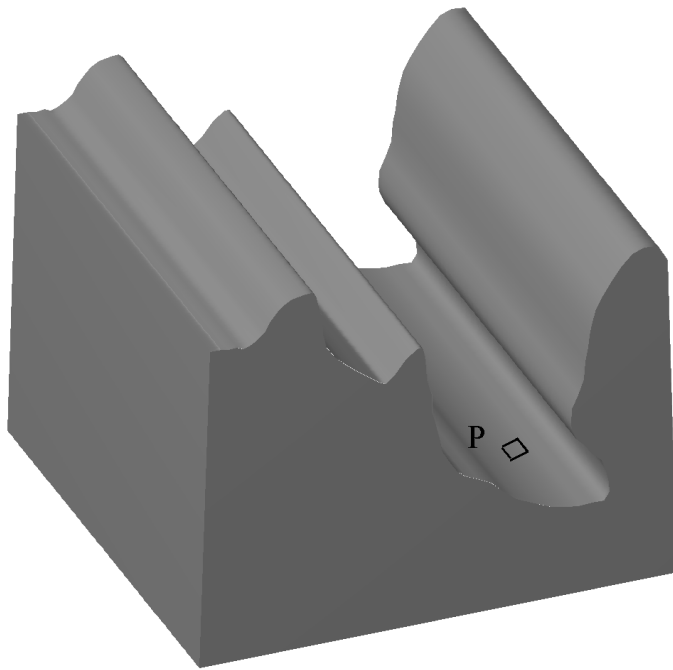
άξονα z κατά γωνία φ_1 ως προς τον άξονα y . Το επίπεδο αυτό περιέχει το σημείο P. (γ) Η τομή της δομής και του επιπέδου του Σχήματος 2.5β. Τα σημεία S_1 και S_2 είναι τα όρια σκίασης για το σημείο P για αυτή την τομή της δομής και χρησιμοποιούνται για τον υπολογισμό των γωνιών $\theta_{max}(\varphi_1)$ και $\theta_{max}(\varphi_2=2\pi - \varphi_1)$.

Οι υπολογισμοί στερεάς γωνίας απλοποιούνται για δομές που εμφανίζουν ειδικά γεωμετρικά χαρακτηριστικά, όπως τα αυλάκια (§2.4.2) και οι οπές κυλινδρικής συμμετρίας (§2.4.3).

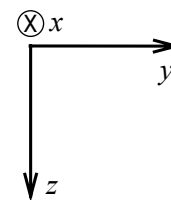
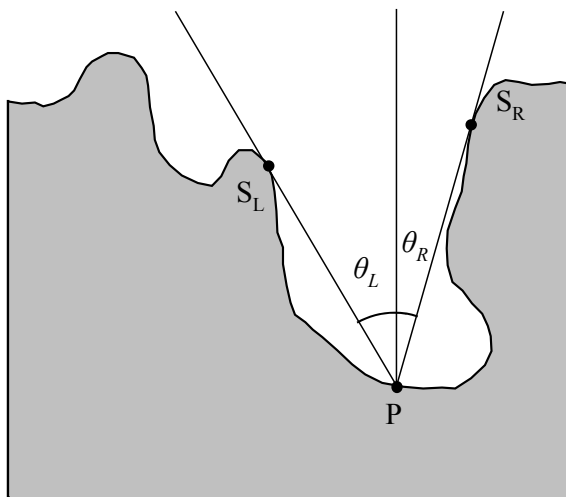
2.4.2 Στερεά γωνία Ω για αυλάκι

Ο υπολογισμός της στερεάς γωνίας σκίασης της ροής απλοποιείται στις περιπτώσεις δομών που διατηρούν την τομή τους με επίπεδο σταθερή ως προς άξονα κάθετο σε αυτό το επίπεδο (Σχήμα 2.6α). Η τομή της δομής του Σχήματος 2.6α με το επίπεδο yz είναι σταθερή ως προς τον άξονα x , είναι η ίδια ανεξάρτητα από την τιμή του x . Τέτοιου είδους δομές, με διάσταση κατά τον άξονα x πολύ μεγαλύτερη από αυτές κατά τους y και z ώστε να μπορεί πρακτικά να θεωρηθεί άπειρου μήκους κατά x , καλούνται στο εξής αυλάκια. Λόγω των ειδικών χαρακτηριστικών της δομής αυλακιού, ο υπολογισμός της στερεάς γωνίας γίνεται με βάση μια τομή της δομής στο επίπεδο yz . Η στερεά γωνία που υπολογίζεται για σημείο $P(x_P, y_P, z_P)$ είναι ίδια για κάθε σημείο $Q(x, y_P, z_P)$.

Έστω ότι υπολογίζεται η στερεά γωνία στη θέση $P(x_P, y_P, z_P)$ της δομής που φαίνεται στο Σχήμα 2.6α. Η στερεά γωνία σκίασης της ροής, Ω , ορίζεται ουσιαστικά από τα όρια ολοκλήρωσης στις γωνίες φ και θ του σφαιρικού συστήματος συντεταγμένων (Σχήμα 2.4γ). Στο Σχήμα 2.6β φαίνεται τομή της δομής του Σχήματος 2.6α με το επίπεδο yz που περιέχει το σημείο P. Φαίνονται επίσης τα σημεία $S_L(y_{SL}, z_{SL})$ και $S_R(y_{SR}, z_{SR})$ τα οποία ορίζουν τη στερεά γωνία Ω για το σημείο P και στο εξής καλούνται όρια σκίασης του σημείου P. Το σημείο S_L είναι, σαρώνοντας τα σημεία της τομής της δομής (Σχήμα 2.6β) από αριστερά προς τα δεξιά, το πρώτο στη σειρά σημείο το οποίο είναι ορατό στο σημείο P. Αντίστοιχα προσδιορίζεται και το σημείο S_R . Ο προσδιορισμός των ορίων σκίασης βασίζεται σε υπολογισμούς ορατότητας μεταξύ σημείων της δομής, οι οποίοι περιγράφονται στην §2.5.4. Οι θ_L και θ_R είναι οι γωνίες που σχηματίζουν τα τμήματα PS_L και PS_R με τον άξονα z .



(α)



(β)

Σχήμα 2.6 (α) Τμήμα δομής αυλακιού στο οποίο σημειώνεται τυχαίο σημείο P. (β) Τομή της δομής του Σχήματος 2.6α με το επίπεδο yz που περιέχει το σημείο P. Τα σημεία S_L και S_R είναι τα όρια σκίασης του σημείου P και ορίζουν τις γωνίες θ_L και θ_R οι οποίες χρησιμοποιούνται για τον υπολογισμό της στερεάς γωνίας Ω για το σημείο P.

Στη συνέχεια περιγράφεται ο τρόπος προσδιορισμού της στερεάς γωνίας Ω για το σημείο P του Σχήματος 2.6. Απαραίτητες για τον προσδιορισμό ποσότητες είναι οι

$$dy_L = y_p - y_{SL}, \quad dy_R = y_{SR} - y_p, \quad dz_L = z_p - z_{SL} \text{ και } dz_R = z_p - z_{SR}. \quad (2.15)$$

Οι γωνίες θ_L και θ_R του Σχήματος 2.6β είναι

$$\theta_L = a \tan\left(\frac{dyL}{dzL}\right), \quad (2.16)$$

$$\theta_R = a \tan\left(\frac{dyR}{dzR}\right). \quad (2.17)$$

Ο προσδιορισμός της στερεάς γωνίας Ω για το σημείο P γίνεται με κέντρο το σημείο P και την πολική γωνία θ να μεταβάλλεται από 0 έως $\pi/2$. Προσδιορίζεται για κάθε θ το σύνολο των αζιμουθιακών γωνιών $\varphi(\theta)$ για το οποίο τα ζεύγη $[\theta, \varphi(\theta)]$ ορίζουν ευθείες γραμμές που ενώνουν το σημείο P με τον κύριο όγκο χωρίς να τέμνουν τη δομή (επιτρεπτά ζεύγη).

Για το σημείο P του Σχήματος 2.6 είναι $\theta_R \leq \theta_L$ και $dyL \geq 0$ και $dyR \geq 0$ και $dzR \neq 0$ και $dzL \neq 0$. Διακρίνονται τρεις περιπτώσεις (Σχήμα 2.7). Στην πρώτη περίπτωση, η οποία περιγράφεται στα Σχήματα 2.7α και 2.7β, αναζητούνται τα επιτρεπτά ζεύγη $[\theta, \varphi(\theta)]$ όταν $\theta = \theta_1 \leq \theta_R$. Έστω R το επίπεδο xy στο ύψος του ορίου σκίασης S_R και L το επίπεδο xy στο ύψος του ορίου σκίασης S_L . Τα ευθύγραμμο τμήματα PP_L και PP_R είναι κάθετα στα επίπεδα L και R, ενώ το σημείο $S_{L(R)}$ είναι το σημείο τομής του επιπέδου R με την ευθεία που ορίζεται από το ευθύγραμμο τμήμα PS_L . Η απόσταση r_1 εξαρτάται από τη γωνία θ_1 και είναι $r_1 = dzR \tan \theta_1$. Για $\theta = \theta_1 \leq \theta_R$, το σύνολο των επιτρεπτών ζευγών ορίζει ένα κόλουρο κώνου η τομή του οποίου με το επίπεδο R είναι κύκλος (P_R, r_1) και φαίνεται στο Σχήμα 2.7β. Σε αυτή την περίπτωση, δεν υπάρχει περιορισμός στην αζιμουθιακή γωνία φ , οι επιτρεπτές τιμές για τη γωνία φ είναι $0 \leq \varphi \leq 2\pi$.

Στη δεύτερη περίπτωση, η οποία περιγράφεται στα Σχήματα 2.7γ και 2.7δ, αναζητούνται τα επιτρεπτά ζεύγη $[\theta, \varphi(\theta)]$ όταν $\theta = \theta_2: \theta_R \leq \theta_2 \leq \theta_L$. Η απόσταση r_2 εξαρτάται από τη γωνία θ_2 και είναι $r_2 = dzR \tan \theta_2$. Το σύνολο των επιτρεπτών ζευγών $[\theta_2, \varphi(\theta_2)]$ ορίζει τμήμα κόλουρου κώνου η τομή του οποίου με το επίπεδο R είναι τμήμα περιφέρειας κύκλου (P_R, r_2) και φαίνεται στο Σχήμα 2.7δ. Σε αυτή την περίπτωση, υπάρχει περιορισμός στην αζιμουθιακή γωνία φ : οι επιτρεπτές τιμές για τη γωνία φ είναι $\varphi_{R2} \leq \varphi \leq 2\pi - \varphi_{R2}$.

Από το Σχήμα 2.7δ προκύπτει ότι

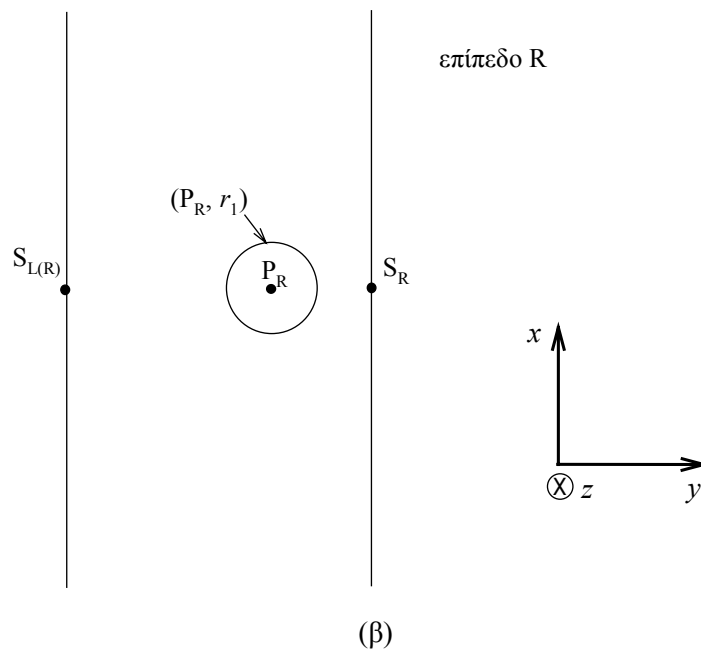
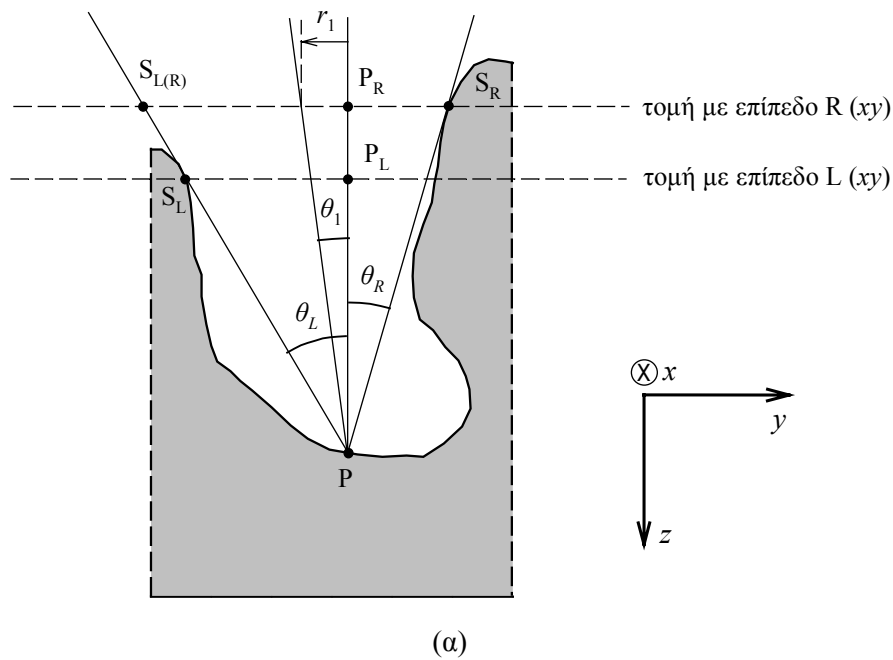
$$\cos \varphi_{R2} = \frac{P_R S_R}{P_R A_2} = \frac{r_2}{dyR} = \frac{dzR \tan \theta_2}{dyR} = \frac{\tan \theta_2}{\tan \theta_R} \Rightarrow \varphi_{R2} = a \cos\left(\frac{\tan \theta_2}{\tan \theta_R}\right). \quad (2.18)$$

Στην τρίτη περίπτωση, η οποία περιγράφεται από τα Σχήματα 2.7ε και 2.7στ, αναζητούνται τα επιτρεπτά ζεύγη όταν $\theta = \theta_3: \theta_L \leq \theta_3 \leq \pi/2$. Το σύνολο των επιτρεπτών ζευγών ορίζει τμήμα κόλουρου κώνου η τομή του οποίου με το επίπεδο R είναι τμήματα περιφέρειας κύκλου (P_R, r_3) και φαίνεται στο Σχήμα 2.7στ. Σε αυτή την περίπτωση οι επιτρεπτές τιμές για τη γωνία φ είναι $\varphi_{R3} \leq \varphi \leq \pi - \varphi_{L3}$ και $\pi + \varphi_{L3} \leq \varphi \leq 2\pi - \varphi_{R3}$.

Από το Σχήμα 2.7στ με συνεπαγωγές αντίστοιχες της Εξ. (2.18) προκύπτει ότι

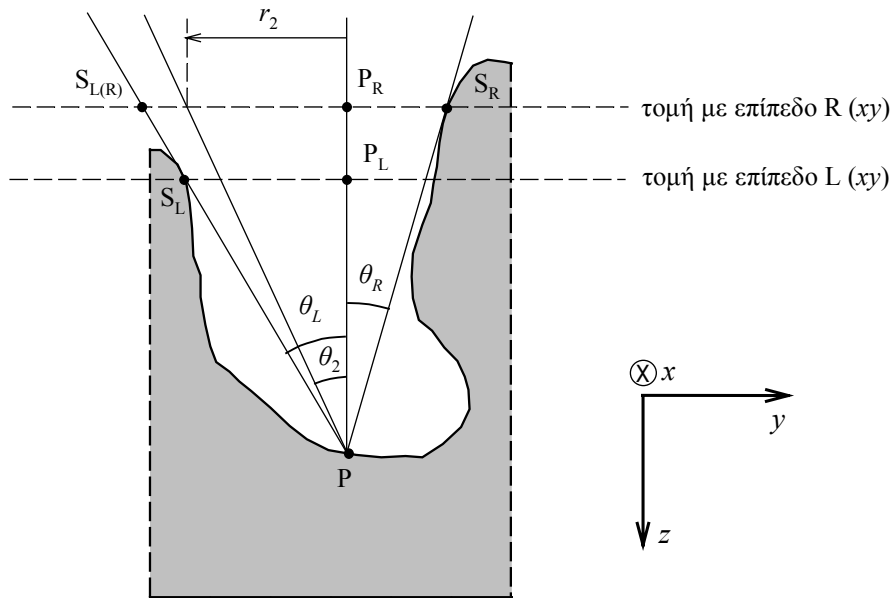
$$\varphi_{R3} = a \cos\left(\frac{\tan \theta_3}{\tan \theta_R}\right), \quad (2.19)$$

$$\varphi_{L3} = a \cos\left(\frac{\tan \theta_3}{\tan \theta_L}\right). \quad (2.20)$$

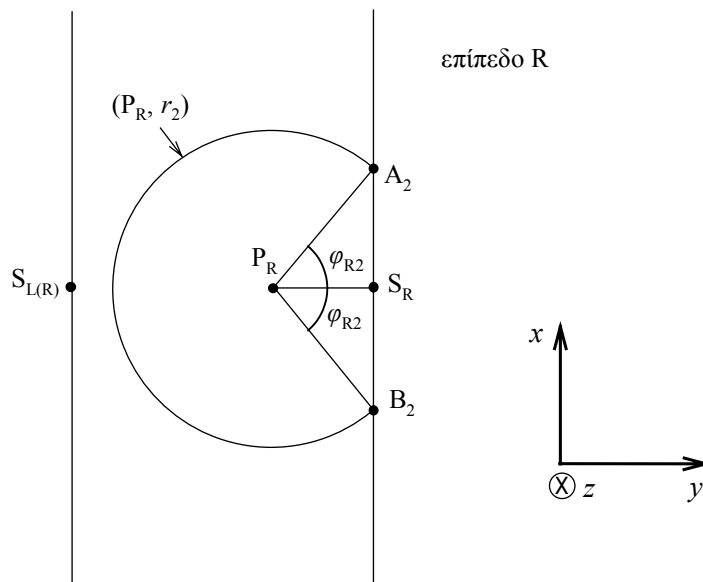


Σχήμα 2.7 Τομές της δομής του Σχήματος 2.6α με τα επίπεδα yz και xy , οι οποίες χρησιμοποιούνται για τον υπολογισμό των επιτρεπτών ζευγών $[\theta, \varphi(\theta)]$ για το σημείο P. Διακρίνονται τρεις περιοχές τιμών για την πολική γωνία θ , οι οποίες εξαρτώνται από τις γωνίες θ_L και θ_R , όπως αυτές ορίζονται

από τα όρια σκίασης S_L και S_R του σημείου P . R είναι το επίπεδο xy στο ύψος του S_R και L το επίπεδο xy στο ύψος του S_L . Τα ευθύγραμμα τμήματα PP_L και PP_R είναι κάθετα στα επίπεδα L και R , ενώ το σημείο $S_{L(R)}$ είναι το σημείο τομής του επιπέδου R με την ευθεία που ορίζεται από το ευθύγραμμο τμήμα PS_L . (α) Τομή του αυλακιού στο επίπεδο yz που περιέχει το σημείο P , $\theta = \theta_1 \leq \theta_R$. (β) Τομή του αυλακιού στο επίπεδο R . Ο κύκλος (P_R, r_1) ορίζει το σύνολο των επιτρεπτών ζευγών $[\theta_1, \varphi(\theta_1)]$: $0 \leq \varphi(\theta_1) \leq 2\pi$. Το Σχήμα 2.7 συνεχίζεται στις επόμενες σελίδες.

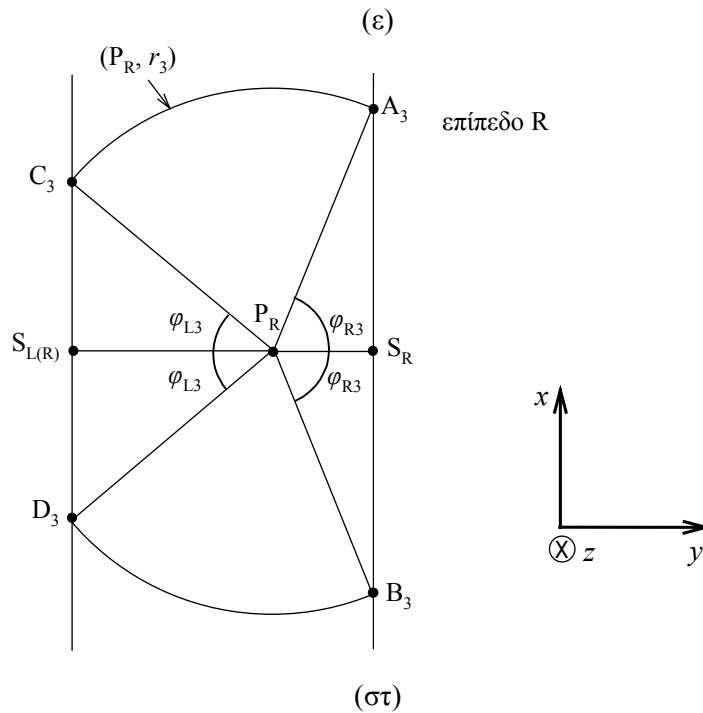
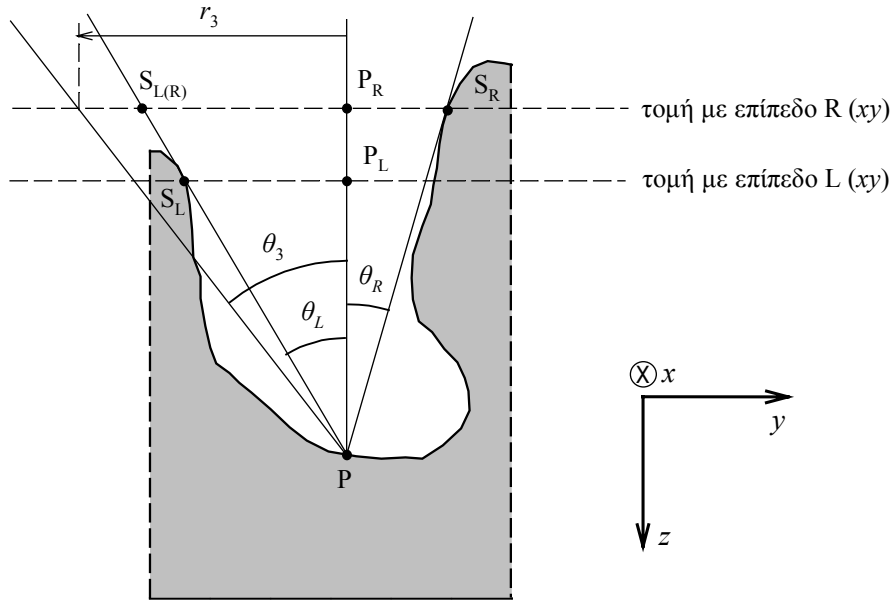


(γ)



(δ)

Σχήμα 2.7 (συνέχεια) (γ) Τομή του αυλακιού στο επίπεδο yz που περιέχει το P , $\theta = \theta_2$: $\theta_R \leq \theta_2 \leq \theta_L$. (δ) Τομή του αυλακιού στο επίπεδο R . Το σύνολο των επιτρεπτών ζευγών $[\theta_2, \varphi(\theta_2)]$ ορίζει τμήμα κόλουρου κώνου η τομή του οποίου με το επίπεδο R είναι τμήμα περιφέρειας κύκλου (P_R, r_2) : $\varphi_{R2} \leq \varphi(\theta_2) \leq 2\pi - \varphi_{R2}$.



Σχήμα 2.7 (συνέχεια) (ε) Τομή του αυλακιού στο επίπεδο yz που περιέχει το P , $\theta = \theta_3 : \theta_L \leq \theta_3 \leq \pi/2$. (στ) Τομή του αυλακιού στο επίπεδο R . Το σύνολο των επιτρεπτών ζευγών $[\theta_3, \varphi(\theta_3)]$ ορίζει τμήμα κόλουρου κώνου η τομή του οποίου με το επίπεδο R είναι τμήματα περιφέρειας κύκλου (P_R, r_3) : $\varphi_{R3} \leq \varphi(\theta_3) \leq \pi - \varphi_{L3}$ και $\pi + \varphi_{L3} \leq \varphi(\theta_3) \leq 2\pi - \varphi_{R3}$.

Συγκεντρώνοντας τα παραπάνω αποτελέσματα προκύπτει ότι η στερεά γωνία Ω (ή τα επιτρεπτά ζεύγη) για το σημείο P των Σχημάτων 2.6 και 2.7 ($dyL \geq 0$ και $dyR \geq 0$ και $dzR \neq 0$ και $dzL \neq 0$) είναι

$$\Omega(\mathbf{x}_p) = \left\{ \begin{array}{l} 0 < \theta < \frac{\pi}{2} \\ \varphi_R(\theta) \leq \varphi \leq \pi - \varphi_L(\theta) \\ \pi + \varphi_L(\theta) \leq \varphi \leq 2\pi - \varphi_R(\theta) \end{array} \right\}, \quad (2.21)$$

όπου

$$\varphi_L(\theta) = \left\{ \begin{array}{ll} 0 & , 0 < \theta \leq \theta_L \\ a \cos\left(\frac{\tan \theta_L}{\tan \theta}\right) & , \theta_L < \theta < \frac{\pi}{2} \end{array} \right\}, \quad (2.22)$$

$$\varphi_R(\theta) = \left\{ \begin{array}{ll} 0 & , 0 < \theta \leq \theta_R \\ a \cos\left(\frac{\tan \theta_R}{\tan \theta}\right) & , \theta_R < \theta < \frac{\pi}{2} \end{array} \right\}, \quad (2.23)$$

ενώ οι γωνίες θ_L, θ_R δίδονται από τις Εξ. (2.16) και (2.17).

Οι Εξ. (2.21) – (2.23) και οι Εξ. (2.16) – (2.17) γενικεύονται για κάθε σημείο δομής με τα χαρακτηριστικά της δομής του Σχήματος 2.6. Για τυχαίο σημείο $\mathbf{x}(x, y, z)$ τέτοιων δομών η στερεά γωνία Ω είναι

$$\Omega(\mathbf{x}) = \left\{ \begin{array}{l} 0 < \theta < \frac{\pi}{2} \\ \varphi_R(\theta) \leq \varphi \leq \pi - \varphi_L(\theta) \\ \pi + \varphi_L(\theta) \leq \varphi \leq 2\pi - \varphi_R(\theta) \end{array} \right\}, \quad (2.24)$$

όπου

$$\varphi_L(\theta) = \left\{ \begin{array}{ll} 0, & 0 < \theta \leq \theta_L \wedge dyL \geq 0 \\ a \cos\left(\frac{\tan \theta_L}{\tan \theta}\right), & \theta_L < \theta < \frac{\pi}{2} \wedge dyL \geq 0 \\ \pi, & 0 < \theta \leq \theta_L \wedge dyL < 0 \\ \pi - a \cos\left(\frac{\tan \theta_L}{\tan \theta}\right), & \theta_L < \theta < \frac{\pi}{2} \wedge dyL < 0 \end{array} \right\}, \quad (2.25)$$

$$\varphi_R(\theta) = \left\{ \begin{array}{ll} 0, & 0 < \theta \leq \theta_R \wedge dyR \geq 0 \\ a \cos\left(\frac{\tan \theta_R}{\tan \theta}\right), & \theta_R < \theta < \frac{\pi}{2} \wedge dyR \geq 0 \\ \pi, & 0 < \theta \leq \theta_R \wedge dyR < 0 \\ \pi - a \cos\left(\frac{\tan \theta_R}{\tan \theta}\right), & \theta_R < \theta < \frac{\pi}{2} \wedge dyR < 0 \end{array} \right\} \quad (2.26)$$

και

$$\theta_L = \left\{ \begin{array}{ll} 0, & dyL = dzL = 0 \\ \frac{\pi}{2}, & dzL = 0 \wedge dyL \neq 0 \\ \rightarrow \frac{\pi}{2}, & dzL < 0 \wedge dyL \neq 0 \\ a \tan\left(\frac{|dyL|}{|dzL|}\right), & dzL > 0 \end{array} \right\}, \quad (2.27)$$

$$\theta_R = \left\{ \begin{array}{ll} 0, & dyR = dzR = 0 \\ \frac{\pi}{2}, & dzR = 0 \wedge dyR \neq 0 \\ \rightarrow \frac{\pi}{2}, & dzR < 0 \wedge dyR \neq 0 \\ a \tan\left(\frac{|dyR|}{|dzR|}\right), & dzR > 0 \end{array} \right\}, \quad (2.28)$$

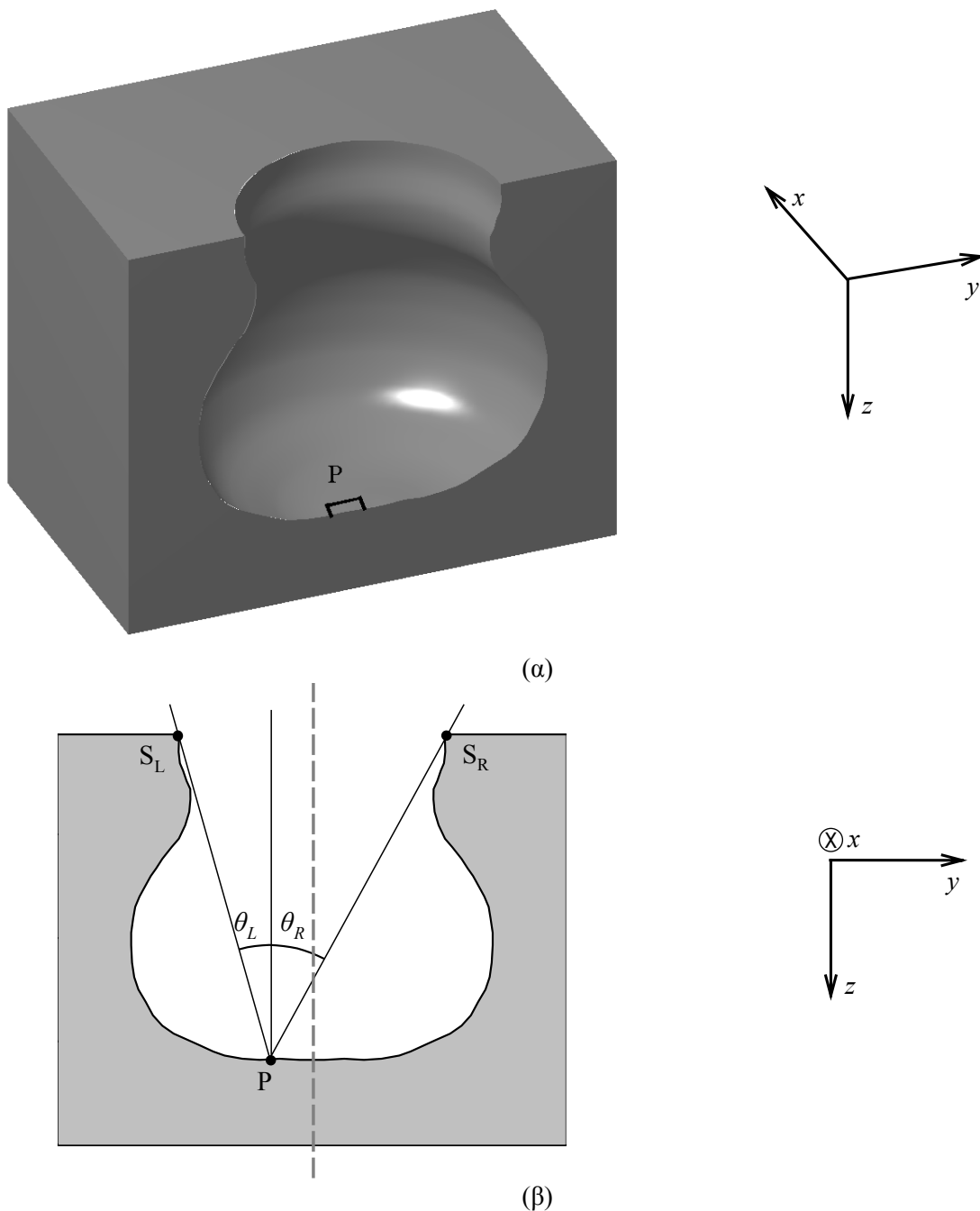
ενώ οι ποσότητες dyL , dzL , dyR , dzR ορίζονται κατ' αντιστοιχία με τις Εξ. (2.15),

$$dyL = y - y_{SL}, \quad dyR = y_{SR} - y, \quad dzL = z - z_{SL}, \quad dzR = z - z_{SR}. \quad (2.29)$$

Σημειώνεται ότι οι Εξ. (2.24) – (2.29) δεν ισχύουν αν $dyL < 0$ και $\theta_L > \theta_R$ ή αν $dyR < 0$ και $\theta_R > \theta_L$. Σε αυτές τις περιπτώσεις ο κύριος όγκος του πλάσματος δεν είναι ορατός στο εξεταζόμενο σημείο.

2.4.3 Στερεά γωνία Ω για οπή κυλινδρικής συμμετρίας

Οι υπολογισμοί στερεάς γωνίας που ακολουθούν αφορούν σε οπές με κυλινδρική συμμετρία (συμμετρία ως προς άξονα). Στο Σχήμα 2.8α φαίνεται μια οπή (ή καλύτερα το μισό μιας οπής) με κυλινδρική συμμετρία. Ο άξονας συμμετρίας είναι ο άξονας z και λόγω κυλινδρικής συμμετρίας κάθε τομή της οπής στο επίπεδο xy είναι ένας κύκλος. Επίσης, λόγω κυλινδρικής συμμετρίας αρκεί να γίνει υπολογισμός της στερεάς γωνίας και της απευθείας ροής μόνο στο μισό της τομής της οπής με το επίπεδο yz (Σχήμα 2.8β, από το σημείο S_L μέχρι το σημείο όπου ο άξονας συμμετρίας τέμνει την τομή της οπής στο επίπεδο xy).



Σχήμα 2.8 (α) Οπή με κυλινδρική συμμετρία. Ο άξονας συμμετρίας είναι ο άξονας z . (β) Τομή της οπής με το επίπεδο yz που περιέχει το σημείο P και τον άξονα κυλινδρικής συμμετρίας (διακεκομμένη

γραμμή). Τα σημεία S_R και S_L είναι τα όρια σκίασης για το σημείο P. Τα σημεία σκίασης και ο άξονας z καθορίζουν τις θ_L και θ_R , οριακές τιμές της πολικής γωνίας θ που χρησιμοποιούνται για τον υπολογισμό της στερεάς γωνίας Ω για το σημείο P.

Στη συνέχεια, θα υπολογιστεί η στερεά γωνία Ω για το σημείο $P(x_P, y_P, z_P)$ της οπής του Σχήματος 2.8α και έπειτα θα γενικευτούν οι εξισώσεις υπολογισμού της στερεάς γωνίας για οποιοδήποτε σημείο της οπής.

Η στερεά γωνία Ω ορίζεται ουσιαστικά από τα όρια ολοκλήρωσης στις γωνίες φ και θ του σφαιρικού συστήματος συντεταγμένων (Σχήμα 2.4γ). Στο Σχήμα 2.8β φαίνεται τομή της δομής του Σχήματος 2.8α με το επίπεδο yz που περιέχει το σημείο P και τον άξονα συμμετρίας. Η οπή του Σχήματος 2.8α προκύπτει περιστρέφοντας κατά 180° την τομή του Σχήματος 2.8β γύρω από τον άξονα συμμετρίας. Στο Σχήμα 2.8β φαίνονται επίσης τα όρια σκίασης $S_L(y_{SL}, z_{SL})$ και $S_R(y_{SR}, z_{SR})$ του σημείου P και οι γωνίες θ_L και θ_R που σχηματίζουν τα τμήματα PS_L και PS_R με τον άξονα z. Οι γωνίες θ_L και θ_R υπολογίζονται, όπως και στην περίπτωση του αυλακιού του Σχήματος 2.6, από τις Εξ. (2.16) και (2.17).

Ο προσδιορισμός της στερεάς γωνίας Ω για το σημείο P γίνεται, όπως και στην περίπτωση του αυλακιού, με την εύρεση των επιτρεπτών ζευγών $[\theta, \varphi(\theta)]$. Τα επιτρεπτά ζεύγη ορίζουν ευθείες γραμμές που ενώνουν το σημείο P με τον κύριο όγκο χωρίς να τέμνουν τη δομή. Οι ποσότητες dy_L , dy_R , dz_R και dz_L όπως ορίζονται από τις Εξ. (2.15) είναι απαραίτητες στους υπολογισμούς. Για το σημείο P του Σχήματος 2.8 είναι $\theta_L \leq \theta_R$ και $dy_L > 0$ και $dy_R > 0$ και $dz_R = dz_L = dz \neq 0$. Διακρίνονται τρεις περιπτώσεις (Σχήμα 2.9).

Στην πρώτη περίπτωση, η οποία περιγράφεται στα Σχήματα 2.9α και 2.9β, αναζητούνται τα επιτρεπτά ζεύγη $[\theta, \varphi(\theta)]$ όταν $\theta = \theta_1 \leq \theta_L$. Έστω RL το επίπεδο xy στο ύψος των ορίων σκίασης S_R και S_L . Το ευθύγραμμο τμήμα PP_{RL} είναι κάθετο στο επίπεδο RL. Η απόσταση r_1 εξαρτάται από τη γωνία θ_1 και είναι $r_1 = dz \tan \theta_1$. Για $\theta = \theta_1 \leq \theta_L$, το σύνολο των επιτρεπτών ζευγών ορίζει ένα κόλouro κώνου η τομή του οποίου με το επίπεδο RL είναι κύκλος (P_{RL}, r_1) και φαίνεται στο Σχήμα 2.9β. Σε αυτή την περίπτωση δεν υπάρχει περιορισμός στην αζιμουθιακή γωνία φ και οι επιτρεπτές τιμές για την αζιμουθιακή γωνία φ είναι $0 \leq \varphi \leq 2\pi$.

Στη δεύτερη περίπτωση, η οποία περιγράφεται στα Σχήματα 2.9γ και 2.9δ, αναζητούνται τα επιτρεπτά ζεύγη $[\theta, \varphi(\theta)]$ όταν $\theta = \theta_2$: $\theta_L \leq \theta_2 \leq \theta_R$. Η απόσταση r_2 εξαρτάται από τη γωνία θ_2 και είναι $r_2 = dz \tan \theta_2$. Το σύνολο των επιτρεπτών ζευγών ορίζει τμήμα κόλουρου κώνου η τομή του οποίου με το επίπεδο R είναι τμήμα περιφέρειας κύκλου (P_{RL}, r_2) και φαίνεται στο Σχήμα 2.9δ. Σε αυτή την περίπτωση, υπάρχει περιορισμός στην αζιμουθιακή γωνία φ και οι επιτρεπτές τιμές για τη γωνία φ είναι, όπως φαίνεται από το Σχήμα 2.9δ, $0 \leq \varphi \leq \varphi_{c2}$ και $2\pi - \varphi_{c2} \leq \varphi \leq 2\pi$.

Από το Σχήμα 2.9δ προκύπτει ότι

$$\cos \varphi_{c2} = \frac{P_{RL} D_2}{P_{RL} A_2}. \quad (2.30)$$

Είναι

$$P_{RL}A_2 = r_2 = dz \tan \theta_2, \quad (2.31)$$

και

$$P_{RL}D_2 = y_{D2} - y_{PRL} = y_{D2} - y_P = y_{A2} - y_P. \quad (2.32)$$

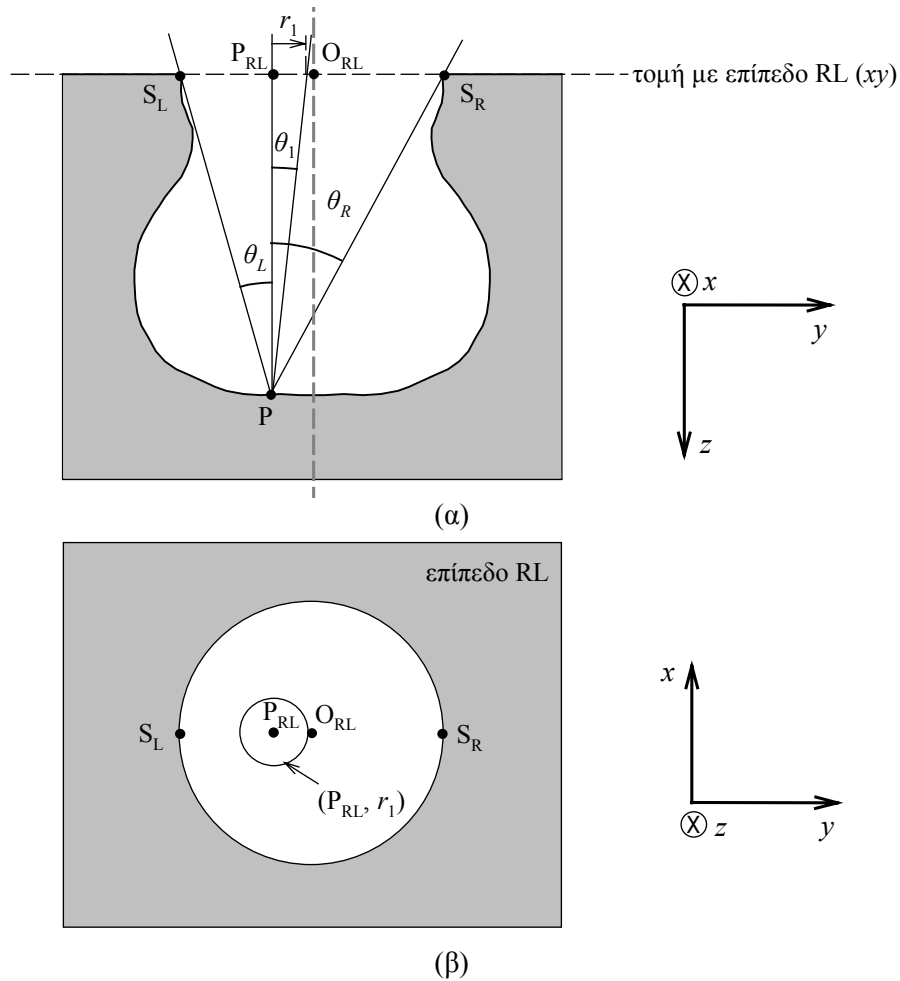
Η τεταγμένη του σημείου A_2 , y_{A2} , προκύπτει από την εύρεση των σημείων τομής δύο κύκλων (Σχήμα 2.9δ): ο πρώτος είναι ο κύκλος (O_{RL} , $O_{RL}S_R$) με κέντρο την τομή του άξονα συμμετρίας με το επίπεδο RL και ακτίνα την ακτίνα της οπής στο επίπεδο RL. Σημειώνεται ότι λόγω της κυλινδρικής συμμετρίας, κάθε τομή της οπής σε επίπεδο xy είναι κύκλος. Ο δεύτερος κύκλος είναι ο κύκλος (P_{RL} , r_2) ο οποίος εκφράζει το σύνολο των ζευγών $[\theta_2, \varphi(\theta_2)]$. Για την απλοποίηση των υπολογισμών θεωρείται ότι η αρχή του συστήματος συντεταγμένων στο οποίο ορίζονται οι δύο κύκλοι είναι το σημείο O_{RL} . Έτσι, η τεταγμένη του σημείου A_2 είναι

$$y_{A2} = \frac{y_{PRL}^2 - (dz \tan \theta_2)^2 + y_{SR}^2}{2y_{PRL}} \quad (2.33)$$

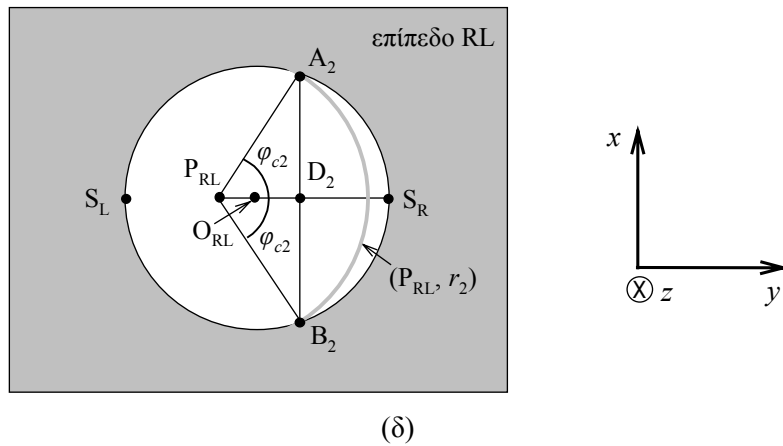
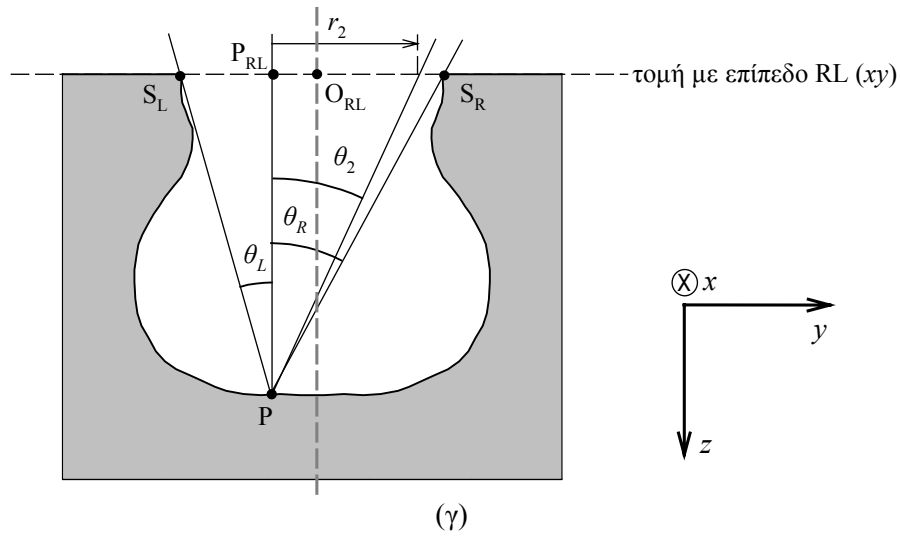
Χρησιμοποιώντας τις Εξ. (2.31), (2.32) και (2.33) προκύπτει από την Εξ. (2.30) ότι

$$\varphi_{c2} = a \cos \left[\frac{-y_P^2 - (dz \tan \theta_2)^2 + y_{SR}^2}{2y_P dz \tan \theta_2} \right]. \quad (2.34)$$

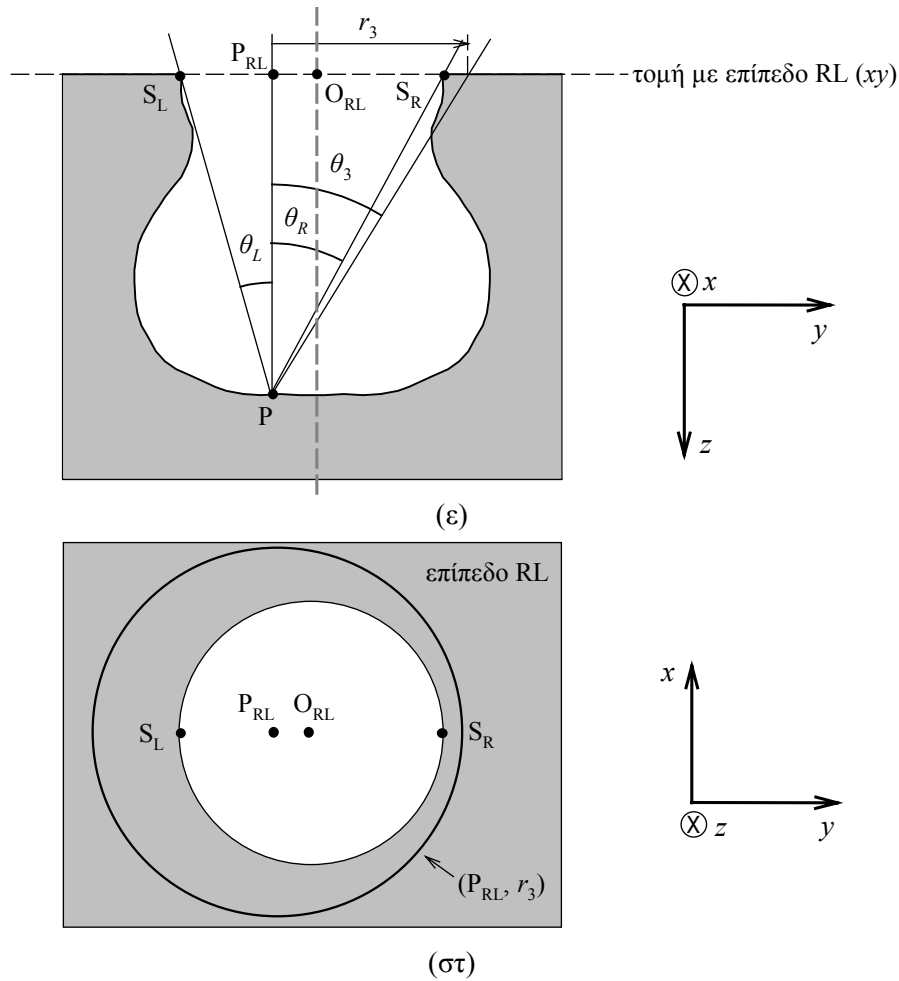
Στην τρίτη περίπτωση όπου $\theta = \theta_3$: $\theta_R \leq \theta_3 \leq \pi/2$ (Σχήμα 2.9ε), δεν υπάρχουν επιτρεπτά ζεύγη, καθώς ο κύκλος που ορίζεται από την τομή της δομής με το επίπεδο RL βρίσκεται στο εσωτερικό του κύκλου (P_{RL} , r_3) χωρίς να υπάρχει σημείο τομής (Σχήμα 2.9στ).



Σχήμα 2.9 Τομές της δομής του Σχήματος 2.8α με τα επίπεδα yz και xy , οι οποίες χρησιμοποιούνται για τον υπολογισμό των επιτρεπτών ζευγών $[\theta, \varphi(\theta)]$ για το σημείο P. Διακρίνονται τρεις περιοχές τιμών για την πολική γωνία θ , οι οποίες εξαρτώνται από τις γωνίες θ_L και θ_R , όπως αυτές ορίζονται από τα όρια σκίασης S_L και S_R του σημείου P. RL είναι το επίπεδο xy στο ύψος των ορίων σκίασης. Το ευθύγραμμο τμήμα PP_{RL} είναι κάθετο στο επίπεδο RL. O_{RL} είναι η τομή του άξονα συμμετρίας της οπής (διακεκομμένη γραμμή) με το επίπεδο RL. (α) Τομή της οπής στο επίπεδο yz που περιέχει το σημείο P, $\theta = \theta_1 \leq \theta_L$. (β) Τομή της οπής στο επίπεδο RL. Ο κύκλος (P_{RL}, r_1) ορίζει το σύνολο των επιτρεπτών ζευγών $[\theta_1, \varphi(\theta_1)]: 0 \leq \varphi(\theta_1) \leq 2\pi$. Το Σχήμα 2.9 συνεχίζεται.



Σχήμα 2.9 (συνέχεια) (γ) Τομή της οπής στο επίπεδο yz που περιέχει το P , $\theta = \theta_2$: $\theta_L \leq \theta_2 \leq \theta_R$. (δ) Τομή της οπής στο επίπεδο RL. Το σύνολο των επιτρεπτών ζευγών $[\theta_2, \varphi(\theta_2)]$ ορίζει τμήμα κόλουρου κώνου η τομή του οποίου με το επίπεδο RL είναι τμήμα περιφέρειας κύκλου (P_R, r_2) : $0 \leq \varphi(\theta_2) \leq \varphi_{c2}$ και $2\pi - \varphi_{c2} \leq \varphi(\theta_2) \leq 2\pi$. Το Σχήμα 2.9 συνεχίζεται.



Σχήμα 2.9 (συνέχεια) (ε) Τομή της οπής στο επίπεδο yz που περιέχει το P , $\theta = \theta_3$; $\theta_R \leq \theta_3 \leq \pi/2$. (στ) Τομή της οπής στο επίπεδο RL. Δεν υπάρχουν επιτρεπτά ζεύγη, καθώς ο κύκλος που ορίζεται από την τομή της δομής με το επίπεδο RL βρίσκεται στο εσωτερικό του κύκλου (P_{RL}, r_3) .

Γενικεύοντας τον υπολογισμό της στερεάς γωνίας για την περίπτωση όπου τα όρια σκίασης ανήκουν στο ίδιο επίπεδο xy ($dz_R = dz_L$), θεωρώντας ότι ο άξονας z του συστήματος συντεταγμένων είναι ο άξονας συμμετρίας της οπής, προκύπτει ότι η στερεά γωνία Ω για σημείο x της οπής είναι:

$$\Omega(\mathbf{x}) = \left\{ \begin{array}{l} 0 < \theta < \frac{\pi}{2} \\ \pi - \varphi_c < \varphi < \pi + \varphi_c \end{array} \right\}. \quad (2.35)$$

Αν $r = |y_P|$, $R = |y_{SR}| = |y_{SL}|$ ³¹ και $dz_R = dz_L = dz$, τότε

³¹ Η ισότητα $|y_{SR}| = |y_{SL}|$ προκύπτει από την $dz_L = dz_R$ και την κυλινδρική συμμετρία που επιβάλλει σε κάθε τομή της οπής στο επίπεδο xy να είναι κύκλος.

$$\varphi_c(\theta) = \begin{cases} \pi, & 0 < \theta \leq \theta_{\min} \wedge r \leq R \\ 0, & 0 < \theta \leq \theta_{\min} \wedge r > R \\ a \cos T, & \theta_{\min} < \theta \leq \theta_{\max} \\ 0, & \theta_{\max} < \theta \leq \frac{\pi}{2} \end{cases} \quad (2.36)$$

όπου

$$T = \begin{cases} \frac{r^2 - R^2 + (dz \tan \theta)^2}{2rdz \tan \theta}, & dz \neq 0 \wedge r \neq 0 \\ -1, & r = 0 \\ 0, & dz = 0 \end{cases}, \quad (2.37)$$

$$\theta_{\min} = \min(\theta_L, \theta_R), \quad (2.38)$$

$$\theta_{\max} = \max(\theta_L, \theta_R), \quad (2.39)$$

$$\theta_L = \begin{cases} 0, & dyL = dz = 0 \\ \frac{\pi}{2}, & dz = 0 \wedge dyL \neq 0 \\ a \tan\left(\frac{|dyL|}{|dz|}\right), & dz \neq 0 \end{cases} \quad (2.40)$$

και

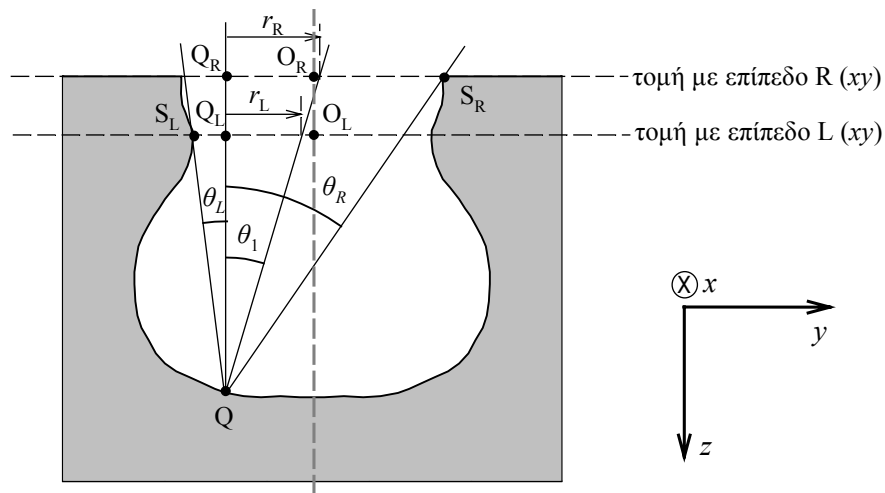
$$\theta_R = \begin{cases} 0, & dyR = dz = 0 \\ \frac{\pi}{2}, & dz = 0 \wedge dyR \neq 0 \\ a \tan\left(\frac{|dyR|}{|dzR|}\right), & dz \neq 0 \end{cases}. \quad (2.41)$$

Οι σχέσεις υπολογισμού των θ_L, θ_R είναι αντίστοιχες των Εξ. (2.27) και (2.28). Δεν περιλαμβάνουν την περίπτωση όπου $dzL < 0$ ή $dzR < 0$, αφού οι ανισότητες αυτές είναι αδύνατες στην περίπτωση σπών με κυλινδρική συμμετρία.

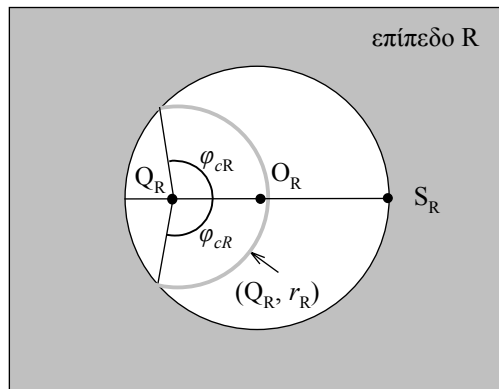
Η εύρεση της στερεάς γωνίας Ω είναι περισσότερο σύνθετη όταν τα όρια σκίασης (S_R, S_L) δεν ανήκουν στο ίδιο επίπεδο xy ($dzR \neq dzL$), όπως συμβαίνει στο σημείο Q του Σχήματος 2.10α. Στα Σχήματα 2.10β και 2.10γ φαίνονται τομές της οπής με τα επίπεδα L (στο ύψος του S_L) και R (στο ύψος του S_R). Η δυσκολία εύρεσης της στερεάς γωνίας Ω

έγκειται στην επιλογή της τομής xy της οπής που καθορίζει τα επιτρεπτά ζεύγη. Η γωνία φ_c που καθορίζει τη στερεά γωνία Ω είναι διαφορετική στις δύο τομές της οπής ($\varphi_{cR} \neq \varphi_{cL}$, Σχήματα 2.10α και 2.10β).

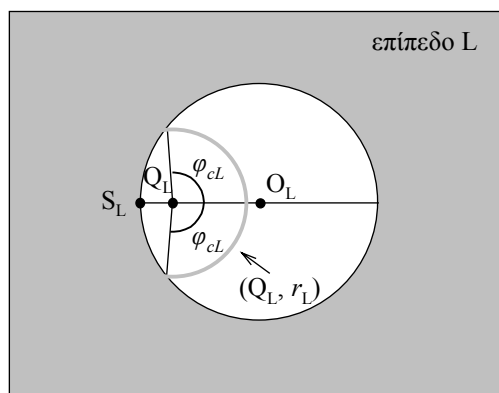
Για την περίπτωση όπου $dzR \neq dzL$ υπάρχει μια τιμή θ_c της πολικής γωνίας, στην οποία αλλάζει η τομή της οπής που περιορίζει τα επιτρεπτά ζεύγη. Η γωνία αυτή σχηματίζεται από τον άξονα z και την ευθεία που διέρχεται από το σημείο P, από σημείο του κύκλου ($OL, |y_{SL}|$) και σημείο του κύκλου ($OR, |y_{SR}|$).



(α)



(β)



(γ)

Σχήμα 2.10 Τομές της δομής του Σχήματος 2.8α με τα επίπεδα yz και xy , οι οποίες χρησιμοποιούνται για τον υπολογισμό των επιτρεπτών ζευγών $[\theta, \varphi(\theta)]$ για το σημείο Q. Η περίπτωση του σημείου Q

διαφέρει από αυτή του σημείου P του Σχήματος 2.9 διότι τα όρια σκίασης του σημείου Q (S_L, S_R) δεν ανήκουν στο ίδιο επίπεδο xy . R είναι το επίπεδο xy στο ύψος του S_R και L το επίπεδο xy στο ύψος του S_L . (α) Τομή της οπής στο επίπεδο yz που περιέχει το σημείο Q, $\theta = \theta_1$: $\theta_L \leq \theta_1 \leq \theta_R$. (β) Τομή της οπής στο επίπεδο R. Το σύνολο των «υποψηφίων» επιτρεπτών ζευγών $[\theta_1, \varphi(\theta_1)]$ ορίζει τμήμα κόλουρου κώνου η τομή του οποίου με το επίπεδο R είναι τμήμα περιφέρειας κύκλου (Q_R, r_R): $0 \leq \varphi(\theta_1) \leq \varphi_{cR}$ και $2\pi - \varphi_{cR} \leq \varphi(\theta_1) \leq 2\pi$. (γ) Τομή της οπής στο επίπεδο L. Το σύνολο των «υποψηφίων» επιτρεπτών ζευγών $[\theta_1, \varphi(\theta_1)]$ ορίζει τμήμα κόλουρου κώνου η τομή του οποίου με το επίπεδο L είναι τμήμα περιφέρειας κύκλου (Q_L, r_L): $0 \leq \varphi(\theta_1) \leq \varphi_{cL}$ και $2\pi - \varphi_{cL} \leq \varphi(\theta_1) \leq 2\pi$. Η δυσκολία εύρεσης των επιτρεπτών ζευγών έγκειται στην ορθή επιλογή της τομής xy της οπής που καθορίζει τα επιτρεπτά ζεύγη. Η γωνία φ_c που καθορίζει τη στερεά γωνία Ω [Εξ. (2.35)] είναι διαφορετική στις δύο τομές της οπής ($\varphi_{cR} \neq \varphi_{cL}$).

Γενικεύοντας τον υπολογισμό της στερεάς γωνίας για την περίπτωση όπου τα όρια σκίασης δεν ανήκουν στο ίδιο επίπεδο xy ($dzR \neq dzL$), θεωρώντας ότι ο άξονας z του συστήματος συντεταγμένων είναι ο άξονας συμμετρίας της οπής, προκύπτει ότι η στερεά γωνία Ω για σημείο x της οπής δίδεται και πάλι από την Εξ. (2.35). Η διαφορά είναι στις εξισώσεις υπολογισμού της γωνίας φ_c , οι οποίες περιγράφονται στη συνέχεια. Είναι

$$\theta_L = a \tan\left(\frac{|dyL|}{|dzL|}\right) \quad (2.42)$$

και

$$\theta_R = a \tan\left(\frac{|dyR|}{|dzR|}\right). \quad (2.43)$$

Σημειώνεται ότι αν $dzR \neq dzL$, τότε $dzR \neq 0$ και $dzL \neq 0$. Επίσης,

$$\theta_{\min} = \min(\theta_L, \theta_R), \quad (2.44)$$

$$\theta_{\max} = \max(\theta_L, \theta_R). \quad (2.45)$$

Ορίζονται οι ποσότητες

$$R_1 = \left\{ \begin{array}{l} |y_{SL}|, \quad \theta_L = \theta_{\min} \\ |y_{SR}|, \quad \theta_R = \theta_{\min} \end{array} \right\}, \quad (2.46)$$

$$R_2 = \left\{ \begin{array}{l} |y_{SR}|, \quad \theta_L = \theta_{\min} \\ |y_{SL}|, \quad \theta_R = \theta_{\min} \end{array} \right\}, \quad (2.47)$$

$$dz_1 = \begin{cases} dzL, & \theta_L = \theta_{\min} \\ dzR, & \theta_R = \theta_{\min} \end{cases}, \quad (2.48)$$

$$dz_2 = \begin{cases} dzR, & \theta_L = \theta_{\min} \\ dzL, & \theta_R = \theta_{\min} \end{cases}, \quad (2.49)$$

και αν $r=|y_p|$, τότε

$$T_1 = \begin{cases} \frac{r^2 - R_1^2 + (dz_1 \tan \theta)^2}{2rdz_1 \tan \theta}, & r \neq 0 \\ -1, & r = 0 \end{cases}, \quad (2.50)$$

$$T_2 = \begin{cases} \frac{r^2 - R_2^2 + (dz_2 \tan \theta)^2}{2rdz_2 \tan \theta}, & r \neq 0 \\ -1, & r = 0 \end{cases}, \quad (2.51)$$

$$\theta_c = a \tan \left(\sqrt{\frac{-R_1^2 dz_1 + R_2^2 dz_2 + r^2 (dz_1 - dz_2)}{dz_1 (dz_1 - dz_2) dz_2}} \right), \quad (2.52)$$

και

$$\varphi_c(\theta) = \begin{cases} \pi, & 0 < \theta \leq \theta_{\min} \wedge r \leq R_1 \wedge r \leq R_2 \\ 0, & 0 < \theta \leq \theta_{\min} \wedge (r > R_1 \vee r > R_2) \\ a \cos T_1, & \theta_{\min} < \theta \leq \theta_c \\ a \cos T_2, & \theta_c < \theta < \theta_{\max} \\ 0, & \theta_{\max} \leq \theta < \pi/2 \end{cases}. \quad (2.53)$$

Οι Εξ. (2.42) – (2.53) διαφοροποιούνται όταν τα σημεία σκίασης, όπως ορίζονται σε τομή της οπής (π.χ. σημεία S_L, S_R στο Σχήμα 2.10α), βρίσκονται και τα δύο αριστερά ή δεξιά του άξονα συμμετρίας.

2.4.4 Κατανομή της ροής

Εκτός από τη στερεά γωνία, για τον υπολογισμό της απευθείας ροής είναι απαραίτητη και η συνάρτηση κατανομής της ροής στον κύριο όγκο, $j_{bulk}(\theta, \varphi)$. Η συνάρτηση αυτή μπορεί

να προσεγγιστεί με γνωστές κατανομές (π.χ. Maxwell-Boltzmann, κανονική) ή να προκύψει από προσομοιώσεις Monte Carlo ή πειραματικά δεδομένα.

Η κατανομή της ροής ενός συστατικού εξαρτάται από τις κατανομές κατευθύνσεων και ταχυτήτων των σωματιδίων του συστατικού. Τα συστατικά σε έναν αντιδραστήρα πλάσματος γενικά κατηγοριοποιούνται σε ουδέτερα και φορτισμένα (ιόντα).

2.4.4.1 Κατανομή της ροής για ουδέτερα συστατικά

Η καθολική παραδοχή [Cale & Raupp (1990), Singh et al. (1992), Arnold et al. (1993), Abraham & Wang (1996)] που γίνεται για τα ουδέτερα συστατικά στον κύριο όγκο είναι ότι ικανοποιούν τις παραδοχές της κινητικής θεωρίας των αερίων [Atkins (1999), σ. 23-24]. Σύμφωνα με την κινητική θεωρία των αερίων, η κατανομή ταχυτήτων των ουδέτερων συστατικών είναι Maxwell-Boltzmann και συνεπώς η ροή είναι ισοτροπική, ίδια σε κάθε κατεύθυνση χωρίς να εμφανίζεται προτίμηση κατεύθυνσης. Χρησιμοποιώντας την κατανομή Maxwell-Boltzmann προκύπτει [ο.π. (1999), σ. 724-725] ότι η ροή ουδέτερου συστατικού που φτάνει σε μια ελεύθερη επιφάνεια, $j_{0,N}$, είναι:

$$j_{0,N} = \frac{1}{4} \bar{c} N, \quad (2.54)$$

όπου N είναι η πυκνότητα του αερίου (το πλήθος των σωματιδίων του αερίου ανά μονάδα όγκου) και \bar{c} η μέση ταχύτητα του αερίου.

Η ροή συστατικού σε ελεύθερη επιφάνεια δίδεται και από την Εξ. (2.12), όταν τα όρια ολοκλήρωσης για τις θ , φ είναι τέτοια ώστε να μην υπάρχει σκίαση της ροής, δηλαδή καλύπτουν κάθε πιθανή κατεύθυνση που ανήκει στο ημισφαίριο πάνω από την ελεύθερη επιφάνεια. Έστω ότι η ελεύθερη επιφάνεια έχει κάθετο διάνυσμα παράλληλο στον άξονα z .³¹
Τότε

$$\int_0^{2\pi} \int_0^{\pi/2} j_{bulk,N}(\theta, \varphi) \sin \theta \cos \theta d\theta d\varphi = j_{0,N}. \quad (2.55)$$

Αφού η ροή είναι η ίδια προς κάθε κατεύθυνση η συνάρτηση $j_{bulk,N}(\theta, \varphi)$ μπορεί να βγει από το ολοκλήρωμα. Έτσι, προκύπτει ότι η κατανομή ροής για τα ουδέτερα συστατικά είναι

$$j_{bulk,N}(\theta, \varphi) = \frac{j_{0,N}}{\pi} = \frac{\bar{c} N}{4\pi}. \quad (2.56)$$

³¹ Αυτή η επιλογή δεν περιορίζει τη γενικότητα του συλλογισμού, απλά απλοποιεί τους υπολογισμούς.

2.4.4.2 Κατανομή της ροής για ιόντα

Τα ιόντα επιταχύνονται από το ηλεκτρικό πεδίο που αναπτύσσεται στην οριακή στοιβάδα (§1.3.2.2) κάθετα προς την εγχαρασσόμενη επιφάνεια. Εκτός από την επίδραση του πεδίου, μέσα στην οριακή στοιβάδα και πριν εισέλθουν στη δομή είναι πιθανό να συγκρούονται με ουδέτερα συστατικά. Η κατανομή της ροής των ιόντων εξαρτάται γενικά από την πίεση στον αντιδραστήρα, το πάχος της οριακής στοιβάδας και την τάση στην οριακή στοιβάδα, τη μάζα του ιόντος, τη μάζα των ουδετέρων συστατικών και τη συχνότητα του πλάσματος [Ulacia & McVittie (1989)]. Για παράδειγμα, υψηλή πίεση και μεγάλο πάχος οριακής στοιβάδας συνεπάγεται μεγαλύτερο πλήθος συγκρούσεων και άρα μεγαλύτερο εύρος της κατανομής κατευθύνσεων των ιόντων.

Η συνήθης παραδοχή [Ulacia et al. (1988), Lii & Jorne (1990), Cale (1991), Harafuji & Misaka (1995), Levinson et al. (1997)], που γίνεται για τα φορτισμένα συστατικά (ιόντα) είναι κανονική κατανομή κατευθύνσεων και την ίδια μονοενεργητική κατανομή σε κάθε κατεύθυνση.⁹¹ Σημειώνεται ότι στην πράξη υπάρχει και εξάρτηση της ενέργειας (ταχύτητας) των ιόντων από τη γωνία απόκλισης από την κατακόρυφο. Έχουν προταθεί απλές συνημιτονοειδείς εξαρτήσεις της ενέργειας των ιόντων από τη γωνία απόκλισης από την κατακόρυφο [Shaqfeh & Jurgensen (1989), Lii & Jorne (1990)]. Επίσης, για την προσέγγιση της κατανομής κατευθύνσεων και ενεργειών των ιόντων, έχουν αναπτυχθεί κατάλληλα μοντέλα με διαφορετικό επίπεδο λεπτομέρειας [Shaqfeh & Jurgensen (1989), Ulacia & McVittie (1989), Pelka et al. (1989)], Abraham & Wang (1995), Panagopoulos & Economou (1999)].

Η συνάρτηση πυκνότητας πιθανότητας που περιγράφει την κατανομή κατευθύνσεων για τα ιόντα είναι

$$G(\theta, \varphi) = \begin{cases} \frac{2}{2\pi \sigma \sqrt{2\pi}} \exp\left[-\frac{(\theta - \theta_{ION})^2}{2\sigma^2}\right], & 0 \leq \theta \leq \frac{\pi}{2} \wedge 0 \leq \varphi \leq 2\pi \\ 0, & \text{αλλιώς} \end{cases}, \quad (2.57)$$

όπου θ και φ είναι η πολική και η αζιμουθιακή γωνία (Σχήμα 2.4γ), θ_{ION} η κύρια κατεύθυνση των ιόντων ως προς τον άξονα z (παράμετρος θέσης της κατανομής) και σ η τυπική απόκλιση των κατευθύνσεων πρόσπτωσης των ιόντων ως προς την θ_{ION} .

Η κατανομή κατευθύνσεων για τα ιόντα που περιγράφεται από την Εξ. (2.57) εμφανίζει κυλινδρική συμμετρία ως προς την κύρια κατεύθυνση ιόντων και προκύπτει από τη γνωστή κανονική ή Γκαουσιανή κατανομή με παράμετρο θέσης την θ_{ION} και παράμετρο μεταβλητότητας την σ [Κοκολάκης & Σπηλιώτης (1991), σ. 102]

⁹¹ Δεν είναι αναγκαία η μονοενεργητική κατανομή σε κάθε κατεύθυνση, η παραδοχή μπορεί να αναφέρεται και σε ίδια κατανομή ταχυτήτων Maxwell-Boltzmann σε κάθε κατεύθυνση. Το σημαντικό της παραδοχής είναι ότι η διαφοροποίηση στη ροή των ιόντων ανά κατεύθυνση οφείλεται στη διαφορά του πλήθους σωματιδίων ανά κατεύθυνση και όχι σε διαφορές στην κατανομή της ταχύτητας (ενέργειας).

$$N(\theta) = \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}} \exp\left[-\frac{(\theta - \theta_{ION})^2}{2\sigma^2}\right], \quad (2.58)$$

για την οποία ισχύει

$$\int_{-\infty}^{\infty} N(\theta)d\theta = 2 \int_0^{\infty} N(\theta)d\theta = 1. \quad (2.59)$$

Η συνάρτηση πυκνότητας πιθανότητας $G(\theta, \varphi) = G(\theta)$ της Εξ. (2.57) πρέπει να ικανοποιεί την συνθήκη

$$\int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} G(\theta, \varphi) d\varphi d\theta = \int_{-\infty}^{\infty} \int_0^{2\pi} G(\theta, \varphi) d\varphi d\theta = \int_0^{2\pi} \int_0^{\pi/2} G(\theta, \varphi) d\varphi d\theta = 1. \quad (2.60)$$

Από τις Εξ. (2.59) – (2.60) προκύπτει

$$\int_0^{2\pi} \int_0^{\infty} G(\theta, \varphi) d\varphi d\theta = 2\pi \int_0^{\infty} G(\theta) d\theta = 1 = 2 \int_0^{\infty} N(\theta) d\theta \Rightarrow G(\theta) = \frac{2N(\theta)}{2\pi}. \quad (2.61)$$

Συνδυάζοντας τις Εξ. (2.61) και (2.58) προκύπτει η Εξ. (2.57).

Η κατανομή κατευθύνσεων για τα ιόντα που περιγράφεται από την Εξ. (2.57) επιβεβαιώνεται από αποτελέσματα προσομοιώσεων Monte Carlo στην οριακή στοιβάδα [Ulacia et al. (1988), Lii & Jorne (1990)]. Για τις περιπτώσεις οριακής στοιβάδας όπου συμβαίνουν συγκρούσεις (το μήκος ελεύθερης διαδρομής είναι μικρότερο από το πάχος της οριακής στοιβάδας), η τυπική απόκλιση της κατανομής εξαρτάται από το πάχος της οριακής στοιβάδας και το μήκος ελεύθερης διαδρομής των ιόντων [Ulacia et al. (1988)]. Αύξηση του λόγου του μήκους ελεύθερης διαδρομής των ιόντων προς το πάχος της οριακής στοιβάδας συνεπάγεται μείωση του πλήθους των συγκρούσεων και άρα τη συρρίκνωση του εύρους της κατανομής κατευθύνσεων και συνεπώς τη μείωση της τυπικής απόκλισης. Οι τιμές που συναντά κανείς στη βιβλιογραφία για την τυπική απόκλιση κυμαίνονται από 1° έως 10° .

Η κατανομή της ροής ιόντων μετά τη διέλευση τους από την οριακή στοιβάδα είναι

$$j_{bulk,ION}(\theta, \varphi) = j_{R,ION} G(\theta, \varphi) \text{ }^{\text{91}} \quad (2.62)$$

⁹¹ Ο δείκτης bulk είναι μάλλον καταχρηστικός, αφού η κατανομή δεν αφορά στην κατανομή των ιόντων στον κύριο όγκο του πλάσματος, αλλά την κατανομή των ιόντων που έρχονται από τον κύριο όγκο του πλάσματος και διέρχονται από την οριακή στοιβάδα.

όπου η μεταβλητή $j_{R,ION}$ προσδίδει διαστάσεις ροής στην G και ορίζεται στην Εξ. (2.63).

Η ροή ιόντος σε ελεύθερη επιφάνεια, $j_{0,ION}$, δίδεται από την Εξ. (2.12), όταν τα όρια ολοκλήρωσης για τις θ, φ είναι τέτοια ώστε να μην υπάρχει σκίαση της ροής, δηλαδή καλύπτουν κάθε πιθανή κατεύθυνση που ανήκει στο ημισφαίριο πάνω από την ελεύθερη επιφάνεια. Έστω ότι η ελεύθερη επιφάνεια έχει κάθετο διάνυσμα παράλληλο στον άξονα z .⁹¹

Τότε

$$j_{0,ION} = \int_0^{\pi/2} \int_0^{2\pi} j_{R,ION} G(\theta, \varphi) \cos \theta \sin \theta d\varphi d\theta \Rightarrow j_{R,ION} = \frac{j_{0,ION}}{\int_0^{\pi/2} \int_0^{2\pi} G(\theta, \varphi) \cos \theta \sin \theta d\varphi d\theta}. \quad (2.63)$$

Επομένως η κατανομή της ροής ιόντων είναι

$$j_{bulk,ION}(\theta, \varphi) = j_{0,ION} \frac{G(\theta, \varphi)}{\int_0^{\pi/2} \int_0^{2\pi} G(\theta, \varphi) \cos \theta \sin \theta d\varphi d\theta}. \quad (2.64)$$

2.4.5 Εξισώσεις υπολογισμού απευθείας ροής

Για τον υπολογισμό της απευθείας ροής συστατικού σε τυχαία δομή (Σχήμα 2.5α) και με τυχαία κατανομή ροής χρησιμοποιείται η Εξ. (2.14). Ο υπολογισμός απλοποιείται όταν η δομή είναι αυλάκι ή οπή με κυλινδρική συμμετρία. Στον Πίνακα 2.1 φαίνονται οι σχέσεις υπολογισμού της απευθείας ροής ουδέτερων συστατικών και ιόντων σε αυλάκι και οπή με κυλινδρική συμμετρία. Έχουν χρησιμοποιηθεί η στερεά γωνία για αυλάκι (§2.4.2) και οπή κυλινδρικής συμμετρίας (§2.4.3) και οι κατανομές ροής για ουδέτερα συστατικά και ιόντα που περιγράφονται στην §2.4.4.

Σημειώνεται ότι για ουδέτερο συστατικό, σε κάποιες περιπτώσεις, τόσο σε αυλάκι [Abraham & Wang (1996), Κόκκορης (2000)], όσο και σε οπή κυλινδρικής συμμετρίας [Abraham & Chen (1996)] το ολοκλήρωμα της αντίστοιχης εξίσωσης του Πίνακα 2.1 μπορεί να υπολογιστεί αναλυτικά.

⁹¹ Αυτή η επιλογή δεν περιορίζει τη γενικότητα του συλλογισμού, απλοποιεί τους υπολογισμούς.

Πίνακας 2.1 Εξισώσεις υπολογισμού της απευθείας ροής, j_{direct} , στη στοιχειώδη επιφάνεια στη θέση \mathbf{x} αυλακιού ή οπής κυλινδρικής συμμετρίας για ουδέτερο συστατικό (ισοτροπική κατανομή) και ιόν (κανονική κατανομή). Το κάθετο διάνυσμα στη στοιχειώδη επιφάνεια στη θέση \mathbf{x} είναι $\mathbf{n}(n_x, n_y, n_z)$. Οι εξισώσεις προκύπτουν από την Εξ. (2.12) και οι $\varphi_L(\theta)$, $\varphi_R(\theta)$, $\varphi_c(\theta)$ και $G(\theta)$ δίδονται από τις Εξ. (2.25), (2.26), (2.36) ή (2.53) και (2.61). $j_{0,N}$ και $j_{0,ION}$ είναι οι ροές ουδέτερου συστατικού και ιόντος σε ελεύθερη επιφάνεια.

Δομή, είδος	$j_{direct}(\mathbf{x})$
Αυλάκι, ουδέτερο συστατικό	$n_y \frac{2j_{0,N}}{\pi} \int_0^{\pi/2} \sin^2 \theta \{ \sin[\varphi_L(\theta)] - \sin[\varphi_R(\theta)] \} d\theta +$ $+ n_z \frac{2j_{0,N}}{\pi} \int_0^{\pi/2} \sin \theta \cos \theta [\pi - \varphi_L(\theta) - \varphi_R(\theta)] d\theta$
Οπή κυλινδρικής συμμετρίας, ουδέτερο συστατικό	$-n_y \frac{2j_{0,N}}{\pi} \int_0^{\pi/2} \sin^2 \theta \sin \varphi_c(\theta) d\theta + n_z \frac{2j_{0,N}}{\pi} \int_0^{\pi/2} \sin \theta \cos \theta \varphi_c(\theta) d\theta$
Αυλάκι, ιόν	$n_y \frac{j_{0,ION}}{\pi \int_0^{\pi/2} G(\theta) \cos \theta \sin \theta d\theta} \int_0^{\pi/2} G(\theta) \sin^2 \theta \{ \sin[\varphi_L(\theta)] - \sin[\varphi_R(\theta)] \} d\theta +$ $+ n_z \frac{j_{0,ION}}{\pi \int_0^{\pi/2} G(\theta) \cos \theta \sin \theta d\theta} \int_0^{\pi/2} G(\theta) \sin \theta \cos \theta [\pi - \varphi_L(\theta) - \varphi_R(\theta)] d\theta$
Οπή κυλινδρικής συμμετρίας, ιόν	$-n_y \frac{j_{0,ION}}{\pi \int_0^{\pi/2} G(\theta) \cos \theta \sin \theta d\theta} \int_0^{\pi/2} G(\theta) \sin^2 \theta \sin[\varphi_c(\theta)] d\theta +$ $+ n_z \frac{j_{0,ION}}{\pi \int_0^{\pi/2} G(\theta) \cos \theta \sin \theta d\theta} \int_0^{\pi/2} G(\theta) \sin \theta \cos \theta \varphi_c(\theta) d\theta$

2.4.6 Αριθμητική μέθοδος υπολογισμού απευθείας ροής

Η αριθμητική ολοκλήρωση των σχέσεων υπολογισμού της απευθείας ροής (Πίνακας 2.1) γίνεται με τη μέθοδο Gauss [Press (1997), σ. 147]. Με τη μέθοδο ολοκλήρωσης Gauss το πλήθος των βαθμών ελευθερίας σε σχέση με τις μεθόδους Newton-Cotes (π.χ. τραπεζίου,

Simpson) είναι διπλάσιο. Είναι δυνατό να επιλεγούν τόσο τα διαστήματα (σημεία υπολογισμού της προς ολοκλήρωσης συνάρτησης), όσο και οι συντελεστές βάρους. Έτσι οι τύποι ολοκλήρωσης Gauss είναι τάξης ουσιαστικά διπλάσιας από αυτή των Newton-Cotes για δεδομένο πλήθος υπολογισμών της συνάρτησης [ο.π., σ. 147].

Τα πλεονεκτήματά της μεθόδου Gauss σε σχέση με τους τύπους Newton-Cotes είναι ότι: α) Αν η συνάρτηση που ολοκληρώνεται είναι πολυώνυμο βαθμού $2N-1$ και χρησιμοποιηθούν N σημεία υπολογισμού της f , τότε η μέθοδος είναι απόλυτα ακριβής [Παπαγεωργίου & Τσίτουρας (2000), σ. 324]. β) Δεν χρησιμοποιεί σημεία της συνάρτησης στα άκρα του διαστήματος ολοκλήρωσης παρακάμπτοντας πιθανά ανώμαλα σημεία. Από την άλλη πλευρά, δεν υπάρχει πρακτικός τρόπος για την εκτίμηση του σφάλματος της μεθόδου Gauss. Εκτίμηση για το σφάλμα μπορεί να αποτελέσει η διαφορά των λύσεων χρησιμοποιώντας N και $2N$ σημεία Gauss.

Για τον προσδιορισμό των συντελεστών βάρους και των σημείων Gauss υλοποιείται ο αλγόριθμος Gauss-Legendre [Press (1997), σ. 152].

2.5 Ροή από επανεκπομπή και συνολική τοπική ροή

Σε κάθε στοιχειώδη επιφάνεια της εγχαρασσομένης δομής, εκτός από την απευθείας ροή από τον κύριο όγκο του πλάσματος (§2.4), φτάνει και ροή από επανεκπομπή (flux from reemission) από τις υπόλοιπες στοιχειώδεις επιφάνειες της δομής. Αν σε στοιχειώδη επιφάνεια στο εσωτερικό δομής φτάνει ροή j και η πιθανότητα προσκόλλησης των σωματιδίων της ροής στην επιφάνεια είναι S , τότε από τη στοιχειώδη επιφάνεια επανεκπέμπεται προς όλες τις υπόλοιπες στοιχειώδεις επιφάνειες της δομής ροή $(1-S)j$.

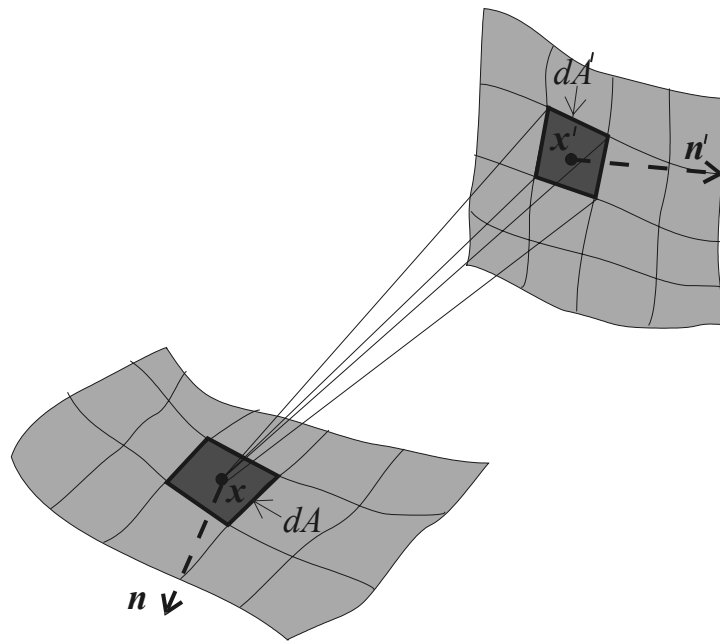
Στις επόμενες παραγράφους μελετάται ο τρόπος υπολογισμού της ροής από επανεκπομπή, ο οποίος, όπως και αυτός της απευθείας ροής, βασίζεται στην παραδοχή ευθειών τροχιών για τα σωματίδια στο εσωτερικό των δομών (§2.3). Περιγράφεται η εξίσωση υπολογισμού της συνολικής (απευθείας + από επανεκπομπή) τοπικής ροής στο εσωτερικό δομών (§2.5.1), σχολιάζεται η έννοια της τάξης επανεκπομπής (§2.5.2), αναφέρονται οι μηχανισμοί επανεκπομπής που συναντά κανείς στη βιβλιογραφία (§2.5.3) και σημειώνεται ο τρόπος υπολογισμού της ορατότητας μεταξύ των στοιχειωδών επιφανειών της δομής (§2.5.4). Τέλος, η εξίσωση υπολογισμού της τοπικής ροής απλοποιείται σε περιπτώσεις δομής αυλακιού (§2.5.5) και οπής με κυλινδρική συμμετρία (§2.5.6).

2.5.1 Υπολογισμός συνολικής και ροής από επανεκπομπή

Η ροή από επανεκπομπή στο εσωτερικό δομής μπορεί να υπολογιστεί με την κατανομή «πηγών» ροής (sources) στην επιφάνεια της δομής [Cale & Raupp (1990), Singh et al. (1992)]. Κάθε «πηγή» αντιστοιχεί σε μια στοιχειώδη επιφάνεια και επανεκπέμπει τη ροή

που δεν προσκολλάται σε αυτή. Επίσης, κάθε «πηγή» λαμβάνει απευθείας ροή (§2.4) και ροή επανεκπεμπόμενη από τις υπόλοιπες «πηγές» στην επιφάνεια της δομής [Εξ. (2.3)]. Στη συνέχεια υπολογίζεται η συνολική ροή και συνεπώς και η ροή από επανεκπομπή που φτάνει σε κάθε «πηγή».

Έστω δύο «πηγές» στο εσωτερικό δομής στις θέσεις $\mathbf{x}(x,y,z)$ και $\mathbf{x}'(x',y',z')$ με μοναδιαία κάθετα \mathbf{n} και \mathbf{n}' (Σχήμα 2.11) και τη συνολική ροή σε αυτές τις δύο θέσεις να είναι $j(\mathbf{x})$ και $j(\mathbf{x}')$. Επίσης, έστω $\mathbf{e}_{xx'}$ το μοναδιαίο διάνυσμα που ξεκινά από την θέση \mathbf{x} και καταλήγει στην θέση \mathbf{x}' και $\mathbf{e}_{x'x}$ το μοναδιαίο διάνυσμα που ξεκινά από την θέση \mathbf{x}' και καταλήγει στην θέση \mathbf{x} .



Σχήμα 2.11 «Πηγές» ροής στο εσωτερικό δομής στις θέσεις \mathbf{x} και \mathbf{x}' με μοναδιαία κάθετα \mathbf{n} και \mathbf{n}' και επιφάνειες dA και dA' .

Η διαφορική ροή από επανεκπομπή που δέχεται η «πηγή» στη θέση \mathbf{x} από την πηγή \mathbf{x}' είναι

$$dj_{rem}(\mathbf{x}) = \mathbf{j}_{x'x} \cdot \mathbf{n} d\omega', \quad (2.65)$$

όπου $\mathbf{j}_{x'x}$ είναι το διάνυσμα της ροής (ανά στερεοακτίνιο) που επανεκπέμπεται από την «πηγή» στη θέση \mathbf{x}' με κατεύθυνση αυτή του διανύσματος $\mathbf{x} - \mathbf{x}'$ και $d\omega'$ είναι το στοιχείο στερεάς γωνίας υπό την οποία η πηγή στη θέση \mathbf{x}' είναι ορατή στη θέση \mathbf{x} . Το στοιχείο $d\omega'$ είναι (Παράρτημα ΣΤ)

$$d\omega' = \frac{\mathbf{e}_{xx'} \cdot \mathbf{n}'}{|\mathbf{x} - \mathbf{x}'|^2} dA', \quad (2.66)$$

όπου dA' είναι η στοιχειώδης επιφάνεια της «πηγής» στη θέση \mathbf{x}' . Έτσι, η Εξ. (2.65) γίνεται

$$dj_{reem}(\mathbf{x}) = \mathbf{j}_{\mathbf{x}'\mathbf{x}} \cdot \mathbf{n} \frac{\mathbf{e}_{\mathbf{x}\mathbf{x}'} \cdot \mathbf{n}'}{|\mathbf{x} - \mathbf{x}'|^2} dA'. \quad (2.67)$$

Το διάνυσμα $\mathbf{j}_{\mathbf{x}'\mathbf{x}}$ είναι

$$\mathbf{j}_{\mathbf{x}'\mathbf{x}} = j_{\mathbf{x}'\mathbf{x}} \mathbf{e}_{\mathbf{x}'\mathbf{x}} = vis(\mathbf{x}', \mathbf{x}) P(\mathbf{x}', \mathbf{x}) [1 - S_E(\mathbf{x}')] j(\mathbf{x}') \mathbf{e}_{\mathbf{x}'\mathbf{x}}, \quad (2.68)$$

όπου $S_E(\mathbf{x}')$ είναι ο φαινόμενος συντελεστής προσκόλλησης των σωματιδίων στην «πηγή» στη θέση \mathbf{x}' και εκφράζει την πιθανότητα προσκόλλησης των σωματιδίων σε αυτή. Στη θεώρηση και στους υπολογισμούς που ακολουθούν θεωρείται ότι είναι γνωστή συνάρτηση της θέσης \mathbf{x}' . Η συνάρτηση $vis(\mathbf{x}', \mathbf{x}) = vis(\mathbf{x}, \mathbf{x}')$ είναι η συνάρτηση ορατότητας μεταξύ των «πηγών» στις θέσεις \mathbf{x} και \mathbf{x}' και είναι ίση με 1, αν υπάρχει ορατότητα μεταξύ των «πηγών», και 0, αν δεν υπάρχει. Η συνάρτηση $P(\mathbf{x}', \mathbf{x})$ εκφράζει την πιθανότητα επανεκπομπής ροής από την «πηγή» στη θέση \mathbf{x}' προς αυτή στη θέση \mathbf{x} και εξαρτάται από το μηχανισμό επανεκπομπής.

Από τις Εξ. (2.67) και (2.68) προκύπτει ότι

$$dj_{reem}(\mathbf{x}) = vis(\mathbf{x}', \mathbf{x}) P(\mathbf{x}', \mathbf{x}) \frac{(\mathbf{e}_{\mathbf{x}'\mathbf{x}} \cdot \mathbf{n})(\mathbf{e}_{\mathbf{x}\mathbf{x}'} \cdot \mathbf{n}')}{|\mathbf{x} - \mathbf{x}'|^2} [1 - S_E(\mathbf{x}')] j(\mathbf{x}') dA'. \quad (2.69)$$

Η συνολική ροή από επανεκπομπή που φτάνει στην πηγή \mathbf{x} , $j_{reem}(\mathbf{x})$, προκύπτει αθροίζοντας τις συνεισφορές ροής από όλες τις «πηγές» \mathbf{x}'

$$j_{reem}(\mathbf{x}) = \int_A vis(\mathbf{x}', \mathbf{x}) P(\mathbf{x}', \mathbf{x}) \frac{(\mathbf{e}_{\mathbf{x}'\mathbf{x}} \cdot \mathbf{n})(\mathbf{e}_{\mathbf{x}\mathbf{x}'} \cdot \mathbf{n}')}{|\mathbf{x} - \mathbf{x}'|^2} [1 - S_E(\mathbf{x}')] j(\mathbf{x}') dA', \quad (2.70)$$

όπου A είναι η επιφάνεια της δομής.

Από την Εξ. (2.70) φαίνεται ότι για τον υπολογισμό της ροής από επανεκπομπή που φτάνει στην «πηγή» στη θέση \mathbf{x} είναι αναγκαίο να είναι γνωστή η συνολική ροή j σε κάθε «πηγή». Η συνολική ροή σωματιδίων που φτάνει στην «πηγή» στη θέση \mathbf{x} είναι [Εξ. (2.3)]

$$\begin{aligned} j(\mathbf{x}) &= j_{direct}(\mathbf{x}) + j_{reem}(\mathbf{x}) = \\ &= j_{direct}(\mathbf{x}) + \int_A G(\mathbf{x}', \mathbf{x}) [1 - S_E(\mathbf{x}')] j(\mathbf{x}') dA', \end{aligned} \quad (2.71)$$

$$\text{όπου } G(\mathbf{x}', \mathbf{x}) = \text{vis}(\mathbf{x}', \mathbf{x}) \frac{(\mathbf{e}_{x'x} \cdot \mathbf{n})(\mathbf{e}_{xx'} \cdot \mathbf{n}')}{|\mathbf{x} - \mathbf{x}'|^2} P(\mathbf{x}', \mathbf{x}). \quad (2.72)$$

Η συνολική ροή και άρα και η ροή από επανεκπομπή σε κάθε «πηγή» στο εσωτερικό της δομής μπορεί να υπολογιστεί με την επίλυση της παραπάνω ολοκληρωτικής εξίσωσης [Εξ. (2.71)].

Στη βιβλιογραφία υπολογισμού της ροής στο εσωτερικό δομών με εξαίρεση την εργασία του Cale [Cale (1991)], γενικά δεν περιγράφεται πώς προκύπτει η ολοκληρωτική εξίσωση υπολογισμού της ροής [Singh et al. (1992), Abachev et al. (1992), Tuda et al. (1997), Drotar et al. (2000b)]: Δεν εξηγείται η προέλευση του παρονομαστή της Εξ. (2.72). Επίσης ορίζεται σαν πιθανότητα επανεκπομπής από τη θέση \mathbf{x}' στη θέση \mathbf{x} ως $P'(\mathbf{x}', \mathbf{x}) = P(\mathbf{x}', \mathbf{x})(\mathbf{e}_{xx'} \cdot \mathbf{n}')$. Η πιθανότητα επανεκπομπής και οι διαφορές ορισμού με τη σχετική βιβλιογραφία σχολιάζονται στην §2.5.3.

Σε κάποια μοντέλα υπολογισμού της ροής, η πιθανότητα προσκόλλησης, όπως αυτή εκφράζεται από το φαινόμενο συντελεστή προσκόλλησης, είναι σταθερή και συνεπώς εκτός ολοκληρώματος [Singh et al. (1992), Drotar et al. (2000b)], ενώ σε άλλα μοντέλα ο φαινόμενος συντελεστής προσκόλλησης θεωρείται ότι εξαρτάται από την κατάσταση της επιφάνειας (κλάσμα κάλυψης της επιφάνειας) και ορίζεται τοπικά [Abachev et al. (1992), Tuda et al. (1997), Levinson et al. (1997), Lukichev & Yunkin (1998)]. Η δεύτερη και γενικότερη προσέγγιση υιοθετείται στην παρούσα εργασία.

Συνοψίζοντας, η συνολική ροή συστατικού στο εσωτερικό δομής εξαρτάται:

A) Από την απευθείας ροή του συστατικού, $j_{direct}(\mathbf{x})$ (§2.4).

B) Από τον καθαρά γεωμετρικό όρο $\frac{(\mathbf{e}_{x'x} \cdot \mathbf{n})(\mathbf{e}_{xx'} \cdot \mathbf{n}')}{|\mathbf{x} - \mathbf{x}'|^2}$.

Γ) Από τη συνάρτηση $\text{vis}(\mathbf{x}', \mathbf{x})$ η οποία υπολογίζεται με τη βοήθεια πεπλεγμένης απεικόνισης συνόρου (§2.5.4).

Δ) Από το μηχανισμό επανεκπομπής (συνάρτηση P) των σωματιδίων του συστατικού. Πιθανοί μηχανισμοί επανεκπομπής για ουδέτερα συστατικά και ιόντα περιγράφονται στην §2.5.3.

Ε) Από τον τοπικό φαινόμενο συντελεστή προσκόλλησης των σωματιδίων του συστατικού σε κάθε στοιχειώδη επιφάνεια της δομής, S_E , ο οποίος εξαρτάται από την κατάσταση της επιφάνειας. Ο φαινόμενος συντελεστής προσκόλλησης ενός συστατικού σε επιφάνεια μπορεί να υπολογιστεί καταστρώνοντας ισοζύγιο μάζας του συστατικού σε ένα λεπτό στρώμα πάνω από την επιφάνεια. Ένα τέτοιο παράδειγμα υπολογισμού για το φαινόμενο συντελεστή

προσκόλλησης των ουδετέρων συστατικών πλάσματος φθοριωμένων υδρογονανθράκων σε επιφάνειες Si και SiO₂ περιγράφεται στην §3.3.

Τα (B) και (Γ) είναι καθαρά γεωμετρικοί όροι, ενώ τα (Δ) και (E) εκφράζουν την αλληλεπίδραση των σωματιδίων του συστατικού με τις στοιχειώδεις επιφάνειες στο εσωτερικό της δομής.

2.5.2 Η ροή στην k -επανεκπομπή και η τάξη επανεκπομπής

Στην πράξη τα σωματίδια του συστατικού επανεκπέμπονται πολλές φορές πριν προσκολληθούν σε μια στοιχειώδη επιφάνεια της δομής. Έστω ότι οι επανεκπομπές συμβαίνουν διαδοχικά: η δεύτερη επανεκπομπή αρχίζει όταν τελειώνει η πρώτη, η τρίτη όταν τελειώνει η δεύτερη κ.ο.κ.. Η ροή στο εσωτερικό δομής από την 1^η, 2^η, k -επανεκπομπή είναι [Εξ. (2.70)]

$$j_{reem}^{(1)} = \int_A G(\mathbf{x}', \mathbf{x}) [1 - S_E^{(0)}(\mathbf{x}')] j_{direct}(\mathbf{x}') dA', \quad (2.73)$$

$$j_{reem}^{(2)}(\mathbf{x}) = \int_A G(\mathbf{x}', \mathbf{x}) [1 - S_E^{(1)}(\mathbf{x}')] j_{reem}^{(1)}(\mathbf{x}') dA', \quad (2.74)$$

$$j_{reem}^{(k)}(\mathbf{x}) = \int_A G(\mathbf{x}', \mathbf{x}) [1 - S_E^{(k-1)}(\mathbf{x}')] j_{reem}^{(k-1)}(\mathbf{x}') dA', \quad (2.75)$$

όπου $S_E^{(i-1)}(\mathbf{x}')$ είναι ο τοπικός φαινόμενος συντελεστής προσκόλλησης πριν την i -επανεκπομπή. Γενικά, ο τοπικός φαινόμενος συντελεστής προσκόλλησης εξαρτάται από την κατάσταση της επιφάνειας. Η κατάσταση της επιφάνειας εξαρτάται από τη ροή που φτάνει σε αυτή και μεταβάλλεται από επανεκπομπή σε επανεκπομπή. Η συνολική ροή μετά από k -επανεκπομπές είναι

$$j^{(k)}(\mathbf{x}) = j_{direct}(\mathbf{x}) + \sum_{i=1}^k j_{reem}^{(i)} \quad (2.76)$$

ή

$$j^{(k)}(\mathbf{x}) = j_{direct}(\mathbf{x}) + \int_A G(\mathbf{x}', \mathbf{x}) \left\{ [1 - S_E^{(0)}(\mathbf{x}')] j_{direct}(\mathbf{x}') + \sum_{i=2}^k [1 - S_E^{(i-1)}(\mathbf{x}')] j_{reem}^{(i-1)}(\mathbf{x}') \right\} dA' \quad (2.77)$$

Αν θεωρηθεί ότι $S_E^{(i-1)}(\mathbf{x}') = S_E(\mathbf{x}')$, $\forall i \in [1, k]$ τότε

$$j^{(k)}(\mathbf{x}) = j_{direct}(\mathbf{x}) + \int_A G(\mathbf{x}', \mathbf{x}) [1 - S_E(\mathbf{x}')] \left\{ j_{direct}(\mathbf{x}') + \sum_{i=1}^{k-1} j_{reem}^{(i)}(\mathbf{x}') \right\} dA' \quad (2.78)$$

$$j^{(k)}(\mathbf{x}) = j_{direct}(\mathbf{x}) + \int_A G(\mathbf{x}', \mathbf{x}) [1 - S_E(\mathbf{x}')] j^{(k-1)}(\mathbf{x}') dA' \quad (2.79)$$

Η συνολική ροή j προκύπτει όταν το πλήθος των επανεκπομπών $k \rightarrow \infty$,

$$j(\mathbf{x}) = j_{direct}(\mathbf{x}) + \sum_{i=1}^{\infty} j_{reem}^{(i)}, \quad (2.80)$$

οπότε και η Εξ. (2.79) συμπίπτει με την Εξ. (2.71). Ο $S_E(\mathbf{x}')$ της Εξ. (2.79) είναι ένας μέσος τοπικός φαινόμενος συντελεστής προσκόλλησης στη θέση \mathbf{x}' για όλες τις επανεκπομπές.

Οι Arnold et al. προτείνουν μοντέλο που προσεγγίζει την Εξ. (2.79) και υπολογίζουν τη ροή από επανεκπομπή σε κάθε επανάληψη [Arnold et al. (1993)]. Θεωρούν ότι οι επανεκπομπές συμβαίνουν διαδοχικά και υπολογίζουν το φαινόμενο συντελεστή προσκόλλησης σε κάθε στοιχειώδη επιφάνεια και για κάθε επανάληψη. Συνεχίζουν τους υπολογισμούς μέχρι η ροή που επανεκπέμπεται να γίνει μικρότερη από κάποιο όριο ανοχής.

Υπάρχουν προσεγγίσεις που χρησιμοποιούν την έννοια της επανεκπομπής k -τάξης. Η συνολική ροή στην k -επανεκπομπή δεν είναι γενικά ίδια με τη συνολική ροή μετά από επανεκπομπή k -τάξης. Η διεργασία επανεκπομπής είναι k -τάξης, όταν $S_E^{(k)}(\mathbf{x}') = 1$ και $S_E^{(i)}(\mathbf{x}') = 0$, $\forall i < k$ [Drotar et al. (2000b)]. Με άλλα λόγια, δεν κολλούν σωματίδια του συστατικού στις στοιχειώδεις επιφάνειες της δομής κατά τις $k - 1$ επανεκπομπές και όλα τα σωματίδια κολλούν στην τελευταία (k) επανεκπομπή.

2.5.3 Μηχανισμοί επανεκπομπής για ουδέτερα και φορτισμένα συστατικά

Ο μηχανισμός επανεκπομπής ενός σωματιδίου από επιφάνεια εξαρτάται από την αλληλεπίδρασή του με την επιφάνεια. Η κατανομή της επανεκπεμπόμενης ροής εξαρτάται από την κατάσταση της επιφάνειας (σύσταση ή κλάσμα κάλυψης και τραχύτητα), το είδος ρόφησης (φυσική ρόφηση ή χημειορόφηση), την αντίδραση που συμβαίνει στην επιφάνεια [Drotar et al. (2000b)] και την ενέργεια και γωνία πρόσπτωσης των προσπιπτόντων σωματιδίων. Οι βασικοί μηχανισμοί επανεκπομπής είναι οι εξής:

A) Μηχανισμός «διάχυτης» επανεκπομπής [diffuse reemission, Singh et al. (1992)], «διάχυτης» ανάκλασης {diffuse reflection, [Present (1958), σ. 56], Cale & Raupp (1990)} ή θερμικής επανεκπομπής [thermal reemission, Drotar et al. (2000b), Chattopadhyay (2002)].

Σύμφωνα με αυτό το μηχανισμό [Millikan (1923), Drotar et al. (2000b)], όλα τα προσπίπτοντα σε επιφάνεια σωματίδια φτάνουν σε θερμική ισορροπία με την επιφάνεια και επανεκπέμπονται άμεσα από αυτή με κατανομή ταχυτήτων Maxwell-Boltzmann, προς τυχαίες κατευθύνσεις και ανεξάρτητα από την κατεύθυνση που είχαν πριν την σύγκρουση.⁹¹ Είναι σαν στη θέση της επιφάνειας που επανεκπέμπει να υπάρχει μια οπή πίσω από την οποία υπάρχει αέριο με κατανομή Maxwell-Boltzmann στη θερμοκρασία της επιφάνειας [Cale (1991)].

Η πιθανότητα επανεκπομπής σωματιδίου από τη θέση x' στη θέση x , $P(x', x)$, είναι η πιθανότητα επανεκπομπής από την επιφάνεια στη θέση x' προς την κατεύθυνση $x'x$. Αυτή η πιθανότητα, λόγω του τυχαίου τρόπου επανεκπομπής, είναι σταθερή και υπολογίζεται από την εξίσωση

$$\int_{\Omega} P \cos \theta d\omega = P \int_0^{2\pi} \int_0^{\pi/2} \cos \theta \sin \theta d\theta d\varphi = 1 \Rightarrow P = \frac{1}{\pi}. \quad (2.81)$$

Η γωνία θ είναι η γωνία που σχηματίζει το κάθετο στην επιφάνεια που επανεκπέμπει με την ταχύτητα (κατεύθυνση της τροχιάς) των επανεκπεμπομένων σωματιδίων. Η προέλευση του συνημιτόνου της Εξ. (2.81) μπορεί να γίνει κατανοητή με τη βοήθεια του Σχήματος 2.12α: Χωρίς βλάβη γενικότητας, θεωρείται ότι όλα τα σωματίδια επανεκπέμπονται (ή φτάνουν) σε επιφάνεια S με την ίδια ταχύτητα u . Σε χρόνο Δt το πλήθος των σωματιδίων που επανεκπέμπονται (ή φτάνουν) υπό γωνία θ με το κάθετο στην S διάνυσμα είναι ανάλογο του όγκου του κυλίνδρου K ($Su\Delta t \cos \theta$, Σχήμα 2.12α). Αυτή είναι και η προέλευση του συνημιτόνου στην Εξ. (2.81) και όχι κάποια «προτίμηση» των σωματιδίων να επανεκπέμπονται προς συγκεκριμένη κατεύθυνση.

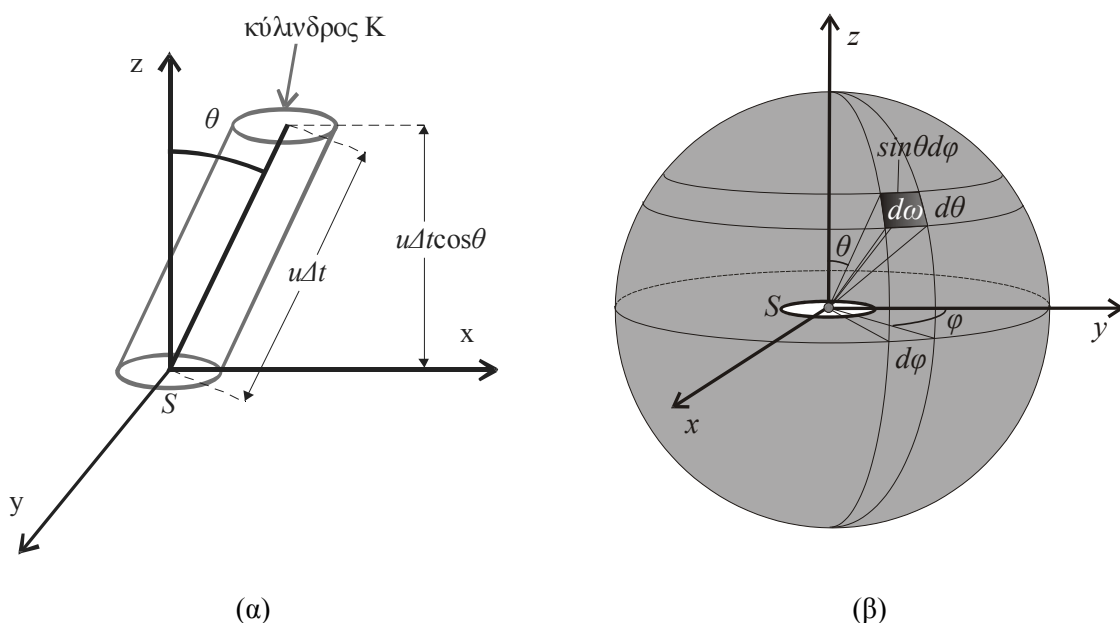
Αυτή η εξάρτηση της ροής που επανεκπέμπεται από (ή φτάνει σε) επιφάνεια από το συνημίτονο της γωνίας θ , περιγράφεται στη βιβλιογραφία με τον όρο νόμος συνημιτόνου [cosine law, Wulu et al. (1991)] ή νόμος συνημιτόνου του Knudsen [Knudsen's cosine law, Feres & Yablonsky (2004)]. Ο νόμος του συνημιτόνου [Greenwood (2002)]⁹² αφορά στο κλάσμα της ροής, f , που επανεκπέμπεται από (ή φτάνει σε) επιφάνεια S , λόγω των σωματιδίων που επανεκπέμπονται από την (ή φτάνουν στην) επιφάνεια S με κατευθύνσεις που ορίζονται από στερεά γωνία $d\omega$, της οποίας ο άξονας (η κύρια κατεύθυνση) σχηματίζει γωνία θ με το κάθετο στην S διάνυσμα (Σχήμα 2.12β):

$$f = \frac{1}{\pi} \cos \theta d\omega. \quad (2.82)$$

⁹¹ Ο μηχανισμός «διάχυτης» επανεκπομπής που περιγράφεται είναι κατά Epstein [Millikan (1923)]. Υπάρχει και ο μηχανισμός «διάχυτης» επανεκπομπής κατά Lenard [Epstein (1924)], σύμφωνα με τον οποίο τα προσπίπτοντα σωματίδια σε μια επιφάνεια επανεκπέμπονται από αυτή ομοιόμορφα προς κάθε κατεύθυνση αλλά με την ίδια ταχύτητα που είχαν πριν τη σύγκρουση. Ο δεύτερος μηχανισμός δεν είναι συμβατός με το 2^ο θερμοδυναμικό νόμο [Millikan (1923)].

⁹² Ο Greenwood επικαλείται κείμενο του Lafferty [Lafferty (1998)].

Συχνά στη βιβλιογραφία [Singh et al. (1992), Drotar et al. (2000b)], η πιθανότητα επανεκπομπής από τη στοιχειώδη επιφάνεια στη θέση \mathbf{x}' στην αντίστοιχη στη θέση \mathbf{x} της Εξ. (2.81) για το μηχανισμό «διάχυτης» επανεκπομπής ορίζεται ως $P'(\mathbf{x}', \mathbf{x}) = P(\mathbf{x}', \mathbf{x})(\mathbf{e}_{xx'} \cdot \mathbf{n}') = P \cos \theta = \cos \theta / \pi$ (θ είναι η γωνία που σχηματίζουν τα $\mathbf{x}'\mathbf{x}$, $\mathbf{e}_{xx'}$). Αυτός ο ορισμός πιθανότητας δεν είναι ορθός [Greenwood (2002)], αφού δεν υπάρχει προτίμηση κατεύθυνσης για τα επανεκπεμπόμενα σωματίδια. Σημειώνεται ότι η θεώρηση στην παρούσα εργασία δεν αρνείται το νόμο του συνημιτόνου και ότι η Εξ. (2.71) συμπίπτει με τις αντίστοιχες της βιβλιογραφίας. Η διαφορά είναι μόνο στον ορισμό της πιθανότητας επανεκπομπής, ο οποίος είναι συμβατός με τη θεώρηση του Cale [Cale (1991)], καθώς και με τη συνηθή θεώρηση κατά τους υπολογισμούς ακτινοβολίας (radiosity) που είναι αντίστοιχοι των υπολογισμών τοπικής ροής.



Σχήμα 2.12 (α) Εξήγηση της προέλευσης του νόμου συνημιτόνου. Σε χρόνο Δt το πλήθος των σωματιδίων που επανεκπέμπονται (ή φτάνουν) υπό γωνία θ με το κάθετο στην S διάνυσμα είναι ανάλογο του όγκου του κυλίνδρου K ($Su\Delta t \cos \theta$). (β) Στοιχείο στερεάς γωνίας $d\omega$ το οποίο ορίζει κατευθύνσεις τροχιών σωματιδίων που επανεκπέμπονται από την (ή φτάνουν στην) επιφάνεια S . Το κλάσμα της ροής των σωματιδίων με τροχιές στο $d\omega$ καθορίζεται από το νόμο του συνημιτόνου [Εξ. (2.82)].

B) Μηχανισμός ομοιόμορφης επανεκπομπής [uniform reemission, Drotar et al. (2000b)]. Σύμφωνα με αυτό το μηχανισμό, η πιθανότητα επανεκπομπής P της Εξ. (2.71) είναι

$$P = \frac{1}{2\pi \cos \theta}, \quad (2.83)$$

όπου θ είναι η γωνία που σχηματίζει το κάθετο στην επιφάνεια που επανεκπέμπει με την ταχύτητα (κατεύθυνση της τροχιάς) των επανεκπεμπόμενων σωματιδίων. Στη βιβλιογραφία συχνά ορίζεται η πιθανότητα για αυτό το μηχανισμό ως $P' = 1/(2\pi)$.

Γ) Ανάκλαση [specular reflection, Wulu et al. (1991), Drotar et al. (2000b)]. Σύμφωνα με το μηχανισμό αυτό, αν η ταχύτητα πρόσπτωσης σωματιδίου σε επιφάνεια είναι \mathbf{v}' , η ταχύτητά του μετά την επανεκπομπή είναι

$$\mathbf{v} = \mathbf{v}' - 2\mathbf{n}(\mathbf{n} \cdot \mathbf{v}') \quad (2.84)$$

όπου \mathbf{n} είναι το κάθετο στην επιφάνεια διάνυσμα. Η γωνία πρόσπτωσης είναι ίση με τη γωνία επανεκπομπής, η τροχιά του σωματιδίου πριν και μετά τη σύγκρουση ανήκει στο ίδιο επίπεδο και το μέτρο της ταχύτητας πριν και μετά τη σύγκρουση είναι ίδιο.

Ο υπολογισμός της πιθανότητας επανεκπομπής δεν είναι εύκολος σε αυτή την περίπτωση. Έτσι, είναι δύσκολο να ενσωματωθεί αυτός ο μηχανισμός στην Εξ. (2.71), καθώς απαιτούνται πληροφορίες για το σωματίδιο πριν τη σύγκρουση. Είναι πιθανό η θεώρηση με τις διαδοχικές επανεκπομπές να είναι καλύτερη προσέγγιση για τον υπολογισμό της ροής στην περίπτωση όπου ο μηχανισμός επανεκπομπής είναι η ανάκλαση. Όταν ο μηχανισμός επανεκπομπής είναι η ανάκλαση, ο υπολογισμός ροής με συνεχές (§2.3) μοντέλο [Abdollahi-Alibeik et al. (1999)] χρήζει περαιτέρω διερεύνησης. Σε τέτοιες περιπτώσεις συνήθως προτιμάται η χρήση διακριτών μοντέλων Monte Carlo [Mahorowala (1998), Hoekstra et al. (1998), Drotar et al. (2000b)].

Αν και ιδεατή περίπτωση, έχει αναφερθεί ο μηχανισμός αξονικής επανεκπομπής [radial reflection, Millikan (1923)], σύμφωνα με τον οποίο τα προσπίπτοντα σε επιφάνεια σωματίδια επανεκπέμπονται χωρίς αλλαγή της ενέργειας τους προς την κατεύθυνση του κάθετου στην επιφάνεια διανύσματος. Επίσης έχουν αναφερθεί συνδυασμοί των παραπάνω μηχανισμών [π.χ. συνδυασμός «διάχυτης» επανεκπομπής και ανάκλασης, Drotar et al. (2000b)], καθώς μηχανισμοί που προβλέπουν κατανομές με μικρό εύρος γύρω από την κατεύθυνση ανάκλασης [Abdollahi-Alibeik et al. (1999)].

Ο μηχανισμός επανεκπομπής, όπως αναφέρθηκε και παραπάνω, εξαρτάται από το είδος του συστατικού (ουδέτερο ή φορτισμένο) ή καλύτερα από την ενέργεια των σωματιδίων του συστατικού. Στο περιβάλλον αντιδραστήρα πλάσματος τα ιόντα φτάνουν στην εγχαρασόμενη δομή με πολύ μεγαλύτερη ενέργεια από ότι τα ουδέτερα συστατικά. Αυτό οφείλεται στο ηλεκτρικό πεδίο που αναπτύσσεται στην οριακή στοιβάδα. Στη συνέχεια αναφέρονται οι θεωρούμενοι μηχανισμοί για κάθε είδος.

Πειραματικά δεδομένα, κυρίως του Knudsen {[Present (1958), σ. 57], [Jeans (1962), σ. 53]}, οδήγησαν στο συμπέρασμα ότι ο μηχανισμός «διάχυτης» επανεκπομπής είναι αυτός που ισχύει για σωματίδια ουδέτερων συστατικών που συγκρούονται με στερεή επιφάνεια. Επίσης, πολλές ερευνητικές ομάδες αναφέρουν ότι ο μηχανισμός επανεκπομπής για αρκετά συστήματα ουδέτερου συστατικού – υποστρώματος είναι κοντά στο μηχανισμό «διάχυτης» επανεκπομπής [Wulu et al. (1991)]. Αν και άλλες πειραματικές μετρήσεις για τα ουδέτερα συστατικά δείχνουν απόκλιση από το μηχανισμό διάχυτης επανεκπομπής [Hwang et al. (1996), Feres & Yablonsky (2004)], η παραδοχή αυτού του μηχανισμού είναι συνήθης [Cale

(1991), Singh et al. (1992), Drotar et al. (2000b)]. Μάλιστα, τραχείες επιφάνειες ικανοποιούν σε μεγαλύτερο βαθμό αυτή την παραδοχή [Present (1958), σ. 56-57].⁹¹ Τέλος, έχει χρησιμοποιηθεί και το μοντέλο του Maxwell, σύμφωνα με το οποίο [Drotar et al. (2000b), Feres & Yablonsky (2004)], τα σωματίδια των ουδέτερων συστατικών επανεκπέμπονται σε ένα ποσοστό με μηχανισμό «διάχυτης» επανεκπομπής και στο υπόλοιπο με μηχανισμό ανάκλασης. *Ο μηχανισμός που υιοθετείται στην παρούσα εργασία για τα ουδέτερα συστατικά είναι αυτός της «διάχυτης» επανεκπομπής.* Σημειώνεται ότι ο μηχανισμός «διάχυτης» επανεκπομπής είναι αναγκαία και όχι ικανή συνθήκη για να ισχύει διάχυση Knudsen [Knudsen diffusion, Coburn & Winters (1989), Gottscho et al. (1992)] στο εσωτερικό των δομών. *Διάχυση Knudsen συστατικού εντός δομής συμβαίνει όταν ο μηχανισμός επανεκπομπής είναι «διάχυτη» επανεκπομπή και ο φαινόμενος συντελεστής προσκόλλησης του συστατικού είναι μηδενικός στα πλάγια τοιχώματα της δομής.*

Γενικά τα ιόντα θεωρείται ότι επανεκπέμπονται με το μηχανισμό της ανάκλασης.⁹² Η πιθανότητα ανάκλασης των ιόντων είναι συνάρτηση της ενέργειας τους, της γωνίας πρόσπτωσης και της σύστασης της επιφάνειας. Η κυρίαρχη παράμετρος είναι η γωνία πρόσπτωσης των ιόντων [Dalton et al. (1993)]: αν τα ιόντα έχουν κατεύθυνση πολύ κοντά στην εφαπτομενική της επιφάνειας, τότε μεταφέρουν ένα μικρό κλάσμα της ενέργειάς τους στην επιφάνεια και είναι πιθανότερο να ανακλαστούν από αυτή. Όταν η κατεύθυνση πλησιάζει την κάθετη στην επιφάνεια, τότε τα ιόντα μεταφέρουν μεγαλύτερο κλάσμα της ενέργειάς τους στην επιφάνεια και προκαλούν δράσεις ή μηχανική εγχάραξη ή απλά εισβάλουν σε αυτή. Έτσι, η πιθανότητα ανάκλασης αναμένεται να είναι μονάδα για κατευθύνσεις ιόντων κοντά στην εφαπτομενική της επιφάνειας και να μειώνεται τείνοντας στο μηδέν καθώς η γωνία πρόσπτωσης πλησιάζει σε κάποια κρίσιμη γωνία πρόσπτωσης. Το όριο αυτό κατά τους Dalton et al. είναι $>60^\circ$ σε σχέση με το κάθετο στην επιφάνεια [Dalton et al. (1993)]. Οι υπολογισμοί τους αφορούν μία μόνο ανάκλαση θεωρώντας ότι η γωνία πρόσπτωσης στη δεύτερη σύγκρουση με επιφάνεια της δομής θα είναι σχετικά μικρή σε σχέση με το κάθετο σε αυτή την επιφάνεια. Τις ίδιες παραδοχές για μία ανάκλαση και μόνο για τα ιόντα με κατεύθυνση κοντά στην εφαπτομενική κάνουν και οι Arnold et al. [Arnold et al. (1993)]. Θεωρούν ότι το ιόν μετά τη δεύτερη σύγκρουση δεν έχει αρκετή ενέργεια για να βοηθήσει στην εγχάραξη και επομένως δεν χρειάζεται να ληφθεί υπόψη. Οι Abdollahi-Alibeik et al., βασισμένοι σε πειραματικές μετρήσεις για αρκετά συστήματα ιόντων-υποστρωμάτων, θεωρούν ότι τα ιόντα επανεκπέμπονται με ένα μικρό εύρος γωνιών γύρω από την κατεύθυνση ανάκλασης [Abdollahi-Alibeik et al. (1999)]. Και σε αυτή τη θεώρηση⁹³ δεν επανεκπέμπονται όλα τα ιόντα παρά μόνο αυτά για τα οποία η γωνία πρόσπτωσης είναι κοντά στις 90° σε σχέση με το κάθετο στην επιφάνεια. Και στις τρεις

⁹¹ Ο ίδιος ο Knudsen, προσπαθώντας να ερμηνεύσει το μηχανισμό «διάχυτης» επανεκπομπής, αναρωτήθηκε μήπως είναι αποτέλεσμα της τραχύτητας της επιφάνειας [Feres & Yablonsky (2004)].

⁹² Σημειώνεται ότι τα ιόντα πριν την επανεκπομπή τους από την επιφάνεια αποφορτίζονται. Έτσι, μετά την πρώτη επανεκπομπή τα πρώην ιόντα είναι θερμά (υψηλής ενέργειας) ουδέτερα σωματίδια [Hoekstra et al. (1998), Abdollahi-Alibeik et al. (1999)].

⁹³ Επίσης φαίνεται ότι λαμβάνεται υπόψη μία μόνο επανεκπομπή.

παραπάνω εργασίες, ο υπολογισμός της ροής των ιόντων γίνεται με συνεχές μοντέλο. Υπάρχουν και εργασίες [Hoekstra et al. (1998), Helmer & Graves (1998), Mahorowala & Sawin (2002)] στις οποίες οι υπολογισμοί ανάκλασης των ιόντων γίνονται με διακριτά μοντέλα (π.χ. Monte Carlo ή μοριακής δυναμικής). Οι Hoekstra et al. θεωρούν ότι ανακλώνται τα ιόντα που προσπίπτουν σε γωνίες $> 80^\circ$ ως προς το κάθετο στην επιφάνεια και ότι τα ανακλώμενα ιόντα διατηρούν το 99% της ενέργειας τους. Οι Helmer και Graves, με προσομοιώσεις μοριακής δυναμικής, επιβεβαιώνουν τη μεγάλη πιθανότητα ανάκλασης ($>90\%$) για τα ιόντα Ag^+ και Cl^+ σε επιφάνειες Si, όταν η γωνία πρόσπτωσης είναι $>75^\circ$, καθώς και τη μείωση της πιθανότητας όταν η γωνία αυτή μειώνεται. Σημειώνουν ότι α) γενικά η ανάκλαση είναι ανελαστική, δηλαδή τα ιόντα χάνουν ενέργεια και μάλιστα αυτή η απώλεια είναι μεγαλύτερη για τραχείες επιφάνειες και β) η τραχύτητα της επιφάνειας επιδρά μειωτικά και στην πιθανότητα επανεκπομπής.

Στις παραπάνω προσεγγίσεις υπάρχει περιορισμός στην ανάκλαση των ιόντων που αφορά τη γωνία πρόσπτωσης τους στην επιφάνεια. Η Abraham θεωρεί ένα ακόμη περιορισμό που αφορά στην ενέργεια των ανακλώμενων ιόντων [Abraham (2001)]: ιόντα με χαμηλή ενέργεια δεν ανακλώνται, ακόμη και αν η γωνία πρόσπτωσης τους είναι κοντά στις 90° σε σχέση με το κάθετο στην επιφάνεια. Μάλιστα, τα ιόντα που προσπίπτουν σε τελείως κάθετα πλάγια τοιχώματα δομών δεν έχουν απόλυτα κάθετες τροχιές και φέρουν [Shaqfeh & Jurgensen (1989), Lii & Jorne (1990)] μειωμένη, σχετικά με τα κατακόρυφης κατεύθυνσης ιόντα, ενέργεια.

Η ανάκλαση των ιόντων στο πλάγιο τοίχωμα έχει χρησιμοποιηθεί για να εξηγήσει [Dalton et al. (1993), Abdollahi-Alibeik et al. (1999), Jin & Sawin (2003)] το φαινόμενο πτυχώσεων στη βάση των δομών (§1.5, Σχήμα 1.9στ), χωρίς αυτή να προβάλλει ως η μοναδική αιτία [Gerodolle & Pelletier (1991), Doemling et al. (1996), Abraham (2001)].

Τέλος, όπως αναφέρθηκε και παραπάνω, η ενσωμάτωση του φαινομένου της ανάκλασης σε ένας συνεχές μοντέλο και μάλιστα σε τρεις διαστάσεις είναι δύσκολη. Ακόμη και οι υπολογισμοί με διακριτά μοντέλα Monte Carlo είναι συνήθως σε δύο διαστάσεις [Hoekstra et al. (1998), Mahorowala & Sawin (2002)].

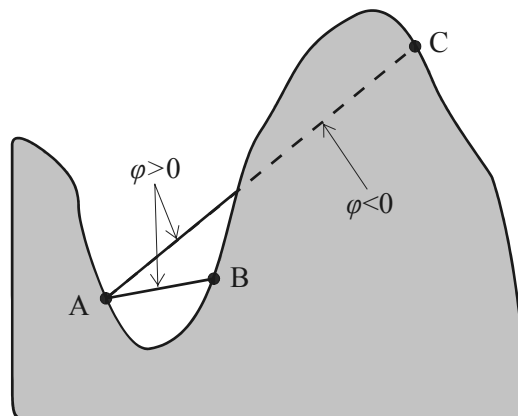
Στην εργασία υιοθετείται η συνήθης παραδοχή [Singh et al. (1992), Tuda et al. (1997), Levinson et al. (1997), Hwang et al. (1999), Volland et al. (2002)]: *η πιθανότητα επανεκπομπής για τα ιόντα θεωρείται κοντά στο μηδέν, δηλαδή ο φαινόμενος συντελεστής προσκόλλησης για τα ιόντα είναι μονάδα: όποιο ιόν προσπίπτει σε επιφάνεια, κολλά σε αυτή. Έτσι, η τοπική ροή των ιόντων στο εσωτερικό των δομών είναι ίση με την απευθείας ροή των ιόντων.*

2.5.4 Υπολογισμοί ορατότητας

Για τον υπολογισμό του γεωμετρικού όρου της Εξ. (2.71) είναι απαραίτητο να υπολογιστεί η συνάρτησης ορατότητας v . Η v απαντά στο αν δύο σημεία (δύο «πηγές») μιας

τοπογραφίας είναι ορατά το ένα στο άλλο και εξαρτάται από τη γενική μορφή της τοπογραφίας και όχι μόνο από τη θέση των σημείων. Αν σημεία A, B είναι ορατά το ένα στο άλλο, τότε $vis(A,B)=vis(B,A)=1$, αλλιώς $vis(A,B)=vis(B,A)=0$.

Οι υπολογισμοί ορατότητας είναι συνήθεις στους υπολογισμούς φωτεινότητας για τα γραφικά υπολογιστών (computer graphics). Έστω σημεία A, B δισδιάστατης τοπογραφίας (Σχήμα 2.13). Ένας απλός τρόπος για βρεθεί αν το A είναι ορατό στο B είναι να βρεθεί αν υπάρχει σημείο τομής μεταξύ του τμήματος AB και της δισδιάστατης τοπογραφίας. Ωστόσο, ο τρόπος αυτός έχει σημαντικό υπολογιστικό κόστος σε χρόνο [Sethian (1999b)]. Ένας αποδοτικότερος αλγόριθμος προκύπτει από τη χρησιμοποίηση πεπλεγμένης συνάρτησης στο πλαίσιο της μεθόδου των ισοϋψών (Κεφ. 5) για την περιγραφή της τοπογραφίας [Sethian (1999), σ. 308-309]. Η πεπλεγμένη συνάρτηση που περιγράφει την τοπογραφία καλείται συνάρτηση ισοϋψών, φ , (§5.4) και είναι θετική στο εξωτερικό του συνόρου που περιγράφει την τοπογραφία, αρνητική στο εσωτερικό και μηδενική ακριβώς πάνω στο σύνορο. Για τον υπολογισμό της $vis(A,B)$ πρέπει να υπολογιστεί το πρόσημο της συνάρτησης φ πάνω στο τμήμα AB. Αν $\varphi > 0$ στο AB, τότε $vis(A,B)=vis(B,A)=1$, αλλιώς αν υπάρχει τμήμα του AB για το οποίο $\varphi < 0$, τότε $vis(A,B)=vis(B,A)=0$. Για το Σχήμα 2.13 είναι $vis(A,B)=vis(B,A)=1$ και $vis(A,C)=vis(C,A)=0$.



Σχήμα 2.13 Ορατότητα μεταξύ σημείων (A και B, A και C) σε δισδιάστατη τοπογραφία με τη χρήση της πεπλεγμένης συνάρτησης ισοϋψών φ .

Ο υπολογισμός ορατότητας μεταξύ των σημείων τοπογραφίας είναι σημαντικός στους υπολογισμούς ροής και γίνεται δύσκολος στην περίπτωση πολύπλοκων τοπογραφιών (π.χ. Σχήμα 2.5α). Πέρα από τους υπολογισμούς ροής, το πεδίο εφαρμογής των υπολογισμών ορατότητας είναι ευρύ (π.χ. φωτοσκίαση αντικειμένων στα γραφικά με υπολογιστή). Οι αλγόριθμοι υπολογισμών ορατότητας που βασίζονται στην άμεση απεικόνιση συνόρου (§5.2) χρησιμοποιούνται ευρέως [Tsai et al. (2004)].³¹ Από την άλλη πλευρά, οι αλγόριθμοι που βασίζονται στην πεπλεγμένη απεικόνιση της τοπογραφίας κερδίζουν ολοένα και περισσότερη προσοχή [Tsai et al. (2002), Osher (2002), Tsai et al. (2004)].

³¹ Οι Tsai et al. [Tsai et al. (2004)] αναφέρουν ότι μια λεπτομερής εργασία επισκόπησης για τις μεθόδους που βασίζονται στην άμεση περιγραφή της τοπογραφίας είναι αυτή του Durand [Durand (1999)].

2.5.5 Τοπική ροή ουδέτερου συστατικού στο εσωτερικό αυλακιού

Ο υπολογισμός της συνολικής ροής στο εσωτερικό δομής μπορεί να απλοποιηθεί όταν η δομή είναι αυλάκι: Το επιφανειακό ολοκλήρωμα της Εξ. (2.71) μπορεί να αναχθεί σε επικαμπύλιο.

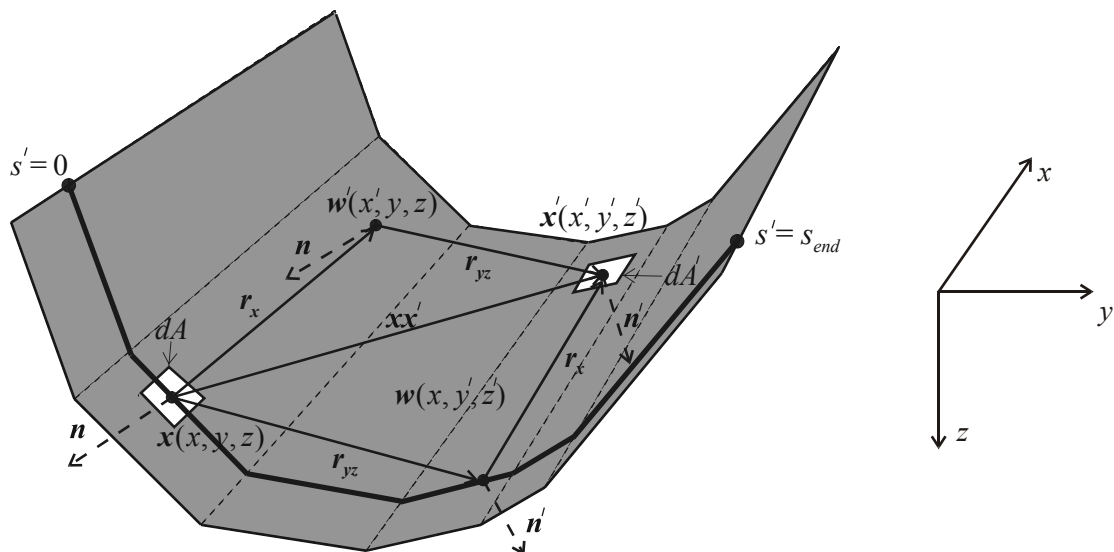
Έστω το τμήμα αυλακιού του Σχήματος 2.14. Έστω δύο πηγές ροής στις θέσεις \mathbf{x} , \mathbf{x}' και \mathbf{n} , \mathbf{n}' τα μοναδιαία κάθετα διανύσματα στις στοιχειώδεις επιφάνειες των πηγών. Το διάνυσμα $\mathbf{x}' - \mathbf{x}$ ενώνει τις \mathbf{x} , \mathbf{x}' και, όπως φαίνεται από το Σχήμα 2.14, είναι

$$\mathbf{x}' - \mathbf{x} = \mathbf{r}_x + \mathbf{r}_{yz} = (\mathbf{w}' - \mathbf{x}) + \mathbf{r}_{yz} = (x' - x)\mathbf{e}_x + \mathbf{r}_{yz}. \quad (2.85)$$

Εξαιτίας των ειδικών γεωμετρικών χαρακτηριστικών της δομής του αυλακιού το διάνυσμα \mathbf{r}_{yz} έχει συνιστώσες μόνο στο επίπεδο yz ,

$$\mathbf{r}_{yz} = \mathbf{w} - \mathbf{x} = (y' - y)\mathbf{e}_y + (z' - z)\mathbf{e}_z \quad (2.86)$$

όπως και τα μοναδιαία διανύσματα \mathbf{n} και \mathbf{n}' .



Σχήμα 2.14 «Πηγές» ροής $\mathbf{x}(x,y,z)$ και $\mathbf{x}'(x',y',z')$ σε τμήμα δομής αυλακιού. Σημειώνεται το διάστημα ολοκλήρωσης $[0, s_{end}]$ της Εξ (2.103).

Το εσωτερικό γινόμενο $\mathbf{e}_{xx'} \cdot \mathbf{n}'$ της Εξ. (2.71) είναι

$$\mathbf{e}_{xx'} \cdot \mathbf{n}' = \frac{\mathbf{x}\mathbf{x}'}{|\mathbf{x} - \mathbf{x}'|} \cdot \mathbf{n}' = \frac{1}{|\mathbf{x} - \mathbf{x}'|} \left[(x' - x)\mathbf{e}_x + \mathbf{r}_{yz} \right] \cdot \mathbf{n}' = \frac{1}{|\mathbf{x} - \mathbf{x}'|} \left[(x' - x)\mathbf{e}_x \cdot \mathbf{n}' + \mathbf{r}_{yz} \cdot \mathbf{n}' \right]. \quad (2.87)$$

Όμως

$$e_x \cdot \mathbf{n}' = 0, \quad (2.88)$$

και άρα

$$e_{x'x'} \cdot \mathbf{n}' = \frac{\mathbf{r}_{yz} \cdot \mathbf{n}'}{|\mathbf{x} - \mathbf{x}'|}. \quad (2.89)$$

Όμοια το έτερο εσωτερικό γινόμενο της Εξ. (2.71) είναι

$$e_{x'x} \cdot \mathbf{n} = -\frac{\mathbf{r}_{yz} \cdot \mathbf{n}}{|\mathbf{x} - \mathbf{x}'|}. \quad (2.90)$$

Για την απλοποίηση του ολοκληρώματος της Εξ. (2.71) είναι απαραίτητο να γίνει αλλαγή μεταβλητής και να αντικατασταθεί η μεταβλητή ολοκλήρωσης A' που εκφράζει την επιφάνεια του αυλακιού. Γενικά, μια επιφάνεια A παριστάνεται αλγεβρικά από μια ανυσματική συνάρτηση της μορφής [Παπαϊωάννου (1993), σ. 89]

$$\mathbf{R}(u, v) = R_1(u, v)\mathbf{e}_x + R_2(u, v)\mathbf{e}_y + R_3(u, v)\mathbf{e}_z, \quad (2.91)$$

όπου οι συναρτήσεις $R_1(u, v)$, $R_2(u, v)$, $R_3(u, v)$ είναι βαθμωτές συναρτήσεις των ανεξάρτητων μεταβλητών u και v .

Το άνυσμα στοιχειώδους τμήματος της επιφάνειας είναι

$$d\mathbf{A} = \mathbf{n}dA = (\mathbf{R}_u \times \mathbf{R}_v) dudv, \quad (2.92)$$

και έχει μέτρο το εμβαδό³¹ του στοιχειώδους τμήματος, dA , και διεύθυνση κάθετη στην επιφάνεια. Το μοναδιαίο κάθετο άνυσμα \mathbf{n} στην επιφάνεια $\mathbf{R}(u, v)$, δίδεται από την εξίσωση [ο.π., σ. 91]

$$\mathbf{n} = \frac{\mathbf{R}_u \times \mathbf{R}_v}{|\mathbf{R}_u \times \mathbf{R}_v|}, \quad (2.93)$$

όπου \mathbf{R}_u και \mathbf{R}_v είναι οι μερικές παράγωγοι της $\mathbf{R}(u, v)$ ως προς τις μεταβλητές u και v αντίστοιχα. Έτσι, το εμβαδό dA στοιχειώδους τμήματος της επιφάνειας A που ορίζεται από την Εξ. (2.92) δίνεται από τη σχέση:

³¹ Το μέτρο του εξωτερικού γινομένου δύο ανυμάτων στο χώρο είναι αριθμητικά ίσο με το εμβαδό του παραλληλογράμμου με διαδοχικές πλευρές τα δύο άνυσματα.

$$dA = |\mathbf{R}_u \times \mathbf{R}_v| dudv. \quad (2.94)$$

Εξαιτίας των ειδικών γεωμετρικών χαρακτηριστικών του αυλακιού (σταθερή τομή με το επίπεδο yz άπειρο μήκος κατά τη διεύθυνση x) και προκειμένου αυτά να αξιοποιηθούν, επιλέγεται η μία από τις δύο ανεξάρτητες μεταβλητές να είναι η x : $u=x=R_1$. Έτσι, για την επιφάνεια αυλακιού οι R_2 και R_3 είναι συναρτήσεις μόνο της άλλης ανεξάρτητης μεταβλητής, v . Η Εξ. (2.91) για την επιφάνεια αυλακιού γίνεται

$$\mathbf{R}(x, v) = x\mathbf{e}_x + R_2(v)\mathbf{e}_y + R_3(v)\mathbf{e}_z \quad (2.95)$$

Συνεπώς,

$$\mathbf{R}_x = \frac{\partial \mathbf{R}(x, v)}{\partial x} = \mathbf{e}_x \quad (2.96)$$

και

$$\mathbf{R}_v = \frac{\partial \mathbf{R}(x, v)}{\partial v} = \frac{\partial R_2(v)}{\partial v} \mathbf{e}_y + \frac{\partial R_3(v)}{\partial v} \mathbf{e}_z. \quad (2.97)$$

Επομένως⁹¹

$$\mathbf{R}_x \times \mathbf{R}_v = -\frac{\partial R_3(v)}{\partial v} \mathbf{e}_y + \frac{\partial R_2(v)}{\partial v} \mathbf{e}_z \quad (2.98)$$

και

$$|\mathbf{R}_x \times \mathbf{R}_v| dv = \sqrt{\left[\frac{\partial R_3(v)}{\partial v}\right]^2 + \left[\frac{\partial R_2(v)}{\partial v}\right]^2} dv = ds, \quad (2.99)$$

όπου s είναι το μήκος τόξου της τομής της δομής αυλακιού στο επίπεδο yz (Σχήμα 2.14). Συνεπώς η στοιχειώδης επιφάνεια dA' της Εξ. (2.71) είναι

$$dA' = dx'ds'. \quad (2.100)$$

Αν το εξεταζόμενο συστατικό είναι ουδέτερο, τότε επανεκπέμπεται με μηχανισμό «διάχυτης» επανεκπομπής (§2.5.3) και

⁹¹ Σημειώνεται ότι από τις Εξ. (2.93) και (2.98) επιβεβαιώνεται ότι η διεύθυνση των κάθετων στην επιφάνεια αυλακιού δεν έχει συνιστώσα κατά τον άξονα x .

$$P(\mathbf{x}', \mathbf{x}) = \frac{1}{\pi}. \quad (2.101)$$

Εξαιτίας των Εξ. (2.89), (2.90), (2.100) και (2.101) και σημειώνοντας ότι τα όρια ολοκλήρωσης για τη μεταβλητή s' είναι η τομή της δομής στο επίπεδο yz (Σχήμα 2.14) και για τη μεταβλητή x' είναι από $-\infty$ έως $+\infty$, η Εξ. (2.71) γίνεται

$$j(\mathbf{x}) = j_{direct}(\mathbf{x}) + \frac{1}{\pi} \int_0^{s_{end}} \int_{-\infty}^{+\infty} vis(\mathbf{x}', \mathbf{x}) \left[-\frac{(\mathbf{r}_{yz} \cdot \mathbf{n})(\mathbf{r}'_{yz} \cdot \mathbf{n}')}{|\mathbf{x} - \mathbf{x}'|^4} \right] [1 - S_E(\mathbf{x}')] j(\mathbf{x}') dx' ds'. \quad (2.102)$$

Από τους όρους της προς ολοκλήρωσης συνάρτησης της Εξ. (2.102) μόνο ο παρονομαστής $|\mathbf{x} - \mathbf{x}'|^4$ εξαρτάται από το x' . Θεωρείται ότι η ροή $j(\mathbf{x}')$, ο $S_E(\mathbf{x}')$ δεν μεταβάλλονται κατά τον άξονα x . Αν μεταβάλλονταν, τότε η δομή δεν θα διατηρούσε τα γεωμετρικά χαρακτηριστικά του αυλακιού. Επίσης είναι $vis(\mathbf{x}', \mathbf{x}) = vis(s', s)$. Συνεπώς, ολοκληρώνοντας από $-\infty$ έως $+\infty$ ως προς τη μεταβλητή x' , προκύπτει για τη συνολική ροή ουδέτερου συστατικού που φτάνει σε μία στοιχειώδη επιφάνεια αυλακιού στη θέση $\mathbf{x}[x, y(s), z(s)]$, $x \in R$ ή στη θέση όπου το μήκος τόξου της τομής του αυλακιού σε επίπεδο yz είναι s , ότι

$$j(s) = j_{direct}(s) + \frac{1}{\pi} \int_0^{s_{end}} vis(s', s) g(s', s) [1 - S_E(s')] j(s') ds', \quad (2.103)$$

όπου

$$g(s', s) = \begin{cases} -\pi \frac{(\mathbf{r}_{yz} \cdot \mathbf{n})(\mathbf{r}'_{yz} \cdot \mathbf{n}')}{2|\mathbf{r}_{yz}|^3}, & |\mathbf{r}_{yz}| \neq 0 \\ 0, & |\mathbf{r}_{yz}| = 0 \end{cases}. \quad (2.104)$$

2.5.6 Τοπική ροή ουδέτερου συστατικού στο εσωτερικό οπής με κυλινδρική συμμετρία

Έστω δύο «πηγές» ροής στις θέσεις \mathbf{x} και \mathbf{x}' στο εσωτερικό οπής με κυλινδρική συμμετρία (Σχήμα 2.15). Οι συνιστώσες των διανυσμάτων που δείχνουν στις θέσεις των «πηγών» μπορούν να εκφραστούν παραμετρικά ως προς τις μεταβλητές κυλινδρικού συστήματος συντεταγμένων

$$\mathbf{x} = r \sin \varphi \mathbf{e}_x + r \cos \varphi \mathbf{e}_y + z \mathbf{e}_z \quad (2.105)$$

και

$$\mathbf{x}' = r' \sin \varphi' \mathbf{e}_x + r' \cos \varphi' \mathbf{e}_y + z' \mathbf{e}_z, \quad (2.106)$$

όπου r και r' είναι οι αποστάσεις των \mathbf{x} και \mathbf{x}' από τον άξονα συμμετρίας, φ και φ' οι αζιμουθιακές γωνίες ως προς τον άξονα y των \mathbf{x} και \mathbf{x}' και z και z' οι συνιστώσες στον άξονα z (Σχήμα 2.15).

Τα κάθετα διανύσματα στις στοιχειώδεις επιφάνειες στις θέσεις \mathbf{x} και \mathbf{x}' ορίζονται από τις εξισώσεις

$$\mathbf{n} = \sin \theta \sin \varphi \mathbf{e}_x + \sin \theta \cos \varphi \mathbf{e}_y + \cos \theta \mathbf{e}_z \quad (2.107)$$

και

$$\mathbf{n}' = \sin \theta' \sin \varphi' \mathbf{e}_x + \sin \theta' \cos \varphi' \mathbf{e}_y + \cos \theta' \mathbf{e}_z, \quad (2.108)$$

όπου θ , θ' είναι οι γωνίες που σχηματίζουν τα \mathbf{n} , \mathbf{n}' με τον άξονα z (Σχήμα 2.15).

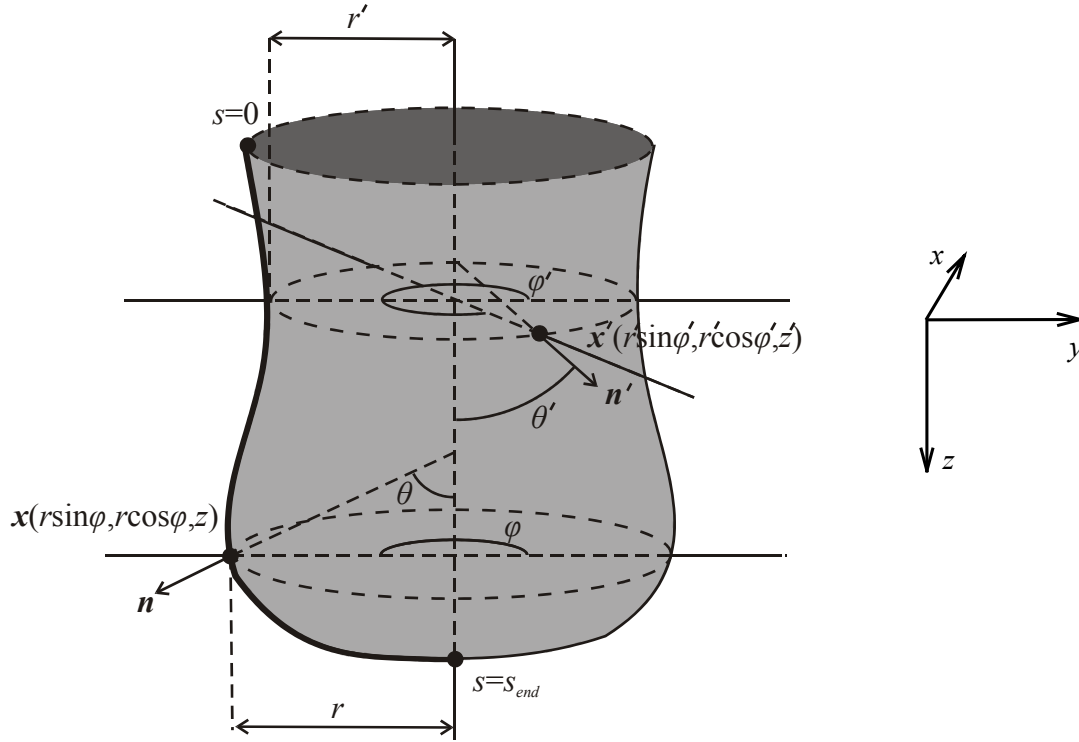
Για τον υπολογισμό της συνολικής ροής, λόγω κυλινδρικής συμμετρίας, είναι δυνατό να επιλεγθεί οποιαδήποτε τομή της οπής με επίπεδο που προκύπτει από την περιστροφή του επιπέδου yz γύρω από τον άξονα z (άξονας συμμετρίας) ως προς τον άξονα y . Επιλέγεται η τομή με επίπεδο yz που έχει περιστραφεί κατά γωνία $\varphi=\pi$. Τότε, τα εσωτερικά γινόμενα της Εξ. (2.71) γίνονται

$$\mathbf{e}_{x'x'} \cdot \mathbf{n}' = \frac{r \sin \theta' \cos \varphi' + r' \sin \theta' + (z' - z) \cos \theta'}{r'^2 \sin^2 \varphi' + (r' \cos \varphi' - r)^2 + (z' - z)^2}, \quad (2.109)$$

$$\mathbf{e}_{x'x} \cdot \mathbf{n} = \frac{r' \sin \theta \cos \varphi + r \sin \theta + (z - z') \cos \theta}{r'^2 \sin^2 \varphi + (r' \cos \varphi - r)^2 + (z' - z)^2}. \quad (2.110)$$

Η στοιχειώδης επιφάνεια dA' οπής με κυλινδρική συμμετρία είναι, με αντίστοιχο με την §2.5.5 τρόπο,

$$dA' = r' d\varphi' ds'. \quad (2.111)$$



Σχήμα 2.15 «Πηγές» ροής στις στοιχειώδεις επιφάνειες στις θέσεις \mathbf{x} και \mathbf{x}' στο εσωτερικό οπής με κυλινδρική συμμετρία. Οι συνιστώσες των διανυσμάτων που δείχνουν στις θέσεις των «πηγών» μπορούν να εκφραστούν παραμετρικά ως προς τις μεταβλητές κυλινδρικού συστήματος συντεταγμένων. Τα διανύσματα \mathbf{n} , \mathbf{n}' είναι κάθετα στις στοιχειώδεις επιφάνειες στις θέσεις \mathbf{x} , \mathbf{x}' . Οι γωνίες θ και θ' είναι οι γωνίες που σχηματίζουν τα \mathbf{n} , \mathbf{n}' με τον άξονα συμμετρίας της οπής. Σημειώνεται το διάστημα ολοκλήρωσης $[0, s_{end}]$ της Εξ. (2.118).

Τα όρια ολοκλήρωσης για τη μεταβλητή s' προκύπτουν από την τομή της δομής με το επίπεδο yz (Σχήμα 2.15) και για τη μεταβλητή ϕ' είναι από 0 έως 2π . Αν το εξεταζόμενο συστατικό είναι ουδέτερο, τότε ο μηχανισμός επανεκπομπής υπαγορεύεται από την Εξ. (2.81). Έτσι, λόγω των Εξ. (2.105), (2.106), (2.109), (2.110) και (2.111), η Εξ. (2.71) γίνεται

$$j(\mathbf{x}) = j_{direct}(\mathbf{x}) + \frac{1}{\pi} \int_0^{s_{end}} \int_0^{2\pi} vis(\mathbf{x}', \mathbf{x}) \frac{n_2 \cos^2 \phi' + n_1 \cos \phi' + n_0}{(d_1 \cos \phi' + d_0)^2} [1 - S_E(\mathbf{x}')] j(\mathbf{x}') r' d\phi' ds', \quad (2.112)$$

όπου

$$n_2 = rr' \sin \theta \sin \theta', \quad (2.113)$$

$$n_1 = (r^2 + r'^2) \sin \theta \sin \theta' + (z' - z)(r' \cos \theta' \sin \theta - r \cos \theta \sin \theta'), \quad (2.114)$$

$$n_0 = rr' \sin \theta \sin \theta' + (z - z')(r' \cos \theta \sin \theta' - r \sin \theta \cos \theta') - (z - z')^2 \cos \theta \cos \theta', \quad (2.115)$$

$$d_1 = 2rr', \quad (2.116)$$

$$d_0 = (z - z')^2 + r^2 + r'^2. \quad (2.117)$$

Οι μεταβλητές r' , z' , θ' είναι συναρτήσεις της προς ολοκλήρωση μεταβλητής s' και οι r , z , θ συναρτήσεις της s . Επίσης, λόγω της κυλινδρικής συμμετρίας η συνολική ροή $j(\mathbf{x}')$ και ο $S_E(\mathbf{x}')$ είναι ανεξάρτητα από την γωνία φ' . Αν υποθεθεί ότι μεταξύ όλων των «πηγών» της οπής υπάρχει ορατότητα, δηλαδή $vis(\mathbf{x}', \mathbf{x})=1$, τότε μόνο το κλάσμα της Εξ. (2.112) εξαρτάται από τη μεταβλητή φ' και αυτό ολοκληρώνεται αναλυτικά. Η εξίσωση που προκύπτει είναι

$$j(s) = j_{direct}(s) + \frac{1}{\pi} \int_0^{s_{end}} g(s', s) [1 - S_E(s')] j(s') ds', \quad (2.118)$$

όπου

$$g(s', s) = \left\{ \begin{array}{ll} 2\pi r' \left[\frac{n_2}{d_1^2} + \frac{d_0 n_0 d_1^2 + 2n_2 d_0 d_1^2 - d_0^3 n_2 - d_1^3 n_1}{d_1^2 (d_0^2 - d_1^2)^{3/2}} \right], & d_1 \neq 0 \wedge d_1^2 \neq d_0^2 \\ 2\pi r' \frac{n_0}{d_0^2}, & (d_1 = 0 \wedge d_1^2 \neq d_0^2) \vee (d_1 \neq 0 \wedge d_1^2 = d_0^2) \\ 0, & d_1 = 0 \wedge d_1^2 = d_0^2 \end{array} \right\}. \quad (2.119)$$

2.6 Αριθμητική μέθοδος υπολογισμού της συνολικής ροής στο εσωτερικό δομής

2.6.1 Η ολοκληρωτική εξίσωση

Η τελική εξίσωση υπολογισμού της συνολικής ροής ουδέτερου συστατικού στο εσωτερικό δομής είναι μια ολοκληρωτική εξίσωση σε μια διάσταση, τόσο στην περίπτωση αυλακιού [Εξ. (2.103)], όσο και στην περίπτωση οπής με κυλινδρική συμμετρία [Εξ. (2.118)]. Η γενική μορφή της προς επίλυση ολοκληρωτικής εξίσωσης για τον υπολογισμό της συνολικής ροής είναι

$$u(s) = h(s) + \lambda \int_a^b K(s', s) u(s') ds', \quad (2.120)$$

όπου

$$u(s) = j(s), h(s) = j_{\text{direct}}(s), a=0, b=s_{\text{end}} \quad (2.121)$$

και

$$\lambda K(s', s) = \frac{1}{\pi} \text{vis}(s', s) g(s', s) [1 - S_E(s')] \text{ για τα αυλάκια,} \quad (2.122)$$

όπου ο γεωμετρικός όρος $g(s', s)$ δίδεται από την Εξ. (2.104) και

$$\lambda K(s', s) = \frac{1}{\pi} g(s', s) [1 - S_E(s')] \text{ για τις οπές,} \quad (2.123)$$

όπου ο γεωμετρικός όρος $g(s', s)$ δίδεται από την Εξ. (2.119).

Η Εξ. (2.120) ανήκει στη γενική κατηγορία ολοκληρωτικών εξισώσεων Fredholm 2^{ου} είδους. Η συνάρτηση K καλείται πυρήνας (kernel) της ολοκληρωτικής εξίσωσης. Αν $h(s)=0$, τότε η Εξ. (2.120) είναι ομογενής. Για την περίπτωση ομογενούς εξίσωσης το λ είναι ιδιοτιμή, ενώ για την περίπτωση μη ομογενούς εξίσωσης αποτελεί δεδομένη παράμετρο. Αν ο πυρήνας είναι συνάρτηση της μορφής $K(s', s)$ τότε η εξίσωση είναι γραμμική. Αν όμως είναι συνάρτηση της μορφής $K[s', s, u(s'), u(s)]$, η εξίσωση είναι μη γραμμική [Press et al. (1997), σ. 790]. Όταν το διάστημα $[a, b]$ είναι πεπερασμένο και ο πυρήνας K φράσσεται και είναι συνεχής, η ολοκληρωτική εξίσωση είναι κανονική ή ομαλή (regular). Αν όμως, είτε το διάστημα $[a, b]$ είναι άπειρο, είτε ο πυρήνας K δεν φράσσεται, η ολοκληρωτική εξίσωση είναι ιδιόμορφη ή ανώμαλη (singular) [Collatz (1966), σ. 467-468].

Οι προς επίλυση ολοκληρωτικές εξισώσεις (για το αυλάκι και την οπή) είναι μη ομογενείς. Επίσης, θεωρώντας ότι ο φαινόμενος συντελεστής προσκόλλησης του συστατικού στις στοιχειώδεις επιφάνειες της δομής είναι μια γνωστή συνάρτηση της μεταβλητής s , προκύπτει ότι οι προς επίλυση εξισώσεις είναι γραμμικές. Ο πυρήνας των εξισώσεων μπορεί να είναι ασυνεχής ή μη φραγμένος και τότε οι ολοκληρωτικές εξισώσεις είναι ιδιόμορφες.

Στις επόμενες παραγράφους περιγράφονται και αξιολογούνται δύο μέθοδοι επίλυσης της Εξ. (2.120): η μέθοδος ταξιθεσίας (§2.6.2) και η μέθοδος Nystrom (§2.6.3). Σχολιάζεται ο τρόπος επίλυσης του γραμμικού συστήματος που προκύπτει από τη διακριτοποίηση της Εξ. (2.120) με τις προαναφερθείσες μεθόδους (§2.6.4). Τέλος, περιγράφονται τα προβλήματα επίλυσης και τα χαρακτηριστικά της λύσης (§2.6.5).

2.6.2 Η μέθοδος ταξιθεσίας

Η μέθοδος ταξιθεσίας ή ταξινόμησης (collocation method) περιλαμβάνει [Atkinson (1976), σ. 54-58]:

A) Την προσέγγιση της άγνωστης συνάρτησης $u(s)$ από μια πεπερασμένη σειρά συναρτήσεων:

$$u(s) = \sum_{j=1}^N u_j \varphi^j(s), \quad (2.124)$$

όπου N είναι το πλήθος των κόμβων του πλέγματος διακριτοποίησης, u_j οι τιμές της άγνωστης συνάρτησης στους κόμβους του πλέγματος και φ^j οι συναρτήσεις βάσης.

B) Την αναζήτηση λύσης που μηδενίζει το υπόλοιπο

$$R(s) = u(s) - \int_a^b \lambda K(s', s) u(s') ds' - h(s), \quad (2.125)$$

ή τα υπόλοιπα

$$R_i = R(s_i) = \sum_{j=1}^N u_j \left[\varphi^j(s_i) - \int_a^b \lambda K(s', s_i) \varphi^j(s') ds' \right] - h(s_i), \quad i=1, 2, \dots, N. \quad (2.126)$$

όπου s_i η θέση του κόμβου διαμέρισης i .

Από την Εξ. (2.126) φαίνεται ότι το πρόβλημα ανάγεται στον υπολογισμό των τιμών u_j της άγνωστης συνάρτησης μέσω της επίλυσης ενός γραμμικού συστήματος $\mathbf{A} \mathbf{x} = \mathbf{b}$, όπου

$$a_{ij} = \varphi^j(s_i) - \int_a^b \lambda K(s', s_i) \varphi^j(s') ds', \quad i=1, 2, \dots, N, \quad j=1, 2, \dots, N \quad (2.127)$$

και

$$b_i = h(s_i), \quad i=1, 2, \dots, N. \quad (2.128)$$

Για τον υπολογισμό των a_{ij} η ολοκλήρωση γίνεται με τη μέθοδο Gauss (§2.4.6) και εφαρμόζεται ισοπαραμετρική απεικόνιση [Μπουντουβής (1992), σ. 26-31].

2.6.3 Η μέθοδος Nystrom

Η εφαρμογή της μεθόδου Nystrom {[Atkinson (1976), σ. 88-90], [Press et al. (1997), σ. 791-794]} για την επίλυση της Εξ. (2.120) απαιτεί:

A) Την επιλογή κανόνα ολοκλήρωσης

$$\int_a^b y(t)dt = \sum_{j=1}^N w_j y(t_j) \quad (2.129)$$

όπου N είναι το πλήθος των κόμβων διαμέρισης του διαστήματος $[a,b]$ και w_j, t_j είναι ο συντελεστής βάρους και η συντεταγμένη του κόμβου διαμέρισης j .

B) Την εφαρμογή του επιλεγμένου κανόνα ολοκλήρωσης στην Εξ. (2.120), οπότε και γίνεται

$$u(s) = h(s) + \sum_{j=1}^N w_j \lambda K(s_j, s) u(s_j). \quad (2.130)$$

Οι τιμές της $u(s)$ στους κόμβους διαμέρισης είναι

$$u_i = u(s_i) = h(s_i) + \sum_{j=1}^N w_j \lambda K(s_j, s_i) u_j. \quad (2.131)$$

Προκύπτει συνεπώς ένα γραμμικό σύστημα εξισώσεων $\mathbf{A} \mathbf{x} = \mathbf{b}$, όπου

$$a_{ij} = \begin{cases} -w_j \lambda K(s_j, s_i), & i \neq j \\ 1 - w_j \lambda K(s_j, s_i), & i = j \end{cases}, \quad i=1,2,\dots,N, j=1,2,\dots,N \quad (2.132)$$

$$b_i = h(s_i), i=1,2,\dots,N. \quad (2.133)$$

Αν ζητούμενη είναι η τιμή της $u(s)$ σε σημείο διαφορετικό από το σύνολο των κόμβων διαμέρισης, δε χρησιμοποιείται οποιαδήποτε παρεμβολή διότι αυτό πιθανά θα «αλλοίωνε» την ακρίβεια υπολογισμών της μεθόδου. Η ιδέα του Nystrom ήταν η χρησιμοποίηση της εξίσωσης (2.130) ως συνάρτησης παρεμβολής [Press et al. (1997), σ. 792].

Ο κανόνας ολοκλήρωσης που καθορίζει τους κόμβους ολοκλήρωσης και τους συντελεστές βάρους, w_j , θα πρέπει να δίνει αξιόπιστα αποτελέσματα με τη χρήση όσο το δυνατόν λιγότερων κόμβων. Δοκιμάστηκαν αρκετοί κανόνες ολοκλήρωσης τύπου Newton-Cotes (π.χ. τραπεζίου, Simpson, 3/8, κανόνας Newton-Cotes 5 σημείων), αλλά τελικά επιλέχθηκε ο κανόνας Gauss διότι δίνει καλύτερα αποτελέσματα. Για ομαλές ολοκληρωτικές εξισώσεις κανένας κανόνας δεν είναι καλύτερος από τον κανόνα ολοκλήρωσης Gauss [ο.π., σ. 792].

2.6.4 Τρόπος επίλυσης του γραμμικού συστήματος

Για την επίλυση του γραμμικού συστήματος $\mathbf{Ax}=\mathbf{b}$ που προκύπτει από τη διακριτοποίηση της ολοκληρωτικής εξίσωσης [Εξ. (2.120)], είτε με τη μέθοδο ταξίθεσίας [Εξ. (2.125) και (2.126)], είτε με τη μέθοδο Nystrom [Εξ. (2.130) και (2.131)], δοκιμάστηκαν επαναληπτικές μέθοδοι, όπως η Jacobi [Παπαγεωργίου (1990), σ. 250-253], η Gauss-Seidel [ο.π., σ. 253-255] και η μέθοδος της διαδοχικής υπερχαλάρωσης SOR {successive over relaxation, [ο.π, σ. 260-262]}, και μία άμεση, η μέθοδος παραγοντοποίησης του πίνακα \mathbf{A} σε άνω και κάτω τριγωνικό {παραγοντοποίηση LU, LU-decomposition, [Press et al. (1997), σ. 43-48]}.

Απαραίτητη προϋπόθεση για τη χρησιμοποίηση μιας επαναληπτικής μεθόδου είναι η σύγκλιση. Για τις επαναληπτικές μεθόδους ικανή και αναγκαία συνθήκη για τη σύγκλιση, ανεξάρτητα από την αρχική εκτίμηση του διανύσματος της λύσης, είναι η φασματική ακτίνα (μέγιστη ιδιοτιμή του \mathbf{B}), $\rho(\mathbf{B})$, του επαναληπτικού πίνακα \mathbf{B} της μεθόδου να είναι μικρότερη της μονάδας [Παπαγεωργίου (1990), σ. 248-249]. Ικανή συνθήκη για τη σύγκλιση της επαναληπτικής μεθόδου Jacobi αποτελεί η αυστηρή διαγώνια υπεροχή του πίνακα \mathbf{A} [Παπαγεωργίου & Τσίτουρας (2000), σ. 155-156]. Η αυστηρή διαγώνια υπεροχή αποτελεί ικανή συνθήκη σύγκλισης και για τη μέθοδο Gauss-Seidel [Dahlquist & Bjorck (1974), σ. 192]. Μικρότερη τιμή της $\rho(\mathbf{B})$ οδηγεί σε αύξηση της ταχύτητας σύγκλισης [Παπαγεωργίου (1990), σ. 257]. Η επιλογή κατάλληλης τιμής για την παράμετρο χαλάρωσης της επαναληπτικής μεθόδου SOR, ω , η οποία επιδρά στον επαναληπτικό πίνακα της μεθόδου, μπορεί να οδηγήσει σε μείωση της φασματικής ακτίνας και συνεπώς, είτε σε σύγκλιση της μεθόδου [καθιστώντας τη $\rho(\mathbf{B})$ μικρότερη του 1], είτε σε επιτάχυνση της σύγκλισης. Έχει βρεθεί στην πράξη ότι το πλήθος των επαναλήψεων με τη μέθοδο SOR χρησιμοποιώντας κατάλληλο ω μειώνεται πολύ, σε μερικές περιπτώσεις και εκατό φορές [Scheid (1976), σ. 341]. Το αδύνατο σημείο των μεθόδων υπερχαλάρωσης είναι [Press et al. (1997), σ. 867] ότι δεν υπάρχει γενικός τρόπος για τον προσδιορισμό της τιμής της παραμέτρου ω που οδηγεί σε ταχύτερη σύγκλιση. Η ταχύτητα σύγκλισης είναι υψηλή μόνο σε μια στενή ζώνη τιμών. Το πλήθος πράξεων για μία επανάληψη των μεθόδων Jacobi, Gauss-Seidel και SOR είναι ανάλογο του N^2 [Παπαγεωργίου & Τσίτουρας (2000), σ. 161].

Οι άμεσες μέθοδοι μπορούν να δώσουν λύση στο γραμμικό σύστημα ακόμη κι αν ο πίνακας \mathbf{A} δεν εμφανίζει διαγώνια υπεροχή. Πρόβλημα για τις άμεσες μεθόδους είναι τα σφάλματα στρογγυλοποίησης, τα οποία μπορεί να γίνουν σημαντικά όταν η διάσταση του συστήματος είναι μεγάλη [Press et al. (1997), σ. 32-33]. Στη μέθοδο παραγοντοποίησης που χρησιμοποιείται (παραγοντοποίηση του πίνακα \mathbf{A} σε άνω και κάτω τριγωνικό – LU-decomposition) έχει εφαρμοστεί μερική οδήγηση [Press et al. (1997), σ. 38], διαδικασία που μειώνει τα σφάλματα στρογγυλοποίησης. Το πλήθος των πράξεων είναι ανάλογο του $(1/3)N^3$ [Press et al. (1997), σ. 48].

Ο πίνακας \mathbf{A} του γραμμικού συστήματος στο οποίο οδηγεί η διακριτοποίηση της ολοκληρωτικής εξίσωσης για τα προβλήματα ενδιαφέροντος (υπολογισμός ροής στο

εσωτερικό αυλακιών και οπών με κυλινδρική συμμετρία) γενικά εμφανίζει διαγώνια υπεροχή, οπότε οι επαναληπτικές μέθοδοι που χρησιμοποιούνται συγκλίνουν. Γενικά, το πλήθος των επαναλήψεων δεν ξεπερνά το N (όπου N η διάσταση του γραμμικού συστήματος), είναι πολύ μικρότερο στις περισσότερες περιπτώσεις, επομένως οι επαναληπτικές μέθοδοι είναι ταχύτερες από την άμεση. Στην πράξη η ταχύτερη από τις επαναληπτικές μεθόδους στα προβλήματα ενδιαφέροντος είναι η μέθοδος SOR [Κόκκορης (2000)]. Οι Singh et al. χρησιμοποιούν τη μέθοδο Gauss-Jordan με πλήρη οδήγηση για μικρούς πίνακες και Gauss – Seidel για μεγαλύτερους [Singh et al. (1992)].

Ο πίνακας A του γραμμικού συστήματος είναι πυκνός. Έτσι, δεν μπορεί να αποθηκευτεί συμπαγώς (§7.3.2) με αποτέλεσμα να είναι μεγάλες οι απαιτήσεις σε μνήμη. Το πρόβλημα με την αποθήκευση του πίνακα A μπορεί να ξεπεραστεί με τις επαναληπτικές μεθόδους, καθώς σε κάθε βήμα υπολογισμού της νέας εκτίμησης της λύσης αρκεί να είναι γνωστή μόνο μία γραμμή του πίνακα A και όχι ολόκληρος ο πίνακας. Συνεπώς, μπορεί να αποθηκεύεται μόνο το απαραίτητο για κάθε βήμα τμήμα του πίνακα A , δηλαδή μία γραμμή. Βέβαια, αυτό επιβαρύνει το υπολογιστικό κόστος σε χρόνο, αφού σε κάθε επανάληψη χρειάζεται να υπολογιστούν εξ' αρχής γραμμή-γραμμή τα στοιχεία του πίνακα A . Γενικά, το υπολογιστικό κόστος σε χρόνο μπορεί να μειωθεί αν μειωθεί το πλήθος των επαναλήψεων της μεθόδου. Για το σκοπό αυτό προσδιορίστηκε εμπειρικά η βέλτιστη τιμή της παραμέτρου χαλάρωσης ω , δηλαδή η τιμή που δίνει το ελάχιστο πλήθος επαναλήψεων για τη μέθοδο SOR. Ειδικότερα, υπολογίστηκε εμπειρικά συνάρτηση που συσχετίζει τη βέλτιστη τιμή του ω με τις παραμέτρους του προβλήματος που επιδρούν στην ταχύτητα σύγκλισης, τόσο στην περίπτωση αυλακιού [Κόκκορης (2000)], όσο και στην περίπτωση οπής κυλινδρικής συμμετρίας [Κουλίδης (2001)].

2.6.5 Ζητήματα κατά την αριθμητική επίλυση

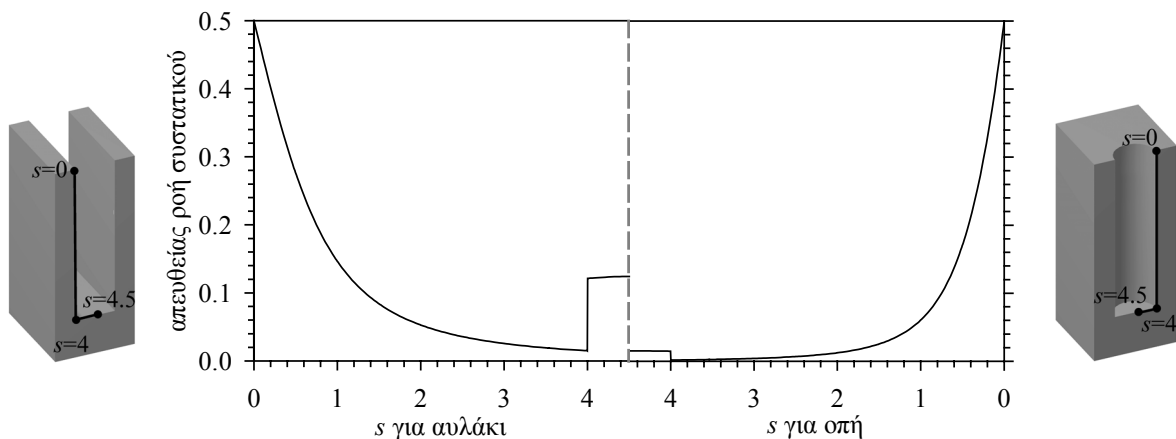
Για την εξέταση της επίδρασης διαφόρων παραμέτρων της ολοκληρωτικής εξίσωσης στην αριθμητική επίλυση και λύση και την αξιολόγηση των μεθόδων επίλυσης θεωρούνται πρότυπες δομές: αυλάκια με κάθετα πλάγια τοιχώματα και πλήρως επίπεδη βάση και κυλινδρικές οπές (οι οπές κυλινδρικής συμμετρίας δεν είναι απαραίτητα κυλινδρικές). Επίσης, θεωρείται ότι ο φαινόμενος συντελεστής προσκόλλησης των σωματιδίων του συστατικού σε κάθε στοιχειώδη επιφάνεια των πρότυπων δομών είναι σταθερός.

Στις επόμενες παραγράφους εξετάζεται η επίδραση της απευθείας ροής στη συνέχεια της λύσης (§2.6.5.1), αντιμετωπίζεται η ιδιομορφία του πυρήνα της ολοκληρωτικής εξίσωσης (§2.6.5.2) και αξιολογούνται οι μέθοδοι επίλυσης (§2.6.5.3). Επίσης εξετάζεται η επίδραση του τρόπου διαμέρισης (§2.6.5.4), καθώς και του φαινόμενου συντελεστή προσκόλλησης και του λόγου ασυμμετρίας της δομής (ο λόγος του βάθους, d , προς το πλάτος, w , της δομής, $A=d/w$) στην αριθμητική επίλυση με τη μέθοδο Nystrom (§2.6.5.5).

Αν ο φαινόμενος συντελεστής προσκόλλησης είναι σταθερός ή γενικότερα δεν εξαρτάται από τις απόλυτες διαστάσεις της δομής, η αδιαστατοποίηση της ολοκληρωτικής εξίσωσης με χαρακτηριστικό μήκος το πλάτος, w , της δομής, μεταβάλλει μόνο το άνω όριο ολοκλήρωσης, το οποίο για τις πρότυπες δομές είναι $2\Lambda+1$. Τα αποτελέσματα που παρουσιάζονται στη συνέχεια αφορούν και κάθε όμοια με την περιγραφόμενη δομή, η αλλιώς αφορούν δομές με τον ίδιο Λ . Η μεταβλητή s στα σχήματα που ακολουθούν μπορεί να αντικατασταθεί από την s/w .

2.6.5.1 Η επίδραση της απευθείας ροής στη συνέχεια της λύσης

Η απευθείας ροή, ή αλλιώς η συνάρτηση $h(s)$ της ολοκληρωτικής εξίσωσης (2.120), εμφανίζει ασυνέχεια στις γωνίες των πρότυπων δομών. Στο Σχήμα 2.16 φαίνεται η απευθείας ροή ουδέτερου συστατικού σε διατομή πρότυπου αυλακιού και πρότυπης οπής με βάθος $d=4$ και πλάτος $w=1$. Η ασυνέχεια που παρατηρείται οφείλεται στην ασυνέχεια της κλίσης στις γωνίες των διατομών.



Σχήμα 2.16 Η απευθείας ροή (ανηγμένη στη ροή σε ελεύθερη επιφάνεια) ουδέτερου συστατικού (ισοτροπική κατανομή) συναρτήσει του μήκους τόξου διατομής πρότυπου αυλακιού και οπής. Το βάθος των δομών είναι $d=4$ και το πλάτος $w=1$ ($\Lambda=4$). Το αριστερό τμήμα του Σχήματος 2.16 αφορά το αυλάκι, ενώ το δεξιό την οπή. Η απευθείας ροή εμφανίζει ασυνέχεια στις γωνίες των δομών ($s=4$).

Η ασυνέχεια της συνάρτησης $h(s)$ οδηγεί σε ασυνέχεια και τη λύση της ολοκληρωτικής εξίσωσης [Atkinson (2000)]. Στη συνέχεια περιγράφεται παράδειγμα προβλήματος αντίστοιχου της Εξ. (2.120) για το οποίο ο πυρήνας είναι

$$\lambda K(s', s) = \frac{1}{(s+1)(s'+1)}, \quad (2.134)$$

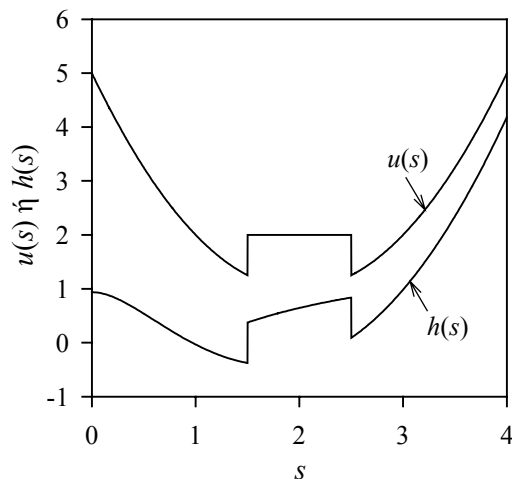
ενώ η συνάρτηση $h(s)$ είναι ασυνεχής

$$h(s) = \left\{ \begin{array}{ll} (s-2)^2 + 1 + \frac{9 \ln 7 - 19 \ln 5 + 9}{s+1}, & \left(0 \leq s < \frac{3}{2} \right) \vee \left(\frac{5}{2} < s \leq 4 \right) \\ 2 + \frac{9 \ln 7 - 19 \ln 5 + 9}{s+1}, & \frac{3}{2} < s < \frac{5}{2} \end{array} \right\}. \quad (2.135)$$

Το πρόβλημα επιλύεται αναλυτικά και η λύση είναι ασυνεχής

$$u_{real}(s) = \left\{ \begin{array}{ll} (s-2)^2 + 1, & \left(0 \leq s < \frac{3}{2} \right) \vee \left(\frac{5}{2} < s \leq 4 \right) \\ 2, & \frac{3}{2} < s < \frac{5}{2} \end{array} \right\}. \quad (2.136)$$

Στο Σχήμα 2.17 φαίνεται η συνάρτηση $h(s)$ και η αριθμητική λύση $u(s)$ του προβλήματος με τη μέθοδο Nystrom, η οποία συμπίπτει με τη αναλυτική λύση [Εξ. (2.136)].



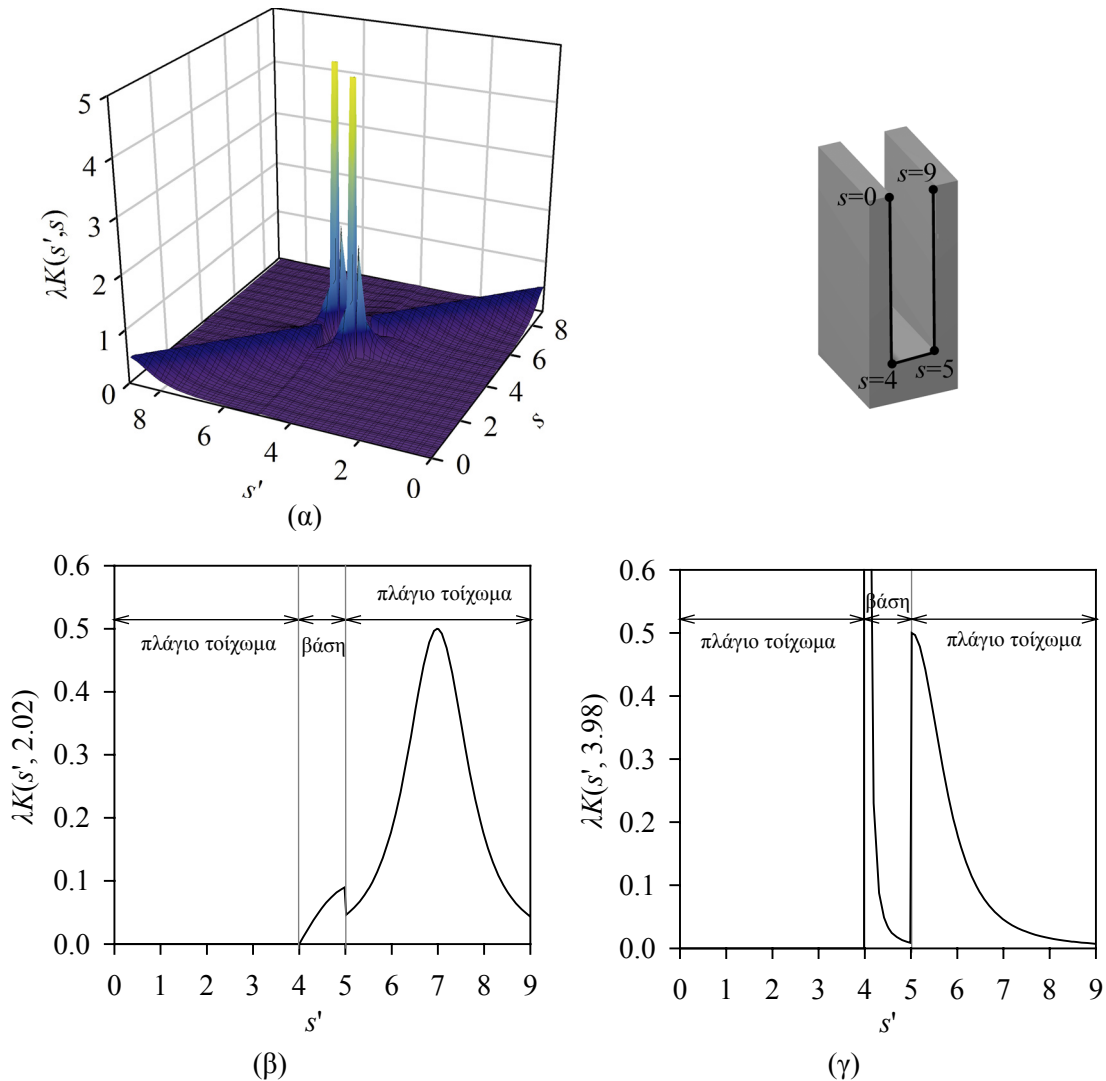
Σχήμα 2.17 Η αριθμητική λύση $u(s)$ της ολοκληρωτικής εξίσωσης (2.120) με συνάρτηση $h(s)$ όπως δίδεται από την Εξ. (2.135) και πυρήνα όπως δίδεται από την Εξ. (2.134). Η ασυνέχεια στη συνάρτηση $h(s)$ οδηγεί σε ασυνέχεια την αναλυτική [Εξ. (2.136)] και αριθμητική λύση.

Τα συμπεράσματα που προκύπτουν είναι: α) Η ασυνέχεια στην απευθείας ροή θα προκαλέσει ασυνέχεια στη συνολική ροή, όπως συνέβη και στο παραπάνω παράδειγμα όπου η ασυνέχεια της $h(s)$ προκάλεσε την ασυνέχεια της λύσης της ολοκληρωτικής εξίσωσης. Αυτό επιβεβαιώνεται από τα αποτελέσματα στην §2.7. β) Η μέθοδος Nystrom αντιμετωπίζει χωρίς πρόβλημα την ασυνέχεια της λύσης, όπως φαίνεται στο Σχήμα 2.17.

Η ασυνέχεια στη συνολική ροή επιβεβαιώνεται με Monte Carlo προσομοιώσεις [Wulu et al. (1991)]. Μάλιστα, οι Wulu et al. αναφέρουν και πειραματικά αποτελέσματα που επιβεβαιώνουν αυτήν την ασυνέχεια. Η ύπαρξη ασυνέχειας στα πειραματικά δεδομένα ενισχύει την παραδοχή ότι η διάχυση στην επιφάνεια δεν είναι σημαντική.

2.6.5.2 Η αντιμετώπιση της ιδιομορφίας του πυρήνα της ολοκληρωτικής εξίσωσης

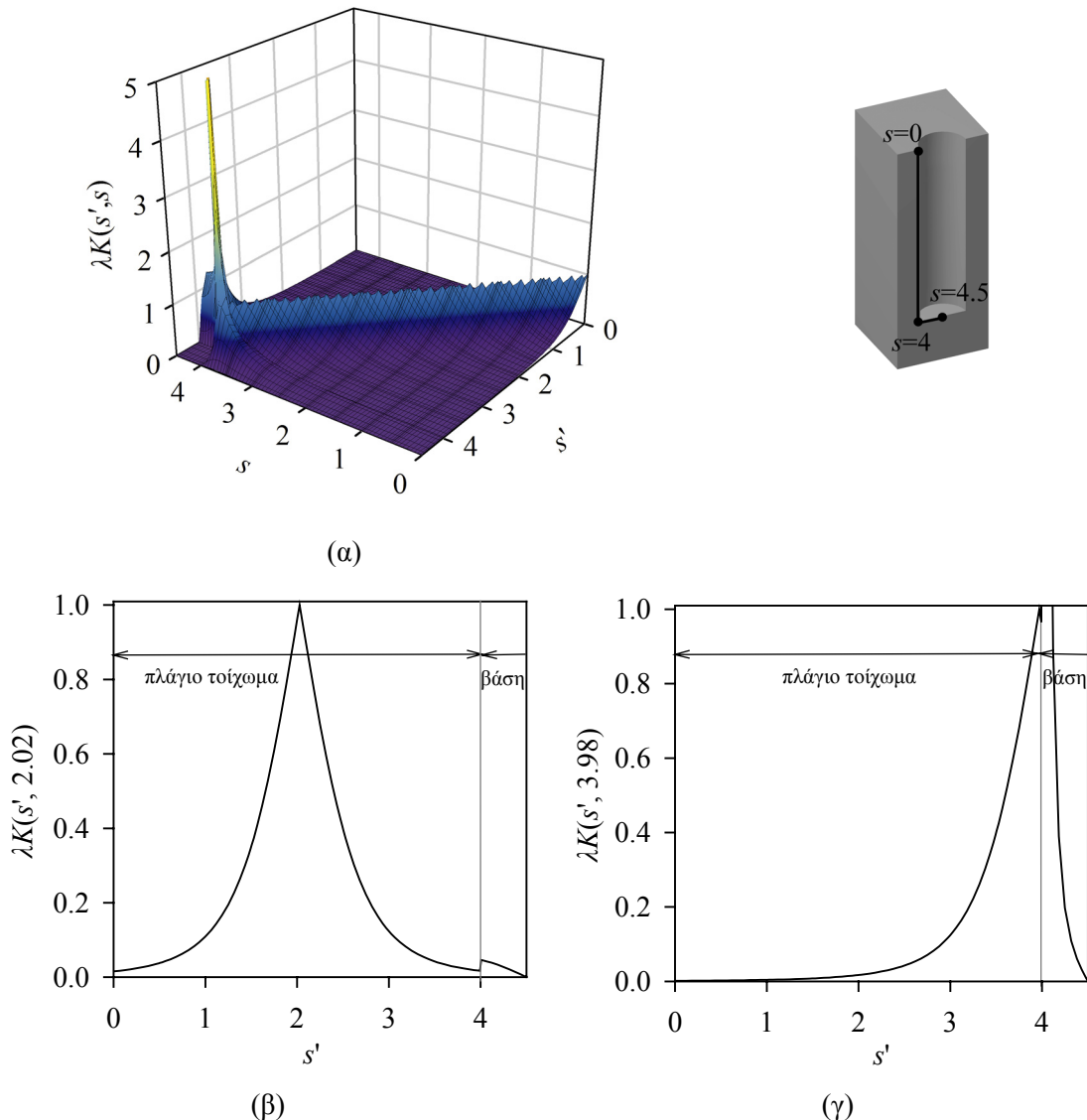
Στα Σχήματα 2.18α και 2.19α φαίνονται οι πυρήνες $K(s',s)$ των ολοκληρωτικών εξισώσεων για αυλάκι και οπή, όπως περιγράφονται από τις Εξ. (2.122) και (2.123), για δύο πρότυπες δομές (αυλάκι με κάθετα τοιχώματα και επίπεδη βάση και κυλινδρική οπή) με βάθος $d=4$ και πλάτος $w=1$. Στα Σχήματα 2.18β, 2.18γ, 2.19β, 2.19γ φαίνεται ο πυρήνας σε δύο σημεία s των πρότυπων δομών: ένα μακριά από γωνία (Σχήματα 2.18β και 2.19β) και ένα κοντά σε γωνία (Σχήματα 2.18γ και 2.19γ).



Σχήμα 2.18 (α) Το γινόμενο $\lambda K(s',s)$ για τη διατομή πρότυπου αυλακιού [Εξ. (2.122)] με βάθος $d=4$ και πλάτος $w=1$. Η τιμή του φαινομένου συντελεστή προσκόλλησης είναι $S_E=0$. (β) Το ίδιο με (α) όταν $s=2.02$, σε ένα σημείο μακριά από τη γωνία. (γ) Το ίδιο με (α) όταν $s=3.98$, σε ένα σημείο στη γειτονιά της γωνίας. Σημειώνεται ότι τα μέγιστα στα 2.18α και 2.18γ είναι πολύ μεγάλοι αριθμοί.

Ο πυρήνας μπορεί να είναι ασυνεχής λόγω ασυνεχούς μεταβολής της κλίσης του διαστήματος ολοκλήρωσης (π.χ. Σχήμα 2.18β για το πρότυπο αυλάκι) ή/και να εμφανίζει ασυνέχειες στην κλίση (π.χ. Σχήμα 2.19β για την πρότυπη οπή). Επίσης, όταν $s' \rightarrow s$ οι

παρονομαστές των πυρήνων παίρνουν πολύ μικρές τιμές με πιθανό αποτέλεσμα - αν οι αριθμητές δεν είναι μηδενικοί ή αρκετά μικροί - οι πυρήνες να παίρνουν πολύ υψηλές τιμές, να μην είναι φραγμένοι. Τότε, οι πυρήνες των ολοκληρωτικών εξισώσεων και κατά συνέπεια οι αντίστοιχες ολοκληρωτικές εξισώσεις είναι ιδιόμορφες. Αυτό συμβαίνει όταν το s βρίσκεται στη γειτονιά των γωνιών, όπως φαίνεται και στα Σχήματα 2.18γ και 2.19γ.



Σχήμα 2.19 (α) Το γινόμενο $\lambda K(s',s)$ για τη διατομή πρότυπης οπής [Εξ. (2.123)] με βάθος $d=4$ και πλάτος $w=1$. Η τιμή του φαινόμενου συντελεστή προσκόλλησης είναι $S_E=0$. (β) Το ίδιο με (α) όταν $s=2.02$, σε ένα σημείο μακριά από τη γωνία. (γ) Το ίδιο με (α) όταν $s=3.98$, σε ένα σημείο στη γειτονιά της γωνίας. Σημειώνεται ότι τα μέγιστα στα Σχήματα 2.19α και 2.19γ είναι πολύ μεγάλοι αριθμοί.

Γενικά, η λύση της ολοκληρωτικής εξίσωσης είναι ασυνεχής (§2.6.5.1, §2.7). Η μόνη περίπτωση στην οποία η λύση είναι συνεχής είναι όταν $S_E=0$. Αυτή είναι και η μόνη περίπτωση όπου η πραγματική λύση είναι γνωστή [Singh et al. (1992)] και ίση με j_0 [ροή σε ελεύθερη επιφάνεια, Εξ. (2.54)] κατά μήκος της διατομής και για τις δύο πρότυπες δομές. Στο Σχήμα 2.20α φαίνεται η συνολική ροή σε διατομή των πρότυπων δομών όταν $S_E=0$, όπως

υπολογίζεται από την ολοκληρωτική εξίσωση (2.103) για το αυλάκι και (2.118) για την οπή με τη μέθοδο Nystrom. Η αριθμητική λύση για την επιλεγμένη διαμέριση (11 σημεία Gauss ανά μονάδα μήκους) είναι γενικά μακριά από την αναλυτική λύση και εμφανίζει στις γωνίες διακυμάνσεις. Αυτά είναι πιθανό να οφείλονται στην ιδιομορφία (έλλειψη φράγματος ή ασυνέχεια) του πυρήνα [Atkinson (1976), σ. 176].

Η πύκνωση της διαμέρισης (41 σημεία Gauss ανά μονάδα μήκους) είχε σαν αποτέλεσμα η αριθμητική λύση να πλησιάζει την πραγματική (Σχήμα 2.20β). Ωστόσο, οι διακυμάνσεις στις γωνίες δεν εξαλείφθηκαν. Η λύση στο πρόβλημα προέκυψε με τη εφαρμογή τεχνικής [Press et al. (1997), σ. 798] που χρησιμοποιείται για την απομάκρυνση πιθανής ιδιομορφίας του πυρήνα όταν $s=s'$. Η ολοκληρωτική εξίσωση (2.120) μετατρέπεται σε

$$u(s) = h(s) + \lambda \int_a^b K(s', s) [u(s') - u(s)] ds' + \lambda r(s)u(s), \quad (2.137)$$

όπου

$$r(s) = \int_a^b K(s', s) ds'. \quad (2.138)$$

Εφαρμόζοντας την παραπάνω τεχνική στη μέθοδο Nystrom, αντί της Εξ. (2.131), προκύπτει για τις τιμές της u στους κόμβους του πλέγματος ότι

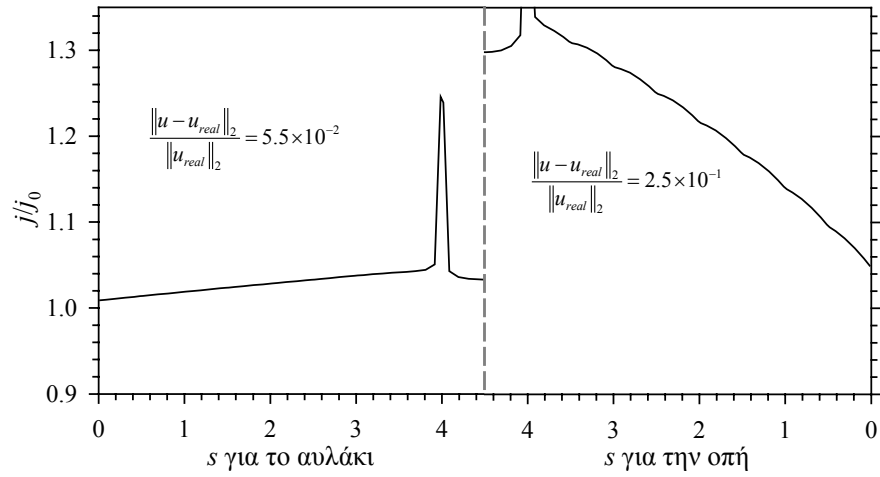
$$u(s_i) = h(s_i) + \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^N w_j \lambda K(s_j, s_i) (u_j - u_i) + \lambda r(s_i)u(s_i). \quad (2.139)$$

Το ολοκλήρωμα $r(s_i)$ υπολογίζεται ανεξάρτητα από την υπάρχουσα διαμέριση με τη μέθοδο ολοκλήρωσης Gauss χρησιμοποιώντας αρκετά μεγαλύτερο πλήθος σημείων Gauss από την υπάρχουσα διαμέριση.

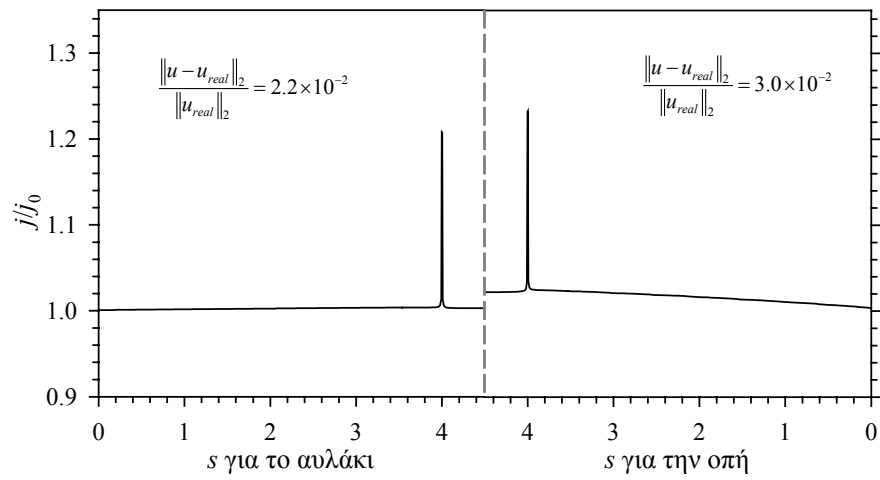
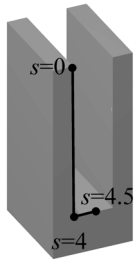
Τα στοιχεία των πινάκων \mathbf{A} και \mathbf{b} του προκύπτοντος γραμμικού συστήματος είναι

$$a_{ij} = \begin{cases} -w_j \lambda K(s_j, s_i), & i \neq j \\ 1 + \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^N w_j \lambda K(s_j, s_i) - \lambda r(s_i), & i = j \end{cases}, \quad i=1,2,\dots,N, \quad j=1,2,\dots,N \quad (2.140)$$

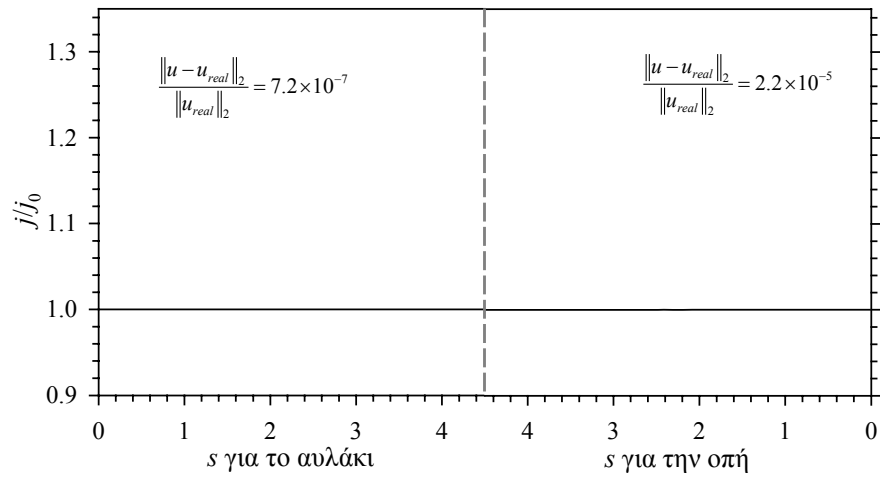
$$b_i = h(s_i), \quad i=1,2,\dots,N. \quad (2.141)$$



(α)



(β)



(γ)

Σχήμα 2.20 (α) Συνολική ροή σε διατομή των πρότυπων δομών όταν $S_E=0$, όπως υπολογίζεται από την ολοκληρωτική εξίσωση (2.103) για αυλάκι και (2.118) για οπή βάθους $d=4$ και πλάτους $w=1$. Χρησιμοποιείται η μέθοδος Nystrom και 11 σημεία Gauss ανά μονάδα μήκους. (β) Όμοια με (α) χρησιμοποιώντας 41 σημεία Gauss ανά μονάδα μήκους. (γ) Όμοια με (α) χρησιμοποιώντας την Εξ. (2.139) για τη διακριτοποίηση.

Το αποτέλεσμα εφαρμογής της τεχνικής φαίνεται στο Σχήμα 2.20γ χρησιμοποιώντας τη διαμέριση του Σχήματος 2.20α (11 σημεία Gauss ανά μονάδα μήκους). Παρατηρείται ότι η λύση βελτιώνεται όχι μόνο στη γειτονιά της γωνίας αλλά και στο υπόλοιπο διάστημα. Μάλιστα η αριθμητική λύση είναι πιο κοντά στην πραγματική από αυτή του Σχήματος 2.20β, μολονότι τα σημεία Gauss είναι 4 φορές λιγότερα.

Σημειώνεται ότι η εφαρμογή της παραπάνω τεχνικής στη μέθοδο ταξιθεσίας δεν είχε αντίστοιχα με τη μέθοδο Nystrom αποτελέσματα.

2.6.5.3 Αξιολόγηση των μεθόδων επίλυσης της ολοκληρωτικής εξίσωσης

Η μέθοδος Nystrom είναι απλούστερη στην εφαρμογή της, αφού δεν απαιτείται ολοκλήρωση για τον υπολογισμό των συντελεστών a_{ij} του γραμμικού συστήματος. Επιπλέον, το πρόβλημα με τις διακυμάνσεις στις γωνίες δεν αντιμετωπίστηκε με τη μέθοδο ταξιθεσίας. Η μέθοδος Nystrom, ακόμη κι όταν δεν εφαρμόζεται η τεχνική αντιμετώπισης της ιδιομορφίας του πυρήνα της §2.6.5.2, φαίνεται ότι είναι υψηλότερης τάξης ακρίβειας. Στην περίπτωση υπολογισμού ροής σε πρότυπο αυλάκι, όταν $S_E=0$ (οπότε είναι γνωστή η πραγματική λύση της ολοκληρωτικής εξίσωσης), το σφάλμα με τη μέθοδο Nystrom είναι ανάλογο του N^{-2} (N το πλήθος των σημείων διαμέρισης), ενώ με τη μέθοδο ταξιθεσίας είναι ανάλογο του N^{-1} , χρησιμοποιώντας γραμμικές ή διωνυμικές συναρτήσεις βάσης [Κόκκορης (2000)]. Η επαλήθευση του κώδικα και για τις δύο μεθόδους περιέχεται στην §A.5.4.

Πλήθος μεθόδων επίλυσης ολοκληρωτικών εξισώσεων και λεπτομέρειες για αυτές μπορεί κάποιος να αναζητήσει στα βιβλία των Atkinson [Atkinson (1976)], Delves και Mohamed [Delves & Mohamed (1985)] και Goldberg [Goldberg (1979)]. Οι Delves και Mohamed πρότειναν τη μέθοδο Nystrom και τη χρήση του κανόνα ολοκλήρωσης Gauss για τις εξισώσεις Fredholm 2^{ου} είδους.³¹ Ο Atkinson αναφέρει ότι η μέθοδος ταξιθεσίας είναι δύσκολο να συναγωνιστεί τη μέθοδο Nystrom και σημειώνει ότι για τις περισσότερες περιπτώσεις πυρήνων ο κανόνας ολοκλήρωσης Gauss για τη μέθοδο Nystrom είναι ο προτεινόμενος [Atkinson (1976), σ. 62].

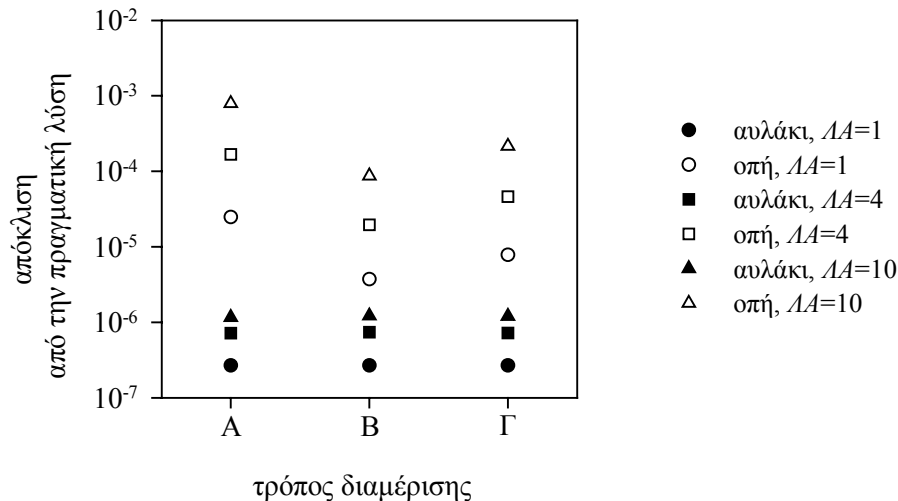
Στις δύο επόμενες παραγράφους εξετάζεται η επίδραση του τρόπου διαμέρισης, του φαινομένου συντελεστή προσκόλλησης και του λόγου ασυμμετρίας της δομής στην αριθμητική επίλυση με τη μέθοδο Nystrom.

2.6.5.4 Η επίδραση του τρόπου διαμέρισης

Στη μέθοδο Nystrom το ίδιο πλήθος σημείων διαμέρισης μπορεί να διασκορπιστεί με διαφορετικούς τρόπους κατά μήκος του προφίλ της δομής. Για παράδειγμα, 90 σημεία Gauss

³¹ Αναφέρουν χαρακτηριστικά για τη μέθοδο Nystrom: “This routine is extremely simple.... Such results are enough to make a numerical analyst weep”.

μπορούν να διασκορπιστούν σε 3 τμήματα του προφίλ (30 στο καθένα) ή σε 9 τμήματα (10 στο καθένα). Εξετάζεται αν ο τρόπος διαμέρισης για σταθερό πλήθος σημείων διαμέρισης επηρεάζει την ακρίβεια της μεθόδου. Στο Σχήμα 2.21 φαίνεται η απόκλιση της αριθμητικής λύσης από την πραγματική λύση για πρότυπο αυλάκι και οπή χρησιμοποιώντας τρεις διαφορετικούς τρόπους διαμέρισης (Α, Β και Γ) διατηρώντας το συνολικό πλήθος των σημείων διαμέρισης σταθερό.



Σχήμα 2.21 Απόκλιση της αριθμητικής λύσης από την πραγματική ($\|u - u_{real}\|_2 / \|u_{real}\|_2$) για 6 πρότυπες δομές (3 αυλάκια, 3 οπές) διαφορετικού λόγου ασυμμετρίας (AA) χρησιμοποιώντας 3 τρόπους διαμέρισης. Είναι $S_E=0$ και έχει χρησιμοποιηθεί η μέθοδος Nystrom. Για κάθε AA διατηρείται το συνολικό πλήθος σημείων διαμέρισης. Σε κάθε περίπτωση το διάστημα ολοκλήρωσης διαιρείται σε ισομήκη στοιχεία σε κάθε ένα από τα οποία διασκορπίζονται σημεία Gauss. Ο Α τρόπος διαμέρισης αφορά 10 στοιχεία διαμέρισης ανά μονάδα μήκους του διαστήματος ολοκλήρωσης, ο Β 5 στοιχεία και ο Γ 2 στοιχεία.

Από το Σχήμα 2.21 φαίνεται ότι με τη μέθοδο Nystrom για τα αυλάκια και για σταθερό πλήθος σημείων διαμέρισης, ο τρόπος διαμέρισης δεν επηρεάζει την απόκλιση από την πραγματική λύση. Για τις οπές δεν μπορεί να βγει συμπέρασμα για το πώς επηρεάζει η διαμέριση την απόκλιση από την πραγματική λύση.

2.6.5.5 Η επίδραση του φαινομένου συντελεστή προσκόλλησης και του λόγου ασυμμετρίας

Η ολοκληρωτική εξίσωση

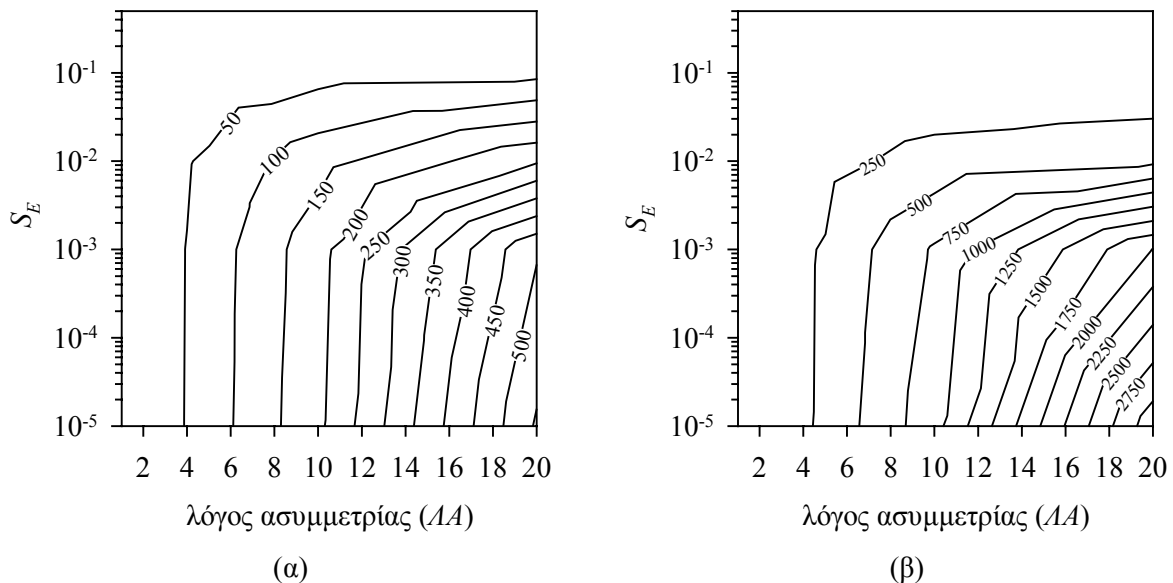
$$u(s) = h(s) + \lambda \int_a^b K(s', s)u(s')ds' \quad (2.142)$$

σε διακριτή μορφή πινάκων γίνεται

$$\left(\mathbf{K} - \frac{1}{\lambda} \mathbf{I}\right) \mathbf{u} = -\frac{1}{\lambda} \mathbf{h}. \quad (2.143)$$

Από την Εξ. (2.143) φαίνεται ότι αν το κλάσμα $1/\lambda$ είναι κοντά σε ιδιοτιμή του πίνακα \mathbf{K} , τότε ο πίνακας $\left(\mathbf{K} - \frac{1}{\lambda} \mathbf{I}\right)$ είναι κοντά σε ιδιομορφία και η επίλυση του γραμμικού συστήματος δυσχεραίνεται.

Τόσο ο φαινόμενος συντελεστής προσκόλλησης, S_E , όσο και ο λόγος ασυμμετρίας, AA , της δομής, μπορούν να επηρεάσουν την επίλυση του γραμμικού συστήματος. Από τη μία πλευρά, ο S_E επηρεάζει την τιμή της παραμέτρου λ . Από τις Εξ. (2.122) και (2.123) φαίνεται μάλιστα ότι $\lambda \sim (1 - S_E)$. Από την άλλη πλευρά, η μεταβολή του AA μεταβάλλει τις ιδιοτιμές του πίνακα \mathbf{K} της Εξ. (2.143), αφού $2AA+1$ είναι το άνω όριο ολοκλήρωσης της Εξ. (2.142) (§2.6.5).

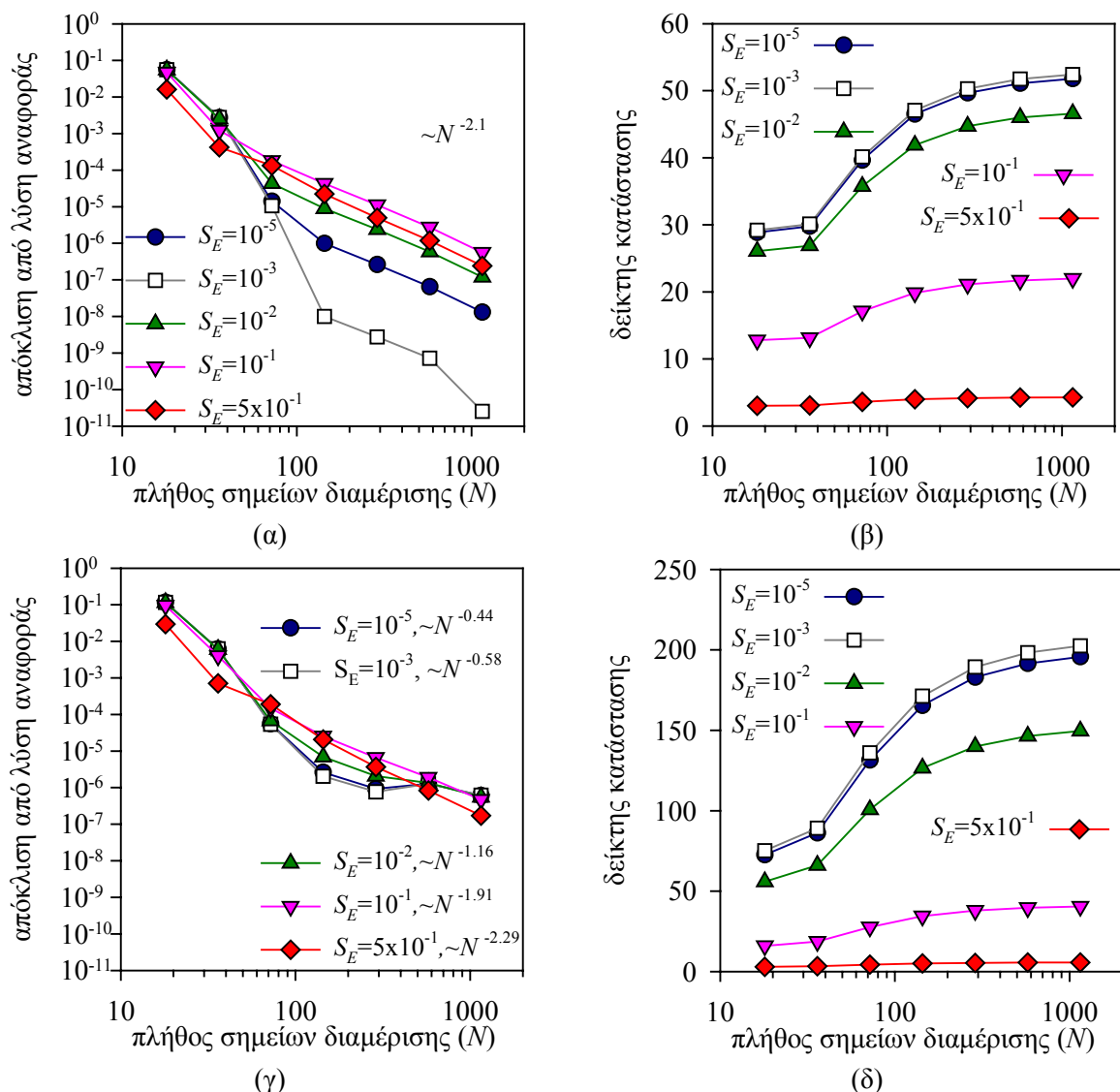


Σχήμα 2.22 Ισοϋψείς του δείκτη κατάστασης (ΔK) του πίνακα \mathbf{A} του γραμμικού συστήματος που προκύπτει από τη διακριτοποίηση της ολοκληρωτικής εξίσωσης με τη μέθοδο Nystrom συναρτήσει του S_E και του AA . (α) Ο ΔK για το πρότυπο αυλάκι. (β) Ο ΔK για την πρότυπη οπή.

Ο δείκτης κατάστασης (ΔK) του πίνακα $\left(\mathbf{K} - \frac{1}{\lambda} \mathbf{I}\right)$ του γραμμικού συστήματος είναι δείκτης για την κατάσταση του γραμμικού συστήματος (§7.2.3.2). Στο Σχήμα 2.22 φαίνεται η εξάρτηση του ΔK του πίνακα \mathbf{A} που προκύπτει από τη διακριτοποίηση με τη μέθοδο Nystrom^{3†} από το AA και το S_E και για τις δύο περιπτώσεις πρότυπων δομών. Γενικά, φαίνεται ότι ο ΔK αυξάνεται με τη μείωση του S_E ή με την αύξηση του AA . Επίσης, ο ΔK

^{3†} Είναι $\mathbf{A} = -\lambda \left(\mathbf{K} - \frac{1}{\lambda} \mathbf{I}\right)$

είναι υψηλότερος στην περίπτωση της πρότυπης οπής. Οι πιθανές επιδράσεις υψηλού ΔK για τον πίνακα **A** είναι ο περιορισμός της ακρίβειας της λύσης.



Σχήμα 2.23 Απόκλιση ($\|u - u_{ref}\|_2 / \|u_{ref}\|_2$) της αριθμητικής λύσης u από τη λύση αναφοράς u_{ref} (ακριβέστερη δυνατή λύση) και ο ΔK του πίνακα **A** του γραμμικού συστήματος που προκύπτει από τη διακριτοποίηση για διάφορες τιμές του S_E συναρτήσει του πλήθους των σημείων διαμέρισης. Η απόκλιση αφορά στο μέσο της βάσης πρότυπης δομής με $\lambda A=4$. Η μέθοδος Nystrom έχει χρησιμοποιηθεί. (α) Η απόκλιση και (β) ο ΔK του πίνακα στην περίπτωση πρότυπου αυλακιού. (γ) Η απόκλιση και (δ) ο ΔK του πίνακα στην περίπτωση πρότυπης οπής.

Στο Σχήμα 2.23 μελετάται η επίδραση του S_E στην ακρίβεια της αριθμητικής λύσης με τη μέθοδο Nystrom. Στο Σχήμα 2.23α φαίνεται η απόκλιση της αριθμητικής λύσης από την ακριβέστερη δυνατή λύση για πρότυπο αυλάκι και για διαφορετικές τιμές του S_E συναρτήσει του πλήθους των σημείων διαμέρισης. Στο Σχήμα 2.23β φαίνεται ο ΔK του πίνακα **A** του γραμμικού συστήματος που προκύπτει από τη διακριτοποίηση συναρτήσει του πλήθους των σημείων διαμέρισης. Στα Σχήματα 2.23γ και 2.23δ φαίνονται τα αντίστοιχα των

Σχημάτων 2.23α και 2.23β για την περίπτωση της πρότυπης οπής. Στα Σχήματα 2.23α και 2.23γ σημειώνεται και η εξάρτηση της απόκλισης από το πλήθος των σημείων διαμέρισης για κάθε τιμή του S_E . Για τον υπολογισμό της εξάρτησης λαμβάνονται υπόψη μόνο τα 4 τελευταία σημεία κάθε καμπύλης. Η απόκλιση είναι ανάλογη του $N^{-2.1}$ για κάθε τιμή του S_E στην περίπτωση του πρότυπου αυλακιού. Η εξάρτηση της απόκλισης από το πλήθος των σημείων για την περίπτωση της πρότυπης οπής αλλάζει με την τιμή του S_E . Η απόκλιση είναι ανάλογη του $N^{-0.44}$ για $S_E=10^{-5}$ και του $N^{-2.29}$ για $S_E=0.5$. Αυτή η μεταβολή της εξάρτησης από το πλήθος των σημείων διαμέρισης ακολουθεί τη μεταβολή του ΔΚ του πίνακα Α. Ο ΔΚ είναι υψηλός για $S_E=10^{-5}$, 10^{-3} και 10^{-2} , οπότε και η παρατηρούμενη τάξη μείωσης της απόκλισης είναι μικρή. Ο ΔΚ μειώνεται για $S_E>0.01$, οπότε και η παρατηρούμενη τάξη μείωσης αυξάνεται. Ο ΔΚ για την περίπτωση του πρότυπου αυλακιού είναι μικρότερος σε σχέση με αυτόν της πρότυπης οπής και για αυτό το λόγο δεν παρατηρείται αλλαγή της τάξης μείωσης για διαφορετικά S_E .

Σημειώνεται ότι οι αποκλίσεις στα Σχήματα 2.23α και 2.23γ αφορούν το μέσο της βάσης των πρότυπων δομών. Οι αποκλίσεις είναι αντίστοιχες και για το μέσο του πλάγιου τοιχώματος των πρότυπων δομών. Αντίστοιχη είναι η τάξη μείωσης της απόκλισης και σε πρότυπες δομές με διαφορετικό AA .

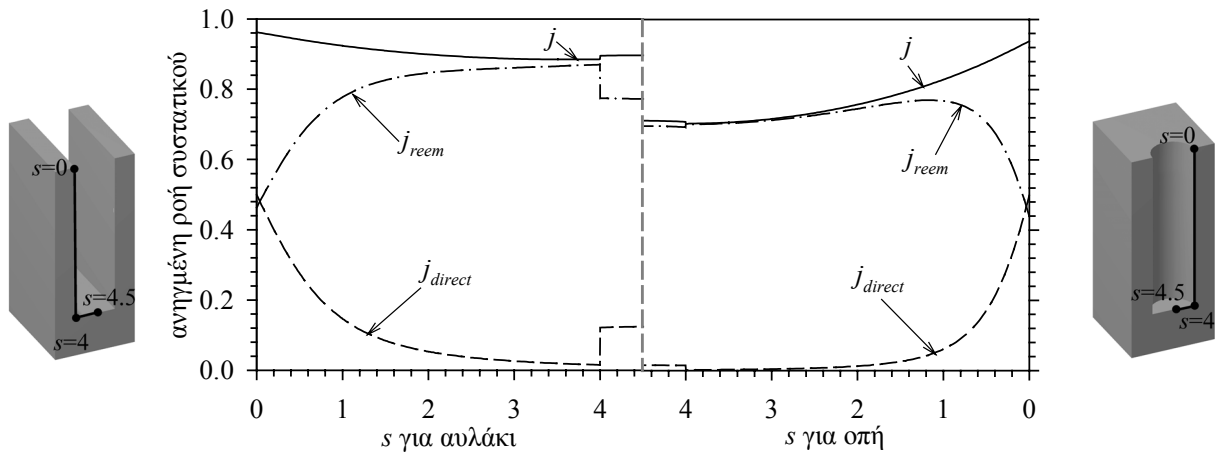
2.7 Αποτελέσματα υπολογισμού της ροής στο εσωτερικό δομών

Στις παραγράφους που ακολουθούν εξετάζεται η επίδραση του φαινομένου συντελεστή προσκόλλησης, S_E , και του λόγου ασυμμετρίας, AA , στη ροή στο εσωτερικό δομών και αναδεικνύεται η σχετική σημασία των φαινομένων σκίασης και επανεκπομπής. Για να εξαχθούν γενικά συμπεράσματα θεωρείται⁹¹ ότι α) ο συντελεστής προσκόλλησης των σωματιδίων του συστατικού που εξετάζεται είναι σταθερός σε κάθε σημείο στο εσωτερικό της δομής και β) οι δομές που εξετάζονται είναι πρότυπες: αυλάκια με κάθετα πλάγια τοιχώματα και πλήρως επίπεδη βάση και κυλινδρικές οπές. Το τυπικό εύρος τιμών για το φαινόμενο συντελεστή προσκόλλησης των συστατικών που μελετώνται στην παρούσα εργασία είναι $10^{-4} \leq S_E \leq 10^{-1}$, ενώ το εύρος τιμών για το λόγο ασυμμετρίας των δομών είναι $0.1 \leq AA \leq 50$. Αρχικά παρουσιάζονται αποτελέσματα για τη ροή ουδέτερου συστατικού και έπειτα για τη ροή φορτισμένου.

Στο Σχήμα 2.24 φαίνεται η συνολική, η απευθείας ροή και η ροή από επανεκπομπή ουδέτερου συστατικού (ισοτροπική κατανομή και μηχανισμός «διάχυτης» επανεκπομπής) κατά μήκος διατομής αυλακιού και οπής βάθους $d=4$ και πλάτους $w=1$ ($AA=4$). Όλες οι ροές είναι κανονικοποιημένες σε σχέση με τη ροή του συστατικού σε ελεύθερη επιφάνεια. Ο

⁹¹ Γενικά ο φαινόμενος συντελεστής προσκόλλησης σωματιδίων συστατικού σε μία επιφάνεια εξαρτάται από την κατάσταση της επιφάνειας, το είδος και τη ροή κάθε συστατικού που φτάνει σε αυτή. Συνεπώς μεταβάλλεται από σημείο σε σημείο στο εσωτερικό μιας δομής. Επίσης, οι δομές αυλακιού και οπής κατά τη διάρκεια της εγχάραξής τους δεν είναι πρότυπες, μπορεί όμως να προσεγγίζουν τις πρότυπες αν η εγχάραξη είναι ανισοτροπική.

φαινόμενος συντελεστής προσκόλλησης των σωματιδίων του συστατικού σε κάθε σημείο του αυλακιού ή της οπής είναι $S_E=0.01$. Παρουσιάζονται αποτελέσματα σε διατομή των δομών και μάλιστα μόνο στο μισό τμήμα των διατομών. Στο αριστερό τμήμα του Σχήματος 2.24 φαίνονται οι ροές στην διατομή του αυλακιού και στο δεξιό οι ροές σε διατομή οπής.



Σχήμα 2.24 Η ροή (συνολική, j , απευθείας, j_{direct} , από επανεκπομπή, j_{reem}) ουδέτερου συστατικού (ισοτροπική κατανομή και μηχανισμός «διάχυτης» επανεκπομπής) συναρτήσει του μήκους τόξου διατομής πρότυπου αυλακιού και οπής. Όλες οι ροές είναι ανηγμένες στη ροή σε ελεύθερη επιφάνεια. Ο φαινόμενος συντελεστής προσκόλλησης του ουδέτερου συστατικού είναι $S_E=0.01$. Το βάθος των δομών είναι $d=4$ και το πλάτος $w=1$ ($LA=4$). Το αριστερό τμήμα του Σχήματος 2.24 αφορά το αυλάκι, ενώ το δεξιό την οπή.

Τα συμπεράσματα από το Σχήμα 2.24 για τη ροή ουδέτερου συστατικού συνοψίζονται στα παρακάτω:

A) Όλες οι ροές (συνολική, απευθείας, από επανεκπομπή) εμφανίζουν μια ασυνέχεια στη γωνία των διατομών, $s=d=4$.

B) Στο πλάγιο τοίχωμα των δομών, η απευθείας ροή μειώνεται όσο πλησιάζουμε στη βάση, διότι μικραίνει το παράθυρο ορατότητας (στερεά γωνία) προς το εξωτερικό της δομής.

Γ) Η ροή στη βάση των δομών είναι περίπου σταθερή.

Δ) Στο πλάγιο τοίχωμα και προσεγγίζοντας τη βάση της δομής, η αντίστοιχη «πηγή» ροής πλησιάζει τις «πηγές» στο βάθος της δομής, ενώ η διαθέσιμη για επανεκπομπή απευθείας ροή σε αυτές τις «πηγές» μειώνεται. Τα δύο αυτά φαινόμενα είναι ανταγωνιστικά με το πρώτο να επιδρά προσθετικά στη ροή από επανεκπομπή και το δεύτερο μειωτικά. Το πρώτο κυριαρχεί σε μικρή απόσταση από το στόμιο των δομών, με αποτέλεσμα η ροή από επανεκπομπή στο πλάγιο τοίχωμα των δομών να αυξάνεται. Στο υπόλοιπο του πλάγιου τοιχώματος τα δύο φαινόμενα ισοσταθούν.

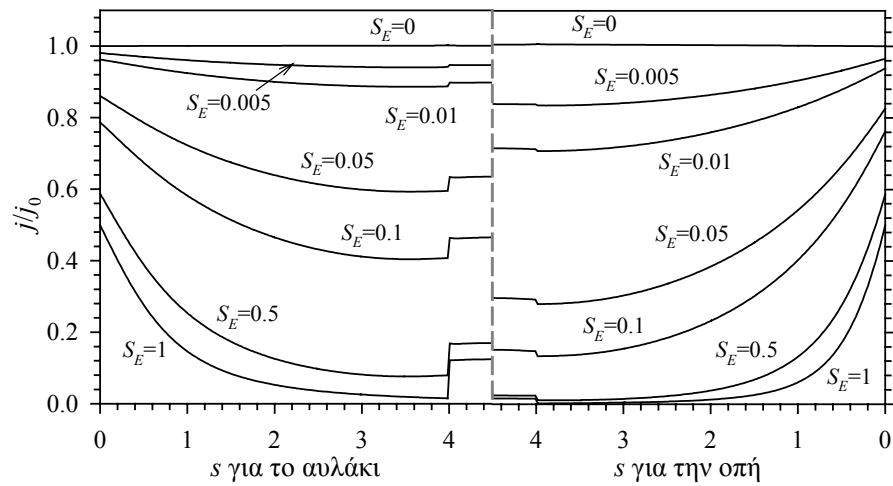
Ε) Η απευθείας ροή είναι μικρότερη στην οπή από ότι στο αυλάκι. Αυτό οφείλεται στο μικρότερο παράθυρο ορατότητας κάθε στοιχειώδους επιφάνειας της οπής. Η επίδραση της σκίασης στη ροή είναι εντονότερη στην οπή.

ΣΤ) Η συνολική ροή στο αυλάκι είναι μεγαλύτερη από ότι στην οπή. Αυτό οφείλεται στο ότι οι «πηγές» ροής είναι περισσότερες στο αυλάκι (απείρου μήκους) και η διαθέσιμη προς επανεκπομπή απευθείας ροή μεγαλύτερη.

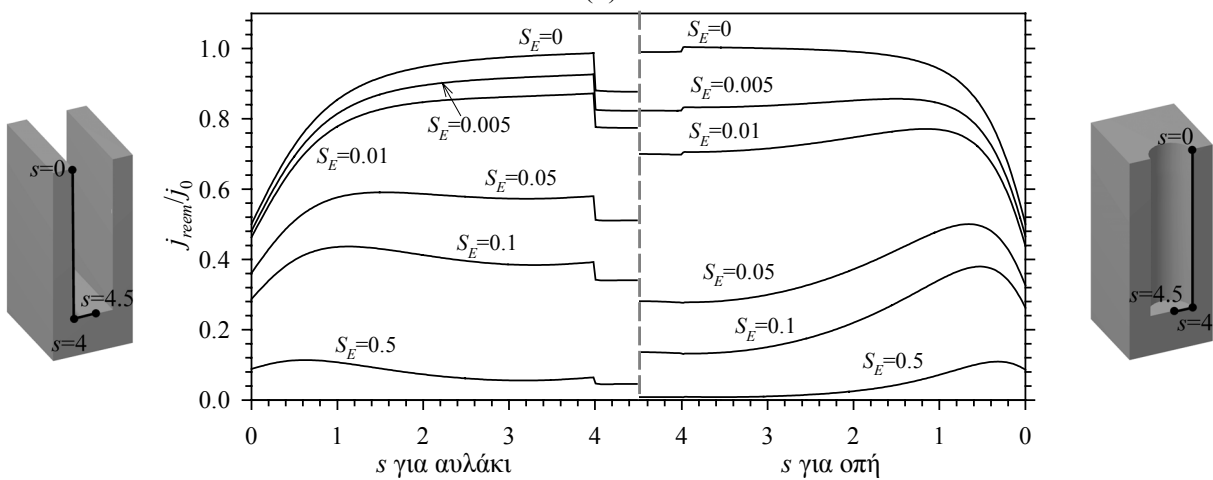
Στο Σχήμα 2.25 φαίνεται η επίδραση του φαινομένου συντελεστή προσκόλλησης, S_E , στη συνολική ροή και στη ροή από επανεκπομπή ουδέτερου συστατικού για πρότυπο αυλάκι και οπή με βάθος $d=4$ και πλάτος $w=1$ ($LA=4$). Από το Σχήμα 2.25α, όπου φαίνεται η συνολική ροή για διάφορες τιμές του S_E , προκύπτει ότι η μείωση του S_E συνεπάγεται αύξηση της συνολικής ροής. Αυτό οφείλεται στο ότι με τη μείωση του S_E αυξάνεται η ροή από επανεκπομπή (Σχήμα 2.25β). Όταν $S_E=0$, για ισοτροπική κατανομή και μηχανισμό «διάχυτης» επανεκπομπής, η συνολική ροή σε κάθε σημείο στο εσωτερικό τυχαίας δομής μπορεί αναλυτικά να αποδειχθεί [Singh et al. (1992)] ότι είναι ίση με τη ροή σε ελεύθερη επιφάνεια ($j/j_0=1$).

Η ροή από επανεκπομπή για σταθερά S_E και LA εξαρτάται από το πλήθος των «πηγών» (συνολική επιφάνεια της δομής), την απόσταση μεταξύ των «πηγών» [παρανομαστής της προς ολοκλήρωση συνάρτησης, Εξ. (2.72)] και την απευθείας ροή (ροή διαθέσιμη για επανεκπομπή). Στο αυλάκι οι «πηγές» ροής είναι περισσότερες (αυλάκι απείρου μήκους) και η απευθείας ροή μεγαλύτερη. Από την άλλη πλευρά, οι «πηγές» ροής στην οπή είναι πιο κοντά μεταξύ τους. Τα S_E και LA καθορίζουν αν θα επικρατήσουν το πλήθος των «πηγών» και η απευθείας ροή ή η απόσταση μεταξύ των «πηγών». Όπως φαίνεται στο Σχήμα 2.25β, για $LA=4$ η ροή από επανεκπομπή είναι γενικά μεγαλύτερη στο αυλάκι. Η διαφορά των ροών από επανεκπομπή στις δύο δομές μειώνεται καθώς μειώνεται ο S_E . Μάλιστα, για τιμές του $S_E \rightarrow 0$, η ροή από επανεκπομπή στην οπή ελαφρά ξεπερνά αυτή στο αυλάκι. Ακόμη και στις περιπτώσεις όπου η ροή από επανεκπομπή είναι μεγαλύτερη στην οπή από ότι στο αυλάκι, η συνολική ροή είναι μικρότερη, αφού η απευθείας ροή στο αυλάκι είναι μεγαλύτερη.

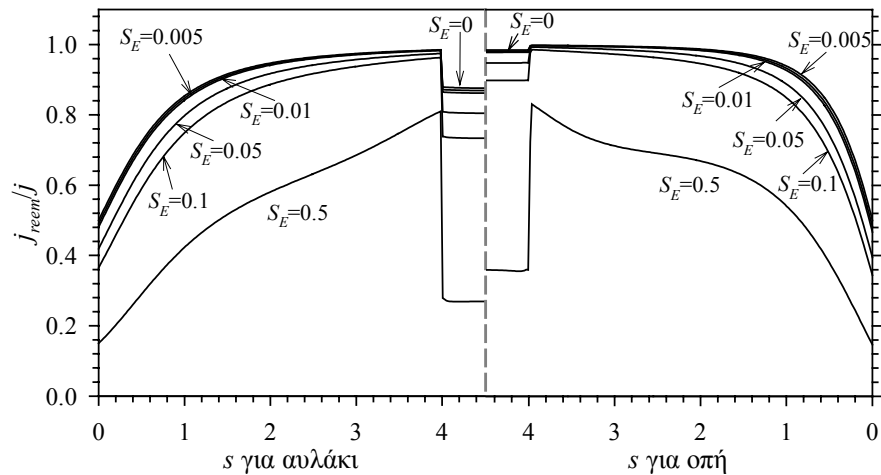
Στο Σχήμα 2.25γ φαίνεται το κλάσμα της ροής από επανεκπομπή στη συνολική ροή για αυλάκι και οπή. Για τιμές του $S_E < 0.05$, το κλάσμα της ροής από επανεκπομπή είναι μεγαλύτερο του 0.8 της συνολικής ροής για κάθε στοιχειώδη επιφάνεια των πρότυπων δομών, εξαιρουμένου ενός μικρού τμήματος του πλάγιου τοιχώματος. Το κλάσμα της ροής από επανεκπομπή είναι λίγο μεγαλύτερο στην οπή. Όπως το φαινόμενο σκίασης, έτσι και αυτό της επανεκπομπής είναι σημαντικότερο στην οπή σε σχέση με το αυλάκι. Το φαινόμενο της σκίασης επιδρά περισσότερο μειωτικά και το φαινόμενο της επανεκπομπής περισσότερο αυξητικά στη ροή στην περίπτωση της οπής.



(α)



(β)



(γ)

Σχήμα 2.25 Η συνολική ροή, j , και η ροή από επανεκπομπή, j_{reem} , ουδέτερου συστατικού (ισοτροπική κατανομή και μηχανισμός «διάχυτης» επανεκπομπής) συναρτήσει του μήκους τόξου διατομής πρότυπου αυλακιού και οπής για διάφορες τιμές του S_E (0, 0.005, 0.01, 0.05, 0.1 και 0.5). Το βάθος των δομών είναι $d=4$ και το πλάτος $w=1$ ($Ad=4$). Το αριστερό τμήμα του Σχήματος 2.25 αφορά το αυλάκι, ενώ το δεξιό την οπή. (α) Ο λόγος της συνολικής ροής προς τη ροή σε ελεύθερη επιφάνεια, j/j_0 . (β) Ο λόγος της ροής από επανεκπομπή προς τη ροή σε ελεύθερη επιφάνεια, j_{reem}/j_0 . (γ) Ο λόγος της ροής από επανεκπομπή προς τη συνολική ροή, j_{reem}/j .

Ο AA είναι η δεύτερη σημαντική παράμετρος για τον υπολογισμό της ροής στο εσωτερικό δομών. Στο Σχήμα 2.26 φαίνεται η συνολική, η απευθείας και η ροή από επανεκπομπή ουδέτερου συστατικού συναρτήσει του AA πρότυπης δομής για διάφορες τιμές του φαινομένου συντελεστή προσκόλλησης. Όλες οι ροές είναι ανηγμένες στη ροή σε ελεύθερη επιφάνεια και αφορούν είτε το μέσο της βάσης (Σχήματα 2.26α και 2.26β), είτε το μέσο του πλάγιου τοιχώματος της πρότυπης δομής (Σχήματα 2.26γ και 2.26δ).

Η απευθείας ροή σε πρότυπες δομές μπορεί να υπολογιστεί αναλυτικά. Μάλιστα η απευθείας ροή για το μέσο της βάσης των δομών, συναρτήσει του AA και της ροής σε ελεύθερη επιφάνεια j_0 , είναι

$$j_{b,anal} = \frac{j_0}{\sqrt{1+4AA^2}} \quad (2.144)$$

για το πρότυπο αυλάκι [Abraham & Wang (1996)] και

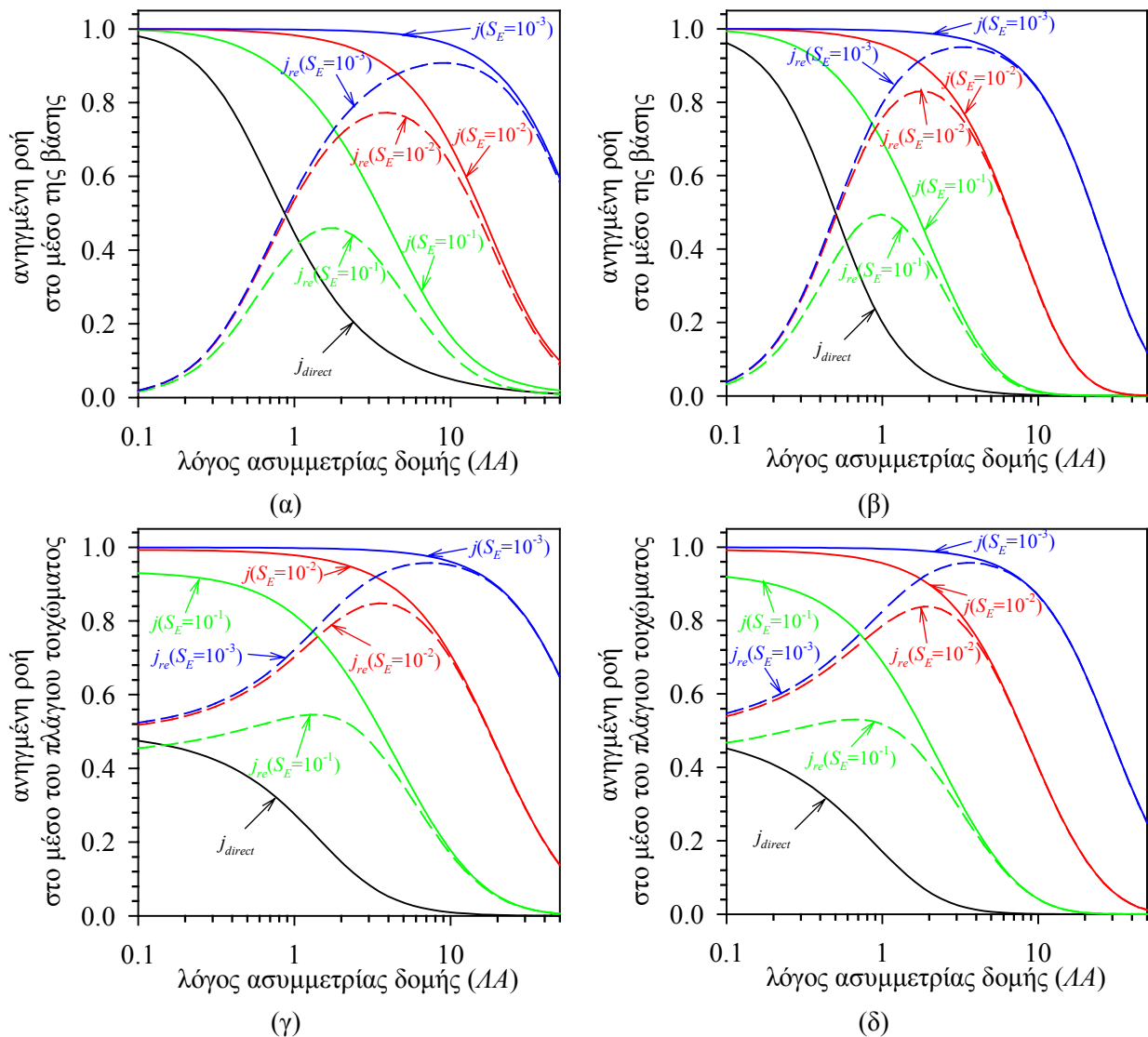
$$j_{b,anal} = \frac{j_0}{2} \left(1 + \frac{1-4AA^2}{1+4AA^2} \right) \quad (2.145)$$

για την πρότυπη οπή [Abraham & Chen (1996)]. Οι τιμές που προκύπτουν από τις παραπάνω σχέσεις για το μέσο της βάσης των πρότυπων δομών δεν διαφέρουν από την αριθμητική λύση στα Σχήματα 2.26α και 2.26β.

Τα συμπεράσματα από το Σχήμα 2.26 για τη ροή ουδέτερου συστατικού συναρτήσει του AA των πρότυπων δομών συνοψίζονται στα παρακάτω:

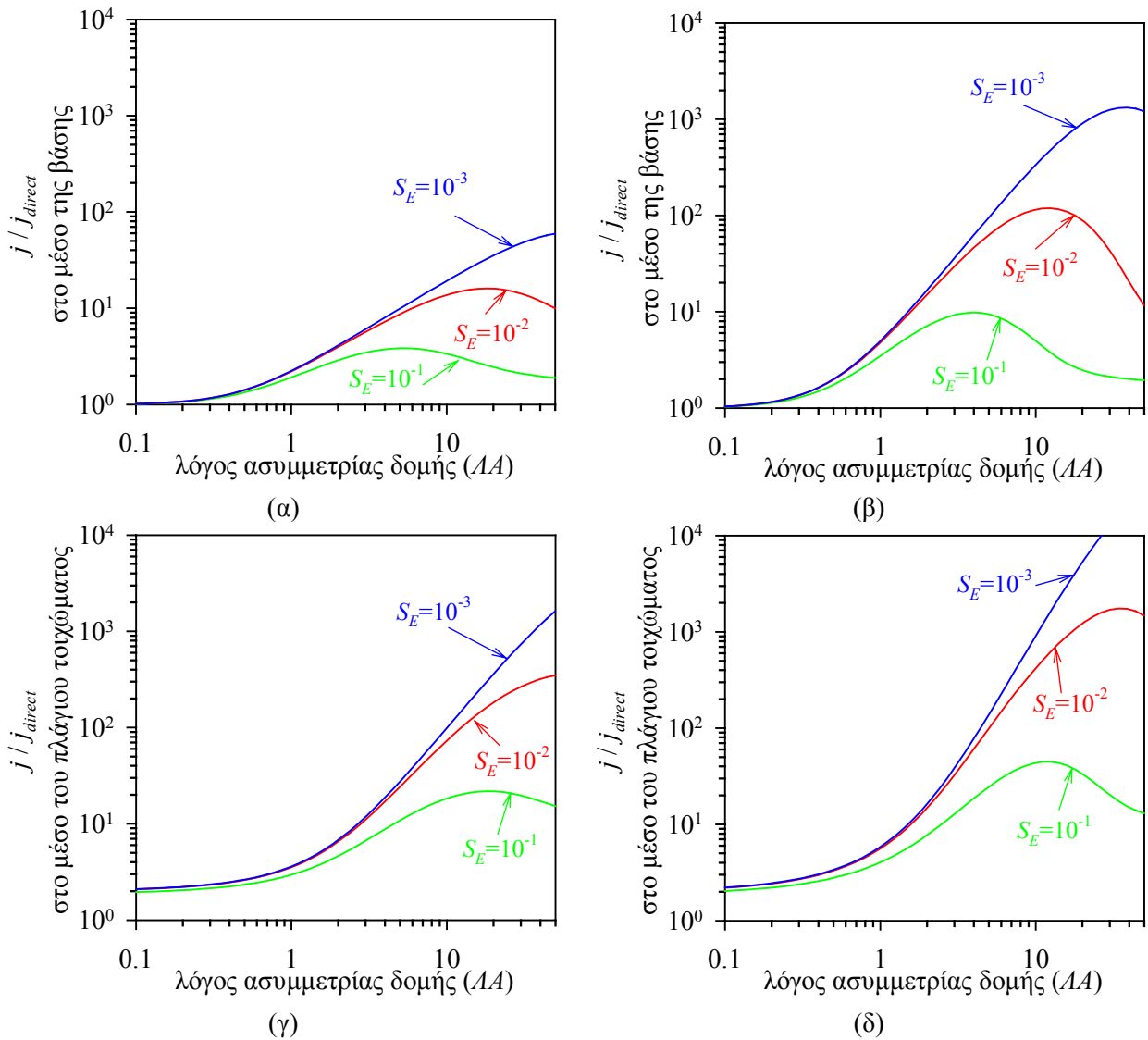
A) Στο μέσο του πλάγιου τοιχώματος των πρότυπων δομών η ροή από επανεκπομπή είναι μεγαλύτερη από την απευθείας για κάθε τιμή των AA , S_E . Εξαιρέση αποτελεί ένα πολύ περιορισμένο εύρος τιμών του λόγου ασυμμετρίας, $0.1 < AA < 0.15$, για το πρότυπο αυλάκι. Στο μέσο της βάσης των πρότυπων δομών η ροή από επανεκπομπή είναι μεγαλύτερη από την απευθείας για $AA > 1$ για τα αυλάκι και $AA > 0.6$ για την οπή.

B) Η ροή από επανεκπομπή εμφανίζει μέγιστο για κάποιο AA . Το μέγιστο αυξάνεται και μετατοπίζεται προς μεγαλύτερα AA , καθώς μειώνεται ο S_E . Τα μέγιστα για την οπή είναι υψηλότερα και εμφανίζονται σε μικρότερα AA .



Σχήμα 2.26 Συνολική, j , απευθείας, j_{direct} [$j(S_E=1)$], και ροή από επανεκπομπή, j_{re} , (για λόγους ευκρίνειας των σχημάτων χρησιμοποιείται το σύμβολο j_{re} αντί του j_{reem} ουδέτερου συστατικού (ισοτροπική κατανομή και μηχανισμός «διάχυτης» επανεκπομπής) συναρτήσεως του ΛA πρότυπης δομής για διάφορους S_E (10^{-1} , 10^{-2} , 10^{-3}). Όλες οι ροές είναι ανηγμένες στη ροή σε ελεύθερη επιφάνεια. (α) Οι ροές στο μέσο της βάσης πρότυπου αυλακιού. (β) Οι ροές στο μέσο της βάσης πρότυπης οπής. (γ) Οι ροές στο μέσο του πλάγιου τοιχώματος πρότυπου αυλακιού. (δ) Οι ροές στο μέσο του πλάγιου τοιχώματος πρότυπης οπής.

Στο Σχήμα 2.27 σημειώνεται η σημασία της ροής από επανεκπομπή: Φαίνεται ο λόγος της συνολικής ροής (απευθείας + ροή από επανεκπομπή) προς την απευθείας ροή συναρτήσεως του ΛA , για διάφορα S_E .



Σχήμα 2.27 Ο λόγος της συνολικής προς την απευθείας ροή, j/j_{direct} , ουδέτερου συστατικού (ισοτροπική κατανομή και μηχανισμός «διάχυτης» επανεκπομπής) συναρτήσει του ΛA πρότυπης δομής για διάφορους S_E (10^{-1} , 10^{-2} , 10^{-3}). (α) Ο λόγος j/j_{direct} στο μέσο της βάσης πρότυπου αυλακιού. (β) Ο λόγος j/j_{direct} στο μέσο της βάσης πρότυπης οπής. (γ) Ο λόγος j/j_{direct} στο μέσο του πλάγιου τοιχώματος πρότυπου αυλακιού. (δ) Ο λόγος j/j_{direct} στο μέσο του πλάγιου τοιχώματος πρότυπης οπής.

Από το Σχήμα 2.27 προκύπτει ότι η ροή από επανεκπομπή (για ισοτροπική κατανομή και μηχανισμό «διάχυτης» επανεκπομπής) δεν μπορεί να αγνοηθεί κατά την ανάπτυξη ενός μοντέλου υπολογισμού της ροής στο εσωτερικό δομών. Αναφέρεται χαρακτηριστικά ότι αν δεν ληφθεί υπόψη η ροή από επανεκπομπή για μια δομή με $\Lambda A=4$, η ροή είναι περίπου 8 φορές μικρότερη για $S_E=10^{-2}$ στο μέσο της βάσης ενός αυλακιού. Οι διαφορές είναι μεγαλύτερες για το μέσο του πλάγιου τοιχώματος και για την περίπτωση οπής. Η σημασία της ροής από επανεκπομπή εντείνεται όταν μειώνεται ο S_E ή/και αυξάνεται ο ΛA (μέχρι κάποια τιμή ΛA από την οποία και μετά η συνεισφορά της ροής από επανεκπομπή φθίνει αν και παραμένει η κυρίαρχη).

Αν και στην συντριπτική πλειοψηφία της σχετικής βιβλιογραφίας λαμβάνεται υπόψη η ροή από επανεκπομπή, τόσο με συνεχή (§2.3) μοντέλα [Singh et al. (1992), Arnold et al. (1993), Levinson et al. (1997), Tuda et al. (1997), Drotar et al. (2000b)], όσο και με στοχαστικά Monte Carlo [Drotar et al. (2000b)], υπάρχουν και εργασίες [Bailey et al. (1995)] που την αγνοούν και δεν την επικαλούνται για την εξήγηση των πειραματικών δεδομένων. Στο μοντέλο υπολογισμού τοπικής ταχύτητας εγχάραξης στο εσωτερικό δομών των Bailey et al. λαμβάνεται υπόψη μόνο η απευθείας ροή. Μολαταύτα, το μοντέλο προσεγγίζει ικανοποιητικά πειραματικά δεδομένα ταχύτητας εγχάραξης αυλακίων Si και GaAs σε πλάσμα Cl₂/Ar. Θα πρέπει ωστόσο να σημειωθεί ότι τα πειραματικά δεδομένα είναι σε χαμηλούς AA (<1.5 για το Si και <2.5 για το GaAs). Από τα Σχήματα 2.26 και 2.27 φαίνεται ότι η απευθείας ροή αποτελεί σημαντικό κλάσμα της συνολικής για χαμηλούς AA ή/και μεγάλα S_E . Βασισμένοι στα πειραματικά δεδομένα της εργασίας των Bailey et al., οι Abraham, Chen και Wang θεωρούν ικανοποιητική την παραδοχή μη επανεκπομπής των ουδέτερων συστατικών για μικρούς AA ($AA < 3$), τόσο για δομή αυλακιού [Abraham & Wang (1996)], όσο και για δομή οπής [Abraham & Chen (1996)]. Για μεγαλύτερους AA , προτείνουν την τροποποίηση του μοντέλου και την προσθήκη σε αυτό όρου για την επανεκπομπή.

Στη συνέχεια εξετάζεται η σχέση της ροής μετά από επανεκπομπή k -τάξης (§2.5.2) με τη συνολική ροή. Η ροή στο εσωτερικό δομής μετά από k επανεκπομπές δίδεται από την Εξ. (2.78).⁹¹ Στο Σχήμα 2.28α φαίνεται η συνολική ροή ουδέτερου συστατικού μετά από επανεκπομπή k -τάξης (συνολική ροή μετά από k επανεκπομπές όταν $S_E=0$, §2.5.2), $k=1,2,3,5,10$ και 20 , για πρότυπη δομή αυλακιού και οπής βάθους $d=4$ και πλάτους $w=1$ ($AA=4$). Οι καμπύλες της ροής μετά από επανεκπομπή k -τάξης (Σχήμα 2.28α) είναι αντίστοιχες αυτές της συνολικής ροής για διαφορετικές τιμές του S_E (Σχήμα 2.25).

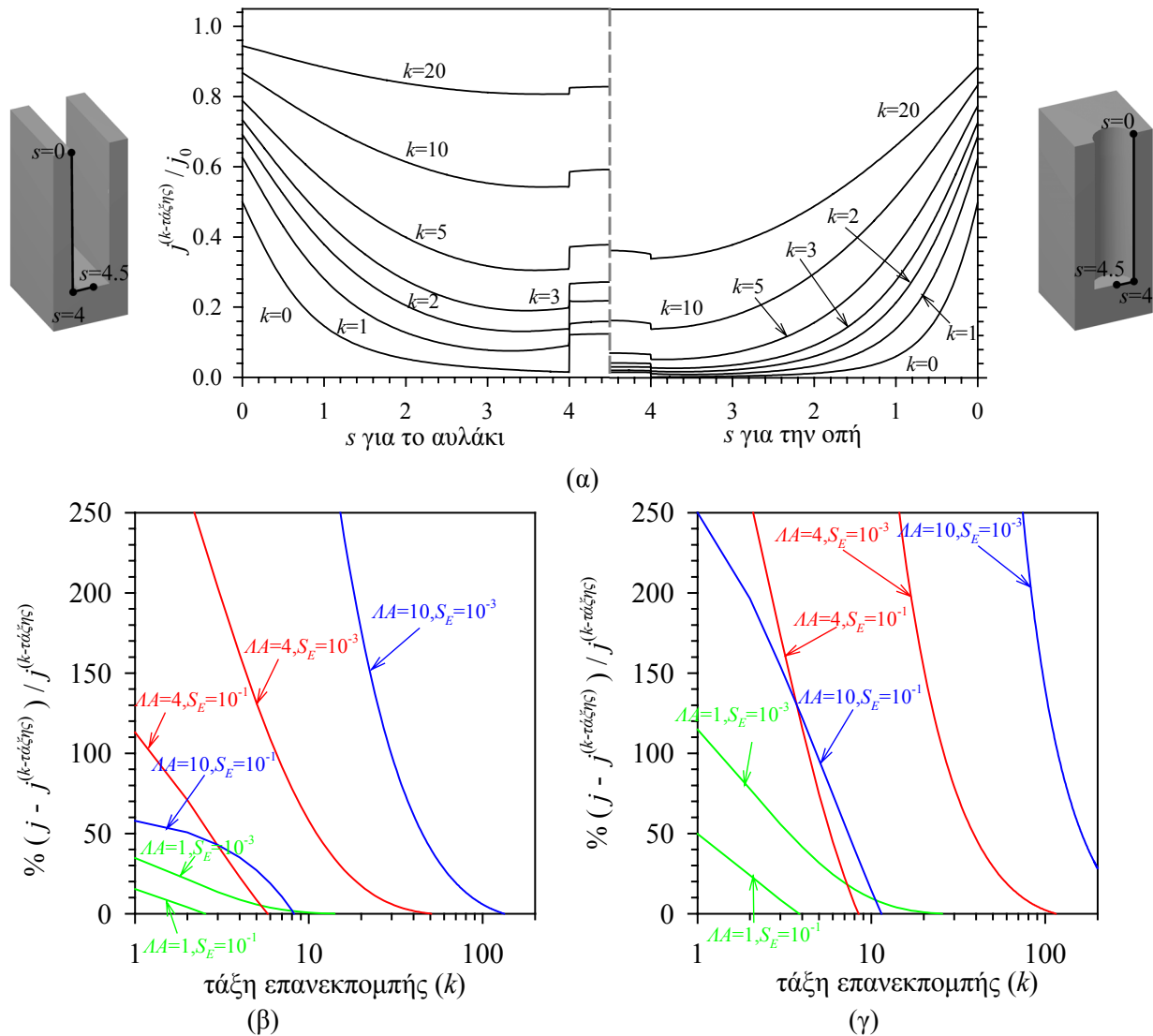
Στα Σχήματα 2.28β έως και 2.28ε φαίνεται η απόκλιση της ροής μετά από επανεκπομπή k -τάξης από τη συνολική ροή για πρότυπες δομές αυλακιού και οπής με $AA=1, 4$ και 10 και $S_E=10^{-1}$ και 10^{-3} . Τα αποτελέσματα αφορούν το μέσο της βάσης και το μέσο του πλάγιου τοιχώματος της πρότυπης δομής. Για παράδειγμα, στο Σχήμα 2.28β φαίνεται ότι η απόκλιση της ροής μετά από επανεκπομπή 3^{ης} τάξης στο μέσο της βάσης πρότυπου αυλακιού από τη συνολική ροή για $AA=4$ και $S_E=10^{-3}$ είναι 250%. Αυτό σημαίνει ότι για να υπολογιστεί η συνολική ροή θα πρέπει η ροή μετά από επανεκπομπή 3^{ης} τάξης να αυξηθεί κατά 250%. Σε κάθε ζεύγος (S_E, AA) αντιστοιχεί και μια τάξη επανεκπομπής η οποία μηδενίζει την απόκλιση από τη συνολική ροή. Η αύξηση του AA και η μείωση του S_E αυξάνει

⁹¹ Η πρακτική εξίσωση υπολογισμού της ροής στη στοιχειώδη επιφάνεια στη θέση x_i μετά από k επανεκπομπές είναι

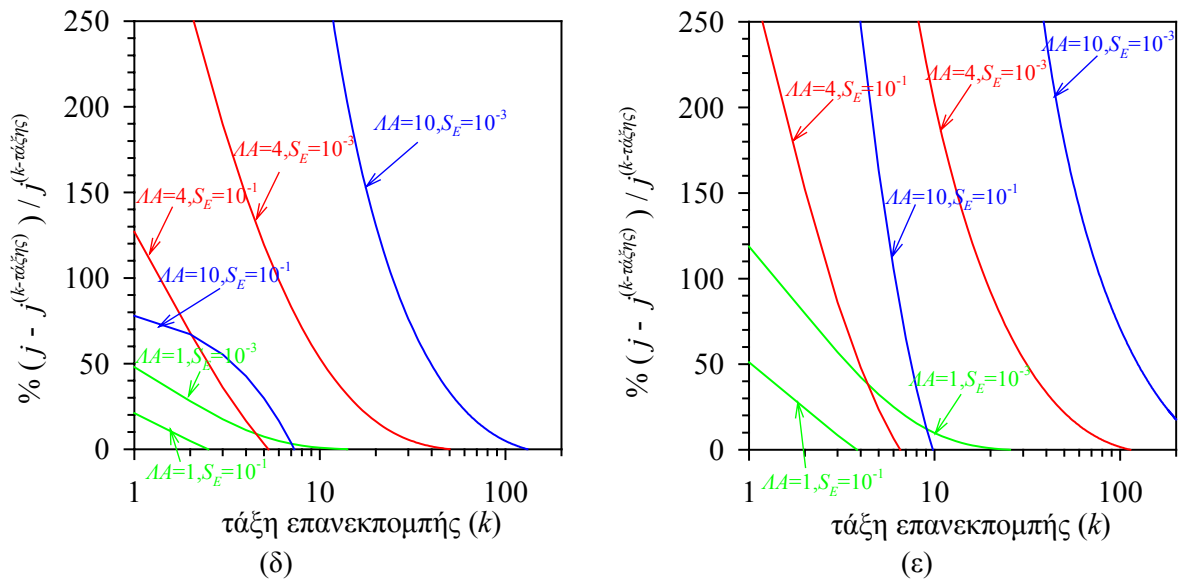
$$u_i^{(k)} = b_i - \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^N a_{ij} u_j^{(k-1)} - (a_{ii} - 1) u_i^{(k-1)},$$

όπου τα b_i, a_{ij} υπολογίζονται από τις Εξ. (2.140) και (2.141).

την τάξη της επανεκπομπής που μηδενίζει την απόκλιση. Οι Drotar et al. χρησιμοποιούν επανεκπομπή 1^{ης} τάξης προκειμένου να εξάγουν τον καθολικό εκθέτη (universality class) για την εξέλιξη της τραχύτητας εγχαρασσόμενης επιφάνειας [Drotar et al. (2000b)] συναρτήσει του χρόνου. Τα Σχήματα 2.28β - 2.28ε δείχνουν ότι θεωρώντας 1^{ης} τάξης επανεκπομπή, το σφάλμα στον υπολογισμό της ροής είναι σημαντικό. Ακόμη κι αν στην εργασία των Drotar et al. ο στόχος δεν είναι ο ακριβής υπολογισμός της ροής, ενδεχομένως αυτή η απόκλιση να επηρεάσει τα συμπεράσματα της εργασίας για την εξαγωγή του καθολικού εκθέτη.



Σχήμα 2.28 (α) Η συνολική ροή ουδέτερου συστατικού (ανηγμένη στη ροή σε ελεύθερη επιφάνεια j_0) μετά από επανεκπομπή k -τάξης, $j^{(k-\tau)}$, στο εσωτερικό πρότυπου αυλακιού και οπής βάθους $d=4$ και πλάτους $w=1$ ($AA=4$). Στα Σχήματα 2.28β - 2.28γ φαίνεται η % απόκλιση της ροής μετά από επανεκπομπή k -τάξης από τη συνολική ροή για $AA=1, 4$ και 10 και $S_E=10^{-1}$ και 10^{-3} . (β) Αποτελέσματα για το μέσο της βάσης πρότυπου αυλακιού. (γ) Αποτελέσματα για το μέσο της βάσης πρότυπης οπής. Το Σχήμα 2.28 συνεχίζεται.

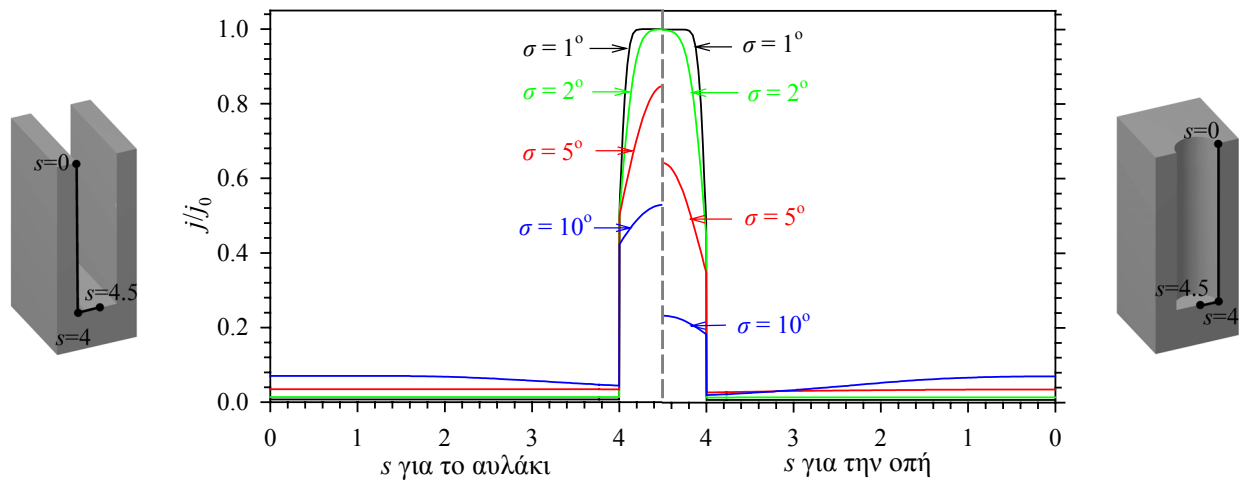


Σχήμα 2.28 (συνέχεια) Στα Σχήματα 2.28δ - 2.28ε φαίνεται η % απόκλιση της ροής μετά από επανεκπομπή k -τάξης από τη συνολική ροή για $AA=1,4$ και 10 και $S_E=10^{-1}$ και 10^{-3} . (δ) Αποτελέσματα για το μέσο του πλάγιου τοιχώματος πρότυπου αυλακιού. (ε) Αποτελέσματα για το μέσο του πλάγιου τοιχώματος πρότυπης οπής.

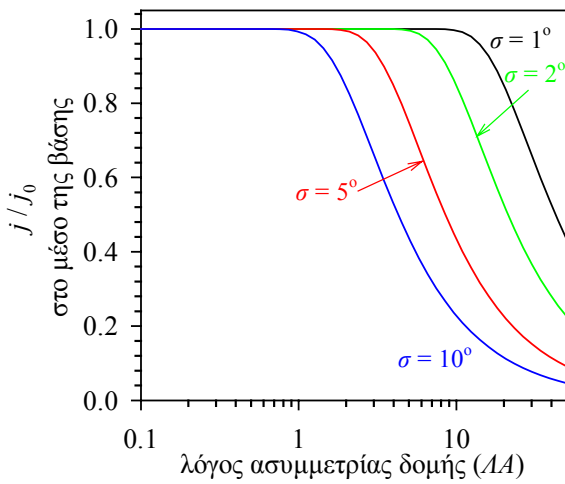
Για τον υπολογισμό τη ροής φορτισμένων σωματιδίων (ιόντων) λαμβάνεται υπόψη μόνο το φαινόμενο της σκίασης στη ροή, δηλαδή η συνολική ροή είναι ίση με την απευθείας ροή (§2.5.3). Επίσης, θεωρείται ότι η κατανομή κατευθύνσεων των ιόντων στο εξωτερικό της δομής είναι κανονική (§2.4.4.2). Στο Σχήμα 2.29α φαίνεται η ροή ιόντων σε πρότυπη δομή αυλακιού και οπής με βάθος $d=4$ και πλάτος $w=1$ ($AA=4$) για διαφορετικές τυπικές αποκλίσεις της κανονικής κατανομής ($\sigma=1^\circ, 2^\circ, 5^\circ$ και 10°).

Από το Σχήμα 2.29α φαίνεται ότι η ροή ιόντων είναι υψηλή στη βάση των δομών και πολύ μικρότερη στο πλάγιο τοίχωμα. Στα Σχήματα 2.29β – 2.29ε φαίνεται ότι η ροή είναι σταθερή μέχρι κάποιο AA , ο οποίος είναι ελαφρά μεγαλύτερος για το πρότυπο αυλάκι σε σχέση με την οπή. Επίσης, η μείωση της ροής είναι περισσότερο απότομη στην πρότυπη οπή. Το φαινόμενο της σκίασης της ροής είναι ελαφρά εντονότερο στην οπή.

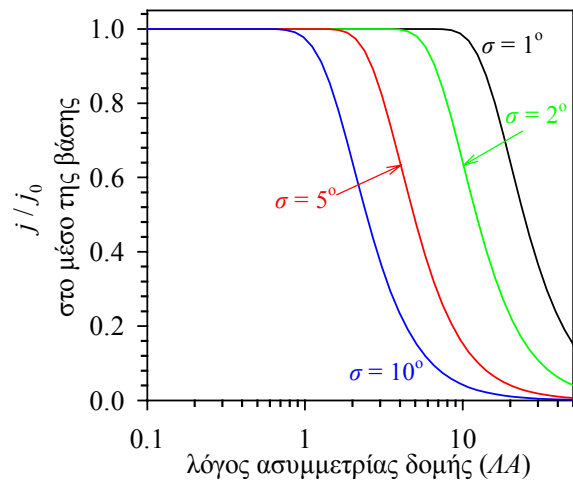
Στην πράξη η τυπική απόκλιση της κατανομής κατευθύνσεων εξαρτάται από το πάχος της οριακής στοιβάδας και το μήκος ελεύθερης διαδρομής των ιόντων (§2.4.4.2). Η πιθανή επίδραση του φαινομένου φόρτισης στις τροχιές των ιόντων προσεγγίζεται με αυξημένη τυπική απόκλιση της γωνιακής κατανομής των ιόντων που εισέρχονται στη δομή [Kokkoris et al. (2002)].



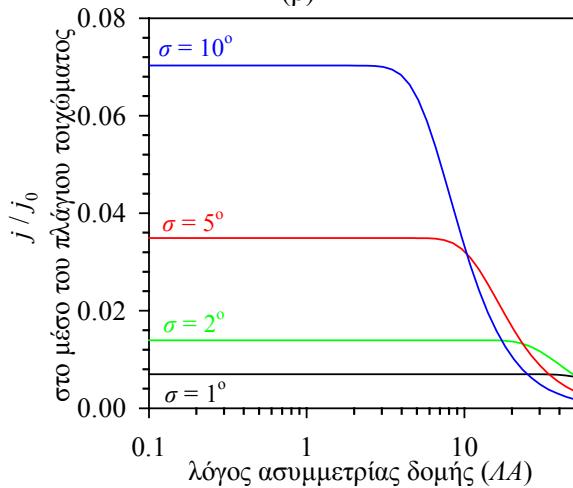
(α)



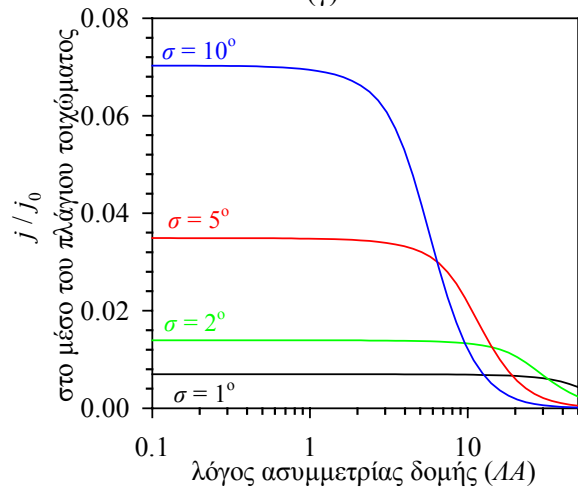
(β)



(γ)



(δ)



(ε)

Σχήμα 2.29 (α) Η ροή ιόντος (συστατικού με κανονική κατανομή κατευθύνσεων που δεν επανεκπέμπεται, $S_E=1$) σε πρότυπο αυλάκι και οπή βάθους $d=4$ και $w=1$ ($LA=4$) για διαφορετικές τυπικές αποκλίσεις της κανονικής κατανομής ($\sigma=1^\circ, 2^\circ, 5^\circ$ και 10°). Στα Σχήματα 2.29β έως και 2.29ε φαίνεται ροή ιόντος συναρτήσεως του LA για διαφορετικές τυπικές αποκλίσεις της κανονικής κατανομής ($\sigma=1^\circ, 2^\circ, 5^\circ$ και 10°). Όλες οι ροές είναι ανηγμένες στη ροή σε ελεύθερη επιφάνεια, j_0 . (β) Αποτελέσματα για το μέσο της βάσης πρότυπου αυλακιού. (γ) Αποτελέσματα για το μέσο της βάσης

πρότυπης οπής. (δ) Αποτελέσματα για το μέσο του πλάγιου τοιχώματος πρότυπου αυλακιού. (ε) Αποτελέσματα για το μέσο του πλάγιου τοιχώματος πρότυπης οπής.

Οι Arnold et al. υπολογίζουν τη ροή ιόντων στο εσωτερικό δομής πρότυπου αυλακιού [Arnold et al. (1993)] λαμβάνοντας υπόψη ανάκλαση των ιόντων (§2.5.3). Υπολογίζουν σφάλμα στη ροή των ιόντων στο μέσο της βάσης του αυλακιού, όταν αγνοείται η ανάκλασή τους, 25% μέχρι 70% για δομές με $LA < 20$ και για τυπική απόκλιση κατανομής κατευθύνσεων $\sigma < 12^\circ$. Δείχνουν επίσης ότι η διαφορά της απευθείας από τη συνολική ροή των ιόντων (απευθείας + ροή από ανάκλαση) δεν είναι το ίδιο σημαντική όσο στην περίπτωση των ουδέτερων συστατικών (Σχήματα 2.27 και 2.28). Υπολογίζουν ότι για $LA < 20$ και $\sigma < 12^\circ$, η συνολική ροή προσεγγίζεται θεωρώντας ανάκλαση (επανεκπομπή) 4^{ης} τάξης. Στην περίπτωση ουδέτερων συστατικών με $S_E = 10^{-3}$ για πρότυπο αυλάκι $LA = 10$, η συνολική ροή προσεγγίζεται θεωρώντας επανεκπομπή τάξης > 100 (Σχήμα 2.28β). Οι Arnold et al., αν και εκτελούν υπολογισμούς πολλαπλών ανακλάσεων, τελικά λαμβάνουν υπόψη στο μοντέλο υπολογισμού της ροής των ιόντων μόνο 1 ανάκλαση, θεωρώντας ότι τα ιόντα μετά την 1^η επανεκπομπή δεν έχουν αρκετή ενέργεια ώστε να προκαλέσουν εγχάραξη.

2.8 Αξιολόγηση

Η αξιολόγηση που ακολουθεί αφορά στην ανασκόπηση του μοντέλου υπολογισμού της ροής και των δυνατοτήτων του, στις διαφορές της παρούσας εργασίας από αντίστοιχες που χρησιμοποιούν την ίδια προσέγγιση υπολογισμού και στις ενδεχόμενες βελτιώσεις και επεκτάσεις του μοντέλου.

Στις προηγούμενες παραγράφους περιγράφεται ένα γενικό, συνεχές³¹ μοντέλο για τον υπολογισμό της τοπικής ροής στο εσωτερικό δομών σε συνθήκες μοριακή ροής, που λαμβάνει υπόψη τα φαινόμενα σκίασης και επανεκπομπής της ροής και έμμεσα το φαινόμενο φόρτισης. Τα απαιτούμενα για τον υπολογισμό της τοπικής ροής συστατικού στο εσωτερικό δομής είναι η τοπογραφία της δομής, η κατανομή ροής των σωματιδίων του συστατικού από τον κύριο όγκο, ο τρόπος αλληλεπίδρασης των σωματιδίων του συστατικού με τις στοιχειώδεις επιφάνειες της δομής (μηχανισμός επανεκπομπής και φαινόμενος συντελεστής προσκόλλησης).

Το μοντέλο προσαρμόστηκε σε δομές με ειδικά γεωμετρικά χαρακτηριστικά: α) σε αυλάκι το οποίο έχει σταθερή διατομή και εκτείνεται στο άπειρο κατά μία διεύθυνση και β) σε οπή με κυλινδρική συμμετρία. Για τέτοιου είδους δομές, οι υπολογισμοί γίνονται σε δύο διαστάσεις, αν και λαμβάνονται υπόψη τα φαινόμενα σκίασης και επανεκπομπής σε τρεις

³¹ Ο όρος «συνεχές» δεν αφορά στα κλασικά μοντέλα που βασίζονται στο συντελεστή διάχυσης, αλλά σε ολοκληρωτικές εξισώσεις. Οι εξισώσεις αυτές προκύπτουν από ολοκλήρωση κατανομών ταχυτήτων των σωματιδίων του συστατικού, λαμβάνοντας υπόψη ότι, στις συνθήκες υψηλού αριθμού Knudsen που ισχύουν για τη ροή στο εσωτερικό των εγχυρασόμενων δομών, δεν συμβαίνουν συγκρούσεις μεταξύ των σωματιδίων.

διαστάσεις. Το μοντέλο είναι γενικό και μπορεί να προσαρμοστεί και σε περιπτώσεις δομών που εμφανίζουν άλλου είδους συμμετρία (π.χ. τετραγωνικές οπές), αλλά και σε δομές που δεν εμφανίζουν κάποιου είδους συμμετρία ή ειδικό γεωμετρικό χαρακτηριστικό.

Για τον υπολογισμό της ροής ουδετέρων και ιόντων θεωρήθηκε ότι η κατανομή ροής είναι ισοτροπική και κανονική αντίστοιχα. Αυτό δεν είναι περιοριστικό καθώς υπάρχει η δυνατότητα να χρησιμοποιηθούν και άλλου είδους κατανομές είτε θεωρητικές, είτε πειραματικές, αντικαθιστώντας τη συνάρτηση κατανομής στις αντίστοιχες εξισώσεις. Επίσης θεωρήθηκε ότι ο μηχανισμός επανεκπομπής για τα ουδέτερα συστατικά είναι μηχανισμός «διάχυτης» επανεκπομπής, και ότι τα ιόντα δεν επανεκπέμπονται. Το μοντέλο υπολογισμού μπορεί να προσαρμοστεί και σε περιπτώσεις όπου τα σωματίδια του συστατικού εμφανίζουν άλλο είδος αλληλεπίδρασης με την επιφάνεια στην οποία προσπίπτουν.

Δύο μέθοδοι χρησιμοποιήθηκαν για την επίλυση της μη ομογενούς γραμμικής ολοκληρωτικής εξίσωσης (Fredholm 2^{ου} είδους) υπολογισμού της ροής, με τη μέθοδο Nystrom να υπερτερεί της μεθόδου ταξιθεσίας. Αντιμετωπίστηκε το αριθμητικό πρόβλημα της ιδιομορφίας του πυρήνα της ολοκληρωτικής εξίσωσης.

Ολοκληρώνοντας την ανασκόπηση, μέσω υπολογισμών σε πρότυπες δομές αυλακιού και οπής, σημειώθηκε η σημασία της ροής από επανεκπομπή στους υπολογισμούς τοπικής ροής και η σχετική σημασία των φαινομένων σκίασης και επανεκπομπής στις δομές αυλακιού και οπής.

Η παρούσα εργασία για τον υπολογισμό της ροής στο εσωτερικό δομών εκπορεύτηκε και τροφοδοτήθηκε από αυτές των Cale και Raupp [Cale & Raupp (1990)] των Singh et al. [Singh et al. (1992)] και των Abraham, Wang και Chen [Abraham & Wang (1996), Abraham & Chen (1996)]. Οι διαφορές αυτών των εργασιών με την παρούσα αφορούν τις εξισώσεις του μοντέλου, τα αποτελέσματα και την αριθμητική επίλυση.

Όσον αφορά στον υπολογισμό της απευθείας ροής, οι σχέσεις υπολογισμού της στερεάς γωνίας που περιγράφονται και αποδεικνύονται στην εργασία (§2.4.2 και §2.4.3), γενικά είναι διαθέσιμες στη βιβλιογραφία σε διάφορες εργασίες [Singh et al. (1992), Abraham & Wang (1996), Abraham & Chen (1996)], εκτός από τις εξισώσεις υπολογισμού της στερεάς γωνίας σε οπή με κυλινδρική συμμετρία όταν τα όρια σκίασης δεν ανήκουν στο ίδιο επίπεδο [Εξ. (2.42) – (2.53)]. Όσον αφορά τη ροή από επανεκπομπή, εξισώσεις υπολογισμού της συνολικής ροής ουδέτερου συστατικού (απευθείας ροή και ροή από επανεκπομπή) για αυλάκια και οπές κυλινδρικής συμμετρίας επίσης υπάρχουν στη βιβλιογραφία [Singh et al. (1992)], χωρίς όμως να υπάρχει και η απόδειξή τους. Η ολοκληρωτική εξίσωση υπολογισμού της ροής σε οπή με κυλινδρική συμμετρία [Εξ. (2.113) – (2.119)] είναι διαφορετική από αυτή που προτείνουν οι Singh et al. [Singh et al. (1992)]. Πέρα από τις διαφορές στις εξισώσεις υπολογισμού, σημαντική στο Κεφ. 2 είναι η συγκέντρωση των απαραίτητων, για τον υπολογισμό της ροής με συνεχές μοντέλο σε αυλάκι και οπή με κυλινδρική συμμετρία, εξισώσεων μαζί με τις αποδείξεις τους.

Τα αποτελέσματα στα σχήματα που δείχνουν τη συνολική ροή ουδέτερου συστατικού κατά μήκος διατομής πρότυπου αυλακιού, όπως προκύπτουν από συνεχές μοντέλο

υπολογισμού της ροής, έχουν παρουσιαστεί σε λιγότερες εργασίες [Tuda et al. (1997), Levinson et al. (1997)] σε σχέση με αυτές που χρησιμοποιούν την ολοκληρωτική εξίσωση για τον υπολογισμό της ροής. Αντίστοιχα αποτελέσματα για πρότυπη οπή δεν έχουν παρουσιαστεί στη βιβλιογραφία και ως εκ τούτου ούτε συγκριτικά αποτελέσματα για τους δύο τύπους δομών. Τέλος, δεν υπάρχει αναφορά σε κάποια από τις σχετικές εργασίες υπολογισμού της ροής στο εσωτερικό δομών για τη μέθοδο διακριτοποίησης της ολοκληρωτικής εξίσωσης ούτε για την ιδιομορφία του πυρήνα της ολοκληρωτικής εξίσωσης και τον τρόπο αντιμετώπισης αυτής της ιδιομορφίας (§2.6.5.2).

Το μοντέλο υπολογισμού της ροής είναι δυνατό να βελτιωθεί στο επίπεδο της μεθόδου επίλυσης και να επεκταθεί στο επίπεδο των εφαρμογών. Η μέθοδος Nystrom είναι μια εύστοχη επιλογή για την επίλυση της ολοκληρωτικής εξίσωσης, στην οποία βασίζεται ο υπολογισμός της ροής. Ωστόσο, ο πίνακας που προκύπτει από τη διακριτοποίηση είναι πυκνός και αυτό μπορεί να οδηγήσει σε υψηλό υπολογιστικό κόστος σε μνήμη ή/και χρόνο. Η τεχνολογία στα, συγγενή με τον υπολογισμό ροής στο εσωτερικό δομών, πεδία της φωτοσκίασης αντικειμένων στα γραφικά υπολογιστών ή μεταφοράς θερμότητας με ακτινοβολία μπορεί να αποδειχθεί χρήσιμη. Μια ενδιαφέρουσα μελλοντική εργασία θα ήταν η στην πράξη σύγκριση των αποτελεσμάτων και της ταχύτητας επίλυσης του προτεινόμενου συνεχούς μοντέλου με στοχαστικό μοντέλο Monte Carlo [Mahorowala (1998), Hoekstra et al. (1998)]. Επίσης, εξαιρετικά ενδιαφέρουσα και χρήσιμη θα ήταν η λεπτομερής μελέτη του προβλήματος υπολογισμού της ροής σε περιπτώσεις όπου η συνάρτηση ορατότητας *vis* (§2.5.4) δεν είναι ίση με το 1. Σε αυτές τις περιπτώσεις, ο πυρήνας της ολοκληρωτικής εξίσωσης αναμένεται να είναι ακόμη «δυσκολότερος», αφού θα εμφανίζει πρόσθετες ασυνέχειες. Οι προτεραιότητες, όσον αφορά τις επεκτάσεις του μοντέλου, αφορούν στην προσαρμογή του μοντέλου στον υπολογισμό τοπικής ροής σε τυχαίες δομές (δομές χωρίς ειδικό γεωμετρικό χαρακτηριστικό που επιτρέπει την απλοποίηση των υπολογισμών σε δύο διαστάσεις) και την ενσωμάτωση του μηχανισμού ανάκλασης για τον ακριβέστερο υπολογισμό της ροής των ιόντων.

Ολοκληρώνοντας, στην αριθμητική επίλυση του προβλήματος υπολογισμού της τοπικής ροής στο εσωτερικό δομών καθώς και στα αποτελέσματα που παρουσιάστηκαν στην §2.6, ο φαινόμενος συντελεστής προσκόλλησης συστατικού θεωρήθηκε σταθερός και ίδιος σε όλες τις στοιχειώδεις επιφάνειες στο εσωτερικό της δομής. Στην πράξη εξαρτάται από την κατάσταση της επιφάνειας, όπως αυτή διαμορφώνεται από το είδος και τη ροή κάθε συστατικού που φτάνει σε αυτή. Συνεπώς, ο φαινόμενος συντελεστής προσκόλλησης μεταβάλλεται από σημείο σε σημείο στο εσωτερικό μιας δομής. Στο Κεφ. 3 περιέχεται μοντέλο υπολογισμού των φαινόμενων συντελεστών προσκόλλησης των συστατικών (ατόμων F, ριζών CF_x σε επιφάνειες SiO_2 και Si). Η εξάρτηση του φαινόμενου συντελεστή προσκόλλησης από τις ροές των συστατικών που φτάνουν στην επιφάνεια καθιστά την ολοκληρωτική εξίσωση υπολογισμού της τοπικής ροής στο εσωτερικό δομών μη γραμμική. Ο αλγόριθμος επίλυσης και αποτελέσματα υπολογισμών σε αυτή την περίπτωση περιλαμβάνονται στο Κεφ. 4.

Κεφάλαιο 3

Μοντέλο εγχάραξης επιφανειών SiO_2 και Si σε πλάσμα φθοριωμένων υδρογονανθράκων

Περιγράφεται φαινομενολογικό μοντέλο εγχάραξης επιφανειών SiO_2 και Si σε πλάσμα φθοριωμένων υδρογονανθράκων. Το μοντέλο βασίζεται σε ισοζύγια θέσεων ρόφησης στην επιφάνεια και υπολογίζει το ρυθμό εγχάραξης και τους φαινόμενους συντελεστές προσκόλλησης των συστατικών στην επιφάνεια.

3.1 Εισαγωγή

Το Si και το SiO₂ αποτελούν βασικά δομικά υλικά για την κατασκευή διατάξεων μικροηλεκτρονικής και μικρο-ηλεκτρο-μηχανικών συστημάτων (§1.1). Η ξηρή εγχάραξη Si γενικά γίνεται με χημεία F, Cl ή Br, και η εγχάραξη SiO₂ με χημεία φθοριωμένων υδρογονανθράκων και F [Lieberman & Lichtenberg (1994), σ. 5]. Το Si εγχαρασσεται και με χημεία φθοριωμένων υδρογονανθράκων σε περιπτώσεις που απαιτείται ανισοτροπική εγχάραξη [Manos & Flamm (1989), σ. 149-152].⁹¹ Επίσης, η χημεία φθοριωμένων υδρογονανθράκων χρησιμοποιείται για την επιλεκτική εγχάραξη SiO₂ ως προς Si [Oehrlein et al. (1994b), Rueger et al. (1999)], που είναι σημαντική σε διεργασίες, όπως η εγχάραξη οπών επαφής (contact hole etching) μεταξύ διαφορετικών στρωμάτων κατά την κατασκευή ολοκληρωμένου κυκλώματος.

Η εγχάραξη SiO₂ και Si σε πλάσμα φθοριωμένων υδρογονανθράκων εξελίσσεται διαμέσου ενός λεπτού φιλμ πολυμερούς [Oehrlein et al. (1994), Rueger et al. (1997), Standaert et al. (1998), Rolland et al. (2000)]. Η εγχάραξη και η απόθεση πολυμερούς διεξάγονται ταυτόχρονα. Στο παρόν κεφάλαιο περιγράφεται ένα φαινομενολογικό μοντέλο επιφανειακών διεργασιών κατά την εγχάραξη SiO₂ και Si σε πλάσμα φθοριωμένων υδρογονανθράκων που λαμβάνει υπόψη τα ανταγωνιστικά φαινόμενα εγχάραξης και απόθεσης. Το μοντέλο αποτελεί το (B) συστατικό του πλαισίου προσομοίωσης εξέλιξης τοπογραφίας δομών (§1.6). Χρησιμοποιείται στον υπολογισμό της τοπικής ταχύτητας εγχάραξης μέσω του υπολογισμού του ρυθμού εγχάραξης και των φαινομένων συντελεστών προσκόλλησης των ουδέτερων συστατικών (Κεφ. 4).

Στη συνέχεια, αφού αναφερθούν οι βασικοί μηχανισμοί εγχάραξης – απόθεσης (§3.2), περιγράφεται το μοντέλο εγχάραξης SiO₂ και Si (§3.3) και σχολιάζονται ζητήματα που το αφορούν (§3.4). Έπειτα παρουσιάζονται αποτελέσματα του μοντέλου και συγκρίνονται με πειραματικά (§3.5). Ακολουθεί ανάλυση ευαισθησίας του μοντέλου στην πιθανότητα σφάλματος κατά την εκτίμηση των συντελεστών του (§3.6). Το κεφάλαιο ολοκληρώνεται με την αξιολόγηση του μοντέλου (§3.7).

3.2 Οι βασικές διεργασίες στην εγχαρασσόμενη επιφάνεια

Οι βασικές επιφανειακές διεργασίες και το μοντέλο που περιγράφονται στη συνέχεια αφορούν την εγχάραξη υποστρωμάτων SiO₂ και Si σε πλάσμα φθοριωμένων υδρογονανθράκων (fluorocarbon plasmas). Τα αέρια που συνήθως χρησιμοποιούνται είναι τα CF₄, CHF₃, C₂F₆, C₂F₄, C₃F₆, C₃F₈, *c*-C₄F₈. Στον κύριο όγκο του αντιδραστήρα πλάσματος παράγεται πληθώρα ουδετέρων συστατικών και ιόντων. Οι ουδέτερες ρίζες CF_x (x=1,2,3), τα

⁹¹ Σε αυτή την περίπτωση, ο C των συστατικών στον κύριο όγκο του πλάσματος συμβάλλει στη δημιουργία πολυμερούς στο πλάγιο τοίχωμα των εγχαρασσόμενων δομών προστατεύοντάς το από την εγχάραξη. Πολυμερές σχηματίζεται σε όλη την επιφάνεια εγχάραξης, ωστόσο στη βάση της δομής λόγω του βομβαρδισμού από ιόντα το πολυμερές καταστρέφεται.

άτομα F και τα ιόντα CF_x^+ ($x=1,2,3$) είναι τα συστατικά που υπάρχουν σε κάθε πλάσμα φθοριωμένων υδρογονανθράκων και στις περισσότερες περιπτώσεις αποτελούν και την πλειοψηφία μεταξύ των ουδέτερων και φορτισμένων συστατικών. Αυτά τα συστατικά χρησιμοποιούνται για την περιγραφή των μηχανισμών και την ανάπτυξη του μοντέλου, αφού θεωρείται ότι μπορούν να περιγράψουν ικανοποιητικά το περιβάλλον πλάσματος φθοριωμένων υδρογονανθράκων.

Τα ιόντα (CF_x^+) και τα ουδέτερα συστατικά (CF_x , F) καταλήγουν³¹ στην προς εγχάραξη επιφάνεια προκαλώντας σε αυτή αυτόνομα ή συνεργιστικά φυσικές και χημικές διεργασίες. Οι βασικές επιφανειακές διεργασίες είναι [Vauvert (1996), Gogolides et al. (2000)]:

A) Προσρόφηση ουδέτερων συστατικών (ριζών CF_x , ατόμων F).

B) Θερμική ή χημική εγχάραξη (thermal ή chemical etching) επιφάνειας SiO_2 ή Si από άτομα F. Η σταθερά δράσης θερμικής εγχάραξης είναι τύπου Arrhenius και ο ρυθμός εγχάραξης είναι ανάλογος της ροής ατόμων F στην επιφάνεια [Manos & Flamm (1989), σ. 118].

Γ) Ιονοβολή [Γογγολίδης (1992)] ή μηχανική εγχάραξη επιφάνειας Si, SiO_2 από τα προσπίπτοντα ιόντα (physical sputtering). Ο ρυθμός ιονοβολής είναι συνάρτηση της ενέργειας και της ροής των ιόντων και συμβαίνει όταν τα ιόντα φέρουν ενέργεια υψηλότερη από ένα κατώφλι ενέργειας [Steinbruchel (1989)].

Δ) Άμεση απόθεση ιόντων χαμηλής ενέργειας [direct ion deposition, Oehrlein et al. (1994)]. Τα ιόντα είναι δυνατό, όταν φέρουν χαμηλή ενέργεια (κάτω από το κατώφλι για τη μηχανική εγχάραξη), να αποθεθούν στην επιφάνεια αντί να προκαλέσουν μηχανική εγχάραξη της

E) Μηχανική απομάκρυνση προσροφημένων στην επιφάνεια ριζών CF_x από προσπίπτοντα ιόντα [carbon removal, Gogolides et al. (2000)]. Η απόδοση μηχανικής απομάκρυνσης ριζών CF_x είναι συνάρτηση της ενέργειας των ιόντων και συμβαίνει όταν τα ιόντα φέρουν ενέργεια υψηλότερη από ένα κατώφλι ενέργειας.

ΣΤ) Απόθεση υποβοηθούμενη από ιόντα [ion-enhanced deposition, “stiching”, Mantzaris et al. (1996)]. Ρίζες CF_x είναι δυνατό υπό τον βομβαρδισμό ιόντων χαμηλής ενέργειας (κάτω από το κατώφλι μηχανικής απομάκρυνσης των ριζών CF_x από ιόντα) να οδηγήσουν στο σχηματισμό πολυμερικού προϊόντος στην επιφάνεια.

Z) Εγχάραξη υποβοηθούμενη από ιόντα [ion enhanced etching, Manos & Flamm (1989), σ. 118]. Τα ιόντα καθώς προσπίπτουν στην επιφάνεια προκαλούν ανάμιξη των προσροφημένων

³¹ Λόγω του ηλεκτρικού πεδίου που αναπτύσσεται στην οριακή στοιβάδα, τα ιόντα φτάνουν στην εγχαρασόμενη επιφάνεια με υψηλή ενέργεια που μπορεί να είναι από μερικές δεκάδες μέχρι μερικές εκατοντάδες eV. Τα ουδέτερα συστατικά φτάνουν με ενέργεια ανάλογη της θερμοκρασίας τους (~0.03 eV).

συστατικών και διάρρηξη δεσμών. Με αυτό τον τρόπο τα ιόντα μπορούν να επιταχύνουν χημικές δράσεις στην επιφάνεια αλλά και να προκαλέσουν την εκρόφιση μη κορεσμένων προϊόντων. Ο ρυθμός υποβοηθούμενης από ιόντα εγχάραξης είναι συνάρτηση της ενέργειας και της ροής ιόντων και συμβαίνει όταν τα ιόντα φέρουν ενέργεια υψηλότερη από ένα κατώφλι ενέργειας.

H) Επανασύνδεση προσροφημένων ριζών CF_x με άτομα F [Gogolides et al. (2000)].

3.3 Μοντέλο εγχάραξης Si, SiO₂ σε πλάσμα φθοριωμένων υδρογονανθράκων

Η προσέγγιση που χρησιμοποιείται στην ανάπτυξη του μοντέλου είναι συνήθης στη βιβλιογραφία [Zawaideh & Kim (1988), Gray et al. (1993), Ding & Hershkowitz (1996), Lukichev & Yunkin (1998), Economidou (2000)] και βασίζεται στο κλάσμα κάλυψης της επιφάνειας: κάθε συστατικό i προσροφάται στην επιφάνεια και απομακρύνεται από αυτή με φυσικούς και χημικούς μηχανισμούς με αποτέλεσμα να καλύπτει ένα κλάσμα της. Το μοντέλο περιλαμβάνει ισοζύγια θέσεων ρόφησης (site balances) στην εγχαρασόμενη επιφάνεια που καταλαμβάνονται από τα άτομα F, τις ουδέτερες ρίζες CF_x , καθώς και από το πολυμερικό προϊόν που σχηματίζεται πάνω στην επιφάνεια. Σε κάθε ένα από τα συστατικά (F, CF_x , P) αποδίδεται κλάσμα κάλυψης επιφάνειας, θ . Στην επιφάνεια του πολυμερικού προϊόντος θεωρείται ότι υπάρχουν θέσεις ρόφησης τόσο για άτομα F όσο και για ουδέτερες ρίζες CF_x . Στο Σχήμα 3.1 και στον συνοδευτικό του Πίνακα 3.1 περιγράφεται σχηματικά η κατάσταση στοιχειώδους επιφάνειας, η οποία βομβαρδίζεται από άτομα F, ουδέτερες ρίζες CF_x και ιόντα CF_x^+ .

Στο μοντέλο θεωρείται μονοστρωματική ρόφηση τύπου Langmuir [Atkins (1999), σ. 858]. Η κινητική του μοντέλου είναι τύπου Eley – Rideal [Atkins (1999), σ. 867, McCash (2001), σ. 139-140]. Σε μια επιφάνεια όπως η εγχαρασόμενη, η οποία είναι άμορφη λόγω του βομβαρδισμού της από ιόντα [Barone & Graves (1995)], οι θέσεις ρόφησης και τα κλάσματα κάλυψης δεν έχουν την ίδια σημασία με αυτή σε μια επίπεδη επιφάνεια. Επίσης, από μετρήσεις του πάχους του πολυμερικού προϊόντος στην επιφάνεια [<1.5 nm για το SiO₂ και ~ 7 nm για το Si, Schaepkens et al. (1999)], δεν υπάρχει ένα μόνο στρώμα προσρόφησης. *Η σκοπιμότητα της θεώρησης των κλασμάτων κάλυψης και των ισοζυγίων θέσεων ρόφησης είναι η απλή φαινομενολογική προσέγγιση της πολύπλοκης διεργασίας της εγχάραξης. Το κλάσμα κάλυψης συστατικού μπορεί να θεωρηθεί σαν το κλάσμα του συστατικού σε αυτό το άμορφο στρώμα πάνω στην επιφάνεια.*







Παρά το φαινομενολογικό χαρακτήρα του μοντέλου υπάρχουν θέματα που κρίνεται σκόπιμο να διευκρινιστούν. Καταρχήν, οι θέσεις ρόφησης σε καθαρή επιφάνεια μπορεί να αφορούν είτε το Si είτε το O (όταν υπόστρωμα είναι το SiO₂). Δεν υπάρχει διαχωρισμός στις θέσεις ρόφησης. Επίσης, η διαφορά των προσροφημένων ριζών CF_x από το πολυμερικό προϊόν P είναι ότι οι ρίζες CF_x έχουν δεσμό με την επιφάνεια SiO₂ (ή Si), ενώ στο

πολυμερικό προϊόν θεωρούνται ότι έχουν δεσμό μόνο με άλλες ρίζες CF_x . Η διαφορά είναι αντίστοιχη με αυτή στην εργασία του Economidou μεταξύ του μονομερούς – όπως το ονομάζει – CF και του πολυμερικού προϊόντος [Economidou (2000)]. Επίσης, οι θέσεις ρόφησης στην επιφάνεια του πολυμερικού προϊόντος είναι αιωρούμενοι δεσμοί πάνω στο δίκτυο του πολυμερικού προϊόντος αποτέλεσμα της πρόσπτωσης ιόντων πάνω σε αυτό [ο.π].



Σχήμα 3.1 Κατάσταση στοιχειώδους εγχαρασσόμενης επιφάνειας σύμφωνα με τη θεώρηση του μοντέλου. Η λευκή περιοχή αντιστοιχεί σε κλάσμα καθαρής επιφάνειας SiO_2 (ή Si), η μαύρη στο κλάσμα που καλύπτεται από πολυμερές, η έντονα γκρι σε κλάσμα που καλύπτεται από CF_x και η γκρι σε κλάσμα που καλύπτεται από F. Οι διεργασίες που συμβαίνουν σε κάθε κλάσμα επιφάνειας περιγράφονται στον Πίνακα 3.1.

Πίνακας 3.1 Οι συμβολισμοί των χρωματισμών του Σχήματος 3.1 (όπου περιγράφεται η κατάσταση στοιχειώδους επιφάνειας) και οι αντίστοιχες διεργασίες.

σύμβολο	επιφάνεια (κλάσμα κάλυψης)	διεργασίες
	καθαρή επιφάνεια SiO_2 ή Si ($1 - \theta_F - \theta_{CF_x} - \theta_P$)	προσρόφηση F, CF_x , άμεση απόθεση CF_x^+ μηχανική εγχάραξη, θερμική εγχάραξη
	πολυμερές (θ_P)	προσρόφηση F, CF_x , άμεση απόθεση CF_x^+
	ουδέτερες ρίζες CF_x σε επιφάνεια SiO_2 ή Si (θ_{CF_x})	άμεση απόθεση CF_x^+ , μηχανική απομάκρυνση προσροφημένων ριζών CF_x , YAI^* απόθεση, YAI^* εγχάραξη (μόνο στο SiO_2), επανασύνδεση με άτομα F από την αέρια φάση
	άτομα F σε επιφάνεια SiO_2 ή Si (θ_F)	άμεση απόθεση CF_x^+ , YAI^* εγχάραξη, θερμική εγχάραξη
	ουδέτερες ρίζες CF_x σε επιφάνεια πολυμερούς ($\theta_{CF_x/P}$)	άμεση απόθεση CF_x^+ , μηχανική απομάκρυνση προσροφημένων ριζών CF_x , YAI^* απόθεση
	άτομα F σε επιφάνεια πολυμερούς ($\theta_{F/P}$)	άμεση απόθεση CF_x^+ , YAI^* εγχάραξη του πολυμερούς

*Υποβοηθούμενη Από Ιόντα

Οι εξισώσεις του μοντέλου στην περίπτωση εγχάραξης επιφανειών SiO₂ και Si είναι αντίστοιχες. Η μόνη διαφορά προκύπτει από το ότι οι ουδέτερες ρίζες CF_x δεν προκαλούν εγχάραξη στο Si. Οι εξισώσεις που ακολουθούν [Εξ. (3.1) – (3.5)] εκφράζουν ισοζύγια θέσεων ρόφησης για τα άτομα F στην επιφάνεια SiO₂ ή Si (δείκτης F), για τις ουδέτερες ρίζες CF_x στην επιφάνεια SiO₂ ή Si (δείκτης CF_x), για το πολυμερές στην επιφάνεια SiO₂ ή Si (δείκτης P), για τα άτομα F πάνω στο πολυμερές (δείκτης F/P) και για τις ουδέτερες ρίζες CF_x στο πολυμερές (δείκτης CF_x/P):

$$\sigma_0 \frac{d\theta_F}{dt} = s_F(1-\theta_{TOT})j_F - 2\beta_F\theta_F j_{ION} - 2k_0 e^{\frac{-E_a}{kT}} \theta_F j_F, \quad (3.1)$$

$$\sigma_0 \frac{d\theta_{CFx}}{dt} = \sum_x s_{CFx}(1-\theta_{TOT})j_{CFx} - \beta_{CFx}\theta_{CFx}j_{ION} - |y_C|\theta_{CFx}j_{ION} - |\beta_S|\theta_{CFx}j_{ION} - K_{REC}\theta_{CFx}j_F, \quad (3.2)$$

$$\sigma_0 \frac{d\theta_P}{dt} = \sum_i x_i |y_{D,i}|j_{ION} + |\beta_S|\theta_{CFx}j_{ION} + |\beta_S|\theta_P\theta_{CFx/P}j_{ION} - \beta_{F/P}\theta_{F/P}j_{ION}, \quad (3.3)$$

$$\sigma_P \frac{d\theta_{F/P}}{dt} = s_{F/P}(1-\theta_{TOT/P})j_F - 2\beta_{F/P}\theta_{F/P}j_{ION}, \quad (3.4)$$

$$\sigma_P \frac{d\theta_{CFx/P}}{dt} = \sum_x s_{CFx/P}(1-\theta_{TOT/P})j_{CFx} - |y_C|\theta_{CFx/P}j_{ION} - |\beta_S|\theta_{CFx/P}j_{ION} - K_{REC}\theta_{CFx/P}j_F, \quad (3.5)$$

όπου $\theta_{TOT} = \theta_F + \theta_{CFx} + \theta_P$, $\theta_{TOT/P} = \theta_{F/P} + \theta_{CFx/P}$, j είναι η ροή, $x=1$ ή 2 ή 3 , x_i είναι το κλάσμα του ιόντος i , και $i = CF^+$ ή CF_2^+ ή CF_3^+ . σ_0 και σ_P είναι η επιφανειακή πυκνότητα των θέσεων ρόφησης σε ένα στρώμα ρόφησης στο SiO₂ ή Si και στο πολυμερές αντίστοιχα.³¹

Το δίκτυο των αντιδράσεων που οδηγούν στο παραπάνω σύστημα εξισώσεων, ο κάθε όρος του μοντέλου, καθώς και ο τρόπος υπολογισμού των συντελεστών του μοντέλου περιγράφονται αναλυτικά από τον Vauvert [Vauvert (1996)], και τους Gogolides et al. [Gogolides et al. (2000)]. Οι συντελεστές του μοντέλου χωριστά για κάθε έναν από τους μηχανισμούς εγχάραξης προκύπτουν με προσαρμογές σε διαθέσιμα πειραματικά δεδομένα εγχάραξης υποστρωμάτων με καλά χαρακτηρισμένες δέσμες συστατικών [beam experiments, Tu et al. (1981), Tachi et al. (1982), Gray et al. (1991), Shibano et al. (1993)]. Οι τιμές των συντελεστών και μια σύντομη περιγραφή υπάρχουν στους Πίνακες 3.II και 3.III. Οι

³¹ Θεωρείται ότι κάθε συστατικό (F, CF_x, P) ανταγωνίζεται για την ίδιες θέσεις ρόφησης στην επιφάνεια SiO₂. Το ίδιο ισχύει και στην επιφάνεια του πολυμερούς.

συντελεστές του μοντέλου που δεν εξαρτώνται από την ενέργεια των ιόντων φαίνονται στον Πίνακα 3.Π. Οι συντελεστές που εξαρτώνται από την ενέργεια έχουν την ακόλουθη μορφή

$$y \text{ ή } \beta = \left\{ \begin{array}{ll} A(\sqrt{E} - \sqrt{E_{TH}}), & E \geq E_{TH} \\ A_{d2}(\sqrt{E} - \sqrt{E_{TH}}), & E_{MD} \leq E \leq E_{TH} \\ -A_{d1}\sqrt{E}, & E \leq E_{MD} \end{array} \right\}, \quad (3.6)$$

όπου E είναι η ενέργεια των ιόντων, E_{TH} είναι το κατώφλι που πρέπει να ξεπεράσει η ενέργεια των ιόντων για να προκαλέσει την αντίστοιχη δράση, E_{MD} είναι η ενέργεια που αντιστοιχεί στη ελάχιστη αρνητική τιμή του συντελεστή y ή β , η οποία θεωρείται ίση με $E_{TH}/2$ [Gogolides et al. (2000)]. Οι παράμετροι για τους συντελεστές που εξαρτώνται από την ενέργεια των ιόντων φαίνονται στον Πίνακα 3.ΙΙΙ.³¹

Εγχάραξη και απόθεση συμβαίνουν ταυτόχρονα στην εγχαρασόμενη επιφάνεια. Το κλάσμα κάλυψης της επιφάνειας από πολυμερές, θ_P , εκφράζει τον ανταγωνισμό εγχάραξης – απόθεσης στην επιφάνεια και δείχνει ποιο φαινόμενο κυριαρχεί: όταν $\theta_P < 1$ συμβαίνει εγχάραξη, όταν $\theta_P \geq 1$ συμβαίνει απόθεση. Όταν $\theta_P < 1$, η εγχάραξη στην επιφάνεια SiO_2 ή Si είναι το άθροισμα α) της ιονβολής, β) της υποβοηθούμενης από ιόντα εγχάραξης σε κλάσμα της επιφάνειας που καλύπτεται από άτομα F και ουδέτερες ρίζες CF_x (μόνο για το SiO_2) και γ) καθαρά χημική ή θερμική εγχάραξη. Η απόδοση εγχάραξης (άτομα Si που απομακρύνονται / προσπίπτον ιόν) είναι

$$EY = \sum_i x_i y_{PS,i} (1 - \theta_{TOT}) + \beta_{CF_x} \theta_{CF_x} + \beta_F \theta_F + k_0 \left(\frac{j_F}{j_{ION}} \right) e^{\frac{-E_a}{kT}} \theta_F. \quad (3.7)$$

Όταν $\theta_P \geq 1$, η απόθεση πολυμερούς στην επιφάνεια SiO_2 ή Si είναι το καθαρό αποτέλεσμα α) άμεσης απόθεσης ιόντων χαμηλής ενέργειας, β) απόθεσης υποβοηθούμενης από ιόντα και γ) υποβοηθούμενης από ιόντα εγχάραξης του πολυμερούς. Η απόδοση απόθεσης (μόρια που αποτίθενται / προσπίπτον ιόν) είναι

³¹ Για τον προσδιορισμό των συντελεστών των μοντέλων εγχάραξης επιφάνειας (π.χ. αποδόσεις, συντελεστές προσκόλλησης), γενικά χρησιμοποιούνται τρεις τρόποι [Graves & Kushner (2003)], οι δύο από τους οποίους απαιτούν την ενσωμάτωση του μοντέλου εγχάραξης σε πλαίσιο προσομοίωσης εξέλιξης τοπογραφίας. Ο πρώτος τρόπος αφορά στην προσαρμογή των συντελεστών στο σχήμα εγχαρασόμενων πρότυπων δομών (test structures), δηλαδή δομών που χρησιμοποιούνται ακριβώς για να αναδείξουν κάποιο φαινόμενο ή μηχανισμό εγχάραξης. Ο δεύτερος τρόπος είναι αντίστοιχος με τον πρώτο, με τη διαφορά ότι η προσαρμογή των συντελεστών γίνεται σε συμβατικές δομές (conventional structures). Με τον τρίτο τρόπο, ο οποίος χρησιμοποιείται στην εργασία και δεν απαιτεί την ενσωμάτωση του μοντέλου εγχάραξης σε πλαίσιο προσομοίωσης εξέλιξης τοπογραφίας, οι συντελεστές προκύπτουν με προσαρμογές σε διαθέσιμα πειραματικά δεδομένα εγχάραξης υποστρωμάτων με καλά χαρακτηρισμένες δέσμες συστατικών (beam experiments).

$$DY = \sum_i x_i |y_{D,i}| + |\beta_S| \theta_{CF_x/P} - \beta_{F/P} \theta_{F/P} \cdot \text{ῥ1} \quad (3.8)$$

Ο ρυθμός εγχάραξης προκύπτει αν πολλαπλασιαστεί η απόδοση εγχάραξης (άτομα Si/προσπίπτον ιόν) με τη ροή των ιόντων

$$ER = EY_{ION} \cdot \quad (3.9)$$

Η ταχύτητα εγχάραξης προκύπτει αν ο ρυθμός εγχάραξης διαιρεθεί με την πυκνότητα του SiO₂ ή Si.

Εκτός από την απόδοση, το ρυθμό και την ταχύτητα εγχάραξης, το μοντέλο υπολογίζει και τους φαινόμενους συντελεστές προσκόλλησης των ουδέτερων συστατικών. Ο φαινόμενος συντελεστής προσκόλλησης συστατικού σε επιφάνεια, S_E , εκφράζει το κλάσμα της ροής του συστατικού που καθαρά καταναλώνεται ($S_E > 0$) ή παράγεται ($S_E < 0$) στην επιφάνεια, υπό τις δεδομένες συνθήκες βομβαρδισμού της από ιόντα και ουδέτερα συστατικά. Υπολογίζεται με βάση το ισοζύγιο μάζας του συστατικού σε ένα λεπτό στρώμα πάνω από την επιφάνεια. Οι φαινόμενοι συντελεστές προσκόλλησης για τα άτομα F και τις ουδέτερες ρίζες CF_x υπολογίζονται από τις εξισώσεις [Kokkoris et al. (2004)]

$$S_{E,F} j_F = s_F (1 - \theta_{TOT}) j_F + s_{F/P} (1 - \theta_{TOT/P}) \theta_P j_F + K_{REC} \theta_{CF_x} j_F + K_{REC} \theta_{CF_x/P} \theta_P j_F + 2k_0 e^{\frac{-E_a}{kT}} \theta_F j_F \quad (3.10)$$

και

$$S_{E,CF_x} j_{CF_x} = s_{CF_x} (1 - \theta_{TOT}) j_{CF_x} + s_{CF_x/P} (1 - \theta_{TOT/P}) \theta_P j_{CF_x} - (2/3) K_{REC} \theta_{CF_x} j_F - (2/3) K_{REC} \theta_{CF_x/P} \theta_P j_F \quad (3.11)$$

αντίστοιχα.^{ῥ2} Οι φαινόμενοι συντελεστές προσκόλλησης των συστατικών είναι σημαντικοί στον υπολογισμό των τοπικών ροών τους στο εσωτερικό δομών (Κεφ. 2). Εξαρτώνται, όπως φαίνεται από τις Εξ. (3.10) και (3.11), από τις ροές όλων των συστατικών στην επιφάνεια και αυτή η εξάρτηση καθιστά το πρόβλημα υπολογισμού των τοπικών ροών μη γραμμικό (Κεφ. 4).

^{ῥ1} Η απόδοση απόθεσης όπως δίδεται από την Εξ. (3.8) δεν μπορεί να χρησιμοποιηθεί για ποσοτικές εκτιμήσεις, παρά μόνο για ποιοτικές. Αυτό γιατί δεν είναι γνωστή η μορφή του πολυμερούς που σχηματίζεται στην επιφάνεια. Στην εργασία στην οποία βασίστηκε ο υπολογισμός των συντελεστών άμεσης απόθεσης ιόντων, $y_{D,i}$, στο Si, θεωρείται ότι το πολυμερές αποτελείται μόνο από άτομα C [Tachi et al. (1982)]. Στην εργασία που περιέχεται πειραματική ένδειξη άμεσης απόθεσης ιόντων στο SiO₂, θεωρείται ότι το πολυμερές έχει την ίδια πυκνότητα με το SiO₂ και σημειώνεται ότι η απόδοση απόθεσης δίνει μόνο ποιοτικές εκτιμήσεις [Shibano et al. (1993)].

^{ῥ2} Στο ισοζύγιο για τα άτομα F [Εξ. (3.10)], ο πρώτος και ο δεύτερος όρος στο δεξιό μέλος εκφράζει τη ροή ατόμων F που προσροφάται στην επιφάνεια. Ο τρίτος όρος αφορά στη ροή ατόμων F που καταναλώνονται κατά τη θερμική εγχάραξη της επιφάνειας. Ο τέταρτος και πέμπτος αναφέρεται στη ροή ατόμων F που καταναλώνονται στην αντίδραση επανασύνδεσης του ατόμων F με τις προσροφημένες ρίζες CF_x. Στο ισοζύγιο για τις ρίζες CF_x [Εξ. (3.11)], ο πρώτος και ο δεύτερος όρος στο δεξιό μέλος εκφράζει τη ροή ριζών CF_x που προσροφάται στην επιφάνεια. Ο τρίτος και ο τέταρτος όρος αφορά την παραγωγή ριζών CF_y ($y=x+1$) από την αντίδραση επανασύνδεσης του F με τις προσροφημένες ρίζες CF_x.

Πίνακας 3.II Συντελεστές και παράμετροι για το μοντέλο εγχάραξης SiO₂ και Si [Εξ. (3.1) – (3.5) και (3.7), (3.8), (3.10) και (3.11)].

σύμβολο	περιγραφή	τιμή για SiO ₂	τιμή για Si
S_F	συντελεστής προσκόλλησης F σε καθαρή επιφάνεια	0.02	0.2
S_{CF_x}	συντελεστής προσκόλλησης CF _x σε καθαρή επιφάνεια	0.9	0.1
$S_{F/P}$	συντελεστής προσκόλλησης F στο πολυμερές	0.1	0.1
$S_{CF_x/P}$	συντελεστής προσκόλλησης CF _x στο πολυμερές	0.1	0.1
K_{REC}	συντελεστής επανασύνδεσης των προσροφημένων CF _x με F από την αέρια φάση	0.0153	0.0153
K_0	προεκθετικός συντελεστής Arrhenius για τη δράση θερμικής εγχάραξης	0.0028	0.0299
E_a	Ενέργεια ενεργοποίησης για τη θερμική εγχάραξη	0.168 eV	0.108 eV

Πίνακας 3.III Παράμετροι A , A_{d1} , A_{d2} και ενέργειες καταφυγίου (E_{TH} σε eV) της Εξ. (3.6). E είναι η ενέργεια των ιόντων σε eV.

σύμβολο	περιγραφή συντελεστή	SiO ₂				Si			
		A	A_{d1}	A_{d2}	E_{TH}	A	A_{d1}	A_{d2}	E_{TH}
$\gamma_{PS,CF3^+}$	ιονοβολής με CF ₃ ⁺	0.0456	0	0	20	0.0414	0	0	74
$\gamma_{PS,CF2^+}$	ιονοβολής με CF ₂ ⁺	0.0306	0	0	80	0.0362	0	0	200
γ_{PS,CF^+}	ιονοβολής με CF ⁺	0.0228	0	0	150	0.1022	0	0	777
$\gamma_{D,CF3^+}$	άμεσης απόθεσης CF ₃ ⁺	0	0.0189	0.0456	20	0	0.0171	0.0414	74
$\gamma_{D,CF2^+}$	άμεσης απόθεσης CF ₂ ⁺	0	0.0127	0.0306	80	0	0.0150	0.0362	200
γ_{D,CF^+}	άμεσης απόθεσης CF ⁺	0	0.0094	0.0228	150	0	0.0370	0.1022	777
β_{CF_x}	YAI εγχάραξης σε επιφάνεια που καλύπτεται από CF _x	0.0305	0	0	4	–	–	–	–
β_F	YAI εγχάραξης σε επιφάνεια που καλύπτεται από F	0.0454 × (1+0.007E ^{0.5})	0	0	4	0.629 × (1+0.009E ^{0.5})	0	0	4
$\beta_{F/P}$	YAI εγχάραξης του πολυμερούς σε επιφάνεια που καλύπτεται από F	0.2	0	0	4	0.2	0	0	4
γ_C	μηχανική απομάκρυνση CF _x	0.0361	0	0	128	0.0361	0	0	128
β_S	YAI απόθεσης CF _x	0	0.0150	0.0361	128	0	0.0150	0.0361	128

3.4 Παρατηρήσεις

Σχολιάζεται το σύνολο των ανεξάρτητων μεταβλητών του μοντέλου, η σταθερότητα του πλήθους των θέσεων ρόφησης, η επίλυση των ισοζυγίων θέσεων ρόφησης στη μόνιμη κατάσταση και ο περιορισμός που επιβάλλει η θεώρηση του μοντέλου εγχάραξης επιφάνειας στα όρια ισχύος του πλαισίου προσομοίωσης.

3.4.1 Οι ανεξάρτητες μεταβλητές του μοντέλου

Το πλήθος των εξισώσεων του μοντέλου είναι 10 [Εξ. (3.1) – (3.5) και (3.7) – (3.11)]. Το πλήθος των μεταβλητών του μοντέλου είναι 17 ($j_F, j_{CF_x}, j_{ION}, x_{CF3+}, x_{CF2+}, E, T, \theta_F, \theta_{CF_x}, \theta_P, \theta_{F/P}, \theta_{CF_x/P}, EY, DY, ER, S_{E,F}, S_{E,CF_x}$). Συνεπώς το πλήθος των ανεξάρτητων μεταβλητών που πρέπει να καθοριστούν είναι 7. Οι ανάγκες κατάστροφης του μοντέλου (υπολογισμός απόδοσης και ρυθμού εγχάραξης, φαινόμενων συντελεστών προσκόλλησης) υπαγορεύουν ότι οι ανεξάρτητες μεταβλητές του μοντέλου είναι οι $j_F, j_{CF_x}, j_{ION}, x_{CF3+}, x_{CF2+}, E, T$. Τότε οι εξαρτημένες μεταβλητές ή μεταβλητές επίλυσης του μοντέλου είναι οι $\theta_F, \theta_{CF_x}, \theta_P, \theta_{F/P}, \theta_{CF_x/P}, EY, DY, S_{E,F}, S_{E,CF_x}$. *Οι ανεξάρτητες μεταβλητές του μοντέλου δεν είναι στην πράξη ανεξάρτητες. Καμιά από αυτές δεν είναι λειτουργική παράμετρος του αντιδραστήρα ώστε να μπορεί να οριστεί ανεξάρτητα.* Είναι όλες το αποτέλεσμα ηλεκτρικής εκκένωσης η οποία εξαρτάται από τις λειτουργικές παραμέτρους του αντιδραστήρα όπως η πίεση, η ισχύς της πηγής του πλάσματος, η τάση που εφαρμόζεται στο δισκίο, το αέριο που τροφοδοτείται στον αντιδραστήρα (π.χ. CF_4, C_2F_4, C_3F_8) και η ροή του. Η σύνδεση των λειτουργικών παραμέτρων με τις ανεξάρτητες μεταβλητές του μοντέλου είναι πολύπλοκη [Arnold et al. (1993)]. Η μεταβολή κάθε λειτουργικής παραμέτρου επηρεάζει, αν όχι όλες, περισσότερες από μία ανεξάρτητες μεταβλητές του μοντέλου.

3.4.2 Σταθερό πλήθος θέσεων ρόφησης και τραχύτητα

Στην κατάστροφη των εξισώσεων του μοντέλου γίνεται παραδοχή σταθερού πλήθους θέσεων ρόφησης. Στην πράξη η εγχάραξη γίνεται διαμέσου ενός κατεστραμμένου στρώματος, ή αλλιώς η εγχαρασόμενη επιφάνεια εμφανίζει τραχύτητα [Gogolides et al. (2004)], όπως επιβεβαιώνεται από υπολογισμούς μοριακής δυναμικής [Graves & Humbird (2002)], η οποία μπορεί να αυξήσει την ενεργό επιφάνεια και άρα το πλήθος των θέσεων ρόφησης. Η ενσωμάτωση αυτής της αύξησης στο μοντέλο εγχάραξης εμφανίζει εξαιρετικό ενδιαφέρον και χρήζει περαιτέρω διερεύνησης. Αν ληφθεί υπόψη η τραχύτητα της επιφάνειας, οι υπολογισμοί δυσκολεύουν καθώς η επιφάνεια δεν θεωρείται πλέον επίπεδη. Λόγω της τραχειάς τοπογραφίας της επιφάνειας, κάποιες θέσεις της ευνοούνται στη διαδικασία ρόφησης [Zhang & Kushner (2000)].

3.4.3 Η σταθερά χρόνου και η επίλυση στη μόνιμη κατάσταση

Για τον υπολογισμό των κλασμάτων κάλυψης από τις Εξ. (3.1) – (3.5) υιοθετείται η καθολική παραδοχή σε αντίστοιχα μοντέλα [Gerodolle & Pelletier (1991), Gray et al. (1993), Bailey et al. (1995), Lukichev & Yunkin (1998)]. Οι εξισώσεις επιλύονται στη μόνιμη κατάσταση. Αυτή η παραδοχή είναι ορθή αν ο χρόνος που χρειάζεται για να φτάσει το σύστημα σε μόνιμη κατάσταση είναι πολύ μικρότερος από το συνολικό χρόνο εγχάραξης υπό σταθερές συνθήκες. Σε μια προσπάθεια για την εκτίμηση της κλίμακας του χρόνου που χρειάζεται το σύστημα να φτάσει στη μόνιμη κατάσταση (χρόνος μετάβασης), υπολογίζεται η σταθερά χρόνου σε ένα απλούστερο σύστημα που αφορά την εγχάραξη Si με Ar^+ και άτομα F. Τότε η εξίσωση που περιγράφει το ισοζύγιο θέσεων ρόφησης είναι

$$\sigma_0 \frac{d\theta_F}{dt} = s_F(1-\theta_F)j_F - 2\beta_F\theta_F j_{ION} - 2k_0 e^{\frac{-E_a}{kT}} \theta_F j_F. \quad (3.12)$$

Η σταθερά χρόνου για το παραπάνω σύστημα 1^{ης} τάξης είναι

$$\tau = \frac{\sigma_0}{2\beta_F j_{ION} + \left(s_F + 2k_0 e^{\frac{-E_a}{kT}} \right) j_F}. \quad (3.13)$$

Για το δεύτερο ζεύγος υπάρχουν διαθέσιμοι συντελεστές της Εξ. (3.12). Είναι $\beta_F = 0.6932(\sqrt{E} - \sqrt{4})$ [Gray et al. (1993)], ενώ τα s_F , k_0 , E_a φαίνονται στον Πίνακα 3.1 για το Si. Για τυπικές τιμές ροής ($j_F = 5 \times 10^{17} \text{ cm}^{-2}\text{s}^{-1}$, $j_{ION} = 2 \times 10^{16} \text{ cm}^{-2}\text{s}^{-1}$) και ενέργειας ιόντων ($E=100\text{eV}$), και θεωρώντας ότι $\sigma_0 = 6.86 \times 10^{14} \text{ cm}^{-2}$ [επιφανειακή πυκνότητα των θέσεων ρόφησης για επιφάνεια Si (100), Lukichev (1998)], προκύπτει ότι $\tau = 2.1 \text{ ms}$. Επομένως, για να φτάσει το σύστημα στη μόνιμη κατάσταση χρειάζεται περίπου $5\tau = 10.5 \text{ ms}$.

3.4.4 Περιορισμός στα όρια ισχύος του πλαισίου προσομοίωσης

Τα συστατικά του πλαισίου προσομοίωσης που περιγράφεται στην εργασία (μοντέλο υπολογισμού τοπικής ροής στο εσωτερικό δομών, μοντέλο εγχάραξης επιφάνειας και αλγόριθμος εξέλιξης τοπογραφίας) είναι συνεχή. Το ερώτημα που τίθεται είναι μέχρι ποιων διαστάσεων δομές μπορεί να χειριστεί αξιόπιστα το πλαίσιο προσομοίωσης, και ειδικότερα αν επιβάλλει κάποιο περιορισμό στην ελάχιστη διάσταση η θεώρηση του μοντέλου εγχάραξης επιφάνειας.

Τα συνεχή μοντέλα απεικόνισης της τοπογραφίας μιας δομής δεν έχουν δομική μονάδα διάστασης, όπως τα διακριτά μοντέλα έχουν τη διάσταση σωματιδίου ή ομάδας

σωματιδίων. Έτσι, τα συνεχή μοντέλα μπορούν να εφαρμοστούν σε μικρο- και νανο-κλίμακα με τον ίδιο τρόπο. Ωστόσο, η αξιοπιστία του συνεχούς μοντέλου στη νανο-κλίμακα είναι ερώτημα και εξαρτάται από το αν στο συνεχές μοντέλο λαμβάνονται υπόψη τα βασικά φαινόμενα που συμβαίνουν στη νανο-κλίμακα.

Φαινόμενο που μπορεί να παίζει σημαντικό ρόλο στη νανο-κλίμακα και δε λαμβάνεται υπόψη στο μοντέλο εγχάραξης επιφάνειας είναι η επιφανειακή διάχυση, η οποία δεν είναι σημαντική σε μικρο-δομές, ωστόσο όσο μικραίνουν οι διαστάσεις των δομών είναι πιθανό να γίνει (§2.3). Πειραματικά δεδομένα αναγκαία για την απάντηση στο αν η επιφανειακή διάχυση σε συστήματα αερίου σε ηλεκτρική εκκένωση και στερεού είναι σημαντική δεν υπάρχουν. Αν ο συντελεστής διάχυσης ατόμων F σε επιφάνεια Si προσεγγιστεί με το συντελεστή διάχυσης ατόμων H σε επιφάνεια Si [Lukichev & Yunkin (1999)], το μήκος διάχυσης (§2.2.4), χρησιμοποιώντας δεδομένα των Reider et al. [Reider et al. (1991)], είναι πολύ μικρό ώστε η επιφανειακή διάχυση να μπορεί να αγνοηθεί ακόμη και στη νανο-κλίμακα (§2.3).

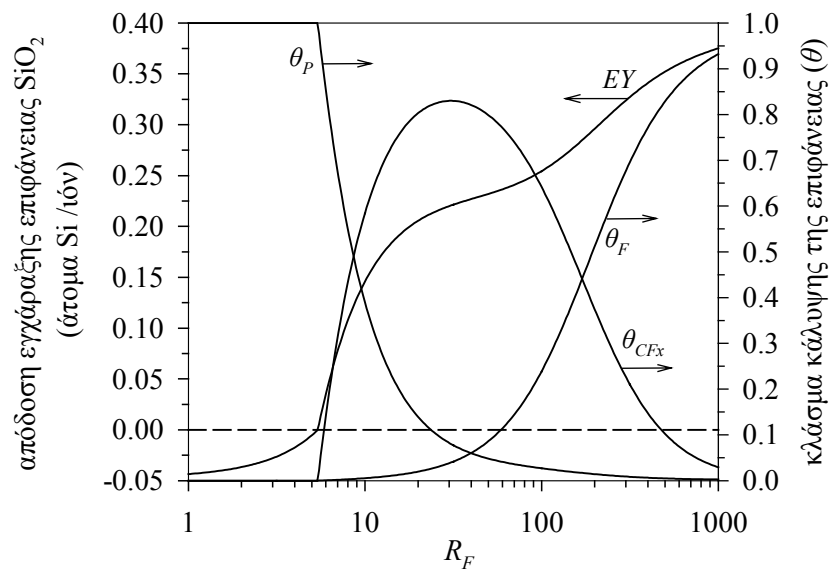
Ένα ακόμη χαρακτηριστικό που δε λαμβάνεται υπόψη στο μοντέλο εγχάραξης επιφάνειας και είναι πιθανά σημαντικό στη νανο-κλίμακα είναι η τυχαιότητα, καθώς δεν υπάρχει κάποιος στοχαστικός όρος στις εξισώσεις του μοντέλου. Επομένως, η λεπτομέρεια των δομών που χειρίζεται αξιόπιστα θα πρέπει να είναι τέτοιες ώστε να έχει νόημα ο στατιστικός μέσος όρος. Η επιφάνεια στην οποία ορίζεται το κλάσμα κάλυψης του μοντέλου θα πρέπει να είναι τέτοια ώστε να περιέχει στατιστικώς επαρκές πλήθος θέσεων ρόφησης. Έστω ότι το στατιστικά επαρκές πλήθος θέσεων ρόφησης είναι 100. Αυτό σημαίνει ότι 100 θέσεις ρόφησης αρκούν για τον υπολογισμό ενός μέσου όρου για το κλάσμα κάλυψης του μοντέλου επιφάνειας. Αν η επιφανειακή πυκνότητα των θέσεων ρόφησης είναι $\sigma_0 = 6.86 \times 10^{14} \text{ cm}^{-2}$ [για επιφάνεια Si (100), Lukichev (1998)], 100 θέσεις ρόφησης περιέχονται σε επιφάνεια $14.58 \sim 15 \text{ nm}^2$. Επομένως, υιοθετώντας το παραπάνω στατιστικώς επαρκές πλήθος θέσεων ρόφησης (100), το κλάσμα κάλυψης εκφράζει το μέσο όρο κάλυψης επιφάνειας περίπου 15 nm^2 . Για τετραγωνική επιφάνεια 15 nm^2 , η διάσταση της πλευράς της επιφάνειας είναι περίπου 4 nm . Έτσι αν, χρησιμοποιώντας το μοντέλο εγχάραξης επιφάνειας της εργασίας, η προσομοίωση εξέλιξης τοπογραφίας δώσει αποτελέσματα για δομές με διαστάσεις (πλάτος και βάθος και μήκος) της τάξης των 4 nm , τα αποτελέσματα δεν μπορούν να θεωρηθούν αξιόπιστα. Όσο μεγαλύτερες από 4 nm είναι οι διαστάσεις των δομών, τόσο πιο αξιόπιστα είναι τα αποτελέσματα. Θεωρείται ότι το πλαίσιο προσομοίωσης μπορεί να χρησιμοποιηθεί για δομές διαστάσεων μιας τάξης μεγέθους μεγαλύτερες (μερικών δεκάδων nm). Η απάντηση για τα ακριβή όρια ισχύος του πλαισίου προσομοίωσης μπορεί να δοθεί μέσα από τη σύγκριση των αποτελεσμάτων του με πειραματικά αποτελέσματα στη νανο-κλίμακα. Με αυτό τον τρόπο μπορεί να εξακριβωθεί αν λαμβάνονται υπόψη τα βασικά φαινόμενα που συμβαίνουν στη νανο-κλίμακα.

Γενικά, τα συνεχή μοντέλα χρησιμοποιούνται για την προσομοίωση εξέλιξης τοπογραφίας σε ακόμη μικρότερες διαστάσεις ($1\text{-}10 \text{ nm}$), όπως η εξέλιξη τραχύτητας

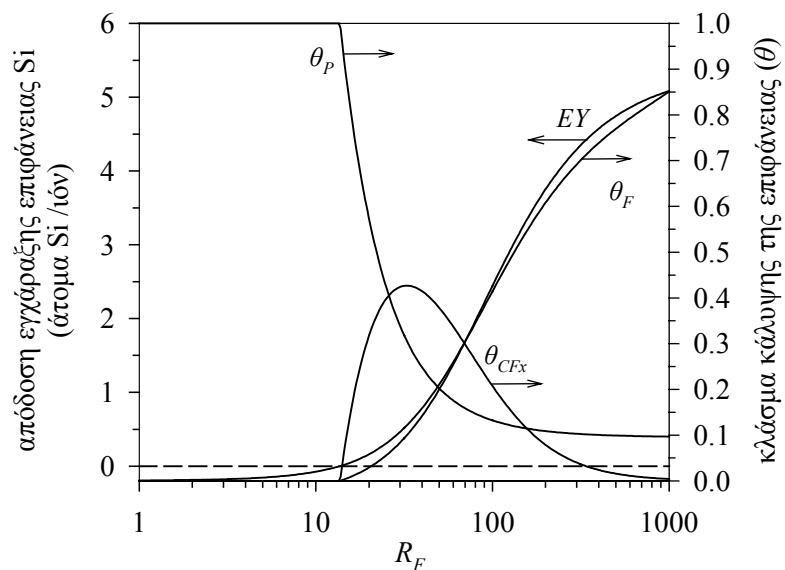
εγχαρασσόμενης επιφάνειας ή επιφάνειας στην οποία γίνεται απόθεση [Barabasi & Stanley (1995), Drotar et al. (2000b), Gogolides et al. (2004)].

3.5 Αποτελέσματα

Στα σχήματα που ακολουθούν φαίνεται η επίδραση ανεξάρτητων μεταβλητών του μοντέλου εγχάραξης στην απόδοση εγχάραξης και τους φαινόμενους συντελεστές προσκόλλησης. Επίσης συγκρίνονται τα αποτελέσματα του μοντέλου με πειραματικά δεδομένα.



(α)



(β)

Σχήμα 3.2 (α) Απόδοση εγχάραξης, EY , και κλάσματα κάλυψης από πολυμερές, θ_p , άτομα F, θ_F , και ουδέτερες ρίζες CF_x , θ_{CF_x} , επιφάνειας SiO₂ συναρτήσεως του λόγου της ροής ατόμων F προς τη ροή ιόντων, R_F . Ο λόγος ροής των ουδέτερων ριζών CF_x προς αυτή των ιόντων, R_{CF_x} , είναι 20, η ενέργεια

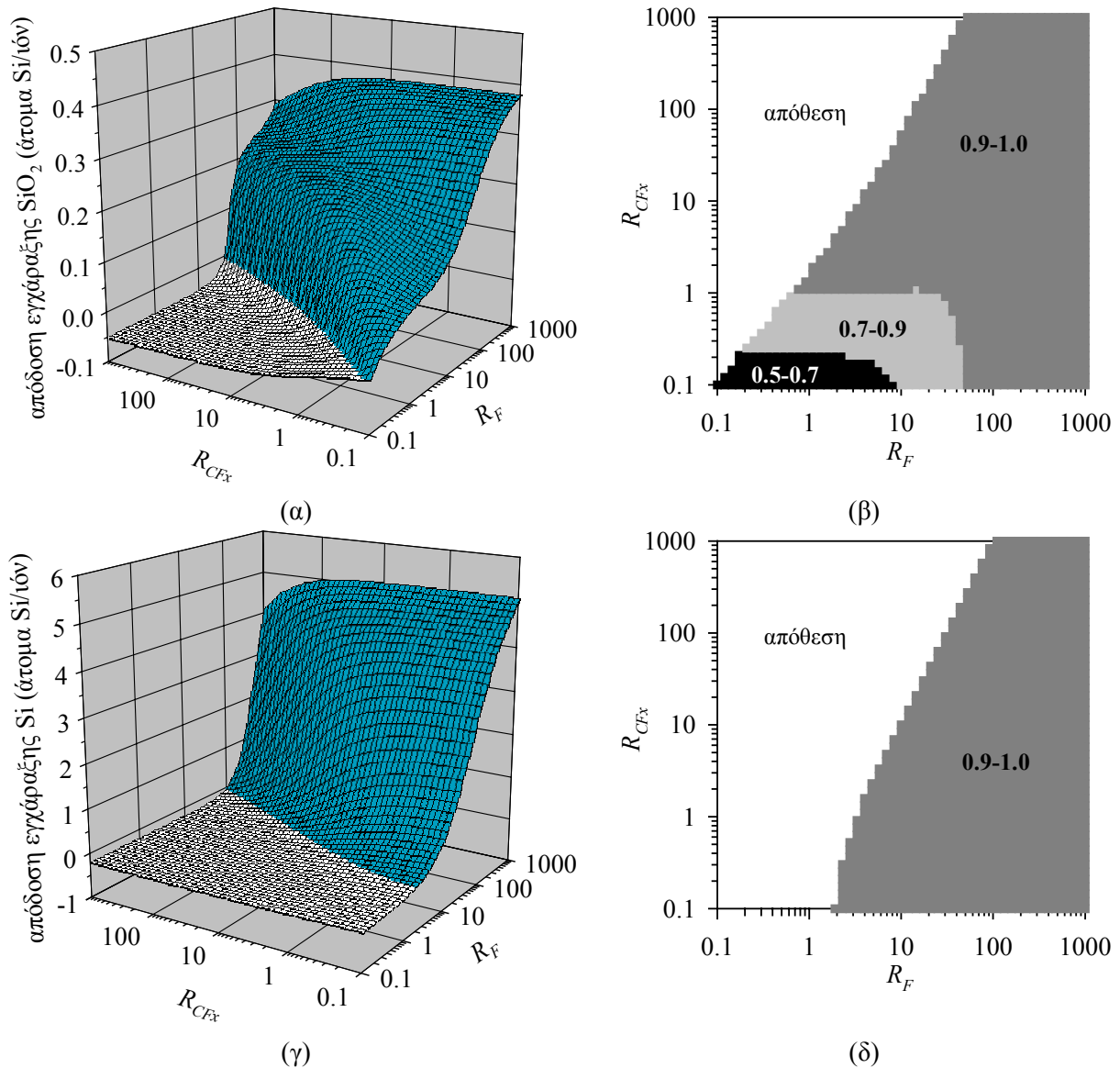
των ιόντων είναι 100eV και η σύσταση των ιόντων είναι 10%CF₃⁺, 85%CF₂⁺, 5%CF⁺.⁹¹ (β) Τα ίδια με (α) για επιφάνεια Si.

Στο Σχήμα 3.2 φαίνεται η απόδοση εγχάραξης SiO₂ και Si (άτομα Si ανά προσπίπτον ιόν) και τα κλάσματα κάλυψης της επιφάνειας, θ , σαν συνάρτηση του λόγου της ροής των ατόμων F προς τη ροή των ιόντων, R_F , με το λόγο της ροής των ουδέτερων ριζών CF_x προς αυτή των ιόντων, R_{CF_x} , να παραμένει σταθερός. Η ενέργεια των ιόντων έχει την τυπική τιμή των 100 eV και η σύσταση των ιόντων είναι 10% CF₃⁺, 85% CF₂⁺, 5% CF⁺.

Στα Σχήματα 3.2α και 3.2β για μικρές τιμές του λόγου R_F , η απόθεση πολυμερούς υπερκερά την εγχάραξή του και η επιφάνεια καλύπτεται από πολυμερές ($\theta_P=1$). Τότε η απόδοση εγχάραξης είναι αρνητική. Καθώς ο λόγος R_F αυξάνεται, το θ_P γίνεται μικρότερο της μονάδας, ξεκινά η εγχάραξη και ταυτόχρονα η απόδοση εγχάραξης περνά από το μηδέν. Η μετάβαση από απόθεση σε εγχάραξη είναι απότομη και για τα δύο υποστρώματα και συμβαίνει σε μικρότερο λόγο R_F για το SiO₂. Η καμπύλη απόδοσης εγχάραξης επιφάνειας SiO₂ ακολουθεί (Σχήμα 3.2α) την καμπύλη του κλάσματος κάλυψης από ουδέτερες ρίζες, θ_{CF_x} , μέχρι ο λόγος R_F να πλησιάσει το λόγο R_{CF_x} (20). Για $R_F > R_{CF_x}$ η καμπύλη απόδοσης ακολουθεί την καμπύλη του κλάσματος κάλυψης από άτομα F. Για την επιφάνεια Si η καμπύλη απόδοσης εγχάραξης ακολουθεί (Σχήμα 3.2β) την καμπύλη του κλάσματος κάλυψης από άτομα F, θ_F .

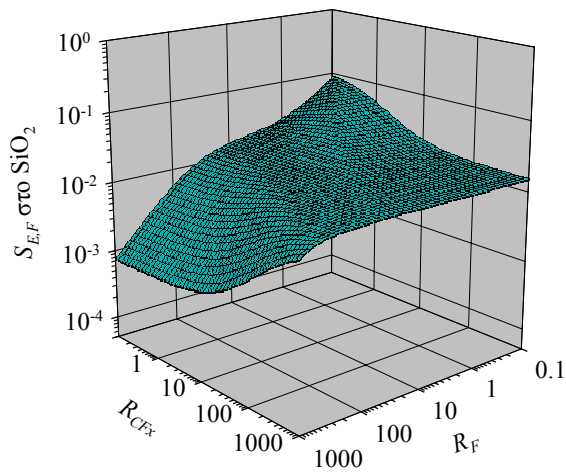
Στο Σχήμα 3.3 φαίνεται η απόδοση εγχάραξης, το κλάσμα της υποβοηθούμενης από ιόντα (YAI) απόδοσης εγχάραξης στη συνολική απόδοση σαν συνάρτηση των λόγων R_F και R_{CF_x} . Στο Σχήμα 3.3 (όπως και στο Σχήμα 3.2) τα όρια των αξόνων καλύπτουν μεγάλο εύρος τιμών των λόγων R_F , R_{CF_x} και αφορούν και υψηλής (μικροί λόγοι) και χαμηλής (υψηλοί λόγοι) πυκνότητας πλάσμα. Η περιοχή τιμών R_F , R_{CF_x} στην οποία συμβαίνει απόθεση πολυμερούς είναι μεγαλύτερη για το Si από αυτή για το SiO₂ (λευκές επιφάνειες στα Σχήματα 3.3α και 3.3γ). Αυτό οφείλεται στο ότι οι ουδέτερες ρίζες CF_x προκαλούν μόνο απόθεση στο Si. Αντίθετα στο SiO₂, μπορούν να προκαλέσουν και εγχάραξη. Στα Σχήματα 3.3β και 3.3δ φαίνεται το κλάσμα της YAI απόδοσης εγχάραξης στη συνολική απόδοση εγχάραξης συναρτήσει των λόγων R_F , R_{CF_x} για επιφάνειες SiO₂ και Si αντίστοιχα. Και στις δύο επιφάνειες φαίνεται ότι η YAI εγχάραξη είναι ο κυρίαρχος μηχανισμός εγχάραξης. Υπενθυμίζεται ότι για την επιφάνεια SiO₂ η YAI εγχάραξη γίνεται στο κλάσμα της επιφάνειας που καλύπτεται από άτομα F και ρίζες CF_x, ενώ για την επιφάνεια Si η YAI εγχάραξη γίνεται μόνο στο κλάσμα της επιφάνειας που καλύπτεται από άτομα F.

⁹¹ Η επιλογή αυτής της σύστασης ιόντων έγινε με βάση τη σύσταση ενός πλάσματος CHF₃ [Rolland et al. (2000)]. Σε πλάσμα CHF₃, εκτός από CF₃⁺, CF₂⁺, CF⁺ υπάρχει και CHF₂⁺, ένα ιόν για το οποίο δεν είναι διαθέσιμα πειραματικά δεδομένα. Έτσι, έχει γίνει η παραδοχή ισοδυναμίας στη συμπεριφορά των ιόντων CF₂⁺ και CHF₂⁺.

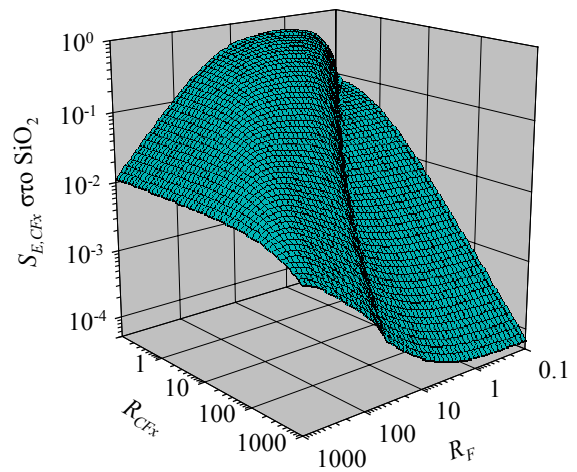


Σχήμα 3.3 (α) Απόδοση εγχάραξης SiO₂, (β) κλάσμα υποβοηθούμενης από ιόντα απόδοσης εγχάραξης στην συνολική απόδοση εγχάραξης SiO₂, (γ) απόδοση εγχάραξης Si και (δ) κλάσμα υποβοηθούμενης από ιόντα απόδοσης εγχάραξης στην συνολική απόδοση εγχάραξης Si συναρτήσει των λόγων R_F και R_{CF_x} . Η ενέργεια των ιόντων είναι 100eV και η σύσταση των ιόντων 10% CF₃⁺, 85% CF₂⁺, 5% CF⁺.

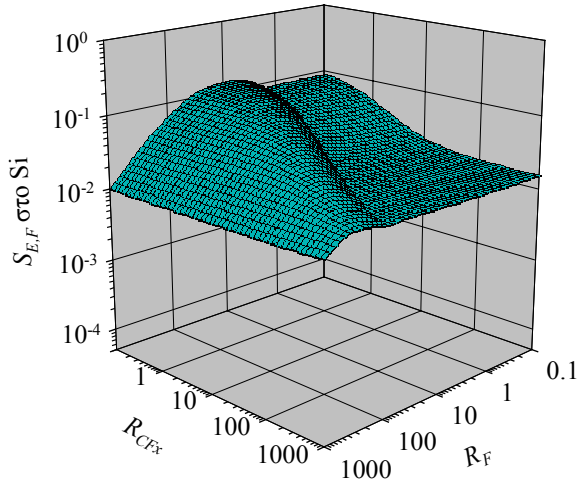
Στο Σχήμα 3.4 φαίνονται οι φαινόμενοι συντελεστές προσκόλλησης των ατόμων F ($S_{E,F}$) και των ουδετέρων ριζών CF_x (S_{E,CF_x}) σε εγχαρασόμενες επιφάνειες SiO₂ και στο Si συναρτήσει των λόγων R_F , R_{CF_x} , όπως υπολογίζονται από τις Εξ. (3.10) – (3.11). Οι $S_{E,i}$ ($i=F,CF_x$), οι οποίοι παίζουν σημαντικό ρόλο στον υπολογισμό των τοπικών ροών στο εσωτερικό δομών (Κεφ. 2 και 4), κυμαίνονται από 5×10^{-5} μέχρι 1. Γενικά φαίνεται ότι τα όρια διακύμανσης του S_{E,CF_x} είναι ευρύτερα από αυτά του $S_{E,F}$.



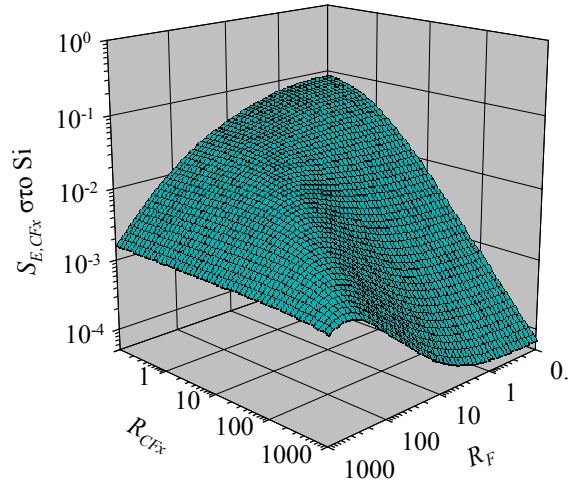
(α)



(β)



(γ)



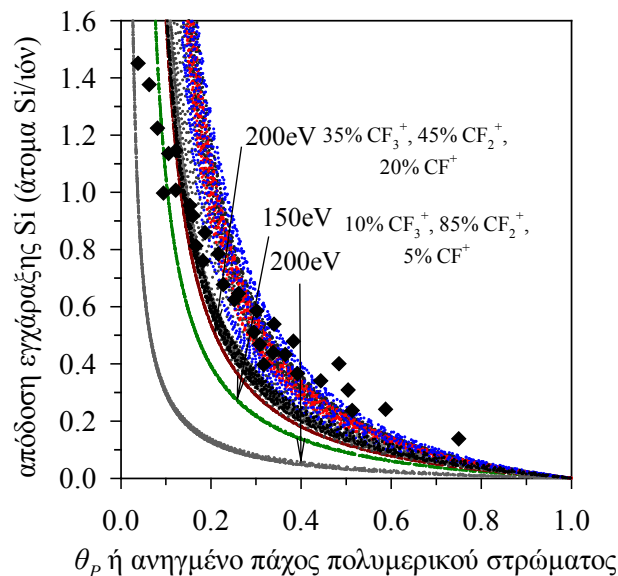
(δ)

Σχήμα 3.4 Ο φαινόμενος συντελεστής προσκόλλησης (α) ατόμων F σε εγχαρασσομένη επιφάνεια SiO_2 , (β) ουδετέρων ριζών CF_x σε εγχαρασσομένη επιφάνεια SiO_2 , (γ) ατόμων F σε εγχαρασσομένη επιφάνεια Si και (δ) ουδετέρων ριζών CF_x σε εγχαρασσομένη επιφάνεια Si συναρτήσει των λόγων R_F , R_{CF_x} .

Όπως αναφέρθηκε, η εγχάραξη SiO_2 και Si σε πλάσμα φθοριωμένων υδρογονανθράκων εξελίσσεται διαμέσου ενός λεπτού φιλμ πολυμερούς [Oehrlin et al. (1994), Rueger et al. (1997), Standaert et al. (1998), Rolland et al. (2000)]. Τα πειραματικά αποτελέσματα δείχνουν μείωση των ρυθμών εγχάραξης σαν συνάρτηση του πάχους αυτού του στρώματος πολυμερούς. Στο μοντέλο επιφάνειας που αναπτύχθηκε, η απόδοση (άρα και ο ρυθμός) εγχάραξης πέφτουν στο μηδέν, όταν το κλάσμα κάλυψης της επιφάνειας από πολυμερές γίνει ίσο με τη μονάδα. Αφού η εγχαρασσομένη επιφάνεια είναι άμορφη λόγω του βομβαρδισμού της από ιόντα, το κλάσμα κάλυψης από πολυμερές μπορεί να θεωρηθεί σε ένα γενικότερο πλαίσιο από αυτό του στρώματος ρόφησης κατά Langmuir. Μπορεί να θεωρηθεί ως κάτι αντίστοιχο του πάχους του στρώματος πολυμερούς που παρατηρείται στην επιφάνεια και ειδικότερα ως το ανηγμένο - στη μέγιστη τιμή για την οποία συντηρείται η εγχάραξη του

υποστρώματος - πάχος του στρώματος πολυμερούς. Τα αποτελέσματα του μοντέλου στα Σχήματα 3.5 και 3.6 επιβεβαιώνουν αυτή τη θεώρηση.

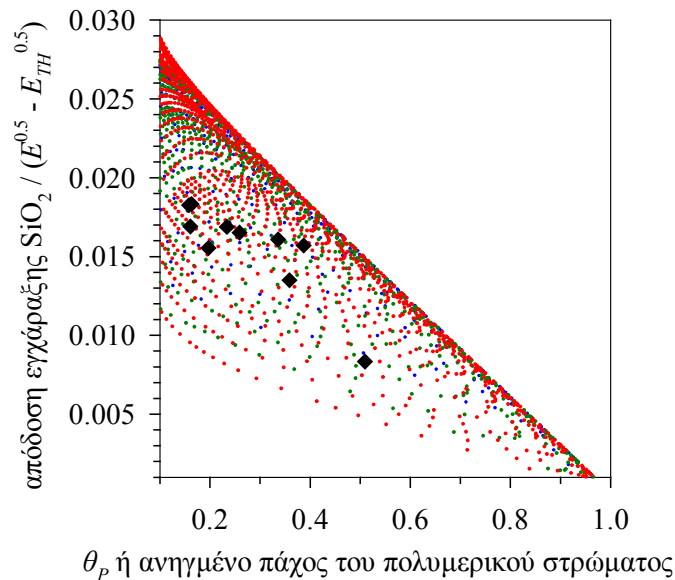
Στο Σχήμα 3.5 φαίνονται περισσότερα από 30000 αποτελέσματα προσομοίωσης που δίνουν την απόδοση εγχάραξης σαν συνάρτηση του κλάσματος κάλυψης της επιφάνειας από πολυμερές. Τα αποτελέσματα αφορούν διαφορετικούς λόγους R_F, R_{CFx} ($\{R_F, R_{CFx} \in [0.1, 100]\}$) και διαφορετικές ενέργειες (70, 100, 130, 150, 190 και 200 eV) και συστάσεις (10% CF_3^+ , 85% CF_2^+ , 5% CF^+ και 35% CF_3^+ , 45% CF_2^+ , 20% CF^+) ιόντων. Στο Σχήμα 3.5 έχουν σημειωθεί και τα πειραματικά δεδομένα των Schaepkens et al., στα οποία το πάχος του πολυμερικού στρώματος για το οποίο ο ρυθμός εγχάραξης πλησιάζει το μηδέν είναι 30A [Schaepkens et al. (1999)]. Σε αυτό το πάχος έχουν αναχθεί τα πειραματικά δεδομένα. Τα αποτελέσματα του μοντέλου ακολουθούν τα πειραματικά: η απόδοση εγχάραξης μειώνεται με την αύξηση του πάχους του πολυμερικού στρώματος.



Σχήμα 3.5 Απόδοση εγχάραξης Si σαν συνάρτηση του κλάσματος κάλυψης της επιφάνειας από πολυμερές. Φαίνονται περισσότερα από 3000 αποτελέσματα προσομοίωσης ($\{R_F, R_{CFx} \in [0.1, 100]\}$) σε ενέργεια ιόντων 100eV και σύσταση 10% CF_3^+ , 85% CF_2^+ , 5% CF^+ , 12000 αποτελέσματα σε διαφορετική ενέργεια ιόντων (70, 130, 150 και 200eV) και 15000 αποτελέσματα για διαφορετική σύσταση ιόντων (35% CF_3^+ , 45% CF_2^+ , 20% CF^+) και ενέργειες 70, 100, 150, 190, 200 eV. Φαίνονται επίσης και πειραματικά δεδομένα [Schaepkens et al. (1999)]. Το πάχος του στρώματος πολυμερούς έχει αναχθεί στα 30A, στην τιμή για την οποία ο ρυθμός εγχάραξης Si για τα συγκεκριμένα πειραματικά δεδομένα πλησιάζει το μηδέν.

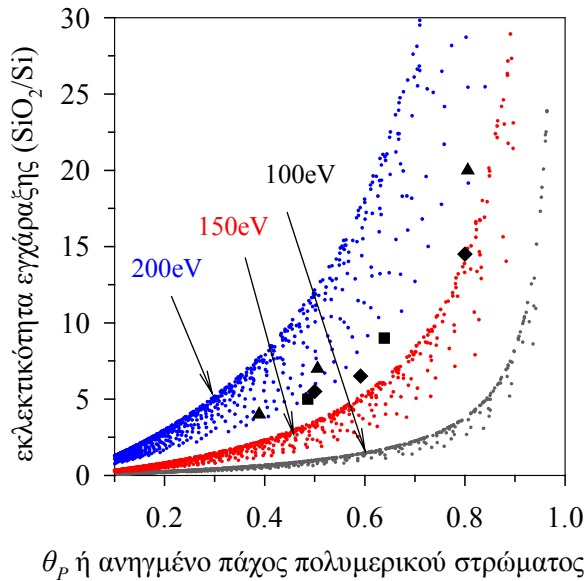
Στο Σχήμα 3.6 φαίνεται η απόδοση εγχάραξης SiO_2 σαν συνάρτηση του κλάσματος κάλυψης της επιφάνειας από πολυμερές, καθώς και τα πειραματικά δεδομένα [Rueger et al. (1997)] για τα οποία το πάχος του πολυμερικού στρώματος έχει αναχθεί στα 12 A (τιμή στην οποία ο ρυθμός εγχάραξης για τα συγκεκριμένα πειραματικά δεδομένα πλησιάζει το μηδέν). Η απόδοση εγχάραξης έχει αναχθεί στην τετραγωνική ρίζα της ενέργειας των ιόντων (μείον την τετραγωνική ρίζα κατωφλίου ενέργειας για την YAI εγχάραξη). Τα αποτελέσματα

αφορούν δύο διαφορετικές συστάσεις και τρεις διαφορετικές ενέργειες ιόντων (70, 100, 130eV). Όλες οι καμπύλες πέφτουν πάνω σε μία, όπως ακριβώς τα πειραματικά δεδομένα. Η απόλυτη τιμή της απόδοσης εγχάραξης υπερεκτιμάται από το μοντέλο. Αυτό συμβαίνει διότι, λόγω έλλειψης πειραματικών αποτελεσμάτων, έχει εξομοιωθεί η συνεισφορά των ιόντων CF_2^+ , CF^+ στην YAI εγχάραξη, με αυτή των ιόντων CF_3^+ κάτι το οποίο δεν συμβαίνει αφού τα ιόντα CF_3^+ είναι αποτελεσματικότερα.

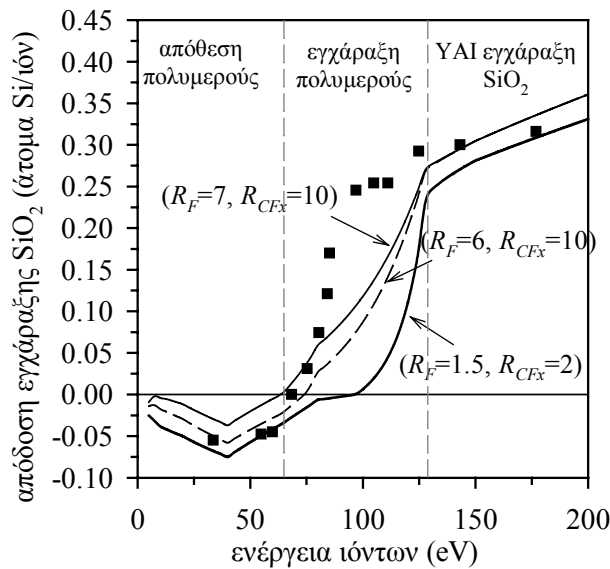


Σχήμα 3.6 Απόδοση εγχάραξης SiO_2 (ανηγμένη στο $E^{0.5} - E_{TH}^{0.5}$, $E_{TH}=4eV$) σαν συνάρτηση του κλάσματος κάλυψης της επιφάνειας από πολυμερές. Φαίνονται περισσότερα από 9000 αποτελέσματα προσομοίωσης $\{R_F, R_{CF_x} \in [0.1, 100]\}$ σε ενέργεια ιόντων 70, 100, 130 eV σύστασης 10% CF_3^+ , 85% CF_2^+ , 5% CF^+ . Φαίνονται και πειραματικά δεδομένα [Rueger et al. (1997)] σε διαφορετικές συστάσεις και ενέργειες ιόντων. Το πάχος του στρώματος πολυμερούς έχει κανονικοποιηθεί με τα 12Å, την τιμή για την οποία ο ρυθμός εγχάραξης του SiO_2 για τα συγκεκριμένα πειραματικά δεδομένα πλησιάζει το μηδέν.

Το πολυμερικό στρώμα στην επιφάνεια που εγχαρασσεται είναι γενικά παχύτερο στο Si [Oehrlein et al. (1994b), Rueger et al. (1999), Schaepkens et al. (1999)]. Αυτή διαφορά πάχους μπορεί να καταστήσει επιλεκτική την εγχάραξη του SiO_2 ως προς Si. Στο Σχήμα 3.7 φαίνεται η επιλεκτικότητα εγχάραξης (§1.3.1) του SiO_2 ως προς το Si σαν συνάρτηση του κλάσματος κάλυψης της επιφάνειας Si από πολυμερές, όπως προκύπτει από το μοντέλο εγχάραξης. Φαίνεται ότι η επιλεκτικότητα εξαρτάται (υπό δεδομένη σύσταση και ενέργεια ιόντων) από το σχηματιζόμενο πολυμερές επί της επιφάνειας Si μόνο, και μπορεί να φτάσει σε υψηλές τιμές όταν το κλάσμα κάλυψης είναι υψηλό. Η ίδια τάση εμφανίζεται και στα πειραματικά αποτελέσματα των Rueger et al. που επίσης φαίνονται στο Σχήμα 3.7 [Rueger et al. (1999)].



Σχήμα 3.7 Επιλεκτικότητα εγχάραξης (SiO_2/Si) σαν συνάρτηση του κλάσματος κάλυψης της επιφάνειας Si από πολυμερές. Φαίνονται αποτελέσματα προσομοίωσης $\{R_F, R_{CFx} \in [0.1, 100]\}$ σε ενέργειες ιόντων 100, 150 και 200eV και σε σύσταση ιόντων 10% CF_3^+ , 85% CF_2^+ , 5% CF^+ . Επίσης φαίνονται πειραματικά αποτελέσματα [Rueger et al. (1999)] σε ενέργεια ιόντων 115 eV και σε 3 πιέσεις (6, 10, 20 mTorr). Το πάχος του πολυμερικού στρώματος των πειραματικών δεδομένων έχει αναχθεί στην τιμή στην ο ρυθμός εγχάραξης Si πλησιάζει το μηδέν (90 Å για τα 6 mTorr, 72 Å για τα 10 mTorr και 60 Å για τα 20 mTorr).



Σχήμα 3.8 Απόδοση εγχάραξης SiO_2 σαν συνάρτηση της ενέργειας ιόντων για διαφορετικές τιμές των λόγων R_F, R_{CFx} . Η σύσταση των ιόντων είναι 10% CF_3^+ , 85% CF_2^+ , 5% CF^+ . Τα πειραματικά δεδομένα είναι των Oehrlein et al. [Oehrlein et al. (1994)]. Διακρίνονται οι 3 «περιοχές» εγχάραξης SiO_2 συναρτήσεως της ενέργειας ιόντων: απόθεση πολυμερούς σε χαμηλή ενέργεια ιόντων, εγχάραξη πολυμερούς σε υψηλότερη ενέργεια (polymer suppression regime), εγχάραξη SiO_2 υποβοηθούμενη από ιόντα σε ακόμη υψηλότερη ενέργεια ιόντων.

Στο Σχήμα 3.8 φαίνεται η απόδοση εγχάραξης SiO_2 συναρτήσει της ενέργειας των ιόντων και συγκρίνεται με πειραματικά δεδομένα [Oehrlein et al. (1994)]. Μολονότι οι ροές ατόμων F και ουδετέρων ριζών CF_x δεν είναι γνωστές ώστε η σύγκριση να είναι ακριβής, η μορφή της πειραματικής καμπύλης είναι ίδια με αυτή του μοντέλου. Διακρίνονται οι 3 «περιοχές» εγχάραξης SiO_2 συναρτήσει της ενέργειας ιόντων [Oehrlein et al. (1994b), Economidou (2000)]: απόθεση πολυμερούς σε χαμηλή ενέργεια ιόντων (polymer deposition regime), εγχάραξη του πολυμερούς σε υψηλότερη ενέργεια (polymer suppression regime), εγχάραξη SiO_2 υποβοηθούμενη από ιόντα σε ακόμη υψηλότερη ενέργεια ιόντων (ion assisted oxide etching regime). Από τις καμπύλες προσομοίωσης προκύπτει ότι η ενέργεια στην οποία γίνεται η μετάβαση εξαρτάται από τους λόγους R_F , R_{CF_x} .

3.6 Ανάλυση ευαισθησίας

Η αβεβαιότητα ή κάποιο σφάλμα στην εκτίμηση των συντελεστών του μοντέλου μπορούν να επηρεάσουν τον υπολογισμό, τόσο της απόδοσης εγχάραξης, όσο και των φαινόμενων συντελεστών προσκόλλησης. Στη συνέχεια παρουσιάζεται ανάλυση ευαισθησίας της απόδοσης εγχάραξης και των φαινόμενων συντελεστών προσκόλλησης στις τιμές των συντελεστών του μοντέλου. Η ανάλυση γίνεται σε εύρος συνθηκών. Σε κάθε περίπτωση μεταβάλλεται ένας συγκεκριμένος συντελεστής του μοντέλου, ενώ οι υπόλοιποι διατηρούνται σταθεροί, και εξετάζεται η επίδραση της μεταβολής του συντελεστή στην απόδοση εγχάραξης και στους φαινόμενους συντελεστές προσκόλλησης.

Στους Πίνακες 3.IV και 3.V φαίνεται η μέση % μεταβολή των τιμών της απόδοσης εγχάραξης και των φαινόμενων συντελεστών προσκόλλησης σε επιφάνειες SiO_2 και Si κατά το διπλασιασμό και τη διαίρεση διά δύο της πλειοψηφίας των συντελεστών του μοντέλου. Η σύγκριση γίνεται για πλήθος συνθηκών οι οποίες οδηγούν σε εγχάραξη του υποστρώματος.⁹¹

Στους Πίνακες 3.IV και 3.V φαίνονται σε κάθε περίπτωση οι σημαντικότεροι συντελεστές για το εύρος συνθηκών που εξετάστηκαν. Από τις παραπάνω επιδράσεις των συντελεστών του μοντέλου στην απόδοση εγχάραξης και στους φαινόμενους συντελεστές προσκόλλησης μπορούν να χαρακτηριστούν κρίσιμοι εκείνοι οι συντελεστές που μεταβάλλουν περισσότερο από 30% τις αντίστοιχες τιμές. Κι αυτό γιατί η μεταβολή των συντελεστών είναι υψηλή (/2, ×2).

Η μεταβολή των συντελεστών μπορεί να μετατοπίσει τη γραμμή που χωρίζει την απόθεση από την εγχάραξη (γραμμή μεταξύ λευκής και χρωματισμένης περιοχής, Σχήμα 3.3). Ωστόσο, οι περισσότεροι συντελεστές προκαλούν ελαφρά μόνο μετατόπιση. Σημαντική μετατόπιση είναι δυνατό να προκαλέσουν πιθανά σφάλματα στα κατώφλια ενέργειας E_{TH} , τα οποία έχουν εξαιρεθεί από την ανάλυση ευαισθησίας.

⁹¹ Ο λόγος για τον οποίο επιλέγονται μόνο οι συνθήκες που οδηγούν σε εγχάραξη είναι ότι η Εξ. (3.8) που δίνει την απόδοση απόθεσης χρησιμοποιείται μόνο για ποιοτικές εκτιμήσεις.

Πίνακας 3.IV Η % σχετική μεταβολή της απόδοσης εγχάραξης, EY , και των φαινόμενων συντελεστών προσκόλλησης, $S_{E,F}$ και $S_{E,CFx}$ σε επιφάνεια SiO_2 όταν οι συντελεστές του μοντέλου (ένας κάθε φορά) διαιρούνται διά δύο (/2) ή διπλασιάζονται ($\times 2$). Οι τιμές αφορούν τη μέση τιμή για ένα πλήθος συνθηκών οι οποίες οδηγούν σε εγχάραξη της επιφάνειας SiO_2 {το υποσύνολο των συνθηκών R_F , $R_{CFx} \in [0.1, 1000]$, $E=70, 100, 150$ eV, σύσταση ιόντων 5% CF_3^+ , 85% CF_2^+ , 10% CF^+ που οδηγούν σε εγχάραξη}.

SiO_2 συντελεστής	% $\Delta EY/EY$		% $\Delta S_{E,F}/S_{E,F}$		% $\Delta S_{E,CFx}/S_{E,CFx}$	
	/2	$\times 2$	/2	$\times 2$	/2	$\times 2$
S_F	5.69	6.38	8.26	10.96	16.27	12.59
S_{CFx}	3.61		4.46		19.62	
$S_{F/P}$	5.06	27.62	5.61	7.78	3.66	6.96
$S_{CFx/P}$	20.52	3.80	3.43	2.91	5.49	4.59
K_{REC}	9.00	25.27	33.27	49.88	22.34	23.69
K_0	13.04	13.13	4.42	4.53	13.20	13.15
E_a	16.24	13.08	8.20	4.49	14.71	13.24
A του $y_{PS,CF3+}$	13.46	15.90	4.37	4.37	13.16	13.16
A του $y_{PS,CF2+}$	21.18	11.64	4.81	3.84	12.91	14.30
A_{d2} του $y_{D,CF+}$	15.53	11.99	4.61	4.45	13.24	13.89
A του β_F	28.28	35.17	16.46	19.96	25.42	27.16
A του $\beta_{F/P}$	12.66	13.73	4.93	4.55	13.83	13.21
A_{d2} του β_S	19.08	15.56	6.08	6.90	18.79	22.74
A του β_{CFx}	30.20	74.18	4.94	5.10	27.93	33.33

Πίνακας 3.V Η % σχετική μεταβολή της απόδοσης εγχάραξης, EY , και των φαινόμενων συντελεστών προσκόλλησης, $S_{E,F}$ και $S_{E,CFx}$ σε επιφάνεια Si όταν οι συντελεστές του μοντέλου (ένας κάθε φορά) διαιρούνται διά δύο (/2) ή διπλασιάζονται ($\times 2$). Οι τιμές αφορούν τη μέση τιμή για ένα πλήθος συνθηκών οι οποίες οδηγούν σε εγχάραξη της επιφάνειας Si {το υποσύνολο των συνθηκών R_F , $R_{CFx} \in [0.1, 1000]$, $E=70, 100, 150$ eV, σύσταση ιόντων 5% CF_3^+ , 85% CF_2^+ , 10% CF^+ που οδηγούν σε εγχάραξη}.

Si συντελεστής	% $\Delta EY/EY$		% $\Delta S_{E,F}/S_{E,F}$		% $\Delta S_{E,CFx}/S_{E,CFx}$	
	/2	$\times 2$	/2	$\times 2$	/2	$\times 2$
S_F	31.29	43.30	11.31	14.63	17.96	13.60
S_{CFx}	17.41	15.61	3.71	3.76	18.83	32.08
$S_{F/P}$	10.86	42.46	14.03	20.78	1.78	1.23
$S_{CFx/P}$	25.70	7.13	8.37	7.30	8.58	11.60
K_{REC}	16.23	49.37	23.90	41.30	9.60	13.62
k_0	0.92	1.84	0.83	1.65	0.35	0.69
E_a	12.93	1.81	11.44	1.64	4.71	0.69
A του $y_{PS,CF3+}$	0.29	0.58	0.01	0.02	0.00	0.01
A_{d2} του $y_{D,CF2+}$	35.31	16.34	3.40	4.82	1.27	2.35
A_{d2} του $y_{D,CF+}$	9.68	6.14	0.69	1.24	0.26	0.51
A του β_F	27.17	35.32	13.08	17.13	13.18	17.43
A του $\beta_{F/P}$	11.71	7.96	5.60	2.89	5.25	2.70
A_{d2} του β_S	4.13	9.16	4.31	6.11	20.72	35.44

Η ακρίβεια στην εκτίμηση των συντελεστών του μοντέλου επηρεάζει σημαντικά την προσομοίωση εξέλιξης τοπογραφίας των εγχαρασσόμενων δομών αφού επιδρά στον υπολογισμό της τοπικής ταχύτητας εγχάραξης: Σφάλμα στις τιμές των συντελεστών επηρεάζει α) την εξάρτηση του ρυθμού εγχάραξης από τις ανεξάρτητες μεταβλητές του μοντέλου και β) τον υπολογισμό των τοπικών ροών, αφού μεταβάλλει τις τιμές των $S_{E,F}$ και S_{E,CF_x} (Κεφ. 2 και 4).

3.7 Αξιολόγηση

Αναπτύχθηκε φαινομενολογικό μοντέλο για την περιγραφή των διεργασιών που συμβαίνουν σε εγχαρασσόμενη επιφάνεια SiO_2 και Si σε πλάσμα φθοριωμένων υδρογονανθράκων. Οι ανεξάρτητες μεταβλητές είναι οι ροές των ουδετέρων συστατικών (ατόμων F και ουδετέρων ριζών CF_x) και η ροή, η ενέργεια και η σύσταση των ιόντων που φτάνουν στην εγχαρασσόμενη επιφάνεια. Οι εξαρτημένες μεταβλητές είναι η απόδοση και ο ρυθμός εγχάραξης και οι φαινόμενοι συντελεστές προσκόλλησης του ουδέτερου συστατικών.

Η αντιστοίχιση του κλάσματος κάλυψης της επιφάνειας από πολυμερές με το ανηγμένο πάχος του πολυμερικού στρώματος επί της επιφάνειας που πειραματικά παρατηρείται κατά την εγχάραξη Si , SiO_2 , καθιστά δυνατή τη σύγκριση των αποτελεσμάτων του μοντέλου με πειραματικά. Τα αποτελέσματα της σύγκρισης επιβεβαιώνουν την αντιστοίχιση. Τα μοντέλο, χωρίς προσαρμόσιμες παραμέτρους, συγκρίνεται ικανοποιητικά με τα πειραματικά δεδομένα. Μάλιστα, το μοντέλο για το SiO_2 χρησιμοποιείται για την εξήγηση των φαινομένων υστέρησης εγχάραξης και αντίστροφης υστέρησης εγχάραξης (§1.5) σε αυλάκια και οπές SiO_2 (§10.2 και §10.4).

Το μοντέλο εγχάραξης χρησιμοποιείται στο συνολικό πλαίσιο προσομοίωσης κατά τον υπολογισμό της τοπικής ταχύτητας εγχάραξης (Κεφ. 4). Τέτοιου είδους μοντέλα έχουν χρησιμοποιηθεί και σε διαφορετικά πλαίσια προσομοίωσης [Zhang & Kushner (2001), Mahorowala & Sawin (2002)], όπου η τοπική ροή στο εσωτερικό δομών υπολογίζεται με μέθοδο Monte Carlo και η εξέλιξη τοπογραφίας με μέθοδο κελιών.

Πιθανή επέκταση του μοντέλου σε επίπεδο θεώρησης είναι η προσθήκη όρου διάχυσης στην επιφάνεια [Gerodolle & Pelletier (1991), Singh et al. (1992)], ώστε να μελετηθεί η σημασία της διάχυσης σε δομές πολύ μικρών διαστάσεων (§2.3). Τέλος, για την εφαρμογή του συνολικού πλαισίου προσομοίωσης σε διαφορετική διεργασία χαμηλής πίεσης (είτε διεργασία εγχάραξης με διαφορετικό υπόστρωμα και πλάσμα, είτε διεργασία απόθεσης), αρκεί η ανάπτυξη αντίστοιχου μοντέλο υπολογισμού των ρυθμών εγχάραξης (απόθεσης) και των φαινομένων συντελεστών προσκόλλησης. Ενδιαφέρον παρουσιάζει η μελέτη και ανάπτυξη αντίστοιχων μοντέλων για την περιγραφή της σύνθετης διεργασίας

πολυβηματικής εγχάραξης δομών Si με εναλλαγή αερίων πλάσματος (ΠΕΜΕΑΠ)⁹¹ που χρησιμοποιείται ευρύτατα στην κατασκευή δομών μικρο-ηλεκτρο-μηχανικών συστημάτων (§1.1). Μια πρώτη προσέγγιση της διεργασίας με απλά μοντέλα (που δεν χρησιμοποιούν τη θεώρηση του κλάσματος κάλυψης) περιλαμβάνεται στην §10.4.2.

⁹¹ Στη διάρκεια ενός κύκλου της διεργασίας ΠΕΜΕΑΠ δύο διαφορετικά αέρια πλάσματος χρησιμοποιούνται διαδοχικά. Το πρώτο βήμα του κύκλου είναι συνήθως εγχάραξη του Si με πλάσμα SF₆, ενώ στο δεύτερο βήμα συμβαίνει απόθεση ενός πολυμερούς στρώματος με πλάσμα C₄F₈ (ή άλλου αερίου C_xF_y). Εκτός από τον πρώτο κύκλο, στο βήμα εγχάραξης εκτός του Si εγχαράσσεται και το πολυμερές που αποτίθεται στο βήμα απόθεσης.

Κεφάλαιο 4

Αλγόριθμος υπολογισμού τοπικής ταχύτητας εγχάραξης

Το μοντέλο υπολογισμού της τοπικής ταχύτητας εγχάραξης στο εσωτερικό δομών προκύπτει από τη σύζευξη των μοντέλων υπολογισμού τοπικών ροών (Κεφ.2) και εγχάραξης επιφάνειας (Κεφ. 3). Συνδέει τις ροές των συστατικών στον κύριο όγκο αντιδραστήρα πλάσματος με την τοπική ταχύτητα εγχάραξης στο εσωτερικό των δομών. Ο αλγόριθμος σύζευξης αφορά τον ταυτόχρονο υπολογισμό των τοπικών ροών και των τοπικών φαινόμενων συντελεστών προσκόλλησης των συστατικών μέσω επαναληπτικής διαδικασίας. Το αριθμητικό πρόβλημα που αντιμετωπίζεται είναι η επίλυση συστήματος μη ομογενών μη γραμμικών ολοκληρωτικών εξισώσεων Fredholm 2^{ου} είδους.

4.1 Εισαγωγή

Στο Κεφ. 2 περιγράφηκε μοντέλο υπολογισμού της τοπικής ροής συστατικού στο εσωτερικό των δομών. Η αριθμητική μέθοδος επίλυσης και τα αποτελέσματα που παρουσιάστηκαν βασίστηκαν στην παραδοχή ότι ο φαινόμενος συντελεστής προσκόλλησης του συστατικού είναι σταθερός σε κάθε στοιχειώδη επιφάνεια της δομής. Στην πράξη, ο φαινόμενος συντελεστής προσκόλλησης συστατικού σε επιφάνεια εξαρτάται από την κατάσταση της επιφάνειας και συνεπώς από τις ροές των συστατικών που φτάνουν σε αυτή. Για το σύστημα πλάσμα φθοριωμένων υδρογονανθράκων – υπόστρωμα SiO₂ ή Si, περιγράφηκε στο Κεφ. 3 μοντέλο υπολογισμού των φαινόμενων συντελεστών προσκόλλησης για τα ουδέτερα συστατικά (άτομα F, ρίζες CF_x), όπου και φάνηκε αυτή η εξάρτηση των φαινόμενων συντελεστών προσκόλλησης από τις ροές των συστατικών [Εξ. (3.10) και (3.11)]. *Οι ροές των συστατικών εξαρτώνται από τους φαινόμενους συντελεστές προσκόλλησης και οι φαινόμενοι συντελεστές προσκόλλησης από τις ροές των συστατικών. Ο υπολογισμός των τοπικών ροών και φαινόμενων συντελεστών προσκόλλησης στο εσωτερικό των δομών είναι ένα μη γραμμικό πρόβλημα.*

Για την επίλυση αυτού του μη γραμμικού προβλήματος χρειάζεται να γίνει σύζευξη των συστατικών μοντέλων (Α) και (Β) του πλαισίου προσομοίωσης (§1.6). Στη συνέχεια του κεφαλαίου περιγράφονται ο αλγόριθμος σύζευξης των δύο μοντέλων για τον υπολογισμό της τοπικής ταχύτητας εγχάραξης (§4.2), αποτελέσματα της σύζευξης (§4.3) και αξιολόγηση του αλγορίθμου (§4.4).

4.2 Αλγόριθμος σύζευξης του μοντέλου υπολογισμού των τοπικών ροών στο εσωτερικό δομών με το μοντέλο εγχάραξης επιφάνειας

Η τοπική ροή συστατικού i σε μια στοιχειώδη επιφάνεια δομής στη θέση \mathbf{x} , $j_i(\mathbf{x})$, είναι το άθροισμα (Κεφ. 2) α) της απευθείας ροής του i , $j_{direct,i}(\mathbf{x})$, δηλαδή της ροής του i που φτάνει στη στοιχειώδη επιφάνεια στη θέση \mathbf{x} απευθείας από τον κύριο όγκο του αντιδραστήρα πλάσματος και β) της ροής του i από επανεκπομπή από όλες τις υπόλοιπες στοιχειώδεις επιφάνειες της δομής. *Το γενικό πρόβλημα υπολογισμού των τοπικών ροών N το πλήθος συστατικών (π.χ. ουδέτερες ρίζες ή ιόντα) περιγράφεται από σύστημα N μη ομογενών μη γραμμικών ολοκληρωτικών εξισώσεων Fredholm 2^{ov} είδους:*

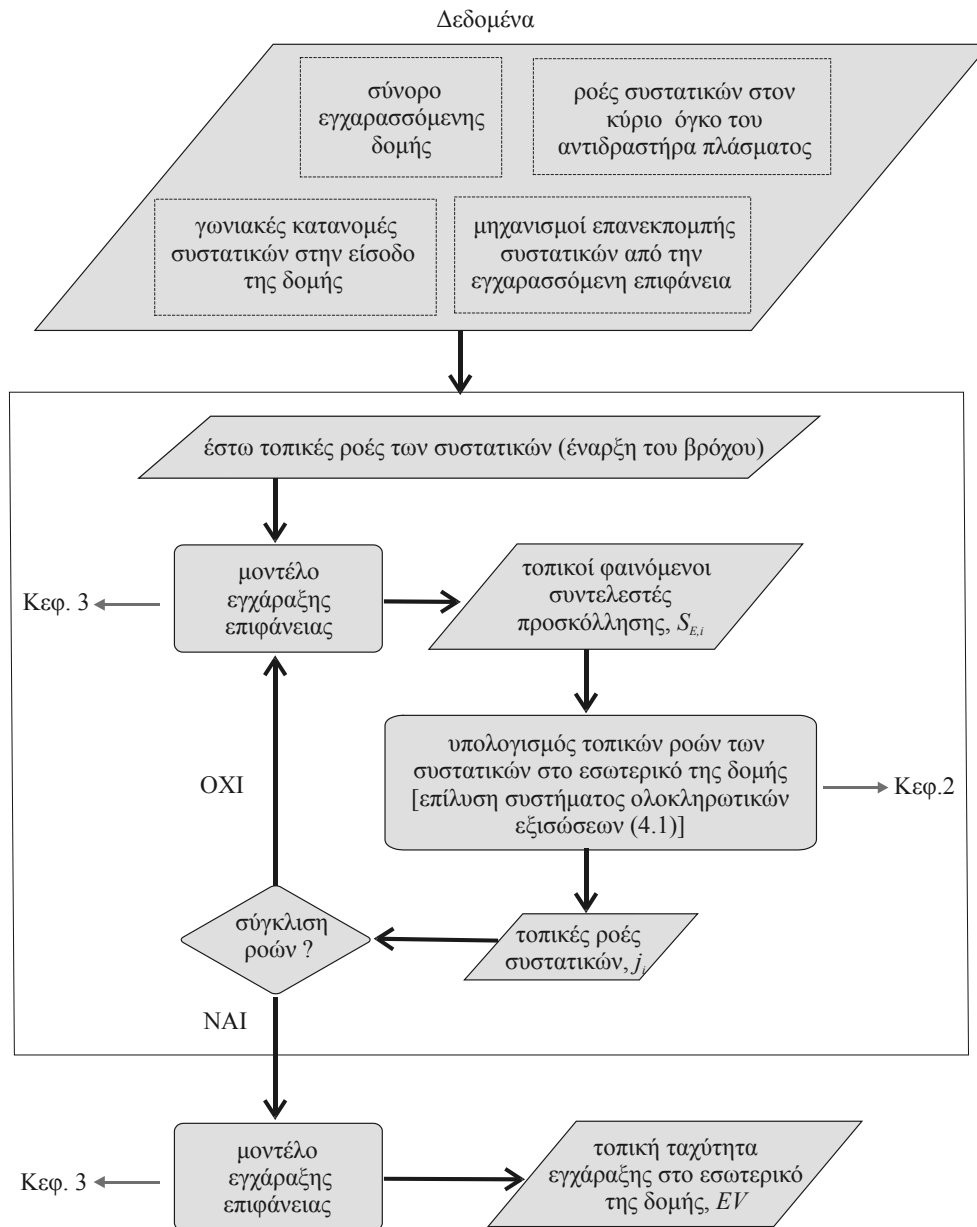
$$j_i(\mathbf{x}) = j_{direct,i}(\mathbf{x}) + \iint_{\substack{\text{επιφάνεια} \\ \text{δομής}}} \{1 - S_{E,i}[j_1(\mathbf{x}'), j_2(\mathbf{x}'), \dots, j_N(\mathbf{x}')]\} Q(\mathbf{x}, \mathbf{x}') j_i(\mathbf{x}') dA' \\ i=1, 2, \dots, N, \quad (4.1)$$

όπου $Q(\mathbf{x}, \mathbf{x}')$ είναι η συνάρτηση που εκφράζει την επίδραση της γεωμετρίας της δομής και του μηχανισμού επανεκπομπής (Κεφ. 2). $S_{E,i}[j_1(\mathbf{x}'), j_2(\mathbf{x}'), \dots, j_N(\mathbf{x}')]$ είναι ο τοπικός

φαινόμενος συντελεστής προσκόλλησης του συστατικού i στη στοιχειώδη επιφάνεια στη θέση x' . Ο φαινόμενος συντελεστής προσκόλλησης του i εκφράζει το κλάσμα της ροής του είδους i που προσκολλάται στην επιφάνεια και μπορεί να υπολογιστεί από το μοντέλο εγχάραξης επιφάνειας [Εξ. (3.10) και (3.11)]. Η εξάρτηση του φαινομένου συντελεστή προσκόλλησης από τις τοπικές ροές προσδίδει στην Εξ. (4.1) το μη γραμμικό χαρακτήρα: Οι τοπικές ροές των συστατικών εξαρτώνται από τους τοπικούς φαινόμενους συντελεστές προσκόλλησης και οι τοπικοί φαινόμενοι συντελεστές προσκόλλησης εξαρτώνται από τις τοπικές ροές. Ο ταυτόχρονος υπολογισμός των τοπικών ροών των συστατικών και των τοπικών φαινομένων συντελεστών προσκόλλησης στο εσωτερικό των δομών αποτελεί το κεντρικό σημείο της σύζευξης των μοντέλων υπολογισμού των τοπικών ροών και του μοντέλου εγχάραξης επιφανειών.

Ο υπολογισμός των τοπικών ροών και φαινομένων συντελεστών προσκόλλησης γίνεται επαναληπτικά και παριστάνεται σχηματικά στο Σχήμα 4.1 [Kokkoris et al. (2004)]. Τα δεδομένα για τον υπολογισμό της τοπικής ταχύτητας εγχάραξης είναι το σύνορο της εγχαρασσόμενης δομής, οι ροές των συστατικών στον κύριο όγκο του αντιδραστήρα πλάσματος, οι γωνιακές κατανομές των συστατικών στην είσοδο της δομής (απαραίτητες για τον υπολογισμό της απευθείας ροής) και οι μηχανισμοί επανεκπομπής των συστατικών από την εγχαρασσόμενη επιφάνεια. Η επαναληπτική διαδικασία ξεκινά με μια αρχική εκτίμηση για τις τοπικές ροές των συστατικών η οποία τροφοδοτείται στο μοντέλο εγχάραξης επιφάνειας. Από το μοντέλο εγχάραξης επιφάνειας προκύπτουν οι τοπικοί φαινόμενοι συντελεστές προσκόλλησης, οι οποίοι τροφοδοτούνται στο μοντέλο υπολογισμού των τοπικών ροών, δηλαδή στο σύστημα των ολοκληρωτικών εξισώσεων της Εξ. (4.1). Από το σύστημα των ολοκληρωτικών εξισώσεων προκύπτουν νέες τιμές για τις τοπικές ροές των συστατικών, οι οποίες στη συνέχεια συγκρίνονται με τις αρχικές. Αν δεν υπάρχει σύγκλιση, οι νέες τιμές παίρνουν τη θέση των αρχικών και η διαδικασία επαναλαμβάνεται μέχρι οι αρχικές και νέες τιμές των τοπικών ροών να συγκλίνουν. Όταν επιτευχθεί σύγκλιση, οι τοπικές ροές των συστατικών τροφοδοτούνται στο μοντέλο εγχάραξης επιφάνειας, από το οποίο προκύπτει η τοπική ταχύτητα εγχάραξης.

Αν και το πρόβλημα υπολογισμού των τοπικών ροών συστατικών στο εσωτερικό δομής αντιστοιχεί σε ένα σύστημα μη γραμμικών ολοκληρωτικών εξισώσεων [Εξ. (4.1)], σε κάθε επανάληψη του αλγόριθμου σύζευξης λύνονται N (πλήθος συστατικών) γραμμικές ολοκληρωτικές εξισώσεις, αφού οι συναρτήσεις $S_{E,i}$ θεωρούνται γνωστές. Για την επίλυση κάθε μίας από αυτές χρησιμοποιούνται οι αριθμητικές μέθοδοι που περιγράφηκαν στο Κεφ. 2 (§2.6).



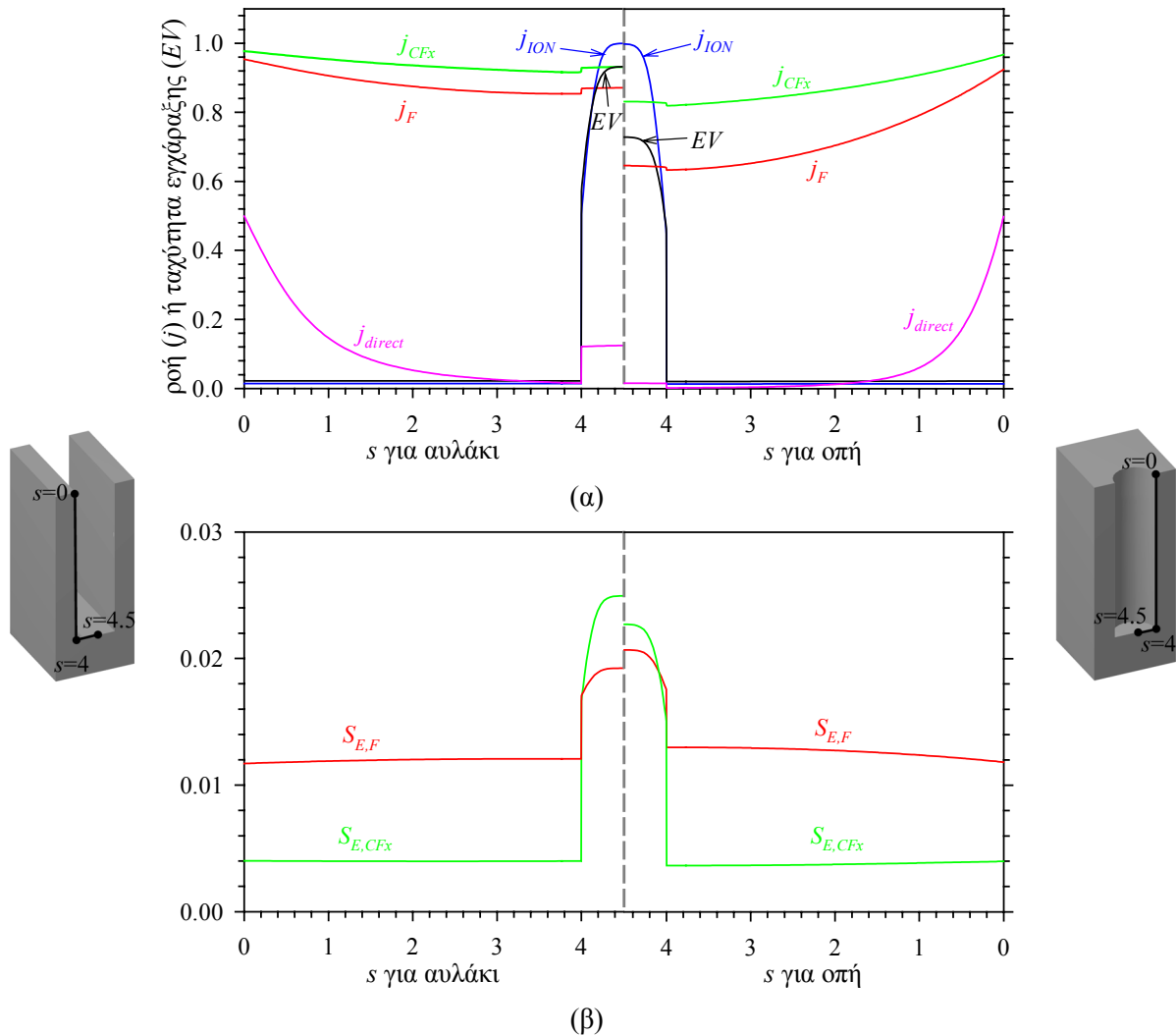
Σχήμα 4.1 Σχηματική παράσταση του αλγόριθμου σύζευξης των μοντέλων υπολογισμού τοπικών ροών στο εσωτερικό δομών και εγχάραξης επιφάνειας. Με τη σύζευξη συνδέονται οι ροές των συστατικών στον κύριο όγκο του πλάσματος με την τοπική ταχύτητα εγχάραξης στο εσωτερικό των δομών.

4.3 Αποτελέσματα

Παρουσιάζονται αποτελέσματα της σύζευξης των δύο μοντέλων σε πρότυπες δομές^{3†} SiO₂ και Si που εγχαράσσονται σε πλάσμα φθοριωμένων υδρογονανθράκων. Επιλύεται σύστημα τριών μη ομογενών μη γραμμικών ολοκληρωτικών εξισώσεων Fredholm 2^{ου} είδους με τον τρόπο που περιγράφεται στην §4.2. Η πρώτη εξίσωση αφορά την τοπική ροή των

^{3†} Αυλάκια με κάθετα πλάγια τοιχώματα και πλήρως επίπεδη βάση και κυλινδρικές οπές.

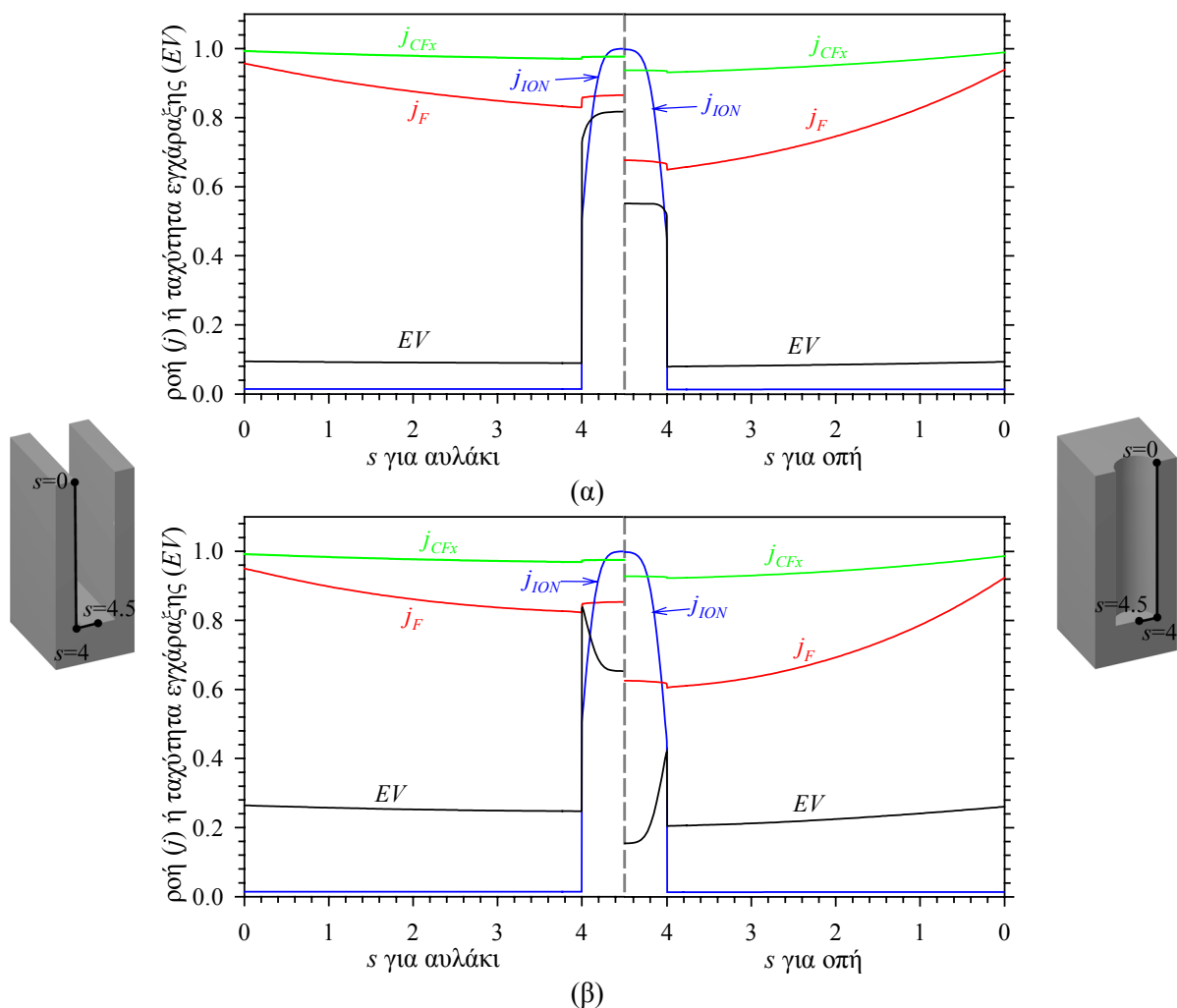
ατόμων F, η δεύτερη στην τοπική ροή ριζών CF_x και η τρίτη την τοπική ροή των ιόντων. Οι φαινόμενοι συντελεστές προσκόλλησης για τα άτομα F και τις ρίζες CF_x υπολογίζονται από τις Εξ. (3.10) και (3.11) του μοντέλου επιφάνειας. Ο φαινόμενος συντελεστής προσκόλλησης για τα ιόντα είναι μονάδα, δηλαδή θεωρείται ότι δεν επανεκπέμπονται. Τα αποτελέσματα που παρουσιάζονται στη συνέχεια αφορούν και κάθε όμοια με την περιγραφόμενη δομή, η αλλιώς αφορούν δομές με τον ίδιο ΛΑ. Η μεταβλητή s στα σχήματα που ακολουθούν μπορεί να αντικατασταθεί από την s/w , όπου w το πλάτος της δομής.



Σχήμα 4.2 (α) Η τοπική ροή των ατόμων F, j_F , των ριζών CF_x , j_{CF_x} , και των ιόντων, j_{ION} , κατά μήκος διατομής πρότυπου αυλακιού και οπής SiO_2 . Στο ίδιο σχήμα φαίνεται η τοπική απευθείας ροή, j_{direct} , και η τοπική ταχύτητα εγχάραξης, EV . Όλες οι ροές είναι ανηγμένες στις αντίστοιχες ροές που φτάνουν σε ελεύθερη επιφάνεια από τον κύριο όγκο του πλάσματος, ενώ η ταχύτητα εγχάραξης είναι ανηγμένη σε αυτή ελεύθερης επιφάνειας. (β) Οι τοπικοί φαινόμενοι συντελεστές προσκόλλησης των ατόμων F, $S_{E,F}$, και των ριζών CF_x , S_{E,CF_x} , κατά μήκος διατομής πρότυπου αυλακιού και οπής SiO_2 . Το βάθος των δομών είναι $d=4$ και το πλάτος $w=1$ ($\Lambda A=4$). Το αριστερό τμήμα του Σχήματος 4.2 αφορά το αυλάκι, ενώ το δεξιό την οπή. Συνθήκες: Οι λόγοι των ροών των ουδέτερων συστατικών (F, CF_x) προς αυτή των ιόντων σε ελεύθερη επιφάνεια είναι $R_{F,0}=R_{CF_x,0}=10$, η ενέργεια των ιόντων είναι $E=100$ eV και η σύσταση τους είναι 10% CF_3^+ , 85% CF_2^+ και 5% CF^+ . Ισοτροπική κατανομή και

μηχανισμός «διάχυτης» επανεκπομπής για τα ουδέτερα συστατικά και κανονική κατανομή με τυπική απόκλιση $\sigma=2^\circ$ για τα ιόντα.

Στο Σχήμα 4.2α φαίνεται η τοπική ροή ατόμων F, ριζών CF_x και ιόντων [ανηγμένες στις αντίστοιχες ροές που φτάνουν σε ελεύθερη επιφάνεια (§1.4) από τον κύριο όγκο του πλάσματος] κατά μήκος διατομής πρότυπου αυλακιού (αριστερή πλευρά του Σχήματος 4.2α) και οπής (δεξιά πλευρά του Σχήματος 4.2α) SiO_2 . Στο ίδιο σχήμα φαίνεται και η τοπική ταχύτητα εγχάραξης (ανηγμένη στην ταχύτητα εγχάραξης ελεύθερης επιφάνειας). Στο Σχήμα 4.2β φαίνονται οι υπολογιζόμενοι τοπικοί φαινόμενοι συντελεστές προσκόλλησης των ατόμων F και των ριζών CF_x . Ο φαινόμενος συντελεστής προσκόλλησης στο πλάγιο τοίχωμα για τα άτομα F είναι μεγαλύτερος από αυτόν για τις ρίζες CF_x και για αυτό η μείωση της τοπικής ροής των ατόμων F είναι σημαντικότερη. Αν και οι φαινόμενοι συντελεστές των συστατικών δεν αλλάζουν σημαντικά από το αυλάκι στην οπή (Σχήμα 4.2β), οι τοπικές ροές στην οπή είναι μικρότερες. Αυτό οφείλεται στο ότι η απευθείας ροή (διαθέσιμη για επανεκπομπή ροή) στην οπή είναι μικρότερη σε σχέση με το αυλάκι (j_{direct} , Σχήμα 4.2α).



Σχήμα 4.3 (α) Η τοπική ροή των ατόμων F, j_F , των ριζών CF_x , j_{CF_x} , και των ιόντων, j_{ION} , κατά μήκος διατομής πρότυπου αυλακιού και οπής Si. Στο ίδιο σχήμα φαίνεται η τοπική ταχύτητα εγχάραξης, EV . Όλες οι ροές είναι ανηγμένες στις αντίστοιχες ροές φτάνουν σε ελεύθερη επιφάνεια από τον κύριο

όγκο του πλάσματος, ενώ η ταχύτητα εγχάραξης είναι ανηγμένη σε αυτή ελεύθερης επιφάνειας. Το βάθος των δομών είναι $d=4$ και το πλάτος $w=1$ ($LA=4$). Το αριστερό τμήμα του Σχήματος 4.3α αφορά το αυλάκι, ενώ το δεξιό την οπή. Συνθήκες: Οι λόγοι των ροών των ουδέτερων συστατικών (F , CF_x) προς αυτή των ιόντων σε ελεύθερη επιφάνεια είναι $R_{F,0}=40$ και $R_{CF_x,0}=10$, η ενέργεια των ιόντων είναι $E=100$ eV και η σύσταση τους είναι 10% CF_3^+ , 85% CF_2^+ και 5% CF^+ . Ισοτροπική κατανομή και μηχανισμός «διάχυτης» επανεκπομπής για τα ουδέτερα συστατικά και κανονική κατανομή με τυπική απόκλιση $\sigma=2^\circ$ για τα ιόντα. (β) Τα ίδια με (α) σε διαφορετικές συνθήκες: $R_{F,0}=20$, $R_{CF_x,0}=10$.

Στο Σχήμα 4.3α φαίνεται η τοπική ροή ατόμων F , ριζών CF_x και ιόντων (ανηγμένες στις αντίστοιχες ροές που φτάνουν σε ελεύθερη επιφάνεια από τον κύριο όγκο του πλάσματος) κατά μήκος διατομής πρότυπου αυλακιού και οπής Si. Στο ίδιο σχήμα φαίνεται και η τοπική ταχύτητα εγχάραξης (ανηγμένη στην ταχύτητα εγχάραξης ελεύθερης επιφάνειας). Στο Σχήμα 4.3β φαίνονται τα ίδια σε διαφορετικές συνθήκες. *Η αλλαγή στις συνθήκες μεταβάλλει την καμπύλη μεταβολής της τοπικής ταχύτητας εγχάραξης. Η τοπική ταχύτητα στις συνθήκες του Σχήματος 4.3β εμφανίζει μέγιστο στα άκρα της βάσης των δομών, το οποίο μπορεί να εξηγήσει ένα από τα προβλήματα εγχάραξης, αυτό των πτυχώσεων στη βάση των δομών (microtrenching, §1.5, Σχήμα 1.9στ).*

Στα παραδείγματα που παρουσιάστηκαν το πλήθος των επαναλήψεων της διαδικασίας που περιγράφεται στην §4.2 είναι μικρότερο από 10.

4.4 Αξιολόγηση

Ο υπολογισμός της τοπικής ταχύτητας εγχάραξης μέσα σε δομές απαιτεί τον υπολογισμό των τοπικών ροών των συστατικών. Για τον υπολογισμό των τοπικών ροών των συστατικών χρειάζεται η επίλυση ενός συστήματος N (πλήθος συστατικών) μη ομογενών μη γραμμικών ολοκληρωτικών εξισώσεων Fredholm 2^{00} είδους [Εξ. (4.1)]. Οι ολοκληρωτικές εξισώσεις είναι μη γραμμικές διότι οι τοπικοί φαινόμενοι συντελεστές προσκόλλησης των συστατικών εξαρτώνται από τις τοπικές ροές των συστατικών. Προτείνεται επαναληπτική διαδικασία ταυτόχρονου υπολογισμού των τοπικών ροών και φαινόμενων συντελεστών προσκόλλησης των συστατικών (Σχήμα 4.1), που απαιτεί σε κάθε επανάληψη την επίλυση N μη ομογενών γραμμικών ολοκληρωτικών εξισώσεων Fredholm 2^{00} είδους με τη μέθοδο Nystrom (με κανόνα ολοκλήρωσης Gauss και μέθοδο SOR για την επίλυση του γραμμικού συστήματος), δηλαδή με τη βέλτιστη των δύο αριθμητικών μεθόδων επίλυσης που περιγράφηκαν στην §2.6.

Το μοντέλο υπολογισμού της τοπικής ροής διαφέρει από άλλα της βιβλιογραφίας [Cale & Raupp (1990), Drotar et al. (2000b)] στο ότι λαμβάνει υπόψη αυτή την εξάρτηση των τοπικών φαινόμενων συντελεστών προσκόλλησης από τις τοπικές ροές. Ωστόσο υπάρχουν και εργασίες στις οποίες λαμβάνεται υπόψη αυτή η εξάρτηση [Arnold et al. (1993), Levinson et al. (1997), Tuda et al. (1997), Levinson et al. (2000)]. Η διαφορά του προτεινόμενου αλγόριθμου σύζευξης από την εργασία των Arnold et al. είναι στον κανόνα

ολοκλήρωσης, ο οποίος στην εργασία τους είναι ο κανόνας ορθογωνίου. Επίσης, χρησιμοποιούν απευθείας την ολοκληρωτική εξίσωση [Εξ. (4.1)] για τον υπολογισμό της τοπικής ροής από επανάληψη σε επανάληψη. Το σύστημα μη γραμμικών ολοκληρωτικών εξισώσεων αντιμετωπίζεται με διαφορετικό τρόπο από τους Levinson et al., οι οποίοι το επιλύουν με τη μέθοδο Newton-Raphson και σε κάθε επανάληψη χρησιμοποιούν τη μέθοδο παραγοντοποίησης LU για την επίλυση του γραμμικού συστήματος. Στον αλγόριθμο που προτείνεται δεν χρειάζεται η κατασκευή Ιακωβιανού πίνακα και η μέθοδος SOR είναι γενικά ταχύτερη από τη μέθοδο παραγοντοποίησης LU. Ο κανόνας ολοκλήρωσης δεν είναι γνωστός στις εργασίες των Levinson et al., ενώ δεν δίδονται στοιχεία για τη μέθοδο επίλυσης στην εργασία των Tuda et al.

Οι Zhang και Kushner [Zhang & Kushner (2001)] και οι Mahorowala και Sawin [Mahorowala & Sawin (2002)] χρησιμοποιούν διαφορετική προσέγγιση για τον υπολογισμό της τοπικής ταχύτητας εγχάραξης μέσα σε δομές: χρησιμοποιούν μέθοδο Monte Carlo για τη μεταφορά των σωματιδίων των συστατικών στο εσωτερικό της δομής, μέθοδο κελιών για την εξέλιξη της τοπογραφίας και μοντέλο εγχάραξης που βασίζεται στο κλάσμα των συστατικών στα κελιά που ορίζουν την επιφάνεια εγχάραξης. Ο λόγος για τον οποίο χρησιμοποιούν τη μέθοδο Monte Carlo είναι λόγω της ευκολίας που παρέχει για την ενσωμάτωση των δράσεων στην επιφάνεια χωρίς να χρειάζονται επαναληπτικές διαδικασίες και σύγκλιση [ο.π.]. Ωστόσο η χρήση της μεθόδου Monte Carlo έχει υψηλότερο υπολογιστικό κόστος σε χρόνο [ο.π.].

Το Μέρος II της εργασίας ορίζει την εφαρμογή του αλγόριθμου εξέλιξης συνόρου. Ορίζει το σύνορο (εγχαρασόμενη επιφάνεια) υπολογίζοντας την ταχύτητά του (ταχύτητα εγχάραξης). Αν ζητούμενο είναι η εφαρμογή της μεθόδου των ισοϋψών (αλγόριθμος εξέλιξης συνόρου) σε άλλη εφαρμογή (π.χ. εξέλιξη διεπιφάνειας ρευστών), θα πρέπει να κατασκευαστεί το πλαίσιο υπολογισμού ταχύτητας συνόρου που περιγράφει την εξεταζόμενη εφαρμογή. Το πλαίσιο υπολογισμού τοπικής ταχύτητας εγχάραξης μέσα σε δομές που παρουσιάζεται είναι γενικό και μπορεί να εφαρμοστεί και σε άλλες διεργασίες εγχάραξης και απόθεσης. Αυτό που χρειάζεται είναι κατάλληλο μοντέλο εγχάραξης (απόθεσης) που υπολογίζει ταχύτητα εγχάραξης (απόθεσης) και φαινόμενους συντελεστές προσκόλλησης των συστατικών.

Μέρος III

Αλγόριθμος εξέλιξης τοπογραφίας.

Εξέλιξη συνόρου με τη μέθοδο των ισοϋψών

Στο Μέρος III της εργασίας περιγράφεται η μέθοδος των ισοϋψών. Στο Κεφ. 5 εισάγονται οι βασικές έννοιες της μεθόδου και σημειώνονται τα υπολογιστικά προβλήματα που περικλείει η εφαρμογή της. Στα επόμενα κεφάλαια μελετώνται αυτοτελώς τα υπολογιστικά προβλήματα και αξιολογούνται μέθοδοι επίλυσης. Στο Κεφ. 6 εξετάζεται η επίλυση της εξίσωσης ισοϋψών, στο Κεφ. 7 περιγράφονται αριθμητικές μέθοδοι για την επίλυση της εξίσωσης Eikonal, στο Κεφ. 8 η εύρεση ισοϋψούς συνάρτησης, και στο Κεφ. 9 η προεκβολή ταχύτητας μετατόπισης του συνόρου.

Κεφάλαιο 5

Η μέθοδος των ισοϋψών

Περιγράφονται οι βασικές έννοιες της μεθόδου των ισοϋψών. Ορίζεται η συνάρτηση ισοϋψών και διερευνάται η προέλευση των εξισώσεων που περιγράφουν εξέλιξη συνόρου. Σημειώνεται η σχέση των εξισώσεων της μεθόδου με υπερβολικούς νόμους διατήρησης και περιγράφονται τα βήματα εφαρμογής της μεθόδου σε προβλήματα εξέλιξης συνόρου. Διακρίνονται δύο τύποι προβλημάτων: α) Το «γενικό» πρόβλημα εξέλιξης συνόρου, το οποίο είναι πρόβλημα αρχικών τιμών που περιγράφεται από την εξίσωση ισοϋψών. β) Το «στατικό» πρόβλημα εξέλιξης συνόρου, το οποίο είναι πρόβλημα συνοριακών τιμών και προκύπτει από το πρόβλημα αρχικών τιμών όταν υπάρχει περιορισμός στο πρόσημο της ταχύτητας μετατόπισης του συνόρου.

5.1 Εισαγωγή

Το πρόβλημα εξέλιξης συνόρου είναι σύνηθες σε πολλές περιοχές. Σε προβλήματα ρευστομηχανικής, το κινούμενο σύνορο είναι η διεπιφάνεια μεταξύ δύο ρευστών, σε προβλήματα καύσης είναι το μέτωπο στη φλόγας. Σε προβλήματα εγχάραξης, το σύνορο είναι η εγχαρασόμενη επιφάνεια.

Οι περισσότεροι διαδεδομένοι αλγόριθμοι εξέλιξης συνόρου σε προβλήματα εγχάραξης είναι:

A) Μέθοδοι χορδής (string ή marker methods). Είναι μέθοδοι στις οποίες διακριτοποιείται το κινούμενο σύνορο και κάθε σημείο του μετακινείται κάθετα σε αυτό σύμφωνα την τοπική ταχύτητα του συνόρου και την εξίσωση κίνησης. Πρόκειται για μία απλή στην εφαρμογή της μέθοδο. Μια γεωμετρική παραλλαγή³¹ της μεθόδου ήταν αυτή που εφαρμόστηκε για πρώτη φορά στα προβλήματα εξέλιξης τοπογραφίας κατά την εμφάνιση στη λιθογραφία, την απόθεση και την εγχάραξη στο τέλος της δεκαετίας του 1970 {[Jewett et al. (1977)], [SAMPLE (a program for Simulating And Modeling of Profiles for Lithography and Etching), Oldham et al. (1979), Oldham et al. (1980)]}. Η μέθοδος χρησιμοποιήθηκε ευρέως και χρησιμοποιείται μέχρι σήμερα [Singh et al. (1992), Harafuji & Misaka (1995), Levinson et al. (1997), Rauf et al. (2002), Volland & Rangelow (2003)].

Το μειονέκτημα των γεωμετρικών παραλλαγών της μεθόδου είναι ότι είναι καθαρά εμπειρικές. Γενικά, οι μέθοδοι χορδής μπορεί να εμφανίσουν προβλήματα αστάθειας [Sethian (1996), σ. 25-28]. Σε περιπτώσεις όπου στο σύνορο υπάρχουν (ή δημιουργούνται) γωνίες (ασυνέχειες κλίσης), είναι πιθανό να δημιουργηθούν βρόχοι στο σύνορο, για την απομάκρυνση των οποίων χρειάζονται πρόσθετες εμπειρικές τεχνικές. Ένα ακόμη ζήτημα που δύσκολα αντιμετωπίζονται από τις μεθόδους χορδής είναι η αποκοπή συνόρου ή η συγχώνευση συνόρων. Τα ζητήματα απομάκρυνσης βρόχων, συνένωσης και αποκοπής είναι περισσότερο πολύπλοκα σε τρεις διαστάσεις [ο.π., σ. 28-29].

B) Μέθοδος χαρακτηριστικών [method of characteristics, shock tracking algorithms, Hamaguchi et al. (1993), Arnold et al. (1994)]. Όταν η κάθετη στο σύνορο $u(x,t)$ ταχύτητα, c , είναι τέτοια ώστε η διαφορική εξίσωση μερικών παραγώγων που περιγράφει την εξέλιξη του συνόρου, $u_t + c\sqrt{1+u_x^2} = 0$, είναι πρώτης τάξης (π.χ. όταν η ταχύτητα σημείου του συνόρου εξαρτάται μόνο από το χρόνο, τη θέση του σημείου και την κλίση του συνόρου στο σημείο), τότε μπορεί να χρησιμοποιηθεί για την επίλυση η μέθοδος των χαρακτηριστικών.

Γ) Μέθοδοι κελιών [cell-based methods, Strasser & Selberherr (1995), Hoekstra et al. (1997), Mahorowala & Sawin (2002), Marcos et al. (2003)]. Στα προβλήματα εγχάραξης – απόθεσης,

³¹ Σε δύο διαστάσεις το σύνορο απεικονίζεται από μία σειρά ευθύγραμμων τμημάτων που ορίζονται από κόμβους. Η μέθοδος σε κάθε χρονικό βήμα μετακινεί αυτούς τους κόμβους κατά τη διεύθυνση της διχοτόμου της γωνίας που σχηματίζεται από το προηγούμενο και το επόμενο του κόμβου ευθύγραμμο τμήματα.

αυτές οι μέθοδοι βασίζονται στην απεικόνιση των δομών με κελιά (ψηφίδες), κάθε ένα από τα οποία μπορεί να περιέχει περισσότερα από ένα υλικά. Τα όρια των κελιών χρησιμοποιούνται για τον προσδιορισμό της τοπογραφίας της δομής. Οι μέθοδοι αυτές μπορούν να χειριστούν εύκολα συγχωνεύσεις συνόρων. Ωστόσο, ο υπολογισμός της κλίσης του συνόρου είναι περισσότερο πολύπλοκος από τις υπόλοιπες μεθόδους. Επίσης, οι μέθοδοι αυτές έχουν υψηλότερο υπολογιστικό κόστος σε χρόνο και μνήμη [Maharowala (1998)].

Δ) Η μέθοδος των ισοϋψών [level set method, Sethian (1999), Osher & Fedkiw (2003)]. Η μέθοδος βασίζεται στην έννοια της πεπλεγμένης συνάρτησης. Το σύνορο ορίζεται έμμεσα ως η ισοϋψής μηδέν πεπλεγμένης συνάρτησης, της λεγόμενης συνάρτησης ισοϋψών. Η εξέλιξη του συνόρου παρακολουθείται έμμεσα από την εξέλιξη αυτής της συνάρτησης.

Η μέθοδος των ισοϋψών έχει χρησιμοποιηθεί για την εξέλιξη τοπογραφίας σε διεργασίες εγχάραξης από αρκετές ομάδες [Cale et al. (1997), Hsiao et al. (1997), Hwang et al. (1999), Im et al. (2001), La Magna & Garozzo (2003)]. Τα πλεονεκτήματα της μεθόδου ισοϋψών⁹¹ που οδήγησαν στην επιλογή υλοποίησής της ως αλγόριθμο εξέλιξης τοπογραφίας στο πλαίσιο προσομοίωσης συνοψίζονται στα παρακάτω [Sethian (2001)]: α) Είναι ειδικά σχεδιασμένη να αντιμετωπίζει σύνορα τα οποία εξελίσσονται αναπτύσσοντας γωνίες χωρίς πρόσθετες εμπειρικές τεχνικές (π.χ. εξάλειψη βρόχων). β) Αντιμετωπίζει τοπολογικές συγχωνεύσεις και αποκοπές με φυσικό τρόπο και χωρίς εμπειρικούς κανόνες. γ) μπορεί να χειριστεί προβλήματα σε δύο ή τρεις διαστάσεις χωρίς διαφορές στα αριθμητικά σχήματα επίλυσης.

Η μέθοδος των ισοϋψών συνιστά, όπως αναφέρθηκε, αλγόριθμο εξέλιξης συνόρου που βασίζεται στην πεπλεγμένη (implicit) απεικόνιση του συνόρου. Για την επίλυση των υπολογιστικών προβλημάτων που περιλαμβάνει χρησιμοποιούνται τεχνικές δανεισμένες από υπερβολικούς νόμους διατήρησης.

Στις επόμενες παραγράφους (§5.2 και §5.3) ορίζεται η συνάρτηση ισοϋψών ως πεπλεγμένη απεικόνιση συνόρου και η προσημασμένη απόσταση από σύνορο [Osher & Fedkiw (2003), σ. 1-21]. Το πρόβλημα εξέλιξης συνόρου με τη μέθοδο των ισοϋψών είναι ένα πρόβλημα αρχικών τιμών που περιγράφεται από την εξίσωση ισοϋψών (§5.4). Σε κάποιες περιπτώσεις μπορεί να αναχθεί σε πρόβλημα συνοριακών τιμών, το λεγόμενο «στατικό» πρόβλημα (§5.5). Διερευνάται η προέλευση των εξισώσεων περιγραφής των δύο προβλημάτων και συνδέονται με τις εξισώσεις Hamilton-Jacobi και τους υπερβολικούς νόμους διατήρησης (§5.6, §5.7, §5.8). Στη συνέχεια (§5.9), με βάση τη μέθοδο των χαρακτηριστικών, προσδιορίζονται οι προβολές των χαρακτηριστικών καμπυλών στα δύο προβλήματα (εξίσωση ισοϋψών και «στατικό» πρόβλημα). Το κεφάλαιο ολοκληρώνεται με

⁹¹ Θα πρέπει να σημειωθεί ότι η αξιολόγηση έγινε με βάση βιβλιογραφικές παρατηρήσεις. Δεν έχει γίνει στην πράξη σύγκριση των υπόλοιπων μεθόδων με τη μέθοδο των ισοϋψών.

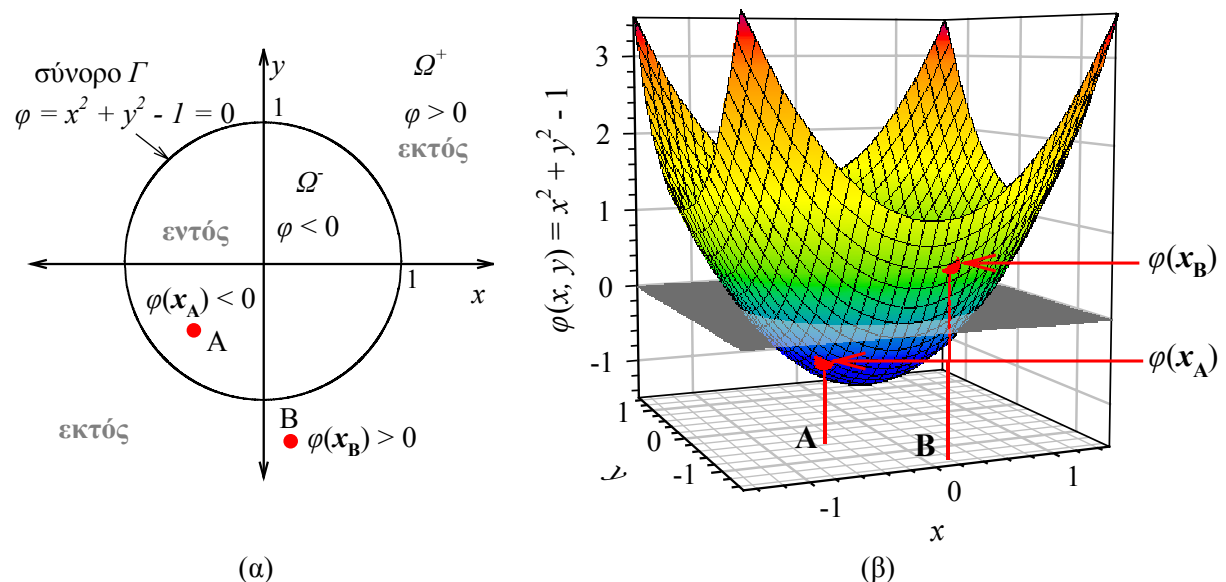
την περιγραφή των βημάτων εφαρμογής της μεθόδου σε προβλήματα εξέλιξης συνόρου (§5.10).

5.2 Άμεση και πεπλεγμένη απεικόνιση συνόρου

Σύνоро σε μία διάσταση είναι το πολύ δύο σημεία που ορίζουν τμήμα σε μία γραμμή. Σε δύο διαστάσεις, είναι μια καμπύλη που χωρίζει δύο επιφάνειες του επιπέδου. Σε τρεις διαστάσεις, είναι μια επιφάνεια που χωρίζει δύο όγκους. Έστω το κλειστό σύνορο Γ του Σχήματος 5.1. Πρόκειται για μια καμπύλη που χωρίζει το $\Omega \subseteq \mathbb{R}^2$ σε δύο περιοχές, Ω^- στο εσωτερικό και Ω^+ στο εξωτερικό του συνόρου Γ . Το σύνορο Γ είναι κύκλος με ακτίνα 1 και κέντρο την αρχή των αξόνων. Άμεση απεικόνιση του συνόρου Γ είναι η

$$\Gamma = \{ \mathbf{x} \mid |\mathbf{x}|=1 \}. \quad (5.1)$$

Η άμεση απεικόνιση συνόρου είναι η ρητή παράθεση όλων των σημείων που ανήκουν σε αυτό. Στη γενική περίπτωση συνόρων σε δύο διαστάσεις, άμεση απεικόνιση είναι μια συνεχής διανυσματική παραμετρική συνάρτηση $\mathbf{x}(s)$, $s \in [s_0, s_f]$. Αν το σύνορο είναι κλειστό, $\mathbf{x}(s_0) = \mathbf{x}(s_f)$. Το ρόλο της παραμέτρου s μπορεί να παίζει το μήκος τόξου του συνόρου.



Σχήμα 5.1 (α) Άμεση απεικόνιση της καμπύλης $|\mathbf{x}|=1$ ή $x^2 + y^2 = 1$ (σύνορο Γ). (β) Πεπλεγμένη απεικόνιση του συνόρου Γ με τη συνάρτηση $\varphi = x^2 + y^2 - 1$. Το σύνορο Γ είναι η ισοϋψής 0 της πεπλεγμένης συνάρτησης φ .

Εκτός από την άμεση απεικόνιση, ένα σύνορο μπορεί να απεικονιστεί και έμμεσα. Γενικά, σύνορο Γ που έμμεσα απεικονίζεται από τη συνάρτηση $\mathbf{x}: \mathbb{R}^{n-1} \rightarrow \mathbb{R}^n$ ($n=2, 3$), μπορεί να απεικονιστεί έμμεσα ως η ισοϋψής μηδέν συνάρτησης $\varphi(\mathbf{x}): \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$,

$$\Gamma = \{ \mathbf{x} \in R^n \mid \varphi = 0 \}. \quad (5.2)$$

Η συνάρτηση φ καλείται *πεπλεγμένη συνάρτηση ορισμού του συνόρου* Γ και δεν είναι μοναδική. Γενικά, η πεπλεγμένη συνάρτηση ορισμού του συνόρου Γ αλλάζει πρόσημο στο σύνορο Γ , ωστόσο υπάρχουν και περιπτώσεις όπου στο σύνορο εμφανίζεται ελάχιστο ίσο με μηδέν (π.χ. όταν η πεπλεγμένη συνάρτηση είναι η απόσταση από το σύνορο). Το σύνορο Γ του Σχήματος 5.1 μπορεί να απεικονιστεί πεπλεγμένα ως η ισοϋψής μηδέν της συνάρτησης $\varphi = x^2 + y^2 - 1$. Η φ είναι μηδέν πάνω στο σύνορο Γ , αρνητική στο εσωτερικό του συνόρου Γ και θετική στο εξωτερικό.

Τόσο στην άμεση, όσο και στην πεπλεγμένη απεικόνιση, συνήθως δεν είναι γνωστές αναλυτικές σχέσεις περιγραφής, όπως αυτές των Εξ. (5.1) και (5.2). Αν για παράδειγμα οι απεικονίσεις είναι αποτέλεσμα αριθμητικών υπολογισμών, αυτές είναι διακριτές και όχι συνεχείς. Τότε χρειάζεται διακριτοποίηση στον R για την άμεση απεικόνιση, και στον R^n για την πεπλεγμένη. Για την περίπτωση συνόρου-καμπύλης, η άμεση διακριτή απεικόνιση απαιτεί διακριτοποίηση καμπύλης, ενώ η πεπλεγμένη απαιτεί διακριτοποίηση δισδιάστατου χωρίου. Συνεπώς, η αποθήκευση της πεπλεγμένης απεικόνισης έχει μεγαλύτερες απαιτήσεις σε μνήμη. Είναι ένα μειονέκτημα της πεπλεγμένης απεικόνισης συνόρου, το οποίο ωστόσο μπορεί να αντιμετωπιστεί με κατάλληλες τεχνικές.

Από την άλλη πλευρά, η πεπλεγμένη απεικόνιση εμφανίζει μια σειρά από πλεονεκτήματα σε σχέση με την άμεση. Η άμεση διακριτή απεικόνιση συνόρου-καμπύλης είναι μια πεπερασμένη σειρά ζευγών $\{s_i, \mathbf{x}(s_i)\}$, $i=1,2,\dots,N$. $\mathbf{x}(s_i)$ είναι διάνυσμα στο επίπεδο που δίνει τη θέση του σημείου i του συνόρου-καμπύλης. Αν κάποιος θέλει να σχεδιάσει το σύνορο-καμπύλη στο επίπεδο, αρκεί να ενώσει με ευθύγραμμα τμήματα τα σημεία στις θέσεις $\mathbf{x}(s_i)$: από τη σειρά των σημείων προκύπτει ότι το σημείο στη θέση $\mathbf{x}(s_i)$ συνδέεται με αυτά στις θέσεις $\mathbf{x}(s_{i-1})$ και $\mathbf{x}(s_{i+1})$. Στην περίπτωση, όμως, άμεσης διακριτής απεικόνισης συνόρου-επιφάνειας δεν είναι το ίδιο προφανές η σύνδεση μεταξύ των σημείων της επιφάνειας. Αν οι πληροφορίες για τη σύνδεση μεταξύ των σημείων του συνόρου-επιφάνειας δεν είναι γνωστές, τότε και οι καλύτεροι στο είδος τους αλγόριθμοι είναι πιθανό να αποτύχουν να τις παράγουν [Osher & Fedkiw (2003), σ. 7]. Επιπλέον, οι πληροφορίες για τη σύνδεση μεταξύ των σημείων της επιφάνειας, αν αυτή εξελίσσεται, μεταβάλλονται. Μάλιστα, το σύνορο-επιφάνεια μπορεί να διαιρείται ή να συνενώνεται με άλλο. Σε αυτές τις περιπτώσεις, είναι εξαιρετικά επίπονο να χρησιμοποιηθεί η άμεση διακριτή απεικόνιση για να παρακολουθήσει την εξέλιξη του συνόρου. Οι Osher και Fedkiw αναφέρουν χαρακτηριστικά ότι απαιτούνται ειδικές «χειρουργικές» τεχνικές [ο. π., σ. 8]. Η αποκοπή και συνένωση συνόρων είναι δύσκολη ακόμη και στην περίπτωση που το σύνορο είναι καμπύλη [Sethian (1996), σ. 29]. Με την πεπλεγμένη απεικόνιση δεν υπάρχει ανάγκη για τις πληροφορίες σύνδεσης μεταξύ των σημείων του συνόρου. Με τη θεώρηση των πεπλεγμένων συναρτήσεων αντιμετωπίζεται, χωρίς εμπειρικούς κανόνες και «χειρουργικές» τεχνικές, η αποκοπή και η συνένωση συνόρων. Μάλιστα, οι πεπλεγμένες συναρτήσεις χρησιμοποιούνται με

τον ίδιο τρόπο, είτε πρόκειται για σύνορο-καμπύλη, είτε πρόκειται για σύνορο-επιφάνεια. Ίσως το πιο «δυνατό χαρτί» των μεθόδων που χρησιμοποιούν πεπλεγμένες συναρτήσεις είναι ότι η θεώρηση είναι ενιαία σε δύο, τρεις ή > τρεις διαστάσεις [Osher & Fedkiw (2003), σ. 8].

Με τη θεώρηση της πεπλεγμένης απεικόνισης συνόρων, μια σειρά γεωμετρικών και άλλων υπολογισμών γίνεται ευκολότερη. Για παράδειγμα, όταν η πεπλεγμένη συνάρτηση αλλάζει πρόσημο στο σύνορο, καθορίζεται άμεσα η θέση σημείου ως προς σύνορο. Στο Σχήμα 5.1 η επιλεγείσα πεπλεγμένη συνάρτηση είναι θετική στο εξωτερικό και αρνητική στο εσωτερικό του συνόρου Γ .⁹¹ Για την εύρεση της θέσης σημείου ως προς το σύνορο, απλά ελέγχεται το πρόσημο της πεπλεγμένης συνάρτησης φ στο σημείο. Το σημείο A στο Σχήμα 5.1 είναι στο εσωτερικό, διότι $\varphi(\mathbf{x}_A) < 0$, ενώ το B στο εξωτερικό, διότι $\varphi(\mathbf{x}_B) > 0$. Η διαδικασία είναι περισσότερο πολύπλοκη στην άμεση απεικόνιση, όπου χρειάζεται ειδικός αλγόριθμος για την εύρεση της θέσης σημείου ως προς σύνορο. Για παράδειγμα για σύνορο-καμπύλη, σχεδιάζεται ευθύγραμμο τμήμα που ενώνει το εξεταζόμενο σημείο με κάποιο σταθερό και γνωστό σημείο που βρίσκεται στο εξωτερικό του συνόρου και υπολογίζεται το πλήθος των σημείων τομής αυτού του τμήματος με το σύνορο. Αν το πλήθος είναι περιττό, τότε το εξεταζόμενο σημείο βρίσκεται στο εσωτερικό του συνόρου. Ο αλγόριθμος [Sedgewick (1992), σ. 353] βασίζεται στο θεώρημα του Jordan για τις κλειστές καμπύλες [Jordan curve theorem, Weisstein (2004)].

Με τη χρήση πεπλεγμένων συναρτήσεων γίνονται εύκολα λογικές πράξεις γεωμετρικών σχημάτων {[Osher & Fedkiw (2003), σ. 9], [Sethian (1999), σ. 277]}, όπως ένωση ή η τομή. Έστω κλειστά σύνορα Γ_1 και Γ_2 που απεικονίζονται από τις συναρτήσεις φ_1 και φ_2 (Σχήματα 5.2α και 5.2β). Η ένωση των εσωτερικών των δύο συνόρων χωρίων (Σχήμα 5.2γ) περικλείεται από την ισοϋψή μηδέν της πεπλεγμένης συνάρτησης

$$\varphi = \min(\varphi_1, \varphi_2). \quad (5.3)$$

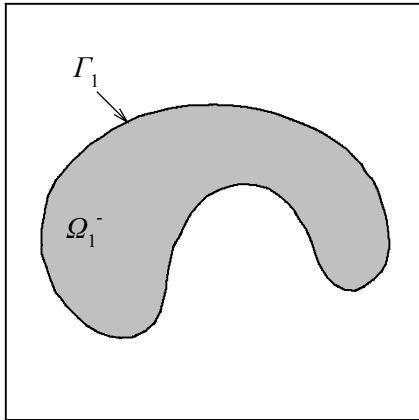
Η τομή των εσωτερικών των δύο συνόρων χωρίων (Σχήμα 5.2δ) περικλείεται από την ισοϋψή μηδέν της πεπλεγμένης συνάρτησης

$$\varphi = \max(\varphi_1, \varphi_2). \quad (5.4)$$

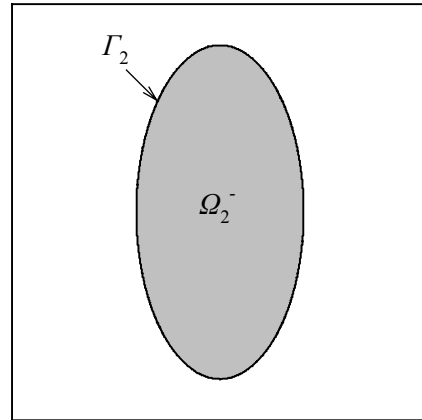
Το χωρίο που προκύπτει από την αφαίρεση του χωρίου που περικλείει το σύνορο Γ_2 από το χωρίο που περικλείει το σύνορο Γ_1 (Σχήμα 5.2ε) περικλείεται από την ισοϋψή μηδέν της πεπλεγμένης συνάρτησης

$$\varphi = \max(\varphi_1, -\varphi_2). \quad (5.5)$$

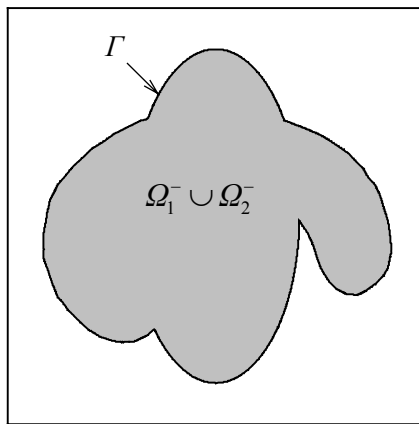
⁹¹ Είναι θετική στα σημεία που ανήκουν στο χωρίο Ω^+ και αρνητική σε αυτά που ανήκουν στο χωρίο Ω^- .



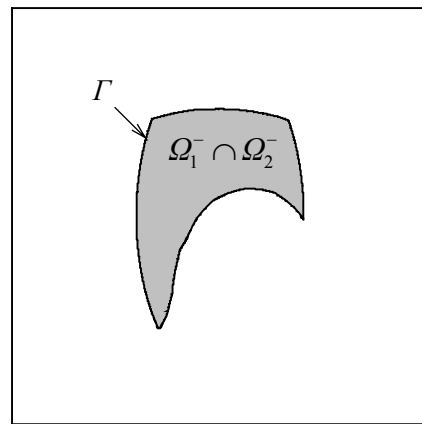
(α)



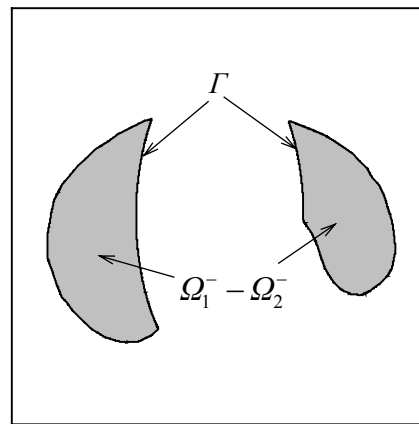
(β)



(γ)



(δ)



(ε)

Σχήμα 5.2 Λογικές πράξεις γεωμετρικών σχημάτων. (α) Το σύνορο Γ_1 ορίζει το χωρίο Ω_1^- . (β) Το σύνορο Γ_2 ορίζει το χωρίο Ω_2^- . (γ) Το σύνορο Γ ορίζει το χωρίο $\Omega_1^- \cup \Omega_2^-$. (δ) Το σύνορο Γ ορίζει το χωρίο $\Omega_1^- \cap \Omega_2^-$. (ε) Το σύνορο Γ ορίζει το χωρίο $\Omega_1^- - \Omega_2^-$.

Με τη χρήση των πεπλεγμένων συναρτήσεων μπορούν να υπολογιστούν γεωμετρικά χαρακτηριστικά του συνόρου, όπως το κάθετο διάνυσμα και η μέση καμπυλότητα (mean curvature). Η βαθμίδα πεπλεγμένης συνάρτησης φ δίνεται από το διάνυσμα

$$\nabla\varphi = \left(\frac{\partial\varphi}{\partial x}, \frac{\partial\varphi}{\partial y}, \frac{\partial\varphi}{\partial z} \right), \quad (5.6)$$

που είναι κάθετο στις ισοϋψείς της φ και δείχνει προς την κατεύθυνση μέγιστης μεταβολής της φ . Συνεπώς, σε σημείο της ισοϋψούς μηδέν (και γενικότερα σε σημείο οποιασδήποτε ισοϋψούς της φ), το μοναδιαίο κάθετο διάνυσμα με φορά προς τιμές της φ με τη μεγαλύτερη απόλυτη τιμή είναι

$$\mathbf{n} = \frac{\nabla\varphi}{|\nabla\varphi|}. \quad (5.7)$$

Η μέση καμπυλότητα είναι

$$\kappa = \nabla \cdot \mathbf{n} = \nabla \cdot \left(\frac{\nabla\varphi}{|\nabla\varphi|} \right). \quad (5.8)$$

Αν η συνάρτηση φ εμφανίζει διακυμάνσεις (θόρυβο στις τιμές της ως αποτέλεσμα αριθμητικών υπολογισμών), τότε το κάθετο διάνυσμα θα έχει ακόμη μεγαλύτερες, αφού υπολογίζεται με βάση τις παραγώγους της φ . Ακόμη μεγαλύτερες θα είναι οι διακυμάνσεις στη μέση καμπυλότητα, αφού υπολογίζεται με βάση τις δεύτερες παραγώγους της φ . Χρειάζεται προσοχή στην επιλογή της πεπλεγμένης συνάρτησης φ . Μια βολική επιλογή οφείλει να ικανοποιεί απαιτήσεις για την ακρίβεια των υπολογισμών. Μια τέτοια επιλογή είναι η προσημασμένη απόσταση από το σύνορο, η οποία ανήκει στο σύνολο των πεπλεγμένων συναρτήσεων που μηδενίζονται αλλάζοντας πρόσημο στο σύνορο και ορίζεται αρνητική στο εσωτερικό και θετική στο εξωτερικό του συνόρου.

5.3 Προσημασμένη απόσταση από σύνορο

Η συνάρτηση απόσταση από σύνορο ορίζεται ως

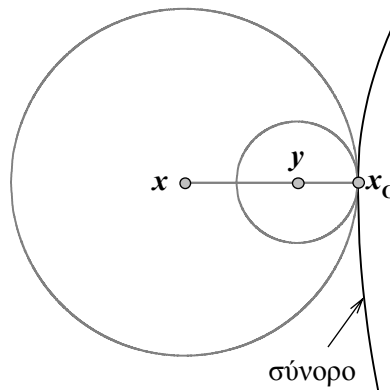
$$r(\mathbf{x}) = \min(|\mathbf{x} - \mathbf{x}_l|), \text{ για όλα τα σημεία } \mathbf{x}_l \text{ του συνόρου.} \quad (5.9)$$

Γεωμετρικά η συνάρτηση r μπορεί να κατασκευαστεί ως εξής: Για σημεία του συνόρου είναι $r(\mathbf{x}) = 0$. Για σημείο \mathbf{x} που δεν ανήκει στο σύνορο, προσδιορίζεται το, κοντινότερο στο \mathbf{x} , σημείο του συνόρου, \mathbf{x}_C . Τότε η απόσταση είναι $r(\mathbf{x}) = |\mathbf{x} - \mathbf{x}_C|$.

Έστω ότι για σημείο \mathbf{x} το κοντινότερο σημείο του συνόρου είναι το \mathbf{x}_C . Τότε για κάθε σημείο \mathbf{y} που ανήκει στο ευθύγραμμο τμήμα που ενώνει το \mathbf{x} με το \mathbf{x}_C , το \mathbf{x}_C θα είναι το

κοντινότερο σημείο του συνόρου στο y . Έστω τα x , y , x_C που φαίνονται στο Σχήμα 5.3. Αφού το x_C είναι κοντινότερο στο x σημείο του συνόρου, τότε στον κύκλο με κέντρο το x και ακτίνα $|x - x_C|$ δεν υπάρχει άλλο σημείο του συνόρου. Σημεία του συνόρου κοντινότερα στο y και διαφορετικά από το x_C , οφείλουν να βρίσκονται μέσα στον κύκλο με κέντρο το y και ακτίνα την $|y - x_C|$. Αφού όμως ο μικρός κύκλος (y , $|y - x_C|$) βρίσκεται μέσα στον μεγάλο (x , $|x - x_C|$), δεν είναι δυνατό να υπάρχουν σημεία του συνόρου στον μικρό κύκλο. Συνεπώς, x_C είναι το κοντινότερο στο σημείο y σημείο του συνόρου. Το ευθύγραμμο τμήμα που ενώνει το x με το x_C είναι το μικρότερο μονοπάτι από το x προς το σύνορο. Το μονοπάτι από το x προς το x_C είναι το μονοπάτι της μεγαλύτερης μεταβολής (μείωσης) της απόστασης r . Η βαθμίδα της απόστασης, $-\nabla r$, σε κάθε σημείο του ευθύγραμμου τμήματος από το x στο x_C , είναι διάνυσμα που δείχνει από το x προς το x_C . Επιπροσθέτως, αφού r είναι Ευκλείδεια απόσταση, είναι

$$|\nabla r| = 1, \tag{5.10}$$



Σχήμα 5.3 Το σημείο x_C είναι το κοντινότερο σημείο του συνόρου στο x και στο y [Osher & Fedkiw (2003), σ. 18].

Ο παραπάνω συλλογισμός για το σημείο x που οδήγησε στην Εξ. (5.10) ισχύει όσο υπάρχει το x_C και είναι μοναδικό. Έτσι, η Εξ. (5.10) ισχύει παντού εκτός από σημεία x τα οποία ισαπέχουν με τουλάχιστο δύο σημεία του συνόρου. Δυστυχώς, στα προβλήματα εξέλιξης συνόρου είναι δυνατό να υπάρχουν σημεία που ισαπέχουν από δύο ή περισσότερα σημεία του συνόρου, αναγκάζοντας την Εξ. (5.10) να ισχύει μόνο γενικά. Εξίσωση που ισχύει γενικά, και όχι σε όλο το πεδίο ορισμού της άγνωστης συνάρτησης, μπορεί να αντιμετωπιστεί με επιτυχία με αριθμητικές μεθόδους σαν να είχε ισχύ σε όλο το πεδίο ορισμού της άγνωστης συνάρτησης. Προϋπόθεση είναι, η παραδοχή ισχύος στα σημεία που δεν ισχύει να μην προκαλεί σφάλματα που επεκτείνονται και επηρεάζουν τη λύση σε όλο το πεδίο ορισμού. Ένας από τους «θριάμβους» της μεθόδου των ισοϋψών είναι η ευκολία με την οποία ικανοποιεί αυτή την προϋπόθεση [Osher and Fedkiw (2003), σ. 18].

Η Εξ. (5.10) είναι η εξίσωση ορισμού της απόστασης από το σύνορο. Η προσημασμένη απόσταση από το σύνορο ορίζεται ως

$$\varphi(\mathbf{x}) = \begin{cases} -r(\mathbf{x}), & \mathbf{x} \in \Omega^- \\ 0, & \mathbf{x} \in \partial\Omega \\ r(\mathbf{x}), & \mathbf{x} \in \Omega^+ \end{cases}. \quad (5.11)$$

Η προσημασμένη απόσταση από το σύνορο του Σχήματος 5.1 είναι $\varphi = \sqrt{x^2 + y^2} - 1$. Τρόποι κατασκευής προσημασμένης απόστασης ή αλλιώς αριθμητικές μέθοδοι επίλυσης της Εξ. (5.10) παρουσιάζονται στο Κεφ. 7. Η προσημασμένη απόσταση εμφανίζει όλα τα χαρακτηριστικά των πεπλεγμένων συναρτήσεων που περιγράφηκαν παραπάνω. Επιπλέον, μεταβάλλεται «ομαλά», υπό την έννοια ότι δεν εμφανίζει απότομες μεταβολές ή μηδενικές βαθμίδες μεταβολής, γεγονός που διευκολύνει τους αριθμητικούς υπολογισμούς.

5.4 Η εξίσωση ισοϋψών

Η μέθοδος των ισοϋψών (level set method) χρησιμοποιείται για τους υπολογισμούς εξέλιξης κινούμενου συνόρου και βασίζεται στην έννοια της πεπλεγμένης συνάρτησης. Το κινούμενο σύνορο ορίζεται έμμεσα ως η ισοϋψής μηδέν πεπλεγμένης συνάρτησης. Η εξέλιξη του συνόρου παρακολουθείται έμμεσα από την εξέλιξη αυτής της συνάρτησης.

Για την περιγραφή κινούμενου συνόρου Γ με τη μέθοδο των ισοϋψών, ορίζεται μια μονοπαραμετρική οικογένεια συναρτήσεων $\varphi(\mathbf{x}, t) : R^n \rightarrow R$ ($n=2$ αν το σύνορο είναι καμπύλη, $n=3$ αν το σύνορο είναι επιφάνεια), για την οποία σε κάθε χρονική στιγμή (ή για κάθε τιμή της παραμέτρου) t ισχύει:

$$\Gamma(t) = \{ \mathbf{x} \in R^n \mid \varphi(\mathbf{x}, t) = 0 \}. \quad (5.12)$$

Η συνάρτηση $\varphi(\mathbf{x}, t)$ καλείται συνάρτηση ισοϋψών τη χρονική στιγμή t , και συνήθως είναι η προσημασμένη απόσταση από το σύνορο Γ (χωρίς αυτό να είναι κανόνας).

Έστω $\mathbf{x}_0(t)$ διανυσματική συνάρτηση που περιγράφει την τροχιά σημείου που ανήκει στο σύνορο Γ . Για να ανήκει το σημείο αυτό στην ισοϋψή μηδέν της συνάρτησης φ σε κάθε χρονική στιγμή πρέπει

$$\varphi(\mathbf{x}_0(t), t) = 0. \quad (5.13)$$

Παραγωγίζοντας ως προς χρόνο την Εξ. (5.13) προκύπτει

$$\varphi_t + \nabla\varphi \cdot \frac{d\mathbf{x}_0}{dt} = 0, \quad (5.14)$$

όπου $\frac{dx_0}{dt}$ η ταχύτητα μετακίνησης σημείου που ανήκει στην ισοϋψή μηδέν της φ . Έστω $x_C(t)$ διανυσματική συνάρτηση που περιγράφει την τροχιά σημείου που ανήκει στην ισοϋψή C της συνάρτησης φ . Με τον ίδιο συλλογισμό προκύπτει

$$\varphi_t + \nabla\varphi \cdot \frac{dx_C}{dt} = 0, \quad (5.15)$$

όπου $\frac{dx_C}{dt}$ η ταχύτητα μετακίνησης σημείου που ανήκει στην ισοϋψή C της φ . Η Εξ. (5.15) ισχύει για κάθε σημείο x του πεδίου ορισμού της φ , υπό την έννοια ότι κάθε σημείο του πεδίου τιμών της φ ανήκει σε ισοϋψή της. Έστω Ω το πεδίο ορισμού της συνάρτησης ισοϋψών, και $V = \frac{dx_C}{dt}$ η ταχύτητα μετακίνησης της τυχαίας ισοϋψούς C της φ . Η εξίσωση που περιγράφει την εξέλιξη της συνάρτησης ισοϋψών είναι

$$\varphi_t + V \cdot \nabla\varphi = 0, \quad \varphi(x, t=0) = q(x), \quad x \in \Omega, \quad (5.16)$$

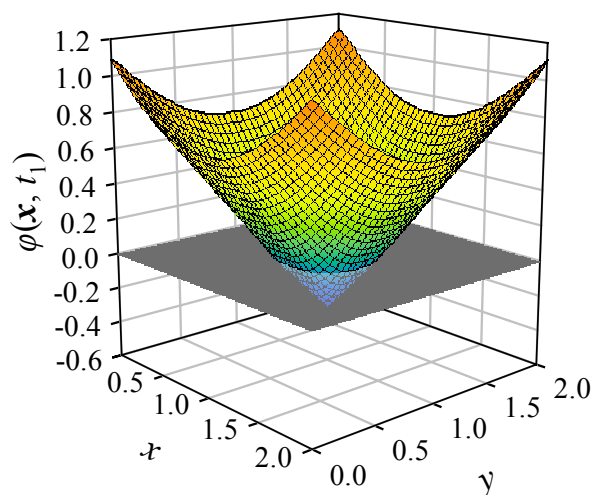
όπου $q(x)$ η αναγκαία για την επίλυση αρχική συνθήκη. Η Εξ. (5.16) περιγράφει την εξέλιξη της συνάρτησης ισοϋψών και καλείται εξίσωση ισοϋψών. Είναι πρόβλημα αρχικών τιμών και εκφράζει το μηδενισμό της υλικής παραγώγου της φ .³¹ Αν παρατηρητής βρίσκεται πάνω στην ισοϋψή C της φ και κινείται με ταχύτητα V , θα παραμείνει σε αυτήν.

Με την Εξ. (5.16) παρακολουθείται έμμεσα η εξέλιξη του συνόρου Γ . Αυτό φαίνεται σχηματικά στο Σχήμα 5.4. Στα Σχήματα 5.4α, 5.4β και 5.4γ φαίνεται συνάρτηση ισοϋψών σε τρεις χρονικές στιγμές. Στο Σχήμα 5.4δ φαίνονται οι ισοϋψείς μηδέν της συνάρτησης ισοϋψών τις τρεις αυτές χρονικές στιγμές.

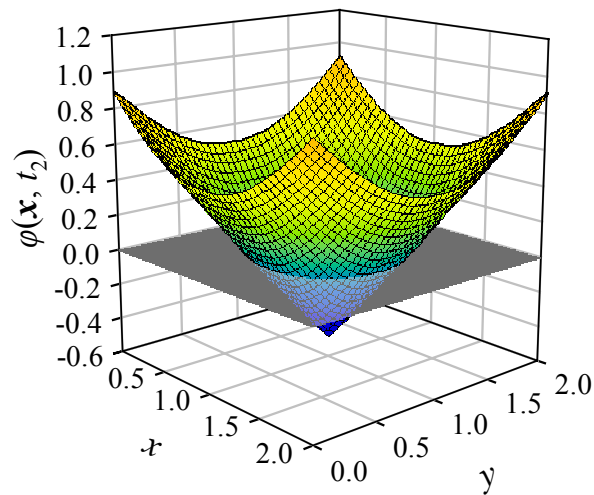
³¹ Υπάρχει αντιστοιχία της Εξ. (5.16) με το μηδενισμό της υλικής παραγώγου ιδιότητας σε πεδίο ροής. Έστω πεδίο ροής όπου η ταχύτητα είναι V . Η υλική παράγωγος ιδιότητας φ του πεδίου ροής

$$\frac{D\varphi}{Dt} = \varphi_t + V \cdot \nabla\varphi$$

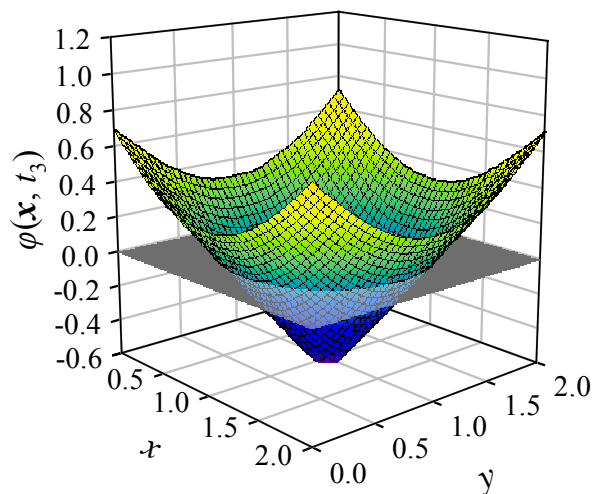
δίνει [Παπαϊωάννου (1993), σ. 76] τον ολικό ρυθμό μεταβολής της φ ως προς ένα παρατηρητή ο οποίος κινείται με ταχύτητα V (ταχύτητα του πεδίου ροής). Ο μηδενισμός της υλικής παραγώγου της φ , σημαίνει ότι ο παρατηρητής που κινείται με ταχύτητα V δεν βλέπει την φ να μεταβάλλεται, τη βλέπει να έχει συνεχώς σταθερή τιμή.



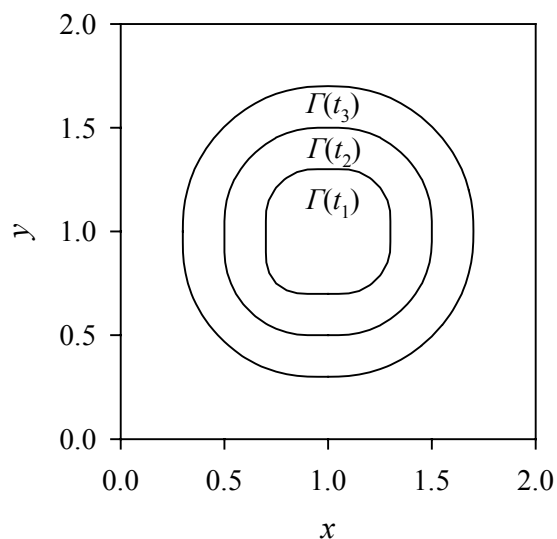
(α)



(β)



(γ)



(δ)

Σχήμα 5.4 Η εξέλιξη του συνόρου Γ προκύπτει από την εξέλιξη της ισοϋψούς μηδέν της συνάρτησης ισοϋψών, φ . (α) $\varphi(\mathbf{x}, t_1)$. (β) $\varphi(\mathbf{x}, t_2)$. (γ) $\varphi(\mathbf{x}, t_3)$. (δ) Ισοϋψείς μηδέν των $\varphi(\mathbf{x}, t_1)$, $\varphi(\mathbf{x}, t_2)$ και $\varphi(\mathbf{x}, t_3)$.

Η ταχύτητα V της Εξ. (5.16) μπορεί να αναλυθεί σε δύο συνιστώσες, μία κάθετη στις ισοϋψείς, $F\mathbf{n}$, και μία εφαπτομενική σε αυτές, $T\mathbf{s}$,

$$V = F\mathbf{n} + T\mathbf{s}, \quad (5.17)$$

όπου \mathbf{n} και \mathbf{s} το κάθετο και εφαπτομενικό μοναδιαίο διάνυσμα στις ισοϋψείς της φ .

Από τις εξισώσεις (5.16) και (5.17) προκύπτει, επειδή $\mathbf{s} \cdot \nabla \varphi = 0$, ότι

$$\varphi_t + F\mathbf{n} \cdot \nabla \varphi = 0, \quad \varphi(\mathbf{x}, t=0) = q(\mathbf{x}), \quad \mathbf{x} \in \Omega. \quad (5.18)$$

Συνδυάζοντας τις Εξ. (5.7) και (5.18), η ισοδύναμη με την Εξ. (5.16), αλλά συχνότερη στη βιβλιογραφία, μορφή της εξίσωσης ισοϋψών είναι

$$\varphi_t + F |\nabla \varphi| = 0, \varphi(\mathbf{x}, t=0) = q(\mathbf{x}), \mathbf{x} \in \Omega. \quad (5.19)$$

Από την Εξ. (5.19) είναι φανερό ότι η εφαπτομενική συνιστώσα της ταχύτητας V , Ts , δεν συμμετέχει στους υπολογισμούς.

Η ταχύτητα F (και ισοδύναμα η V) είναι δυνατό να εξαρτάται από αρκετές παραμέτρους, οι οποίες μπορούν να κατηγοριοποιηθούν σε τοπικές, ολικές και ανεξάρτητες του συνόρου [Sethian (1999), σ. 4]. Τοπικές παράμετροι είναι οι τοπικές γεωμετρικές ιδιότητες του συνόρου, όπως το κάθετο διάνυσμα και η μέση καμπυλότητα. Ολικές παράμετροι του συνόρου είναι αυτές που εξαρτώνται από το σχήμα και τη θέση του συνόρου. Ανεξάρτητες παράμετροι είναι αυτές που δεν είναι ούτε τοπικές, ούτε ολικές. Η ταχύτητα F εκφράζει το φυσικό πρόβλημα εξέλιξης συνόρου που εξετάζεται. Για παράδειγμα, στα προβλήματα εξέλιξης τοπογραφίας κατά την εγχάραξη (απόθεση) συνδέεται με την ταχύτητα εγχάραξης (απόθεσης). Ωστόσο, η F της Εξ. (5.19) δεν ταυτίζεται με την ταχύτητα μετατόπισης του συνόρου $\Gamma(t)$, αφού η ταχύτητα μετατόπισης συνήθως ορίζεται μόνο πάνω στο σύνορο $\Gamma(t)$ (ισοϋψής μηδέν της συνάρτησης ισοϋψών), ενώ η ταχύτητα F χρειάζεται να οριστεί σε όλο το υπολογιστικό χωρίο Ω . Η ταχύτητα μετατόπισης του συνόρου ορίζεται ως F_{mb} . Η ταχύτητα F προκύπτει με προεκβολή της F_{mb} σε όλο το υπολογιστικό χωρίο Ω (Κεφ. 9). Γενικά, σημαντικό πεδίο ενδιαφέροντος στα προβλήματα εξέλιξης συνόρου αφορά στην κατασκευή αξιόπιστων μοντέλων για την ταχύτητα F_{mb} , επαρκώς περιγραφικών της εξεταζόμενης διεργασίας. Το μοντέλο για τον υπολογισμό της ταχύτητας F_{mb} σε προβλήματα εγχάραξης περιγράφεται στο Μέρος II.

5.5 Το «στατικό» πρόβλημα εξέλιξης συνόρου

Συνήθως η συνάρτηση ισοϋψών επιλέγεται να είναι η προσημασμένη απόσταση, χωρίς αυτό να είναι αναγκαίο. Μια εναλλακτική επιλογή [Helmsen et al. (1996)], που στόχο έχει να απλοποιήσει το πρόβλημα αρχικών τιμών της εξίσωσης ισοϋψών [Εξ. (5.19)] και η σκοπιμότητα της οποίας θα φανεί στη συνέχεια της παραγράφου, είναι η συνάρτηση ισοϋψών, φ , να ικανοποιεί την εξίσωση

$$\frac{\partial \varphi}{\partial t} = -1 \Rightarrow \varphi(\mathbf{x}, t) = -t + T(\mathbf{x}), \quad (5.20)$$

όπου $T(\mathbf{x})$ άγνωστη συνάρτηση.

Με βάση την Εξ. (5.20) η εξίσωση ισοϋψών [Εξ. (5.19)] γίνεται

$$F |\nabla T(\mathbf{x})| = 1. \quad (5.21)$$

Από την Εξ. (5.21) είναι φανερό ότι μια σιωπηρή παραδοχή για τη θεώρηση που περιγράφει η Εξ. (5.20) είναι $F > 0$.

Η συνάρτηση $\varphi(\mathbf{x}, t=0)$, $\mathbf{x} \in \Omega$, είναι μια πεπλεγμένη συνάρτηση περιγραφής του συνόρου $\Gamma(t=0)$, το οποίο προκύπτει από τη μηδενική ισοϋψή της φ

$$\varphi(\mathbf{x}, t=0)=0, \mathbf{x} \in \Gamma(t=0). \quad (5.22)$$

Από τις Εξ. (5.20) και (5.22) προκύπτει ότι

$$T(\mathbf{x})=0, \mathbf{x} \in \Gamma(t=0). \quad (5.23)$$

Αντίστοιχα, τη χρονική στιγμή $t=C$, το σύνορο $\Gamma(t=C)$ περιγράφεται από τη

$$\varphi(\mathbf{x}, t=C)=0, \mathbf{x} \in \Gamma(t=C). \quad (5.24)$$

Από τις Εξ. (5.20) και (5.24) προκύπτει ότι

$$T(\mathbf{x})=C, \mathbf{x} \in \Gamma(t=C). \quad (5.25)$$

Επομένως, αν η συνάρτηση ισοϋψών, φ , ικανοποιεί την Εξ. (5.20), προκύπτει ότι η ισοϋψής μηδέν της φ τη χρονική στιγμή $t=C$ αντιστοιχεί στην ισοϋψή C της συνάρτησης $T(\mathbf{x})$. Ο Osher παραθέτει αυστηρή και γενικότερη απόδειξη για την αντιστοιχία των ισοϋψών [Osher (1993)].

Συνοψίζοντας, το πρόβλημα εξέλιξης συνόρου μπορεί να απλοποιηθεί, όταν η ταχύτητα F έχει κατεύθυνση προς το εξωτερικό⁹¹ του συνόρου σε κάθε χρονική στιγμή ($F > 0$). Τότε, το πρόβλημα εξέλιξης συνόρου Γ ανάγεται στην επίλυση του προβλήματος συνοριακών τιμών

$$\left\{ \begin{array}{l} F|\nabla T(\mathbf{x})|=1, F > 0, \mathbf{x} \in \Omega \\ T(\mathbf{x})=0, \mathbf{x} \in \Gamma(t=0) \end{array} \right\}, \quad (5.26)$$

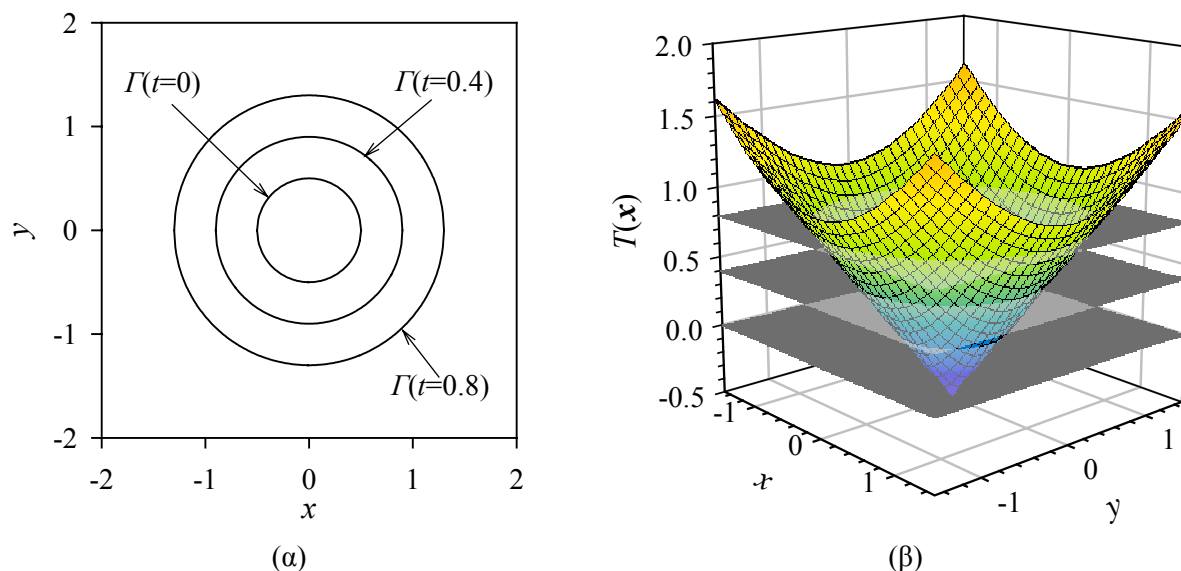
όπου $T(\mathbf{x})$ είναι ο χρόνος άφιξης του συνόρου Γ στη θέση \mathbf{x} .

Η εξέλιξη του συνόρου Γ προκύπτει από τις ισοϋψείς της συνάρτησης $T(\mathbf{x})$. Η ισοϋψής $T=C$ είναι ο γεωμετρικός τόπος των σημείων του συνόρου τη χρονική στιγμή $t=C$:

$$\Gamma(t) = \{ \mathbf{x} \in R^n \mid T(\mathbf{x}) = t \}. \quad (5.27)$$

⁹¹ Το εξωτερικό και εσωτερικό συνόρου ορίζεται συμβατικά, συνεπώς ο περιορισμός $F > 0$ δεν σημαίνει ότι η Εξ. (5.26) ισχύει μόνο όταν η περιοχή που περικλείει το σύνορο διαστέλλεται. Για να ισχύει η Εξ. (5.26) θα πρέπει η ταχύτητα F να έχει κατεύθυνση μόνο προς το εξωτερικό ή μόνο προς το εσωτερικό του συνόρου σε κάθε χρονική στιγμή.

Το πρόβλημα που περιγράφεται από τις Εξ. (5.26) και (5.27) καλείται «στατικό» πρόβλημα εξέλιξης συνόρου. Αν η F εξαρτάται μόνο από τη θέση, η Εξ. (5.26) καλείται εξίσωση *Eikonal*. Σημειώνεται ότι αν $F=1$, τότε το πρόβλημα ταυτίζεται με το πρόβλημα υπολογισμού της απόστασης [Εξ. (5.10)].



Σχήμα 5.5 (α) Σύνορο Γ σε 3 χρονικές στιγμές ($t=0, 0.4, 0.8$), όπως προκύπτει από τις αντίστοιχες ισοϋψείς της συνάρτησης $T(\mathbf{x})$. (β) Η συνάρτηση χρόνου άφιξης $T(\mathbf{x})$. Η θέση του συνόρου τις χρονικές στιγμές ($t=0, 0.4, 0.8$) προκύπτει από την τομή των επιπέδων $T=0, 0.4, 0.8$ με τη συνάρτηση $T(\mathbf{x})$.

Η θεώρηση του προβλήματος εξέλιξης συνόρου ως πρόβλημα συνοριακών συνθηκών φαίνεται σχηματικά στο Σχήμα 5.5: Η θέση του συνόρου σε διάφορες χρονικές στιγμές προκύπτει από τις αντίστοιχες ισοϋψείς της συνάρτησης χρόνου άφιξης T . Παρακάτω σημειώνονται οι βασικές διαφορές από τη θεώρηση του προβλήματος αρχικών τιμών.

A) Στη θεώρηση του προβλήματος αρχικών τιμών (§5.4) χρειάζεται μονοπαραμετρική οικογένεια συναρτήσεων για την περιγραφή της εξέλιξης του συνόρου, στη θεώρηση του προβλήματος συνοριακών τιμών, απαιτείται μία μόνο συνάρτηση, ο χρόνος άφιξης, $T(\mathbf{x})$.

B) Η συνάρτηση $T(\mathbf{x})$ είναι πεπλεγμένη συνάρτηση περιγραφής συνόρου, η οποία προκύπτει από την επίλυση της Εξ. (5.26). Κάθε ισοϋψής της $T(\mathbf{x})$ είναι σημαντική αφού περιγράφει το σύνορο σε κάποια χρονική στιγμή. Αντίθετα, στη θεώρηση του προβλήματος αρχικών τιμών ενδιαφέρει μόνο η ισοϋψής μηδέν των πεπλεγμένων συναρτήσεων $\varphi(\mathbf{x}, t)$.

Γ) Το πρόβλημα συνοριακών τιμών εμπεριέχει μια παραδοχή ($F>0$), γεγονός που καθιστά τη θεώρηση του προβλήματος αρχικών τιμών περισσότερο γενική.

Δ) Με τη θεώρηση του προβλήματος συνοριακών τιμών, αν και υπολογίζεται η εξέλιξη συνόρου στο χρόνο, δεν υπάρχει ανάγκη για ικανοποίηση κριτηρίου ευστάθειας (κριτήριο Courant-Friedrichs-Lewy) των υπολογισμών.

Ε) Στην περίπτωση της εξίσωσης Eikonal [Εξ. (5.26) με $F=F(x)$], η ταχύτητα $F(x)$ είναι η ταχύτητα μετατόπισης του συνόρου στη θέση x , ενώ στο πρόβλημα αρχικών τιμών [Εξ. (5.19)] η ταχύτητα F δεν είναι η ταχύτητα μετατόπισης του συνόρου: προκύπτει με προεκβολή της ταχύτητας του συνόρου, F_{mb} , στο υπολογιστικό χωρίο. Έτσι, ίσως θα ήταν σωστότερο να χρησιμοποιείται ο συμβολισμός F_{mb} αντί F στην εξίσωση Eikonal, ωστόσο έχει επικρατήσει ο συμβολισμός F .

Οι Robinson και Clark τοποθετούν τη βάση της εξίσωσης Eikonal 2500 χρόνια πριν [Robinson & Clark (2003)], συνδέοντάς την με το «κρυφό» Πυθαγόρειο θεώρημα (secret Pythagorean theorem). Το «κρυφό» Πυθαγόρειο θεώρημα για το ορθογώνιο τρίγωνο OAB (Σχήμα 5.6), με ορθή γωνία την BOA και ύψος από την κορυφή της ορθής γωνίας το OC, είναι

$$OA^{-2} + OB^{-2} = OC^{-2}. \quad (5.28)$$

Στο Σχήμα 5.6 φαίνεται τμήμα κινούμενου συνόρου σε δύο χρονικές στιγμές t_1 και t_2 που διαφέρουν Δt . Έστω O σημείο του συνόρου τη χρονική στιγμή t_1 , το οποίο σε χρόνο Δt μετατοπίζεται κάθετα στο σύνορο κατά Δs και φτάνει στο σημείο C τη χρονική στιγμή t_2 . Έστω $OA=\Delta x$ και $OB=\Delta y$ το οριζόντιο (κατά τον άξονα x) και το κάθετο (κατά τον άξονα y) ευθύγραμμο τμήμα που ενώνουν το σημείο O με το σύνορο τη χρονική στιγμή t_2 . Αφού η ταχύτητα μετατόπισης είναι κάθετη στο σύνορο, είναι $OC \perp AB$. Εφαρμόζοντας το «κρυφό» Πυθαγόρειο θεώρημα προκύπτει:

$$\left(\frac{1}{\Delta x}\right)^2 + \left(\frac{1}{\Delta y}\right)^2 = \left(\frac{1}{\Delta s}\right)^2. \quad (5.29)$$

Πολλαπλασιάζοντας και τα δύο μέλη της Εξ. (5.29) με το Δt^2 , προκύπτει:

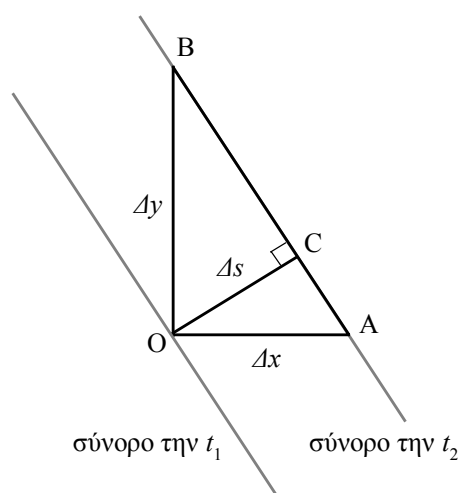
$$\left(\frac{\Delta t}{\Delta x}\right)^2 + \left(\frac{\Delta t}{\Delta y}\right)^2 = \left(\frac{\Delta t}{\Delta s}\right)^2. \quad (5.30)$$

Καθώς τα Δx , Δy και Δs τείνουν στο μηδέν, η Εξ. (5.30) γίνεται διαφορική εξίσωση (από εξίσωση διαφορών). Αν προστεθεί η τρίτη διάσταση προκύπτει

$$\left(\frac{\partial t}{\partial x}\right)^2 + \left(\frac{\partial t}{\partial y}\right)^2 + \left(\frac{\partial t}{\partial z}\right)^2 = \left(\frac{1}{F}\right)^2, \quad (5.31)$$

όπου $\frac{1}{F} = \lim_{\Delta s \rightarrow 0} \frac{\Delta t}{\Delta s}$, αφού ο λόγος $\Delta t/\Delta s$ είναι το αντίστροφο της ταχύτητας.

Από την Εξ. (5.31), αν $F > 0$, προκύπτει ότι $F|\nabla t| = 1$, δηλαδή η Εξ. (5.26).



Σχήμα 5.6 Τμήμα κινούμενου συνόρου σε δύο χρονικές στιγμές, t_1 και $t_2 = t_1 + \Delta t$. Το σημείο O του συνόρου μετατοπίζεται κατά Δs σε χρόνο Δt και φτάνει στο C τη χρονική στιγμή t_2 . $OA = \Delta x$ και $OB = \Delta y$ είναι το οριζόντιο (κατά τον άξονα x) και το κάθετο (κατά τον άξονα y) ευθύγραμμο τμήμα που ενώνουν το σημείο O με το σύνορο τη χρονική στιγμή t_2 .

5.6 Σύνδεση με τις εξισώσεις Hamilton-Jacobi

Η εξίσωση ισοϋψών [Εξ. (5.19)], όταν η ταχύτητα F έχει ειδικά χαρακτηριστικά, ανήκει στη γενική κατηγορία εξισώσεων Hamilton-Jacobi (HJ)

$$u_t + H(\mathbf{x}, u, u_x, u_y, u_z, t) = 0, \quad u(\mathbf{x}, t=0) = q(\mathbf{x}), \quad \mathbf{x} \in \Omega, \quad (5.32)$$

όπου $q(\mathbf{x})$ γνωστή συνάρτηση. Η Εξ. (5.32) είναι πρόβλημα αρχικών τιμών και ανήκει στα προβλήματα Cauchy των εξισώσεων HJ [Crandall & Lions (1983)].

Η συνάρτηση H της Εξ. (5.32) καλείται Χαμιλτονιανή της εξίσωσης HJ και εξαρτάται το πολύ από πρώτες παραγώγους της u . Οι εξισώσεις HJ είναι υπερβολικές [Osher & Fedkiw (2003), σ. 47]. Όταν η Χαμιλτονιανή εξαρτάται από δεύτερη παράγωγο (π.χ. όταν η ταχύτητα F είναι ανάλογη της μέσης καμπυλότητας του συνόρου), τότε η εξίσωση είναι παραβολική και δεν είναι HJ. Συγκρίνοντας τις Εξ. (5.32) και (5.19) προκύπτει ότι

$$H = F|\nabla\phi|. \quad (5.33)$$

Συνεπώς, για να ανήκει η εξίσωση ισοϋψών στην γενική κατηγορία εξισώσεων HJ, θα πρέπει η ταχύτητα F να εξαρτάται από τη θέση \mathbf{x} , τη συνάρτηση ισοϋψών, φ , και τις πρώτες μερικές παραγώγους της φ . Ο ίδιος περιορισμός ισχύει για να περιληφθούν στη γενική κατηγορία «στατικών» εξισώσεων HJ, τόσο το «στατικό» πρόβλημα εξέλιξης [Εξ. (5.26)], όσο και το πρόβλημα υπολογισμού της απόστασης [Εξ. (5.10)]. Η γενική μορφή των «στατικών» εξισώσεων HJ είναι

$$\left\{ \begin{array}{l} H(\mathbf{x}, u, u_x, u_y, u_z) = 0, \mathbf{x} \in \Omega \\ u(\mathbf{x}) = g(\mathbf{x}), \mathbf{x} \in \Gamma, \Gamma \subset \Omega \end{array} \right\}, \quad (5.34)$$

όπου $g(\mathbf{x})$ γνωστή συνάρτηση και Γ το σύνορο όπου ορίζονται οι συνοριακές συνθήκες. Η Εξ. (5.34) είναι πρόβλημα συνοριακών τιμών και ανήκει στα προβλήματα Dirichlet των εξισώσεων HJ [Crandall & Lions (1983)].

Στη γενική περίπτωση, η λύση των Εξ. (5.32) και (5.34) δεν είναι διαφορίσιμη. Έτσι, οι Εξ. (5.32) και (5.34) δεν δέχονται κλασική λύση, δηλαδή λύση που ικανοποιεί αυτές τις εξισώσεις σε κάθε σημείο του πεδίου ορισμού τους. Υπάρχουν πολλές ασθενείς λύσεις⁹¹ (weak solutions) αυτών των εξισώσεων, δηλαδή λύσεις που τις ικανοποιούν σχεδόν σε κάθε σημείο του πεδίου ορισμού τους. Οι Crandall και Lions εισήγαγαν την έννοια της «ιξώδους» λύσης αποδεικνύοντας την ύπαρξη και μοναδικότητά της [ο.π.]. Η «ιξώδης» λύση είναι η ορθή⁹¹ ασθενής λύση. Ο όρος «ιξώδης» προκύπτει από τον τρόπο με τον οποίο απέδειξαν τη μοναδικότητά της και από τον τρόπο με τον οποίο υπολογίζεται. Η «ιξώδης» λύση προκύπτει από τη μέθοδο εξάλειψης ιξώδους όρου [vanishing viscosity method, Crandall & Lions (1984)]. Σύμφωνα με τη μέθοδο αυτή, εισάγεται στις Εξ. (5.32) και (5.34) ένας «ιξώδης» όρος $\varepsilon \nabla^2 u^\varepsilon$.⁹² Η Εξ. (5.32) γίνεται

$$u_t^\varepsilon + H(\mathbf{x}, u_x^\varepsilon, u_y^\varepsilon, u_z^\varepsilon) = f(\mathbf{x}) + \varepsilon \nabla^2 u^\varepsilon, \quad u^\varepsilon(\mathbf{x}, t = 0) = g(\mathbf{x}), \quad \mathbf{x} \in \Omega. \quad (5.35)$$

Η «ιξώδης» λύση της Εξ. (5.32) είναι η λύση της Εξ. (5.35), καθώς ο συντελεστής $\varepsilon \rightarrow 0$,

$$\lim_{\varepsilon \rightarrow 0} u^\varepsilon = \text{«ιξώδης» λύση της Εξ. (5.32)} \quad (5.36)$$

Ο «ιξώδης» όρος ουσιαστικά είναι ένας όρος αριθμητικής διάχυσης που αμβλύνει τις γωνίες και επιβάλλει στη λύση να παραμείνει λεία σε όλο το χωρίο Ω . Η προσθήκη του όρου

⁹¹ Η σημασία της ασθενούς και της ορθής ασθενούς λύσης σχολιάζεται στις §5.7 και §5.8.

⁹² Ο εκθέτης ε δεν αφορά σε ύψωση σε δύναμη ή σε παράγωγο, είναι απλά συμβολισμός της λύσης της Εξ. (5.35).

αριθμητικής διάχυσης γενικά σταθεροποιεί σχήματα κεντρικών διαφορών {[Osher & Fedkiw (2003), σ. 46], [Levy (2002), Κεφ. 3, σ. 6]}.

Στη συνέχεια, για την επίλυση της εξίσωσης ισοϋψών και Eikonal χρησιμοποιείται η μέθοδος εξάλειψης ιξώδους όρου (§7.2, εξίσωση Eikonal), αλλά και αριθμητικά σχήματα πεπερασμένων διαφορών [(§7.3 και §7.4, εξίσωση Eikonal), (Κεφ. 6, εξίσωση ισοϋψών)]. Στη δεύτερη περίπτωση, το σφάλμα αποκοπής (Παράρτημα Β) των αριθμητικών σχημάτων παίζει τον ίδιο ρόλο με τον «ιξώδη» όρο [Osher & Fedkiw (2003), σ. 46].

5.7 Νόμοι διατήρησης και σύνδεση με τις εξισώσεις Hamilton-Jacobi

Για την επίλυση των εξισώσεων HJ χρησιμοποιούνται τεχνικές και όροι δανεισμένα από την επίλυση νόμων διατήρησης. Νόμος διατήρησης σε μία διάσταση είναι η εξίσωση

$$v_t + G(v)_x = 0, \quad (5.37)$$

όπου v είναι η ποσότητα που διατηρείται, και $G(v)$ η συνάρτηση ροής (flux function).

Ένα σημαντικό χαρακτηριστικό των νόμων διατήρησης είναι ότι η λύση μπορεί να είναι ασυνεχής, ακόμη κι αν οι αρχικές συνθήκες δεν είναι [Levy (2002), Κεφ. 3, σ. 1]. Για παράδειγμα, στους υπερβολικούς νόμους διατήρησης, ασυνέχεια στη λύση προκύπτει όταν οι χαρακτηριστικές (ή καλύτερα οι προβολές των χαρακτηριστικών, §5.9) τέμνονται ή αποκλίνουν. Μετά τη δημιουργία της ασυνέχειας υπάρχει δυσκολία στον ορισμό της λύσης της διαφορικής εξίσωσης: πως μπορεί μια ασυνεχής (και άρα μη παραγωγίσιμη) συνάρτηση να ικανοποιεί διαφορική εξίσωση;

Για να ξεπεραστεί η δυσκολία, και να οριστεί λύση και μετά την δημιουργία της ασυνέχειας, χρησιμοποιείται η έννοια της ασθενούς λύσης {weak solution, [Levy (2002), Κεφ. 3, σ. 3]}. Η ασθενής λύση διαφορικής εξίσωσης είναι λύση που ικανοποιεί μια ολοκληρωτική μορφή της εξίσωσης [Sethian (1999), σ. 21]. Το πλεονέκτημα της ολοκληρωτικής μορφής είναι ότι δεν απαιτεί από μια πιθανή λύση τον ίδιο βαθμό διαφορισμότητας και επομένως επιτρέπει λιγότερο αυστηρές λύσεις που ικανοποιούν τη διαφορική εξίσωση σχεδόν σε όλα τα σημεία του πεδίου ορισμού.

Ο ορισμός της ασθενούς λύσης ξεπερνά το πρόβλημα ύπαρξης λύσης μετά τη δημιουργία ασυνέχειας, ωστόσο αναδεικνύει ένα νέο: η ασθενής λύση δεν είναι μοναδική, συνεπώς μια επιπλέον συνθήκη είναι αναγκαία για την επιλογή της ορθής ή αποδεκτής ασθενούς λύσης, “physically relevant” κατά Levy [Levy (2002), Κεφ. 3, σ. 4], “more physically realistic” κατά Levandovsky [Levandovsky (2001), Κεφ. 3, σ. 11]. Αυτή η συνθήκη καλείται συνθήκη εντροπίας [ο.π., Κεφ. 3, σ. 11] και επιλέγει την ορθή ασθενή λύση: α) Όταν οι προβολές των χαρακτηριστικών τέμνονται. Οι προβολές των χαρακτηριστικών είναι καμπύλες πάνω στις οποίες διαδίδεται η πληροφορία (§5.9). Έτσι, σε σημεία τομής των προβολών η λύση δεν έχει μοναδική τιμή. Η συνθήκη εντροπίας εντοπίζει

τα σημεία τομής των προβολών των χαρακτηριστικών {καμπύλη σοκ, shock curve [ο.π., Κεφ. 2, σ. 8]}. Πάνω στην καμπύλη σοκ η λύση είναι ασυνεχής. β) Όταν οι προβολές των χαρακτηριστικών αποκλίνουν και δεν καλύπτουν πλήρως το πεδίο τιμών της άγνωστης συνάρτησης δημιουργώντας ζώνη αραιώσης (rarefaction zone) δηλαδή ένα κενό στη λύση. Τότε η συνθήκη εντροπίας επιβάλλει κατάλληλη λύση για να «γεμίσει» το κενό.

Ο όρος «εντροπία» αναφέρεται στην οργάνωση της πληροφορίας. Γενικά, η συνθήκη εντροπίας σημαίνει ότι δεν μπορεί να παραχθεί πληροφορία κατά την επίλυση του προβλήματος. Αυτό μεταφράζεται στο ότι οι προβολές των χαρακτηριστικών καταλήγουν σε καμπύλη σοκ και δεν πηγάζουν από αυτή [Sethian (1999), σ. 52].

Οι εξισώσεις HJ σχετίζονται με τους νόμους διατήρησης. Έστω εξίσωση HJ σε μία διάσταση:

$$u_t + H(u_x) = 0. \quad (5.38)$$

Παραγωγίζοντας την Εξ. (5.38) ως προς x προκύπτει

$$(u_x)_t + H(u_x)_x = 0. \quad (5.39)$$

Θέτοντας $v = u_x$ η Εξ. (5.39) γίνεται

$$v_t + H(v)_x = 0, \quad (5.40)$$

που είναι νόμος διατήρησης με συνάρτηση ροής τη Χαμιλτονιανή της εξίσωσης HJ. Η λύση v του νόμου διατήρησης είναι η μερική παράγωγος ως προς x της λύσης u της εξίσωσης HJ. Αντίστροφα, η λύση u της εξίσωσης HJ είναι η παράγουσα της λύσης v του νόμου διατήρησης.

Από την αντιστοιχία εξισώσεων HJ και νόμων διατήρησης προκύπτουν χρήσιμες πληροφορίες για τη λύση u της εξίσωσης HJ: α) Εφόσον στους νόμους διατήρησης η λύση v μπορεί να είναι ασυνεχής, η μερική παράγωγος ως προς x της λύσης u της εξίσωσης HJ μπορεί να είναι ασυνεχής. β) Η συνθήκη εντροπίας που επιβάλλεται για την επιλογή της ορθής ασθενούς λύσης στους νόμους διατήρησης μπορεί να χρησιμοποιηθεί και στις εξισώσεις HJ.

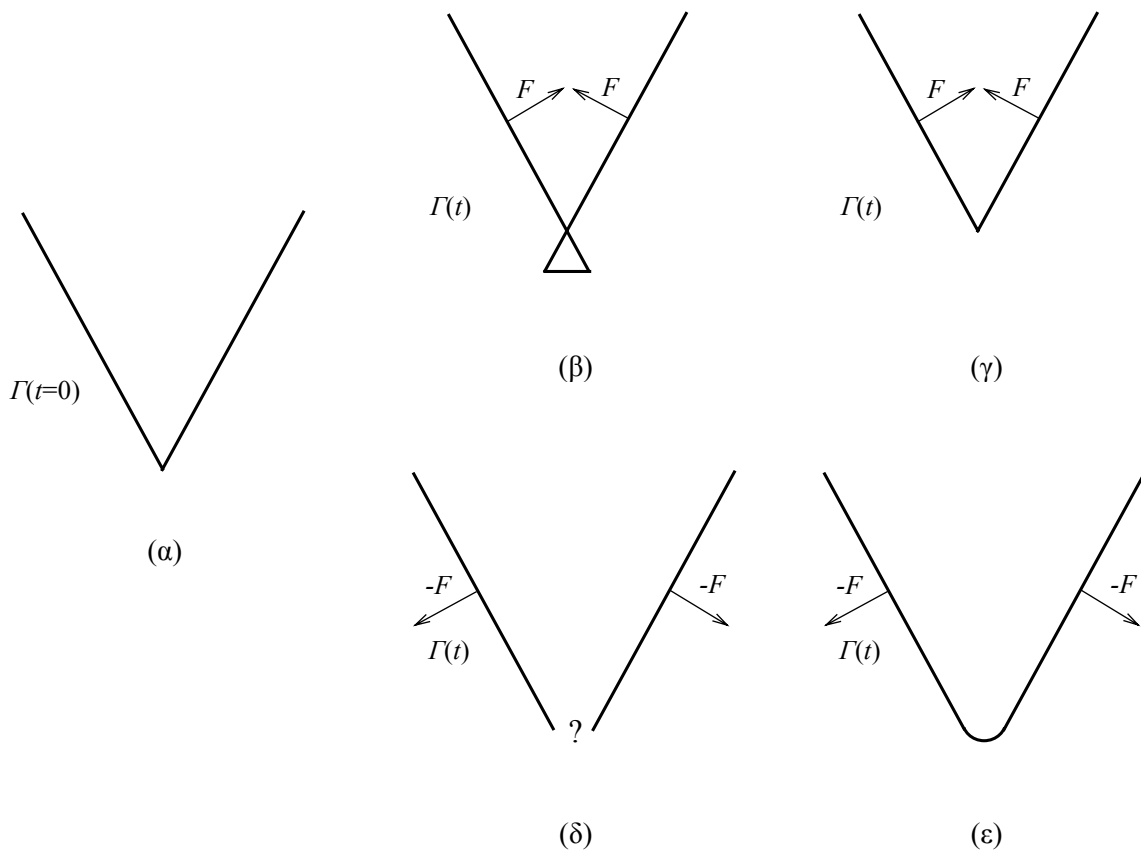
Οι Osher και Sethian χρησιμοποίησαν αυτή την αντιστοιχία μεταξύ νόμων διατήρησης και εξισώσεων HJ, για την κατασκευή κατάλληλων αριθμητικών σχημάτων [Osher & Sethian (1988)]. Μάλιστα απέδειξαν ότι η λύση που προκύπτει από αυτά τα αριθμητικά σχήματα ταυτίζεται με την «ιξώδη» λύση [Sethian (1996), σ. 12]. Η ορθή ασθενής λύση, η οποία προκύπτει από την επιβολή της συνθήκης εντροπίας στους νόμους διατήρησης, αντιστοιχεί στην «ιξώδη» λύση των εξισώσεων HJ. Σημειώνεται ότι αν και η αντιστοιχία μεταξύ νόμων διατήρησης και εξισώσεων HJ δεν ισχύει σε δύο ή τρεις

διαστάσεις [Jiang & Peng (2000)], γενικά οι εξισώσεις HJ μπορούν να διακριτοποιηθούν χωριστά σε κάθε διάσταση.

5.8 Η συνθήκη εντροπίας στα προβλήματα εξέλιξης συνόρου

Έστω το σύνορο $\Gamma(t=0)$ του Σχήματος 5.7α, το οποίο κινείται με ταχύτητα F , κάθετη σε αυτό. Αν κάθε σημείο του συνόρου μετατοπιστεί, εισάγεται βρόχος στο σύνορο (Σχήμα 5.7β). Αν το σύνορο χωρίζει δύο υλικά ή περιοχές, ο βρόχος δεν έχει φυσική σημασία. Η επιβολή συνθήκης εντροπίας σχετίζεται με την απομάκρυνση του βρόχου από το σύνορο, ή καλύτερα με την πρόληψη δημιουργίας του βρόχου. Η εξέλιξη του συνόρου όταν επιβάλλεται η συνθήκη εντροπίας φαίνεται στο Σχήμα 5.7γ. Η αρχική ασυνέχεια στην κλίση της λύσης διατηρείται. Το παράδειγμα αυτό αντιστοιχεί με την εμφάνιση και εξέλιξη ασυνέχειας της λύσης στους νόμους διατήρησης.

Έστω ότι το σύνορο $\Gamma(t=0)$ του Σχήματος 5.7α κινείται με ταχύτητα $-F$, κάθετη σε αυτό. Αν κάθε σημείο του συνόρου μετατοπιστεί, δημιουργείται κενό στη λύση (Σχήμα 5.7δ), το οποίο δεν έχει νόημα όταν το σύνορο χωρίζει δύο περιοχές. Η συνθήκη εντροπίας σε αυτή την περίπτωση «γεμίζει» τη λύση.



Σχήμα 5.7 (α) Σύνορο τη χρονική στιγμή $t=0$, $\Gamma(t=0)$. (β) Σύνορο τη στιγμή t , όταν κινείται με ταχύτητα F κάθετη σε αυτό, χωρίς επιβολή συνθήκης εντροπίας. (γ) Σύνορο τη στιγμή t , όταν κινείται με ταχύτητα F κάθετη σε αυτό, με επιβολή συνθήκης εντροπίας. (δ) Σύνορο τη στιγμή t , όταν κινείται

με ταχύτητα $-F$ κάθετη σε αυτό, χωρίς επιβολή συνθήκης εντροπίας. (ε) Σύνορο τη στιγμή t , όταν κινείται με ταχύτητα $-F$ κάθετη σε αυτό, με επιβολή συνθήκης εντροπίας.

5.9 Η μέθοδος και οι προβολές των χαρακτηριστικών καμπυλών

Οι χαρακτηριστικές καμπύλες συνδέονται με ένα συγκεκριμένο τύπο προβλημάτων διαφορικών εξισώσεων μερικών παραγώγων (ΔΕΜΠ), τα υπερβολικά. Υπερβολικό είναι [Μαρκάτος & Ασημακόπουλος (1995), σ. 26] εκείνο το πρόβλημα που παρουσιάζει μια μορφή μονόδρομης συμπεριφοράς κατά μήκος ειδικών καμπυλών, των χαρακτηριστικών της διαφορικής εξίσωσης που περιγράφει το πρόβλημα.

Με τη μέθοδο των χαρακτηριστικών εντοπίζονται αυτές οι χαρακτηριστικές καμπύλες και τότε το πρόβλημα ΔΕΜΠ, όπως η εξίσωση Eikonal και η εξίσωση ισοϋψών, ανάγεται σε πρόβλημα συστήματος συνήθων διαφορικών εξισώσεων.³¹ Στη συνέχεια προσδιορίζονται, χρησιμοποιώντας βασικές αρχές της μεθόδου των χαρακτηριστικών, οι χαρακτηριστικές καμπύλες και οι προβολές τους στην εξίσωση Eikonal και ισοϋψών.

A) Η εξίσωση Eikonal (ή καλύτερα η Eikonal υψωμένη στο τετράγωνο) ανήκει στη γενική κατηγορία ΔΕΜΠ 1^{ης} τάξης της μορφής (σε δύο διαστάσεις):

$$au_x + bu_y = c, \quad (5.41)$$

όπου οι συντελεστές a, b, c είναι γενικά συναρτήσεις των x, y, u, u_x, u_y .

Έστω ότι υπάρχει λύση και είναι η συνάρτηση $u(x, y)$. Η γραφική παράσταση της u είναι η επιφάνεια

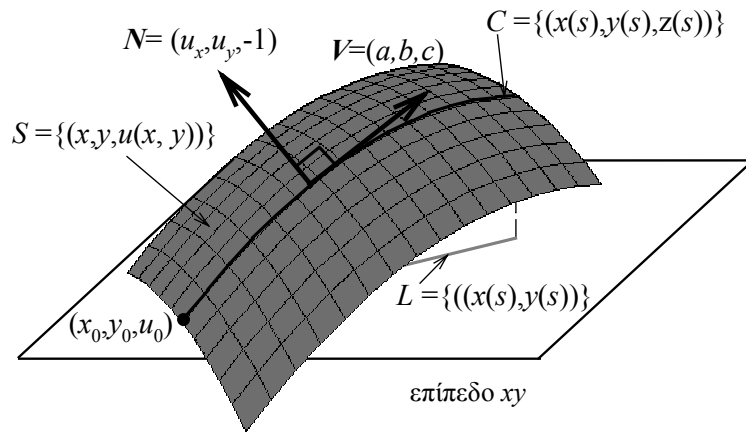
$$S = \{(x, y, u(x, y))\}. \quad (5.42)$$

Αν η u είναι λύση, τότε από την Εξ. (5.41) προκύπτει ότι σε κάθε σημείο $(x, y, u(x, y))$ είναι

$$(a, b, c) \cdot (u_x, u_y, -1) = 0. \quad (5.43)$$

Όμως, το διάνυσμα $(u_x, u_y, -1) \equiv N$ είναι κάθετο σε κάθε σημείο της επιφάνειας S . Αφού το διάνυσμα (a, b, c) είναι κάθετο στο N [Εξ. (5.43)], είναι εφαπτόμενο στην S (Σχήμα 5.8).

³¹ Ωστόσο, για την αριθμητική επίλυση χρησιμοποιούνται κυρίως σχήματα πεπερασμένων διαφορών και λιγότερο η μέθοδος των χαρακτηριστικών. Αυτό οφείλεται στο ότι η κωδικοποίηση της μεθόδου των χαρακτηριστικών είναι πολύ δυσκολότερη από την κωδικοποίηση σχημάτων πεπερασμένων διαφορών [Smith (1985), σ. 190].



Σχήμα 5.8 Η επιφάνεια $S = (x, y, u(x, y))$, το κάθετο $N \equiv (u_x, u_y, -1)$ και το εφαπτόμενο $V = (a, b, c)$ σε σημείο $x, y, u(x, y)$ της S . Το V είναι εφαπτόμενο στη χαρακτηριστική καμπύλη $C = \{(x(s), y(s), z(s))\}$. Η ένωση όλων των χαρακτηριστικών καμπυλών δίνει την επιφάνεια S . Η λύση u κατά μήκος της προβολής της χαρακτηριστικής καμπύλης C στο επίπεδο (x, y) , $L = \{(x(s), y(s))\}$, εξαρτάται μόνο από την τιμή $u_0 = u(x(0), y(0)) = u(x_0, y_0)$.

Συνεπώς, για την εύρεση της λύσης της Εξ. (5.41), αναζητούνται καμπύλες $C = \{(x(s), y(s), z(s))\}$ σε κάθε σημείο των οποίων το διάνυσμα (a, b, c) είναι εφαπτόμενο στην S . Οι καμπύλες αυτές καλούνται χαρακτηριστικές καμπύλες (characteristic curves) της Εξ. (5.41). Η ζητούμενη λύση ή η επιφάνεια S προκύπτει από την ένωση όλων των χαρακτηριστικών καμπυλών.

Η παραμετρική καμπύλη $L = \{(x(s), y(s))\}$ (Σχήμα 5.8) είναι η προβολή της χαρακτηριστικής καμπύλης C (projected characteristic curve) στο επίπεδο (x, y) . Η λύση $u(x(s), y(s))$ κατά μήκος προβολής χαρακτηριστικής καμπύλης εξαρτάται [Levandovsky (2001), Κεφ. 1, σ. 3] από τις τιμές $u(x(s'), y(s'))$, $0 \leq s' < s$.

Αφού οι χαρακτηριστικές καμπύλες είναι εφαπτόμενες στο (a, b, c) , οι προβολές των χαρακτηριστικών στο επίπεδο (x, y) θα είναι εφαπτόμενες στο (a, b) . Συγκρίνοντας την εξίσωση Eikonal,

$$|\nabla u| = 1 \Leftrightarrow \sqrt{u_x^2 + u_y^2} = 1 \Leftrightarrow u_x^2 + u_y^2 = 1 \Leftrightarrow u_x u_x + u_y u_y = 1, \quad (5.44)$$

με την Εξ. (5.41), προκύπτει ότι $a = u_x$, $b = u_y$ και $c = 1$.

Συνεπώς, στην εξίσωση Eikonal οι προβολές των χαρακτηριστικών καμπυλών είναι εφαπτόμενες στο διάνυσμα $(a, b) = (u_x, u_y) = \nabla u$, δηλαδή σε διάνυσμα κάθετο στις ισοϋψείς της λύσης u . Η διεύθυνση του ∇u συμπίπτει με τη διεύθυνση του επιπέδου (x, y) όπου παρατηρείται η μέγιστη αύξηση της u (το μέτρο του είναι ίσο με τη μέγιστη αυτή αύξηση) και η φορά του είναι προς την κατεύθυνση όπου αυξάνεται η u [Παπαϊωάννου (1993), σ. 102].

B) Η εξίσωση ισοϋψών είναι η

$$u_t + F|\nabla u| = 0 \Leftrightarrow u_t + F\mathbf{n} \cdot \nabla u = 0 \Leftrightarrow$$

$$\Leftrightarrow u_t + F \frac{\nabla u}{|\nabla u|} \cdot \nabla u = 0 \Leftrightarrow u_t + \left(F \frac{u_x}{\sqrt{u_x^2 + u_y^2}} \right) u_x + \left(F \frac{u_y}{\sqrt{u_x^2 + u_y^2}} \right) u_y = 0. \quad (5.45)$$

Με αντίστοιχο τρόπο με την εξίσωση Eikonal, προκύπτει ότι οι προβολές των χαρακτηριστικών είναι εφαπτόμενες στο διάνυσμα $\left(\left(F \frac{u_x}{\sqrt{u_x^2 + u_y^2}} \right), \left(F \frac{u_y}{\sqrt{u_x^2 + u_y^2}} \right), 1 \right)$ στο χώρο (x, y, t) . Πρόκειται για διάνυσμα που δείχνει συνεχώς από μικρότερο προς μεγαλύτερο χρόνο. Η συνιστώσα αυτού του διανύσματος στο επίπεδο (x, y) είναι το διάνυσμα $F \frac{\nabla u}{|\nabla u|}$, το οποίο είναι κάθετο στις ισοϋψείς της $u(x, y, t)$ σε κάθε χρονική στιγμή t . Η φορά του διανύσματος $F \frac{\nabla u}{|\nabla u|}$ καθορίζεται από το πρόσημο της ταχύτητας F .

Η πληροφορία διαδίδεται κατά μήκος των προβολών των χαρακτηριστικών καμπυλών [Levandovsky (2001), Κεφ. 1, σ. 3]. Στην εξίσωση ισοϋψών, αυτό σημαίνει ότι η διεύθυνση διάδοσης πληροφορίας είναι από μικρότερο προς μεγαλύτερο χρόνο και κάθετα στις ισοϋψείς της u (το διάνυσμα $F \frac{\nabla u}{|\nabla u|}$ είναι κάθετο στις ισοϋψείς της u).

5.10 Αλγόριθμος επίλυσης του προβλήματος εξέλιξης συνόρου με τη μέθοδο των ισοϋψών

Έστω σύνορο $\Gamma(t=0)$ τη χρονική στιγμή $t=0$, το οποίο μετατοπίζεται με ταχύτητα F_{mb} . Με τη θεώρηση της μεθόδου των ισοϋψών, η εξέλιξη του συνόρου στο χρόνο, $\Gamma(t)$, παρακολουθείται έμμεσα από την εξέλιξη πεπλεγμένης συνάρτησης: είτε της συνάρτησης χρόνου άφιξης $T(\mathbf{x})$, αν ικανοποιούνται οι κατάλληλες προϋποθέσεις (§5.5), είτε της συνάρτησης ισοϋψών, φ . Η ταχύτητα μετατόπισης του συνόρου, F_{mb} , εισάγει τη φυσική πληροφορία στο πρόβλημα. Η F_{mb} είτε είναι προκαθορισμένη, είτε υπολογίζεται με κατάλληλο μοντέλο της εξεταζόμενης διεργασίας (στο πρόβλημα εγχάραξης η F_{mb} είναι η ταχύτητα εγχάραξης). Σημειώνεται ότι στο στατικό πρόβλημα, η ταχύτητα F ταυτίζεται με την ταχύτητα μετατόπισης του συνόρου F_{mb} (§5.5).

Στην περίπτωση που αντιμετωπίζεται το «γενικό», χωρίς περιορισμούς στο πρόσημο της ταχύτητας, πρόβλημα εξέλιξης συνόρου, επιλύεται η εξίσωση ισοϋψών. Πρόκειται για το πρόβλημα αρχικών τιμών

$$\varphi_t + F |\nabla\varphi| = 0, \varphi(\mathbf{x}, t=0) = q(\mathbf{x}), \mathbf{x} \in \Omega, \quad (5.46)$$

για την επίλυση του οποίου είναι απαραίτητες η ταχύτητα F [ή V της Εξ. (5.16)] σε όλο το χωρίο Ω και η αρχική συνθήκη $q(\mathbf{x})$. Έστω, ότι είναι γνωστό το σύνορο Γ την χρονική στιγμή $t=0$. Η εφαρμογή της μεθόδου των ισοϋψών στο πρόβλημα εξέλιξης συνόρου περιλαμβάνει τα παρακάτω υπολογιστικά προβλήματα (Σχήμα 5.9):

A) Υπολογισμός της συνάρτησης ισοϋψών τη χρονική στιγμή $t=0$, $\varphi(\mathbf{x}, t=0)$, ή υπολογισμός της αρχικής συνθήκης της Εξ. (5.46). Οι επιλογές για την πεπλεγμένη συνάρτηση που θα παίξει το ρόλο της συνάρτησης ισοϋψών είναι πολλές. Η επιλογή της προσημασμένης απόστασης από το σύνορο παρουσιάζει πλεονεκτήματα. Η προσημασμένη απόσταση ορίζεται από την Εξ. (5.11). Η απόσταση από το σύνορο προκύπτει από το πρόβλημα συνοριακών τιμών

$$\left\{ \begin{array}{l} |\nabla\varphi(\mathbf{x}, t=0)| = 1, \mathbf{x} \in \Omega \\ \varphi(\mathbf{x}, t=0) = 0, \mathbf{x} \in \Gamma(t=0) \end{array} \right\}, \quad (5.47)$$

όπου $\Gamma(t=0)$ το σύνορο τη χρονική στιγμή $t=0$. Λεπτομέρειες για την αριθμητική επίλυση της Εξ. (5.47) περιέχονται στο Κεφ. 7.

B) Εύρεση του συνόρου $\Gamma(t)$ (ισοϋψούς μηδέν). Αποτελεί την αντίστροφη διαδικασία του βήματος (A). Με δεδομένη τη συνάρτηση ισοϋψών υπολογίζεται το σύνορο $\Gamma(t)$. Ο αλγόριθμος εύρεσης ισοϋψούς που χρησιμοποιείται περιγράφεται στο Κεφ. 8. Τη χρονική στιγμή $t=0$ δεν χρειάζεται η εύρεση του συνόρου, αφού αυτό είναι γνωστό.

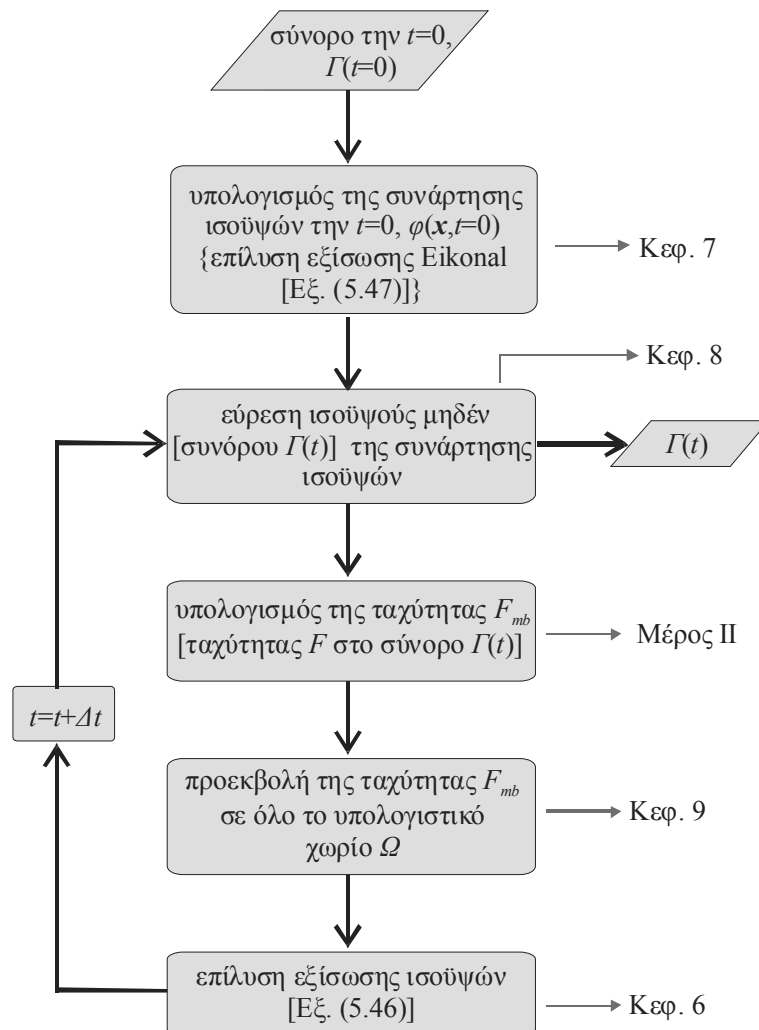
Γ) Υπολογισμός της ταχύτητας F πάνω στο σύνορο Γ , F_{mb} . Στο βήμα αυτό εισάγεται στον αλγόριθμο εξέλιξης συνόρου η φυσική πληροφορία. Στα προβλήματα εγχάραξης/απόθεσης, η F_{mb} αντιστοιχεί στην τοπική ταχύτητα εγχάραξης/απόθεσης στο εσωτερικό δομών και μπορεί να προκύψει από κατάλληλα μοντέλα. Στο Μέρος II (Κεφ. 2,3,4) περιέχεται το πλαίσιο υπολογισμού της τοπικής ταχύτητας κατά την εγχάραξη δομών και περιγράφεται η εφαρμογή αυτού του πλαισίου στην εγχάραξη δομών SiO_2 και Si με πλάσμα φθοριωμένων υδρογονανθράκων.

Δ) Απόδοση τιμών στην ταχύτητα F της Εξ. (5.46) μακριά από το σύνορο. Στα περισσότερα προβλήματα εξέλιξης συνόρου, μόνο η ταχύτητα στο σύνορο, F_{mb} , έχει φυσική σημασία. Ωστόσο, για την επίλυση της Εξ. (5.46) είναι αναγκαίο να αποδοθούν τιμές στην F σε όλο το

χωρίο Ω . Έτσι, γίνεται προεκβολή της ταχύτητας F_{mb} σε όλο το υπολογιστικό χωρίο. Ο μόνος περιορισμός για την προεκβολή είναι πλησιάζοντας το σύνορο η F να τείνει στην F_{mb} . Περισσότερες λεπτομέρειες για αυτό το βήμα του αλγορίθμου υπάρχουν στο Κεφ. 9.

Ε) Υπολογισμός της συνάρτησης ισοϋψών, φ , την επόμενη χρονική στιγμή ($t+\Delta t$, Δt το χρονικό βήμα) με την εξίσωση ισοϋψών [Εξ. (5.46)]. Περισσότερες λεπτομέρειες για την επίλυση της εξίσωσης ισοϋψών υπάρχουν στο Κεφ. 6.

Τα βήματα (B) έως και (E) επαναλαμβάνονται για κάθε χρονική στιγμή της κίνησης του συνόρου.



Σχήμα 5.9 Αλγόριθμος επίλυσης του «γενικού», χωρίς περιορισμούς στο πρόσημο της ταχύτητας, προβλήματος εξέλιξης συνόρου. Δεξιά των βημάτων του αλγορίθμου φαίνονται τα κεφάλαια στα οποία αυτά μελετώνται. Δt είναι το χρονικό βήμα εξέλιξης του συνόρου.

Στην περίπτωση που αντιμετωπίζεται το «στατικό» πρόβλημα εξέλιξης συνόρου (§5.5), ο αλγόριθμος περιλαμβάνει τρία βήματα (Σχήμα 5.10):

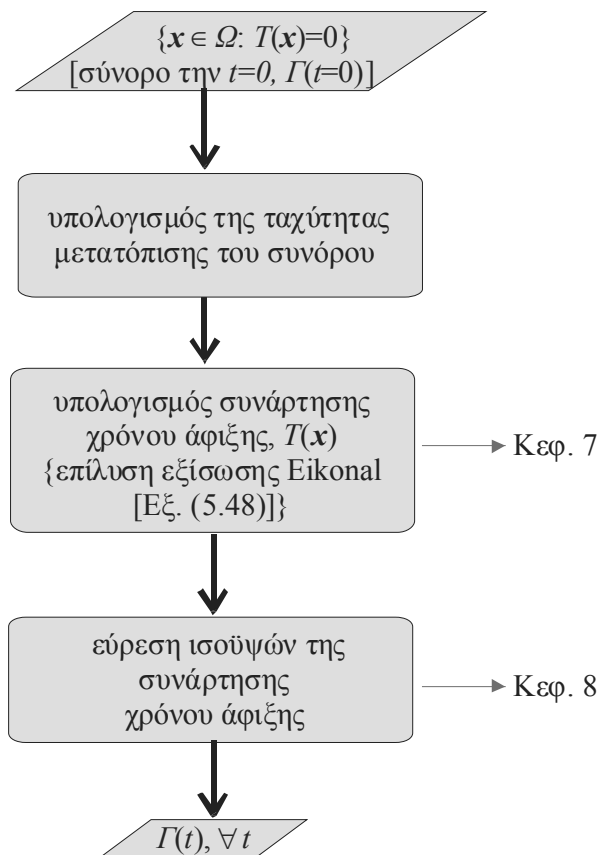
A) Υπολογισμός ή καθορισμός της ταχύτητας μετατόπισης του συνόρου, $F(\mathbf{x})$.

B) Επίλυση της εξίσωσης Eikonal

$$\left\{ \begin{array}{l} F(\mathbf{x})|\nabla T(\mathbf{x})|=1, F(\mathbf{x})>0, \mathbf{x} \in \Omega \\ T(\mathbf{x})=0, \mathbf{x} \in \Gamma(t=0) \end{array} \right\}, \quad (5.48)$$

οπότε και προκύπτει η συνάρτηση του χρόνου άφιξης, $T(\mathbf{x})$. Η επίλυση της εξίσωσης Eikonal περιλαμβάνεται στο Κεφ. 7. Σημειώνεται ότι αντιμετωπίζεται μια κατηγορία «στατικών» προβλημάτων για τα οποία $F=F(\mathbf{x})$. Η γενική κατηγορία «στατικών» προβλημάτων που ανήκουν στις εξισώσεις HJ [Εξ. (5.34)] περιλαμβάνει προβλήματα στα οποία είναι $F=F(\mathbf{x}, T, T_x, T_y, T_z)$.

Γ) Υπολογίζονται οι ισοϋψείς της $T(\mathbf{x})$, δηλαδή το σύνολο $\Gamma(t)$. Ο αλγόριθμος περιγράφεται στο Κεφ. 8.



Σχήμα 5.10 Αλγόριθμος επίλυσης του «στατικού» προβλήματος εξέλιξης συνόρου. Δεξιά των βημάτων σημειώνονται τα κεφάλαια στα οποία αυτά μελετώνται.

Τόσο στο βήμα (A) του αλγόριθμου του «γενικού» προβλήματος, όσο και στο βήμα (B), είναι απαραίτητη η προσαρμογή του συνόρου $\Gamma(t=0)$ στο αριθμητικό πλέγμα επίλυσης

της εξίσωσης Eikonal και η προεκβολή των συνθηκών Dirichlet της εξίσωσης Eikonal σε κόμβους του αριθμητικού πλέγματος. Αυτές οι απαραίτητες διαδικασίες αποτελούν ένα αυτοτελές βήμα των αλγορίθμων το οποίο περιγράφεται στην §7.4.6.

Στα κεφάλαια του Μέρους III που ακολουθούν μελετώνται αυτοτελώς όλα τα υπολογιστικά προβλήματα των παραπάνω αλγορίθμων. Αξιολογούνται διαφορετικές μέθοδοι επίλυσης και μελετάται η επίδραση των αποτελεσμάτων κάθε υπολογιστικού προβλήματος στο γενικό πρόβλημα εξέλιξης συνόρου. Ο στόχος είναι οι αριθμητικοί υπολογισμοί εξέλιξης συνόρου να μην αλλοιώνουν τη φυσική πληροφορία, δηλαδή την ταχύτητα μετατόπισης του συνόρου [βήμα (Α) στον αλγόριθμο του «στατικού» προβλήματος, βήμα (Γ) του αλγορίθμου του «γενικού» προβλήματος]. Με αυτό τον τρόπο είναι δυνατή η αξιολόγηση του φυσικού μοντέλου υπολογισμού της ταχύτητας μετατόπισης (ταχύτητα εγχάραξης στα προβλήματα εγχάραξης).

Στο Κεφ. 6 περιγράφονται και αξιολογούνται διαφορετικά αριθμητικά σχήματα για την επίλυση της εξίσωσης ισοϋψών. Στο Κεφ. 7 μελετάται η αριθμητική επίλυση της εξίσωσης Eikonal [Εξ. (5.47) και (5.48)]. Στο Κεφ. 8 περιγράφεται αλγόριθμος εύρεσης ισοϋψούς συνάρτησης και στο Κεφ. 9 μέθοδος για την απόδοση τιμών στην ταχύτητα F της εξίσωσης ισοϋψών [Εξ. (5.46)] μακριά από το σύνορο.

Κεφάλαιο 6

Επίλυση της εξίσωσης ισοϋψών

Η επίλυση της εξίσωσης ισοϋψών είναι το κεντρικό αριθμητικό πρόβλημα του αλγόριθμου του «γενικού» προβλήματος εξέλιξης συνόρου. Μελετώνται και αξιολογούνται διαφορετικά σχήματα ολοκλήρωσης στο χρόνο και διακριτοποίησης στο χώρο, καθώς και διαφορετικά σχήματα προσέγγισης της Χαμιλτονιανής της εξίσωσης ισοϋψών.

6.1 Εισαγωγή

Η εξίσωση ισοϋψών (level set equation),⁹¹

$$u_t + F|\nabla u| = 0, u(\mathbf{x}, t=0) = q(\mathbf{x}), \mathbf{x} \in \Omega, \quad (6.1)$$

όπου F η κάθετη στις ισοϋψείς της u συνιστώσα της ταχύτητας και $q(\mathbf{x})$ γνωστή συνάρτηση, ανήκει στη γενική κατηγορία εξισώσεων Hamilton–Jacobi,

$$u_t + H(\mathbf{x}, t, u, u_x, u_y, u_z) = 0, u(\mathbf{x}, t=0) = q(\mathbf{x}), \mathbf{x} \in \Omega. \quad (6.2)$$

Η συνάρτηση H καλείται Χαμιλτονιανή και για την εξίσωση ισοϋψών είναι $H=F|\nabla u|$. Η εξίσωση ισοϋψών είναι πρόβλημα αρχικών τιμών η επίλυση του οποίου είναι το βήμα (E) του αλγορίθμου του «γενικού» προβλήματος (§5.10).

Είναι κοινή πρακτική [Gottlieb et al. (2001)] κατά την επίλυση προβλημάτων αρχικών τιμών, αρχικά να γίνεται διακριτοποίηση στο χώρο και να προκύπτει ένα σύστημα συνήθων διαφορικών εξισώσεων ως προς το χρόνο, το οποίο επιλύεται με κατάλληλο σχήμα. Έτσι, για την επίλυση του προβλήματος αρχικών τιμών της Εξ. (6.1) τα αριθμητικά σχήματα περιλαμβάνουν: α) το σχήμα ολοκλήρωσης στο χρόνο για την επίλυση του συστήματος συνήθων διαφορικών εξισώσεων, β) το σχήμα προσέγγισης της Χαμιλτονιανής, $H = F|\nabla u|$, για την επιλογή της ορθής ασθενούς λύσης, και γ) το σχήμα προσέγγισης των χωρικών παραγώγων (διακριτοποίηση στο χώρο). Τα αριθμητικά σχήματα που έχουν χρησιμοποιηθεί για τη διακριτοποίηση της εξίσωσης ισοϋψών είναι ρητά (explicit). Τέτοια είναι και τα σχήματα που δοκιμάζονται στην παρούσα εργασία.

Στις παραγράφους που ακολουθούν περιγράφονται τα αριθμητικά σχήματα που χρησιμοποιήθηκαν (§6.2). Στη συνέχεια σχολιάζεται η ευστάθεια των αριθμητικών σχημάτων (§6.3), η κυρτότητα της Χαμιλτονιανής (§6.4) και οι συνοριακές συνθήκες (§6.5). Έπειτα (§6.6), τα αριθμητικά σχήματα αξιολογούνται μέσα από την εφαρμογή τους σε ειδικά προβλήματα και αναδεικνύεται η σημασία των χαρακτηριστικών τους (σχήμα ολοκλήρωσης στο χρόνο, προσέγγισης Χαμιλτονιανής και προσέγγισης χωρικών παραγώγων). Το κεφάλαιο ολοκληρώνεται με την αξιολόγηση της μελέτης. Η επαλήθευση του κώδικα επίλυσης της εξίσωσης ισοϋψών με τα σχήματα που χρησιμοποιούνται στο παρόν κεφάλαιο περιέχεται στην §A.5.1.

⁹¹ Στο υπόλοιπο του κεφαλαίου χρησιμοποιείται το σύμβολο u για την άγνωστη συνάρτηση, αντί του συμβόλου φ που χρησιμοποιήθηκε στο Κεφ. 5. Ο συμβολισμός φ αναφέρεται σε πεπλεγμένη συνάρτηση περιγραφής συνόρου και ο συμβολισμός u αφορά στην άγνωστη συνάρτηση σε ένα αριθμητικό πρόβλημα.

6.2 Αριθμητικά σχήματα για την επίλυση της εξίσωσης ισοϋψών

6.2.1 Αριθμητικό σχήμα για την ολοκλήρωση στο χρόνο

Η ολοκλήρωση στο χρόνο μπορεί να γίνει είτε με σχήμα Euler 1^{ης} τάξης ακρίβειας, είτε [Gottlieb et al. (2001)] με υψηλότερης τάξης Runge-Kutta σχήματα διατήρησης ισχυρής ευστάθειας (strong stability preserving Runge-Kutta, SSPRK, §6.3).

A) Σχήμα Euler 1^{ης} τάξης με κατάντη διαφορές (Euler).

Είναι:

$$u_{i,j}^{n+1} = u_{i,j}^n - \Delta t (F|\nabla u|)_{i,j}^n. \quad (6.3)$$

B) Σχήμα RK 2^{ης} τάξης (SSPRK2) [Shu & Osher (1988), Peng et al. (1999)].

Είναι:

$$u_{i,j}^{(1)} = u_{i,j}^n - \Delta t (F|\nabla u|)_{i,j}^n, \quad (6.4)$$

$$u_{i,j}^{n+1} = \frac{1}{2}u_{i,j}^n + \frac{1}{2}u_{i,j}^{(1)} - \frac{\Delta t}{2}(F|\nabla u|)_{i,j}^{(1)}. \quad (6.5)$$

Παρακάτω περιγράφεται απλούστερη σειρά πράξεων [Osher & Fedkiw (2003), σ. 37-39], με την οποία χρειάζεται η αποθήκευση μόνο δύο πινάκων για τον υπολογισμό της συνάρτησης u την επόμενη χρονική στιγμή:

$$u_{i,j}^* = u_{i,j}^n - \Delta t (F|\nabla u|)_{i,j}^n, \quad (6.6)$$

$$u_{i,j}^* = u_{i,j}^* - \Delta t (F|\nabla u|)_{i,j}^*, \quad (6.7)$$

$$u_{i,j}^{n+1} = \frac{1}{2}(u_{i,j}^n + u_{i,j}^*). \quad (6.8)$$

Γ) Σχήμα RK 3^{ης} τάξης (SSPRK3) [Shu & Osher (1988), Jiang & Shu (1996), Jiang & Peng (2000)].

Είναι:

$$u_{i,j}^{(1)} = u_{i,j}^n - \Delta t (F|\nabla u|)_{i,j}^n, \quad (6.9)$$

$$u_{i,j}^{(2)} = \frac{3}{4}u_{i,j}^n + \frac{1}{4}u_{i,j}^{(1)} - \frac{\Delta t}{4}(F|\nabla u)_{i,j}^{(1)}, \quad (6.10)$$

$$u_{i,j}^{n+1} = \frac{1}{3}u_{i,j}^n + \frac{2}{3}u_{i,j}^{(2)} - \frac{2}{3}\Delta t(F|\nabla u)_{i,j}^{(2)}. \quad (6.11)$$

Παρακάτω περιγράφεται απλούστερη σειρά πράξεων [Osher & Fedkiw (2003), σ. 37-39], με την οποία χρειάζεται η αποθήκευση μόνο δύο πινάκων για τον υπολογισμό της συνάρτησης u την επόμενη χρονική στιγμή:

$$u_{i,j}^* = u_{i,j}^n - \Delta t(F|\nabla u)_{i,j}^n, \quad (6.12)$$

$$u_{i,j}^* = u_{i,j}^* - \Delta t(F|\nabla u)_{i,j}^*, \quad (6.13)$$

$$u_{i,j}^* = \frac{3}{4}u_{i,j}^n + \frac{1}{4}u_{i,j}^*, \quad (6.14)$$

$$u_{i,j}^* = u_{i,j}^* - \Delta t(F|\nabla u)_{i,j}^*, \quad (6.15)$$

$$u_{i,j}^{n+1} = \frac{1}{3}u_{i,j}^n + \frac{2}{3}u_{i,j}^*. \quad (6.16)$$

6.2.2 Προσέγγιση της Χαμιλτονιανής

Το σχήμα προσέγγισης της Χαμιλτονιανής ενσωματώνει τη συνθήκη εντροπίας για την επιλογή της ορθής ασθενούς λύσης της Εξ. (6.1). Οι Osher και Fedkiw περιγράφουν τρία βασικά σχήματα προσέγγισης της Χαμιλτονιανής [Osher & Fedkiw (2003), σ. 50-54]: α) Lax-Friedrichs, β) Roe-Fix (Roe with entropy fix) και γ) Godunov. Ο Sethian έχει υιοθετήσει το πρώτο σχήμα που παρουσιάστηκε από τον ίδιο και τον Osher [Osher & Sethian (1988)] για την προσέγγιση της Χαμιλτονιανής και αυτό προτείνει σε μια σειρά από εργασίες του [Sethian (1999), σ. 65-66]. Το σχήμα αυτό καλείται στη συνέχεια της εργασίας σχήμα Osher-Sethian, αν και οι εμπνευστές του δεν το είχαν βαφτίσει έτσι.

Στη συνέχεια περιγράφονται τα σχήματα προσέγγισης της Χαμιλτονιανής της Εξ. (6.1), δηλαδή της ποσότητας $(F|\nabla u)_{i,j}$, που δοκιμάστηκαν:

A) Σχήμα Osher-Sethian (OS) [Osher & Sethian (1988)].

Πρόκειται για σχήμα προσέγγισης κατά την κατεύθυνση διάδοσης πληροφορίας (upwind). Για τη Χαμιλτονιανή της Εξ. (6.1), το πρόσημο της ταχύτητας F χρησιμοποιείται για την επιλογή της προσέγγισης του $|\nabla u|$:

$$H^{OS} = (F|\nabla u|)_{i,j} = \max(F_{i,j}, 0)\nabla_{ij}^+ + \min(F_{i,j}, 0)\nabla_{ij}^-, \quad (6.17)$$

όπου

$$\nabla_{ij}^+ = \left\{ \max \left[(u_x^-)_{ij}, 0 \right]^2 + \min \left[(u_x^+)_{ij}, 0 \right]^2 + \max \left[(u_y^-)_{ij}, 0 \right]^2 + \min \left[(u_y^+)_{ij}, 0 \right]^2 \right\}^{1/2}, \quad (6.18)$$

$$\nabla_{ij}^- = \left\{ \max \left[(u_x^+)_{ij}, 0 \right]^2 + \min \left[(u_x^-)_{ij}, 0 \right]^2 + \max \left[(u_y^+)_{ij}, 0 \right]^2 + \min \left[(u_y^-)_{ij}, 0 \right]^2 \right\}^{1/2}. \quad (6.19)$$

Οι μερικές παράγωγοι $u_x^-, u_x^+, u_y^-, u_y^+$ ορίζονται στην §6.2.3.

B) Σχήμα Lax-Friedrichs (LF) [Osher & Fedkiw (2003), σ. 50-54].

Πρόκειται για σχήμα κεντρικών διαφορών:

$$H^{LF} = (F|\nabla u|)_{i,j} = F_{i,j} \sqrt{\left[\frac{(u_x^-)_{ij} + (u_x^+)_{ij}}{2} \right]^2 + \left[\frac{(u_y^-)_{ij} + (u_y^+)_{ij}}{2} \right]^2} - a^x \left[\frac{(u_x^+)_{ij} - (u_x^-)_{ij}}{2} \right] - a^y \left[\frac{(u_y^+)_{ij} - (u_y^-)_{ij}}{2} \right], \quad (6.20)$$

όπου $a^x = \max |H_1(u_x, u_y)|$ και $a^y = \max |H_2(u_x, u_y)|$ οι συντελεστές απώλειας (dissipation coefficients) και

$$H_1 = \frac{\partial H}{\partial u_x} = \frac{\partial (F|\nabla u|)}{\partial u_x}, \quad (6.21)$$

$$H_2 = \frac{\partial H}{\partial u_y} = \frac{\partial (F|\nabla u|)}{\partial u_y}. \quad (6.22)$$

Ο υπολογισμός του $a^x(a^y)$ είναι γενικά δύσκολος. Στη συνέχεια περιγράφεται περίπτωση όπου ο προσεγγιστικός υπολογισμός του $a^x(a^y)$ είναι εφικτός. Έστω ότι η F δεν εξαρτάται από τις μερικές παραγώγους της u . Τότε,

$$H = F(x,y,t)|\nabla u| \Rightarrow H_1 = \frac{\partial H}{\partial u_x} = F(x,y,t) \frac{u_x}{|\nabla u|}. \quad (6.23)$$

Υπάρχουν παραλλαγές του σχήματος Lax-Friedrichs που διαφοροποιούνται στο διάστημα στο οποίο υπολογίζεται το μέγιστο κατά τον υπολογισμό του $a^x(a^y)$.

Το πρώτο είναι το γενικό σχήμα Lax-Friedrichs (global Lax-Friedrichs), όπου το μέγιστο υπολογίζεται σε όλο το υπολογιστικό χωρίο. Τότε, μπορεί να θεωρηθεί ότι $H_1 \leq |F(x,y,t)|$, αφού $|u_x|/|\nabla u| \leq 1$, και συνεπώς

$$a^x = \max |F(x,y,t)| = a^y. \quad (6.24)$$

Το δεύτερο είναι το τοπικό-τοπικό Lax-Friedrichs σχήμα (local-local Lax-Friedrichs, LLLF), όπου

$$\begin{aligned} a^x(x_0, y_0) &= \max \left| H_1 [u_x(x_0, y_0), u_y(x_0, y_0)] \right| = \max \left| F(x_0, y_0) \frac{u_x(x_0, y_0)}{\sqrt{[u_x(x_0, y_0)]^2 + [u_y(x_0, y_0)]^2}} \right| = \\ &= \max \left\{ \left| F(x_0, y_0) \right| \frac{u_x(x_0, y_0)}{\sqrt{[u_x(x_0, y_0)]^2 + [u_y(x_0, y_0)]^2}} \right\} = \\ &= \max |F(x_0, y_0)| \max \left| \frac{u_x(x_0, y_0)}{\sqrt{[u_x(x_0, y_0)]^2 + [u_y(x_0, y_0)]^2}} \right| = \\ &= |F(x_0, y_0)| \max \left\{ \frac{|u_x(x_0, y_0)|}{\sqrt{[u_x(x_0, y_0)]^2 + [u_y(x_0, y_0)]^2}} \right\}. \end{aligned} \quad (6.25)$$

Έτσι,

$$a^x(x_0, y_0) = |F(x_0, y_0)| \frac{\max[|u_x^-(x_0, y_0)|, |u_x^+(x_0, y_0)|]}{\sqrt{\max[|u_x^-(x_0, y_0)|, |u_x^+(x_0, y_0)|]^2 + \min[|u_y^-(x_0, y_0)|, |u_y^+(x_0, y_0)|]^2}}. \quad (6.26)$$

Όμοια,

$$a^y(x_0, y_0) = |F(x_0, y_0)| \frac{\max[|u_y^-(x_0, y_0)|, |u_y^+(x_0, y_0)|]}{\sqrt{\max[|u_y^-(x_0, y_0)|, |u_y^+(x_0, y_0)|]^2 + \min[|u_x^-(x_0, y_0)|, |u_x^+(x_0, y_0)|]^2}}. \quad (6.27)$$

Στην τελευταία περίπτωση το σχήμα συμβολίζεται με LLLF και η Χαμιλτονιανή H^{LLL} .

6.2.3 Προσέγγιση χωρικών παραγώγων

Τα σχήματα πεπερασμένων διαφορών που έχουν προταθεί για την προσέγγιση των χωρικών παραγώγων είναι είτε σχήματα 1^η τάξης, είτε σχήματα Essentially Non Oscillatory (ENO) και Weighed ENO (WENO) υψηλότερης τάξης [Shu (1997)].

Τόσο τα σχήματα ENO, όσο και τα WENO βασίζονται σε προσεγγίσεις της άγνωστης συνάρτησης με πολυώνυμα παρεμβολής Newton με διηρημένες διαφορές [Παπαγεωργίου & Τσίτουρας (2000), σ. 200]. Το πλήθος των σημείων του πλέγματος που χρησιμοποιούνται για την προσέγγιση καθορίζει το βαθμό του πολυωνύμου Newton. Επιλέγοντας διαφορετικό σύνολο σημείων για την κατασκευή του πολυωνύμου παρεμβολής προκύπτουν διαφορετικές πιθανές προσεγγίσεις της χωρικής παραγώγου. Τα ENO σχήματα επιλέγουν την προσέγγιση με τη μικρότερη μεταβολή, ενώ τα WENO σχήματα κατασκευάζουν ένα γραμμικό συνδυασμό των πιθανών προσεγγίσεων με βάρη. Σε κάθε προσέγγιση αποδίδεται συντελεστής βάρους: προσέγγιση με μικρή μεταβολή έχει υψηλό συντελεστή βάρους.

Ο λόγος για τον οποίο προτείνονται σχήματα ENO και WENO είναι α) η υψηλότερη ακρίβεια, και κυρίως β) η αποφυγή πλαστών διακυμάνσεων της λύσης κοντά σε ασυνέχειες της κλίσης. Αυτές οι διακυμάνσεις κοντά στις ασυνέχειες κλίσης αντιστοιχούν [Harten et al. (1987), Shu (1997)], στο φαινόμενο Gibbs των φασματικών μεθόδων (spectral methods).

Τα σχήματα WENO α) ανάγονται σε σχήματα ENO κοντά στις ασυνέχειες κλίσης και β) είναι υψηλότερης τάξης ακρίβειας από τα ENO σε περιοχές μακριά από τις ασυνέχειες χρησιμοποιώντας το ίδιο πλήθος σημείων του πλέγματος. Επίσης, με τα σχήματα WENO αποφεύγονται λογικές πράξεις για την επιλογή της κατάλληλης ομαλής προσέγγισης, με

αποτέλεσμα σχήματα WENO να είναι τουλάχιστο δύο φορές ταχύτερα από τα σχήματα ENO [Jiang & Shu (1996)].

Στην παρούσα εργασία οι χωρικές παράγωγοι προσεγγίζονται:

A) Με διαφορές 1^{ης} τάξης (1).

Είναι:

$$\left(u_x^-\right)_{ij} = D^{-x}u_{i,j}, \left(u_x^+\right)_{ij} = D^{+x}u_{i,j}, \left(u_y^-\right)_{ij} = D^{-y}u_{i,j}, \left(u_y^+\right)_{ij} = D^{+y}u_{i,j}, \quad (6.28)$$

όπου

$$D^{-x}u_{ij} = \frac{u_{i,j} - u_{i-1,j}}{\Delta x}, D^{+x}u_{ij} = \frac{u_{i+1,j} - u_{i,j}}{\Delta x}, D^{-y}u_{ij} = \frac{u_{i,j} - u_{i,j-1}}{\Delta y}, D^{+y}u_{ij} = \frac{u_{i,j+1} - u_{i,j}}{\Delta y}. \quad (6.29)$$

B) Με σχήματα ENO 2^{ης} τάξης (ENO2).

Είναι:

$$\left(u_x^-\right)_{ij} = \begin{cases} \left(u_x^{-,1}\right)_{ij}, & \left|D^{-x}D^{+x}u_{i-1,j}\right| < \left|D^{-x}D^{+x}u_{i,j}\right| \\ \left(u_x^{-,2}\right)_{ij}, & \left|D^{-x}D^{+x}u_{i-1,j}\right| > \left|D^{-x}D^{+x}u_{i,j}\right| \end{cases}, \quad (6.30)$$

$$\left(u_y^-\right)_{ij} = \begin{cases} \left(u_y^{-,1}\right)_{ij}, & \left|D^{-y}D^{+y}u_{i,j-1}\right| < \left|D^{-y}D^{+y}u_{i,j}\right| \\ \left(u_y^{-,2}\right)_{ij}, & \left|D^{-y}D^{+y}u_{i,j-1}\right| > \left|D^{-y}D^{+y}u_{i,j}\right| \end{cases}, \quad (6.31)$$

$$\left(u_x^+\right)_{ij} = \begin{cases} \left(u_x^{+,1}\right)_{ij}, & \left|D^{+x}D^{-x}u_{i+1,j}\right| < \left|D^{+x}D^{-x}u_{i,j}\right| \\ \left(u_x^{+,2}\right)_{ij}, & \left|D^{+x}D^{-x}u_{i+1,j}\right| > \left|D^{+x}D^{-x}u_{i,j}\right| \end{cases}, \quad (6.32)$$

$$\left(u_y^+\right)_{ij} = \begin{cases} \left(u_y^{+,1}\right)_{ij}, & \left|D^{+y}D^{-y}u_{i,j+1}\right| < \left|D^{+y}D^{-y}u_{i,j}\right| \\ \left(u_y^{+,2}\right)_{ij}, & \left|D^{+y}D^{-y}u_{i,j+1}\right| > \left|D^{+y}D^{-y}u_{i,j}\right| \end{cases}, \quad (6.33)$$

όπου $D^{\pm p}D^{\pm q}u_{ij} = D^{\pm p}\left(D^{\pm q}u_{ij}\right)$ και

$$\left(u_x^{-,1}\right)_{ij} = -\frac{1}{2}D^{+x}u_{i-2,j} + \frac{3}{2}D^{+x}u_{i-1,j}, \left(u_x^{-,2}\right)_{ij} = \frac{1}{2}D^{+x}u_{i-1,j} + \frac{1}{2}D^{+x}u_{i,j}, \quad (6.34)$$

$$(u_y^{-,1})_{ij} = -\frac{1}{2}D^{+y}u_{i,j-2} + \frac{3}{2}D^{+y}u_{i,j-1}, (u_y^{-,2})_{ij} = \frac{1}{2}D^{+y}u_{i,j-1} + \frac{1}{2}D^{+y}u_{i,j}, \quad (6.35)$$

$$(u_x^{+,1})_{ij} = -\frac{1}{2}D^{-x}u_{i+2,j} + \frac{3}{2}D^{-x}u_{i+1,j}, (u_x^{+,2})_{ij} = \frac{1}{2}D^{-x}u_{i+1,j} + \frac{1}{2}D^{-x}u_{i,j}, \quad (6.36)$$

$$(u_y^{+,1})_{ij} = -\frac{1}{2}D^{-y}u_{i,j+2} + \frac{3}{2}D^{-y}u_{i,j+1}, (u_y^{+,2})_{ij} = \frac{1}{2}D^{-y}u_{i,j+1} + \frac{1}{2}D^{-y}u_{i,j}. \quad (6.37)$$

Γ) Με σχήματα ENO 2^{ης} τάξης, όπως έχουν προταθεί από τους Osher και Sethian (ENO2S) [Osher & Sethian (1988), Sethian (1999), σ. 66].

Είναι:

$$(u_x^-)_{ij} = D^{-x}u_{ij} + \frac{\Delta x}{2}m(D^{-x}D^{-x}u_{ij}, D^{-x}D^{+x}u_{ij}), \quad (6.38)$$

$$(u_x^+)_{ij} = D^{+x}u_{ij} - \frac{\Delta x}{2}m(D^{+x}D^{+x}u_{ij}, D^{+x}D^{-x}u_{ij}), \quad (6.39)$$

$$(u_y^-)_{ij} = D^{-y}u_{ij} + \frac{\Delta y}{2}m(D^{-y}D^{-y}u_{ij}, D^{-y}D^{+y}u_{ij}), \quad (6.40)$$

$$(u_y^+)_{ij} = D^{+y}u_{ij} - \frac{\Delta y}{2}m(D^{+y}D^{+y}u_{ij}, D^{+y}D^{-y}u_{ij}), \quad (6.41)$$

όπου

$$m(a,b) = \begin{cases} \left\{ \begin{array}{ll} a & \text{αν } |a| \leq |b| \\ b & \text{αν } |a| > |b| \end{array} \right\}, & ab \geq 0 \\ 0, & ab < 0 \end{cases} \quad (6.42)$$

Η διαφορά με το προηγούμενο σχήμα ENO 2^{ης} τάξης είναι η συνάρτηση $m(a,b)$ (συνάρτηση minmode). Τα σχήματα ENO ουσιαστικά εισάγουν αριθμητική διάχυση κοντά στις ασυνέχειες κλίσης και η σημασία της συνάρτησης $m(a,b)$ είναι [Jiang & Shu (1996)] να εξαλείψει αυτή την αριθμητική διάχυση και να κάνει πιο απότομες τις μεταβολές της άγνωστης συνάρτησης.

Δ) Με σχήματα ENO 3^{ης} τάξης (ENO3) [Osher & Shu (1991), Jiang & Peng (2000)].

Είναι:

$$\begin{aligned} (u_x^-)_{ij} &= \frac{1}{12} \left(-D^{+x} u_{i-2,j} + 7D^{+x} u_{i-1,j} + 7D^{+x} u_{i,j} - D^{+x} u_{i+1,j} \right) - \\ &\quad - \Phi^{ENO} \left(\Delta x D^{-x} D^{+x} u_{i-2,j}, \Delta x D^{-x} D^{+x} u_{i-1,j}, \Delta x D^{-x} D^{+x} u_{i,j}, \Delta x D^{-x} D^{+x} u_{i+1,j} \right), \end{aligned} \quad (6.43)$$

$$\begin{aligned} (u_y^-)_{ij} &= \frac{1}{12} \left(-D^{+y} u_{i,j-2} + 7D^{+y} u_{i,j-1} + 7D^{+y} u_{i,j} - D^{+y} u_{i,j+1} \right) - \\ &\quad - \Phi^{ENO} \left(\Delta y D^{-y} D^{+y} u_{i,j-2}, \Delta y D^{-y} D^{+y} u_{i,j-1}, \Delta y D^{-y} D^{+y} u_{i,j}, \Delta y D^{-y} D^{+y} u_{i,j+1} \right), \end{aligned} \quad (6.44)$$

$$\begin{aligned} (u_x^+)_{ij} &= \frac{1}{12} \left(-D^{+x} u_{i-2,j} + 7D^{+x} u_{i-1,j} + 7D^{+x} u_{i,j} - D^{+x} u_{i+1,j} \right) + \\ &\quad + \Phi^{ENO} \left(\Delta x D^{-x} D^{+x} u_{i+2,j}, \Delta x D^{-x} D^{+x} u_{i+1,j}, \Delta x D^{-x} D^{+x} u_{i,j}, \Delta x D^{-x} D^{+x} u_{i-1,j} \right), \end{aligned} \quad (6.45)$$

$$\begin{aligned} (u_y^+)_{ij} &= \frac{1}{12} \left(-D^{+y} u_{i,j-2} + 7D^{+y} u_{i,j-1} + 7D^{+y} u_{i,j} - D^{+y} u_{i,j+1} \right) + \\ &\quad + \Phi^{ENO} \left(\Delta y D^{-y} D^{+y} u_{i,j+2}, \Delta y D^{-y} D^{+y} u_{i,j+1}, \Delta y D^{-y} D^{+y} u_{i,j}, \Delta y D^{-y} D^{+y} u_{i,j-1} \right), \end{aligned} \quad (6.46)$$

όπου

$$\Phi^{ENO}(a, b, c, d) = \begin{cases} \Phi_1 + \frac{1}{3}(a - 2b + c), & |b| < |c| \wedge |a - b| < |b - c| \\ -\Phi_1, & |b| > |c| \wedge |b - c| > |c - d| \\ \Phi_1, & \text{αλλιώς} \end{cases} \quad (6.47)$$

και

$$\Phi_1 = -\frac{1}{12}(b - 2c + d). \quad (6.48)$$

Ε) Με WENO σχήμα 3^{ης} τάξης (WENO3) [Jiang & Peng (2000)].

Προκύπτει με συνδυασμό των προσεγγίσεων των μερικών παραγώγων του σχήματος ENO 2^{ης} τάξης. Είναι:

$$(u_x^-)_{ij} = \frac{1}{2} \left(D^{+x} u_{i-1,j} + D^{+x} u_{i,j} \right) - \frac{w_{x-}}{2} \left(D^{+x} u_{i-2,j} - 2D^{+x} u_{i-1,j} + D^{+x} u_{i,j} \right), \quad (6.49)$$

$$(u_y^-)_{ij} = \frac{1}{2} \left(D^{+y} u_{i,j-1} + D^{+y} u_{i,j} \right) - \frac{w_{y-}}{2} \left(D^{+y} u_{i,j-2} - 2D^{+y} u_{i,j-1} + D^{+y} u_{i,j} \right), \quad (6.50)$$

$$(u_x^+)_{ij} = \frac{1}{2}(D^{+x}u_{i-1,j} + D^{+x}u_{i,j}) - \frac{w_{x+}}{2}(D^{+x}u_{i+1,j} - 2D^{+x}u_{i,j} + D^{+x}u_{i-1,j}), \quad (6.51)$$

$$(u_y^+)_{ij} = \frac{1}{2}(D^{+y}u_{i,j-1} + D^{+y}u_{i,j}) - \frac{w_{y+}}{2}(D^{+y}u_{i,j+1} - 2D^{+y}u_{i,j} + D^{+y}u_{i,j-1}), \quad (6.52)$$

όπου

$$w_{-x} = \frac{1}{1+2r_{-x}^2}, w_{-y} = \frac{1}{1+2r_{-y}^2}, w_{+x} = \frac{1}{1+2r_{+x}^2}, w_{+y} = \frac{1}{1+2r_{+y}^2}, \quad (6.53)$$

$$r_{-x} = \frac{e + (D^{-x}D^{+x}u_{i-1,j})^2}{e + (D^{-x}D^{+x}u_{i,j})^2}, r_{-y} = \frac{e + (D^{-y}D^{+y}u_{i,j-1})^2}{e + (D^{-y}D^{+y}u_{i,j})^2}, \quad (6.54)$$

$$r_{+x} = \frac{e + (D^{-x}D^{+x}u_{i+1,j})^2}{e + (D^{-x}D^{+x}u_{i,j})^2}, r_{+y} = \frac{e + (D^{-y}D^{+y}u_{i,j+1})^2}{e + (D^{-y}D^{+y}u_{i,j})^2}. \quad (6.55)$$

Ο όρος $e = 10^{-6}$ εισάγεται στις εξισώσεις για την αποφυγή διαίρεσης με το μηδέν.

ΣΤ) Με WENO σχήμα 5^{ης} τάξης (WENO5) [Jiang & Peng (2000)].

Προκύπτει με συνδυασμό των προσεγγίσεων των μερικών παραγώγων του σχήματος ENO 3^{ης} τάξης. Είναι:

$$(u_x^-)_{ij} = \frac{1}{12}(-D^{+x}u_{i-2,j} + 7D^{+x}u_{i-1,j} + 7D^{+x}u_{i,j} - D^{+x}u_{i+1,j}) - \Phi^{WENO}(\Delta x D^{-x} D^{+x} u_{i-2,j}, \Delta x D^{-x} D^{+x} u_{i-1,j}, \Delta x D^{-x} D^{+x} u_{i,j}, \Delta x D^{-x} D^{+x} u_{i+1,j}), \quad (6.56)$$

$$(u_y^-)_{ij} = \frac{1}{12}(-D^{+y}u_{i,j-2} + 7D^{+y}u_{i,j-1} + 7D^{+y}u_{i,j} - D^{+y}u_{i,j+1}) - \Phi^{WENO}(\Delta y D^{-y} D^{+y} u_{i,j-2}, \Delta y D^{-y} D^{+y} u_{i,j-1}, \Delta y D^{-y} D^{+y} u_{i,j}, \Delta y D^{-y} D^{+y} u_{i,j+1}), \quad (6.57)$$

$$(u_x^+)_{ij} = \frac{1}{12}(-D^{+x}u_{i-2,j} + 7D^{+x}u_{i-1,j} + 7D^{+x}u_{i,j} - D^{+x}u_{i+1,j}) + \Phi^{WENO}(\Delta x D^{-x} D^{+x} u_{i+2,j}, \Delta x D^{-x} D^{+x} u_{i+1,j}, \Delta x D^{-x} D^{+x} u_{i,j}, \Delta x D^{-x} D^{+x} u_{i-1,j}), \quad (6.58)$$

$$\begin{aligned} (u_y^+)_{ij} = & \frac{1}{12} (-D^{+y} u_{i,j-2} + 7D^{+y} u_{i,j-1} + 7D^{+y} u_{i,j} - D^{+y} u_{i,j+1}) + \\ & + \Phi^{WENO} (\Delta y D^{-y} D^{+y} u_{i,j+2}, \Delta y D^{-y} D^{+y} u_{i,j+1}, \Delta y D^{-y} D^{+y} u_{i,j}, \Delta y D^{-y} D^{+y} u_{i,j-1}). \end{aligned} \quad (6.59)$$

όπου

$$\Phi^{WENO}(a, b, c, d) = \frac{1}{3} w_0 (a - 2b + c) + \frac{1}{6} \left(w_2 - \frac{1}{2} \right) (b - 2c + d), \quad (6.60)$$

$$w_0 = \frac{a_0}{a_0 + a_1 + a_2}, \quad w_2 = \frac{a_2}{a_0 + a_1 + a_2}, \quad (6.61)$$

$$a_0 = \frac{1}{(e + IS_0)^2}, \quad a_1 = \frac{6}{(e + IS_1)^2}, \quad a_2 = \frac{3}{(e + IS_2)^2}, \quad (6.62)$$

$$IS_0 = 13(a - b)^2 + 3(a - 3b)^2, \quad (6.63)$$

$$IS_1 = 13(b - c)^2 + 3(b + c)^2, \quad (6.64)$$

$$IS_2 = 13(c - d)^2 + 3(3c - d)^2. \quad (6.65)$$

Ο όρος $e = 10^{-6}$ εισάγεται στις εξισώσεις για την αποφυγή διαίρεσης με το μηδέν.

6.3 Ευστάθεια των αριθμητικών σχημάτων

Ο στόχος είναι να προσδιοριστούν οι συνθήκες, η κατάλληλη διακριτοποίηση στο χώρο και στο χρόνο, υπό τις οποίες τα περιγραφόμενα σχήματα είναι ευσταθή, αλλά και να εντοπιστεί (αν υπάρχει) το αριθμητικό σχήμα που εμφανίζει τα καλύτερα χαρακτηριστικά ευστάθειας. Στην ευστάθεια των αριθμητικών σχημάτων που χρησιμοποιούνται για την επίλυση της Εξ. (6.1) επιδρούν και τα τρία χαρακτηριστικά τους (το σχήμα ολοκλήρωσης στο χρόνο, η συνάρτηση προσέγγισης της Χαμιλτονιανής και η προσέγγιση των χωρικών παραγώγων).

Αρχικά εξετάζεται η επίδραση των σχημάτων ολοκλήρωσης στο χρόνο στην ευστάθεια. Επειδή η λύση συνήθως δεν είναι λεία, η γραμμική ανάλυση ευστάθειας δεν είναι επαρκής και απαιτείται [Gottlieb et al. (2001)] ισχυρότερο μέτρο για την ευστάθεια. Οι Spiteri και Ruuth ορίζουν την ισχυρή ευστάθεια ως εξής [Spiteri & Ruuth (2002)]:

Μια ακολουθία $\{\mathbf{u}^n\}$ είναι ισχυρώς ευσταθής ως προς νόρμα $\|\cdot\|$ όταν $\forall n : \|\mathbf{u}^{n+1}\| \leq \|\mathbf{u}^n\|$.

Το διάνυσμα \mathbf{u}^n φέρει τις τιμές της λύσης u στο πλέγμα διακριτοποίησης του υπολογιστικού χωρίου το χρονικό βήμα n . Το σχήμα που γεννά μια ακολουθία με την παραπάνω ιδιότητα καλείται ισχυρώς ευσταθές ως προς την εξεταζόμενη νόρμα. Η επιλογή της νόρμας είναι αυθαίρετη, συνήθης επιλογή είναι η νόρμα ολικής μεταβολής [total variation norm, Gottlieb & Shu (1998)] και η άπειρη νόρμα. Στη χρησιμοποίηση της νόρμας ολικής μεταβολής οφείλεται η ορολογία σχήματα ελαχιστοποίησης ολικής μεταβολής (total variation diminishing schemes, TVD schemes) που είχε επικρατήσει [Gottlieb & Shu (1998)] για να περιγράψει τα σχήματα διατήρησης ισχυρής ευστάθειας.

Αυστηρή ευστάθεια σημαίνει ότι δεν υπάρχει αύξηση της νόρμας με το χρόνο, σε αντιδιαστολή [Gottlieb et al. (2001)] με τον όρο ευστάθεια που επιτρέπει φραγμένη αύξηση της νόρμας $\|\mathbf{u}^n\| \leq a\|\mathbf{u}^0\|$, όπου a αυθαίρετη θετική σταθερά που μπορεί να ξεπερνά και τη μονάδα.

Τα σχήματα RK υψηλότερης τάξης (≥ 2) που χρησιμοποιούνται για την ολοκλήρωση στο χρόνο (§6.2.1) είναι σχήματα διατήρησης ισχυρής ευστάθειας (strong stability preserving Runge-Kutta schemes, SSPRK schemes). Αναπτύχθηκαν για την επίλυση συστημάτων συνήθων διαφορικών εξισώσεων της μορφής

$$u_t = L(u), \quad (6.66)$$

όπου L διαφορικός τελεστής στο χώρο.

Η ιδέα για την ανάπτυξη σχημάτων διατήρησης ισχυρής ευστάθειας βασίζεται στην υπόθεση ότι το σχήμα διακριτοποίησης του L σε συνδυασμό με το σχήμα Euler με κατάντη διαφορές,

$$u^{n+1} = u^n + \Delta t L(u^n), \quad (6.67)$$

είναι ισχυρώς ευσταθές ως προς κάποια νόρμα,

$$\forall n : \|\mathbf{u}^{n+1}\| \leq \|\mathbf{u}^n\|,$$

όταν το μέτρο διακριτοποίησης Δt φράσσεται κατάλληλα σύμφωνα με τη συνθήκη Courant-Friedrichs-Lewy (CFL),

$$\Delta t \leq \Delta t_{\text{CFL}}. \quad (6.68)$$

Με βάση την παραπάνω υπόθεση, αναζητούνται σχήματα υψηλής τάξης (Runge-Kutta ή πολυβηματικά) που διατηρούν την ισχυρή ευστάθεια ως προς την ίδια νόρμα, πιθανώς με τροποποιημένους περιορισμούς στο μέτρο διακριτοποίησης.

Η γενική μορφή ενός άμεσου Runge-Kutta σχήματος³¹ για την επίλυση της Εξ. (6.66) είναι

$$u^{(0)} = u^n, \quad (6.69)$$

$$u^{(i)} = \sum_{k=0}^{i-1} \left[a_{i,k} u^{(k)} + \Delta t \beta_{i,k} L(u^{(k)}) \right], \quad (6.70)$$

$$a_{i,k} \geq 0, \text{ και συμβατικά } \sum_{k=0}^{i-1} a_{i,k} = 1, \quad i=1, \dots, m.$$

$$u^{n+1} = u^{(m)}. \quad (6.71)$$

Αποδεικνύεται [Gottlieb et al. (2001)] η επόμενη πρόταση: Αν το σχήμα Euler με κατάντη διαφορές [Εξ. (6.67)] είναι ισχυρά ευσταθές υπό τη συνθήκη CFL [Εξ. (6.68)], δηλαδή $\|u^n + \Delta t L(u^n)\| \leq \|u^n\|$, τότε το σχήμα Runge-Kutta των Εξ. (6.69) – (6.71) όταν $\beta_{i,k} \geq 0$, είναι σχήμα διατήρησης ισχυρής ευστάθειας, δηλαδή $\|u^{n+1}\| \leq \|u^n\|$, όταν ισχύει

$$\Delta t \leq c \Delta t_{\text{CFL}}, \quad (6.72)$$

όπου c ο συντελεστής CFL για το σχήμα Runge-Kutta και

$$c = \min_{i,k} \frac{a_{i,k}}{\beta_{i,k}}. \quad (6.73)$$

Οι Gottlieb και Shu απέδειξαν ότι τα σχήματα 2^{ns} (2 βημάτων) και 3^{ns} τάξης (3 βημάτων) της §6.2.1 (όπου $\beta_{i,k} \geq 0$) είναι τα βέλτιστα, υπό την έννοια ότι για αυτά είναι $c=1$ [Gottlieb & Shu (1998)]. Βέλτιστο SSPRK σχήμα 4^{ns} τάξης (με 4 βήματα) δεν είναι γνωστό και απαιτεί την ύπαρξη ενός αρνητικού $\beta_{i,k}$. Οι Spiteri και Ruuth επιχειρούν την κατασκευή σχημάτων SSPRK υψηλής τάξης με πλήθος βημάτων μεγαλύτερο από την τάξη [Spiteri & Ruuth (2002)].

Απαραίτητη προϋπόθεση για την ισχυρή ευστάθεια των σχημάτων SSPRK είναι το σχήμα Euler με κατάντη διαφορές σε συνδυασμό με τη διακριτοποίηση στο χώρο να είναι ισχυρώς ευσταθές. Αν δεν είναι, τότε δεν μπορεί να αποδειχθεί ότι τα προτεινόμενα υψηλότερης τάξης σχήματα ολοκλήρωσης στο χρόνο είναι ευσταθή, χωρίς να αποκλείεται να είναι. Έτσι, το θέμα της ευστάθειας ανάγεται στην αναζήτηση των συνθηκών ισχυρής ευστάθειας για τα αριθμητικά σχήματα επίλυσης της Εξ. (6.1) που χρησιμοποιούν σχήμα Euler με κατάντη διαφορές για την ολοκλήρωση στο χρόνο. Η συνθήκη ισχυρής ευστάθειας που ισχύει για τα 2

³¹ Η γενική μορφή σχήματος Runge-Kutta που περιγράφεται από τις Εξ. (6.69) – (6.71) είναι ισοδύναμη με αυτή που περιγράφεται στο Παράρτημα Δ.

σχήματα SSPRK υψηλής τάξης της §6.2.1 με συγκεκριμένη διακριτοποίηση στο χώρο είναι η ίδια με αυτή που ισχύει για το σχήμα Euler για την ίδια διακριτοποίηση στο χώρο.

Συμπερασματικά, τα υψηλής τάξης προτεινόμενα σχήματα ολοκλήρωσης στο χρόνο (SSPRK2 και SSPRK3) δεν επιδρούν στη συνθήκη ευστάθειας. Εμφανίζουν την ίδια συνθήκη ισχυρής ευστάθειας με το σχήμα Euler. Η συνθήκη ισχυρής ευστάθειας (ουσιαστικά το Δt_{CFL}) για την ολοκλήρωση στο χρόνο με το σχήμα Euler εξαρτάται από το σχήμα διακριτοποίησης στο χώρο (σχήμα προσέγγισης Χαμιλτονιανής και χωρικών παραγώγων).

Στοιχεία για τη συνθήκη ισχυρής ευστάθειας, όταν το σχήμα Euler με κατάντη διαφορές χρησιμοποιείται για την ολοκλήρωση στο χρόνο, δεν βρέθηκαν στη βιβλιογραφία. Οι Osher και Fedkiw αναφέρουν ότι η συνθήκη CFL, όταν το σχήμα Euler με κατάντη διαφορές χρησιμοποιείται, είναι [Osher & Fedkiw (2003), σ. 49-50]

$$\Delta t \max \left(\frac{|H_1|}{\Delta x} + \frac{|H_2|}{\Delta y} \right) < 1, \quad (6.74)$$

όπου τα H_1 και H_2 δίδονται από τις Εξ. (6.21) – (6.22). Δεν αναφέρεται όμως, αν η συνθήκη (6.74) είναι συνθήκη ισχυρής ευστάθειας. Επίσης, η συνθήκη (6.74) παρουσιάζεται ανεξάρτητη από το σχήμα προσέγγισης των χωρικών παραγώγων ή τη συνάρτηση προσέγγισης της Χαμιλτονιανής. Στη συνέχεια θεωρείται, και δεν έχει προκύψει απόδειξη περί του αντιθέτου, ότι η συνθήκη (6.74) εξασφαλίζει την ευστάθεια για κάθε αριθμητικό σχήμα επίλυσης της Εξ. (6.1).

6.4 Κυρτή και μη Χαμιλτονιανή

Το σχήμα που προτείνει ο Sethian για την προσέγγιση της Χαμιλτονιανής της Εξ. (6.1) εξαρτάται από το αν η Χαμιλτονιανή είναι κυρτή (convex) ή μη κυρτή (non-convex): Αν η Χαμιλτονιανή είναι κυρτή (convex), τότε ο Sethian προτείνει το σχήμα Osher – Sethian (H^{OS}), αν η Χαμιλτονιανή δεν είναι κυρτή (non-convex), προτείνει το σχήμα Lax – Friedrichs (H^{LF}) [Sethian (1999), σ. 65-69].

Η κυρτότητα στην οποία αναφέρεται ο Sethian αφορά τις πρώτες μερικές παραγώγους της συνάρτησης u . Η Χαμιλτονιανή της Εξ. (6.1) θεωρείται κυρτή ως προς τις πρώτες μερικές παραγώγους της συνάρτησης u , όταν [Osborne (2003)] η Εσσιανή (Hessian) ως προς τις πρώτες μερικές παραγώγους είναι θετικώς ημι-ορισμένη (positive semidefinite). Στη συνέχεια παρατίθενται παραδείγματα κυρτής (A) και μη κυρτής (B) Χαμιλτονιανής.

A) Έστω ότι η ταχύτητα F δεν εξαρτάται από τις μερικές παραγώγους της u . Τότε η Χαμιλτονιανή της Εξ. (6.1) είναι

$$H = F(x,y,t)|\nabla\phi|. \quad (6.75)$$

Η Εσσιανή είναι

$$\begin{bmatrix} \frac{\partial^2 H}{\partial u_x^2} & \frac{\partial^2 H}{\partial u_x \partial u_y} \\ \frac{\partial^2 H}{\partial u_y \partial u_x} & \frac{\partial^2 H}{\partial u_y^2} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{Fu_y^2}{|\nabla u|^3} & -\frac{Fu_y u_x}{|\nabla u|^3} \\ -\frac{Fu_y u_x}{|\nabla u|^3} & \frac{Fu_x^2}{|\nabla u|^3} \end{bmatrix}. \quad (6.76)$$

Για τυχαίο διάνυσμα $\mathbf{x} = \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix}$ είναι

$$\mathbf{x}^T \cdot \begin{bmatrix} \frac{Fu_y^2}{|\nabla u|^3} & -\frac{Fu_y u_x}{|\nabla u|^3} \\ -\frac{Fu_y u_x}{|\nabla u|^3} & \frac{Fu_x^2}{|\nabla u|^3} \end{bmatrix} \cdot \mathbf{x} = \frac{F(x_1 u_y - x_2 u_x)^2}{|\nabla u|^3} \geq 0, \forall x_1, x_2 \in R. \quad (6.77)$$

Η Εσσιανή της Χαμιλτονιανής είναι θετικώς ημι-ορισμένη, συνεπώς η Χαμιλτονιανή είναι κυρτή.

Β) Έστω ότι η ταχύτητα F εξαρτάται από τις μερικές παραγώγους της u ως εξής:

$$F = (1 + A) \frac{u_y}{|\nabla u|} - A \left(\frac{u_y}{|\nabla u|} \right)^3. \quad (6.78)$$

Η Εξ. (6.78) περιγράφει ταχύτητα ιονοβολής επιφάνειας (§1.3.2.3), κατά την οποία ιόντα προσπίπτουν στην εγχαρασόμενη επιφάνεια και απομακρύνουν με μηχανικό τρόπο τμήματά της. Σε κάποιες περιπτώσεις, η απόδοση και άρα η ταχύτητα της ιονοβολής εγχάραξης εξαρτάται από τη γωνία πρόσπτωσης των ιόντων στην επιφάνεια. Αν θ είναι η γωνία που σχηματίζει η διεύθυνση των ιόντων με το κάθετο διάνυσμα στην επιφάνεια και τα ιόντα έχουν διεύθυνση αυτή του άξονα y , τότε $\cos\theta = u_y / |\nabla u|$.

Αν η F δίδεται από την Εξ. (6.78), τότε η Χαμιλτονιανή της Εξ. (6.1) είναι

$$H = (1 + A)u_y - A \frac{u_y^3}{|\nabla u|^2}. \quad (6.79)$$

Για τυχαίο διάνυσμα $\mathbf{x} = \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix}$ είναι

$$\mathbf{x}^T \cdot [\text{Hessian}] \cdot \mathbf{x} = \frac{2Au_y(u_y^2 - 3u_x^2)(x_1u_y - x_2u_x)^2}{|\nabla u|^6}. \quad (6.80)$$

Το πρόσημο του παραπάνω γινομένου εξαρτάται από τις μερικές παραγώγους και την παράμετρο A , επομένως μόνο υπό συνθήκες είναι μη αρνητικό. Συνεπώς, δεν μπορεί να εξαχθεί το συμπέρασμα ότι η Εσσιανή είναι θετικώς ημι-ορισμένη. Επομένως, σε αυτή την περίπτωση δεν μπορεί να χαρακτηριστεί η Χαμιλτονιανή ως κυρτή.

6.5 Συνοριακές συνθήκες

Η εξίσωση ισοϋψών ορίζεται γενικά στον R^n . Ωστόσο, για την επίλυσή της είναι αναγκαίο να οριστεί υπολογιστικό χωρίο. Τα όρια του υπολογιστικού χωρίου σε τέτοιου είδους περιπτώσεις [όταν το πεδίο ορισμού είναι ο (άπειρος) R^n] είναι τεχνητά (artificial). Δεν ταυτίζονται με φυσικά όρια που θα υπαγόρευαν αντίστοιχες συνοριακές συνθήκες. Το υπολογιστικό χωρίο περιορίζει το φυσικό πρόβλημα σε τεχνητά όρια ώστε να είναι δυνατό να λυθεί. Οι συνοριακές συνθήκες που επιβάλλονται σε τέτοιου είδους υπολογιστικά χωρία καλούνται τεχνητές (artificial boundary conditions). Η επιλογή των τεχνητών συνοριακών συνθηκών παίζει σημαντικό ρόλο στην ποιότητα και αξιολόγηση των αποτελεσμάτων και αποτελεί πεδίο έρευνας [Tsypkon (1998)].

Η επιλογή του υπολογιστικού χωρίου και των αντίστοιχων τεχνητών συνοριακών συνθηκών σε φυσικά προβλήματα σε άπειρο χωρίο (π.χ. στον R^n) δεν είναι μοναδική [ο.π.]. Η επίδραση των τεχνητών συνοριακών συνθηκών στη λύση γενικά εξαρτάται από το είδος του φυσικού προβλήματος (υπερβολικό, παραβολικό, ελλειπτικό), την κατεύθυνση διάδοσης πληροφορίας, και από το αριθμητικό σχήμα επίλυσης που χρησιμοποιείται. Αν για παράδειγμα, ένα αριθμητικό σχήμα είναι κατά την κατεύθυνση διάδοσης πληροφορίας (upwind scheme), και η κατεύθυνση διάδοσης πληροφορίας είναι προς το εξωτερικό του υπολογιστικού χωρίου, τότε οι τεχνητές συνοριακές συνθήκες (π.χ. συνθήκες Neumann με μηδενική τιμή παραγώγου) δεν αναμένεται να έχουν εκτεταμένη επίδραση στη λύση στο εσωτερικό του υπολογιστικού χωρίου.

Στο «γενικό» πρόβλημα εξέλιξης συνόρου ενδιαφέρει η αριθμητική λύση στη γειτονιά της ισοϋψούς μηδέν και όχι σε ολόκληρο το υπολογιστικό χωρίο. Αυτό καθιστά την επιλογή των τεχνητών συνοριακών συνθηκών λιγότερο σημαντική από ότι στην περίπτωση όπου η λύση σε όλο το χωρίο ήταν κρίσιμη. Αυτό δε σημαίνει ότι δεν χρειάζεται προσοχή στην επιλογή συνοριακών συνθηκών, διότι είναι πιθανό η επίδραση τους να φτάσει και στη γειτονιά της ισοϋψούς μηδέν.

Οι Peng et al. [Peng et al. (1999)], ο Sethian [Sethian (1999), σ. 72] και οι Jiang και Peng [Jiang & Peng (2000)] επιβάλλουν συνοριακές συνθήκες Neumann με μηδενική τιμή για την επίλυση της εξίσωσης ισοϋψών. Στην παρούσα εργασία υιοθετείται η ίδια προσέγγιση. Ωστόσο, η επιλογή κατάλληλων συνοριακών συνθηκών και η επίδρασή τους στην αριθμητική λύση στο εσωτερικό του υπολογιστικού χωρίου χρίζει περαιτέρω μελέτης.

6.6 Παρατηρήσεις – Αξιολόγηση αριθμητικών σχημάτων

Ο συνδυασμός των χαρακτηριστικών των αριθμητικών σχημάτων επίλυσης της εξίσωσης ισοϋψών που περιγράφηκαν στην §6.2 οδηγεί σε 3 (σχήματα ολοκλήρωσης στο χρόνο) \times 2 (σχήματα προσέγγισης της Χαμιλτονιανής) \times 6 (σχήματα προσέγγισης των χωρικών παραγώγων) = 36 πιθανά σχήματα. Τα σχήματα περιγράφηκαν σε δύο διαστάσεις, η περιγραφή τους σε τρεις διαστάσεις είναι ακριβώς αντίστοιχη.

Τα σχήματα που χρησιμοποιούνται στα παραδείγματα και στις συγκρίσεις που ακολουθούν συμβολίζονται με βάση τα συστατικά τους (σχήμα ολοκλήρωσης στο χρόνο, προσέγγισης Χαμιλτονιανής, προσέγγισης χωρικών παραγώγων). Έτσι, ένα αριθμητικό σχήμα που χρησιμοποιεί σχήμα SSPRK3 για τη χρονική ολοκλήρωση, OS για την προσέγγιση της Χαμιλτονιανής και WENO 5^{ης} τάξης για την προσέγγιση των χωρικών παραγώγων συμβολίζεται με SSPRK3/OS/WENO5.

Στη συνέχεια εξετάζεται η συμπεριφορά των σχημάτων της §6.2 σε τρία προβλήματα εξέλιξης συνόρου. Η επιλογή των προβλημάτων γίνεται με στόχο να αναδειχθούν στην πράξη τα χαρακτηριστικά των αριθμητικών σχημάτων, όπως η σχετική επίδραση των συστατικών σχημάτων στην ακρίβεια των υπολογισμών και η συμπεριφορά των σχημάτων σε περιπτώσεις ασυνέχειας της παραγώγου.

Στα προβλήματα εξέλιξης συνόρου με τη μέθοδο των ισοϋψών, αυτό που ενδιαφέρει δεν είναι η συνάρτηση ισοϋψών, παρά μόνο η ισοϋψής μηδέν αυτής, δηλαδή η θέση του συνόρου μετά από χρόνο t . Για αυτό το λόγο η ακρίβεια κάθε σχήματος αξιολογείται με βάση τη θέση του συνόρου τη χρονική στιγμή t . Συγκρίνεται η αριθμητική λύση με την πραγματική, η οποία για τα προβλήματα που εξετάζονται είναι γνωστή.

Γενικά, η ακρίβεια της θέσης του συνόρου μετά από χρόνο t , επηρεάζεται:

A) Από την ακρίβεια της αρχικής συνάρτησης ισοϋψών [$q(\mathbf{x})$ στην Εξ. (6.1)]. Η συνάρτηση ισοϋψών τη χρονική στιγμή $t=0$ είναι η προσημασμένη απόσταση και ο αριθμητικός υπολογισμός της (Κεφ. 7) θα εισάγει σφάλματα στον υπολογισμό της θέσης του συνόρου.

B) Από την ακρίβεια της μεθόδου προεκβολής της ταχύτητας F μακριά από το σύνορο (Κεφ. 9).

Γ) Από την ακρίβεια επίλυσης της εξίσωσης ισοϋψών με τα σχήματα της §6.2.

Δ) Από την ακρίβεια με την οποία υπολογίζεται η ισοϋψής μηδέν όταν είναι γνωστή η συνάρτηση ισοϋψών (Κεφ. 8).

Στη συνέχεια μελετάται η ακρίβεια επίλυσης της εξίσωσης ισοϋψών με τα σχήματα της §6.2. Για την αποφυγή επίδρασης των παραγόντων (Α), (Β) και (Δ): α) Η αρχική συνάρτηση ισοϋψών για τα προβλήματα που εξετάζονται είναι η πραγματική προσημασμένη απόσταση, δηλαδή δεν υπολογίζεται αριθμητικά. β) Η ταχύτητα F σε όλα τα προβλήματα είναι γνωστή σε όλο το υπολογιστικό χωρίο, δεν απαιτείται προεκβολή τιμών από το σύνορο σε όλο το υπολογιστικό χωρίο. γ) Η ακρίβεια εύρεσης της ισοϋψούς είναι τέτοια που δεν αλλοιώνει αυτή της αριθμητικής λύσης της εξίσωσης ισοϋψών (Κεφ. 8).

Η μελέτη ακρίβειας αφορά στον υπολογισμό του σφάλματος της λύσης και της παρατηρούμενης τάξης ακρίβειας του αντίστοιχου σχήματος (συγκρίνοντάς την με τη θεωρητική τάξη ακρίβειας). Η προϋπόθεση για ασφαλή συμπεράσματα αξιολόγησης των σχημάτων επίλυσης της εξίσωσης ισοϋψών, είναι η επαλήθευση τόσο του κώδικα επίλυσης της εξίσωσης ισοϋψών, όσο και του κώδικα εύρεσης ισοϋψούς. Η επαλήθευση των κωδίκων γίνεται στην §Α.5.1 και στο Παράρτημα Δ αντίστοιχα. Οι νόρμες σφάλματος που χρησιμοποιούνται ορίζονται στο Παράρτημα Γ.

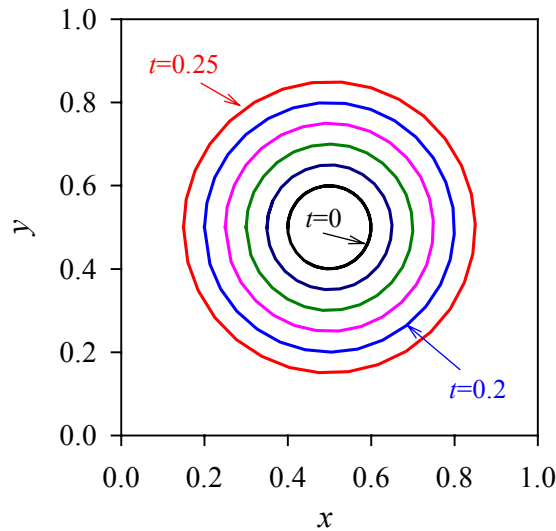
6.6.1 Πρόβλημα 6.Α: Ισοτροπική διαστολή κύκλου

Επιλύεται με τη μέθοδο των ισοϋψών το πρόβλημα διαστολής κύκλου, κέντρου $(x_0, y_0) = (0.5, 0.5)$ και αρχικής ακτίνας $r_0 = 0.1$, με ταχύτητα κάθετη σε αυτόν και ίση με 1. Για το σκοπό αυτό, επιλύεται η Εξ. (6.1) στο υπολογιστικό χωρίο $\Omega = [0, 1] \times [0, 1]$, με $F = 1$ και $u(x, y, t = 0) = q(x, y)$,⁹¹ οπότε και προκύπτει η συνάρτηση ισοϋψών σε κάθε χρονική στιγμή. Η θέση του κύκλου σε κάθε χρονική στιγμή προκύπτει από την ισοϋψή μηδέν της συνάρτησης ισοϋψών. Η ισοϋψής μηδέν σε κάθε χρονική στιγμή υπολογίζεται με τον αλγόριθμο εύρεσης ισοϋψούς που περιγράφεται στο Κεφ. 8. Το χαρακτηριστικό αυτού του προβλήματος είναι ότι η λύση, δηλαδή το σύνορο, η ισοϋψής μηδέν, είναι λεία, δεν εμφανίζει ασυνέχειες στην κλίση. Η πραγματική λύση του προβλήματος είναι

$$\mathbf{R}_{real}(s, t) = [x(s, t), y(s, t)] = \left[x_0 + (r_0 + Ft) \cos \left(\pi - \frac{s}{r_0 + Ft} \right), y_0 + (r_0 + Ft) \sin \left(\pi - \frac{s}{r_0 + Ft} \right) \right], \quad (6.81)$$

⁹¹ Η $q(x, y) = \sqrt{(x - x_0)^2 + (y - y_0)^2} - r_0$ είναι η προσημασμένη απόσταση από κύκλο ακτίνας r_0 και κέντρου (x_0, y_0) .

όπου $0 \leq s \leq 2\pi(r_0 + Ft)$. s είναι το μήκος τόξου του συνόρου. Υπενθυμίζεται ότι στο παράδειγμα αυτό $F=1$. Στιγμιότυπα της λύσης σε διάφορες χρονικές στιγμές φαίνονται στο Σχήμα 6.1.



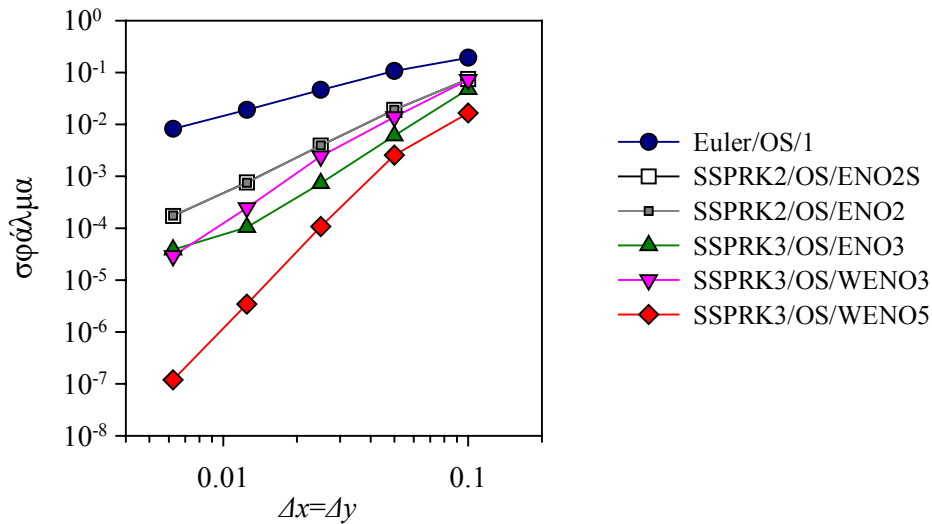
Σχήμα 6.1 Εξέλιξη συνόρου για το πρόβλημα 6.A. Στιγμιότυπα του συνόρου (ισοϋψούς μηδέν) σε διάφορες χρονικές στιγμές που απέχουν 0.05.

Αρχικά εξετάζεται η ακρίβεια των διαθέσιμων σχημάτων ως προς $\Delta x = \Delta y$. Στον Πίνακα 6.I φαίνονται το σφάλμα και η παρατηρούμενη τάξη ακρίβειας (§B.4) καθώς μειώνεται το $\Delta x = \Delta y$ για το πρόβλημα 6.A, χρησιμοποιώντας όλα τα διαθέσιμα σχήματα. Η ολοκλήρωση γίνεται μέχρι $t=0.25$, ενώ $\Delta t=0.0001$. Στο Σχήμα 6.2 φαίνονται ενδεικτικά αποτελέσματα από τον Πίνακα 6.I.

Πίνακας 6.I Σφάλμα στην υπολογιζόμενη ισοϋψή μηδέν ($\|\mathbf{R} - \mathbf{R}_{\text{real}}\|_F / \|\mathbf{R}_{\text{real}}\|_F$) και παρατηρούμενη τάξη ακρίβειας, καθώς το $\Delta x = \Delta y$ μειώνεται για το πρόβλημα 6.A. Εξετάζονται όλα τα διαθέσιμα σχήματα ($t=0.25$, $\Delta t=0.0001$).

Σχήμα→	Euler/ OS/1		Euler/ LLLF/1		Euler/ OS/ENO2		Euler/ LLLF/ENO2	
	Σφάλμα	Τάξη	Σφάλμα	Τάξη	Σφάλμα	Τάξη	Σφάλμα	Τάξη
$\Delta x = \Delta y$								
0.1	1.92E-01		5.01E-01		7.39E-02		1.16E-01	
0.05	1.07E-01	0.85	1.92E-01	1.38	1.96E-02	1.92	2.62E-02	2.14
0.025	4.61E-02	1.21	6.71E-02	1.52	3.82E-03	2.36	4.35E-03	2.59
0.0125	1.90E-02	1.28	2.33E-02	1.53	7.48E-04	2.35	7.67E-04	2.50
0.00625	8.19E-03	1.21	8.85E-03	1.40	1.76E-04	2.08	1.88E-04	2.03
	Euler/ OS/ENO2S		Euler/ LLLF/ENO2S		Euler/ OS/ENO3		Euler/ LLLF/ENO3	
$\Delta x = \Delta y$								
0.1	7.40E-02		1.16E-01		4.34E-02		8.43E-02	
0.05	1.85E-02	2.00	2.62E-02	2.15	5.80E-03	2.90	7.94E-03	3.41
0.025	3.78E-03	2.29	4.39E-03	2.58	7.78E-04	2.90	7.35E-04	3.43
0.0125	7.62E-04	2.31	7.62E-04	2.53	1.23E-04	2.67	1.12E-04	2.71
0.00625	1.88E-04	2.02	1.90E-04	2.00	2.60E-05	2.24	2.71E-05	2.05

	Euler/ OS/WENO3		Euler/ LLLF/WENO3		Euler/ OS/WENO5		Euler/ LLLF/WENO5	
$\Delta x = \Delta y$	Σφάλμα	Τάξη	Σφάλμα	Τάξη	Σφάλμα	Τάξη	Σφάλμα	Τάξη
0.1	7.49E-02		1.09E-01		1.65E-02		3.33E-02	
0.05	1.36E-02	2.46	1.85E-02	2.55	2.73E-03	2.59	1.52E-03	4.46
0.025	2.47E-03	2.46	2.83E-03	2.71	1.00E-04	4.77	1.25E-04	3.61
0.0125	2.37E-04	3.38	2.53E-04	3.49	3.32E-06	4.92	3.31E-06	5.24
0.00625	2.91E-05	3.02	2.91E-05	3.12	1.16E-07	4.84	1.15E-07	4.85
	SSPRK2/ OS/1		SSPRK2/ LLLF/1		SSPRK2/ OS/ENO2		SSPRK2/ LLLF/ENO2	
$\Delta x = \Delta y$	Σφάλμα	Τάξη	Σφάλμα	Τάξη	Σφάλμα	Τάξη	Σφάλμα	Τάξη
0.1	1.96E-01		5.02E-01		7.51E-02		1.16E-01	
0.05	1.06E-01	0.89	1.95E-01	1.37	1.92E-02	1.97	2.58E-02	2.17
0.025	4.67E-02	1.18	6.87E-02	1.50	3.96E-03	2.28	4.48E-03	2.52
0.0125	1.92E-02	1.28	2.34E-02	1.55	7.51E-04	2.40	7.65E-04	2.55
0.00625	8.32E-03	1.21	8.74E-03	1.42	1.75E-04	2.10	1.88E-04	2.03
	SSPRK2/ OS/ENO2S		SSPRK2/ LLLF/ENO2S		SSPRK2/ OS/ENO3		SSPRK2/ LLLF/ENO3	
$\Delta x = \Delta y$	Σφάλμα	Τάξη	Σφάλμα	Τάξη	Σφάλμα	Τάξη	Σφάλμα	Τάξη
0.1	7.49E-02		1.15E-01		5.72E-02		8.49E-02	
0.05	1.90E-02	1.98	2.66E-02	2.11	5.65E-03	3.34	8.34E-03	3.35
0.025	3.92E-03	2.27	4.42E-03	2.59	7.08E-04	3.00	7.87E-04	3.41
0.0125	7.62E-04	2.36	7.87E-04	2.49	1.00E-04	2.82	1.13E-04	2.80
0.00625	1.73E-04	2.14	1.83E-04	2.11	1.54E-05	2.70	4.16E-05	1.44
	SSPRK2/ OS/WENO3		SSPRK2/ LLLF/WENO3		SSPRK2/ OS/WENO5		SSPRK2/ LLLF/WENO5	
$\Delta x = \Delta y$	Σφάλμα	Τάξη	Σφάλμα	Τάξη	Σφάλμα	Τάξη	Σφάλμα	Τάξη
0.1	7.33E-02		1.05E-01		1.66E-02		3.35E-02	
0.05	1.47E-02	2.31	1.86E-02	2.49	2.69E-03	2.62	1.46E-03	4.51
0.025	2.39E-03	2.62	2.86E-03	2.70	1.08E-04	4.65	1.21E-04	3.59
0.0125	2.53E-04	3.24	2.53E-04	3.50	3.44E-06	4.96	3.55E-06	5.10
0.00625	2.91E-05	3.12	2.92E-05	3.11	1.19E-07	4.86	1.19E-07	4.90
	SSPRK3/ OS/1		SSPRK3/ LLLF/1		SSPRK3/ OS/ENO2		SSPRK3/ LLLF/ENO2	
$\Delta x = \Delta y$	Σφάλμα	Τάξη	Σφάλμα	Τάξη	Σφάλμα	Τάξη	Σφάλμα	Τάξη
0.1	1.96E-01		4.99E-01		7.53E-02		1.15E-01	
0.05	1.06E-01	0.89	1.93E-01	1.37	1.93E-02	1.97	2.60E-02	2.15
0.025	4.65E-02	1.19	6.89E-02	1.48	3.81E-03	2.34	4.40E-03	2.56
0.0125	1.92E-02	1.28	2.34E-02	1.56	7.40E-04	2.36	7.63E-04	2.53
0.00625	8.12E-03	1.24	8.66E-03	1.43	1.81E-04	2.03	1.83E-04	2.06
	SSPRK3/ OS/ENO2S		SSPRK3/ LLLF/ENO2S		SSPRK3/ OS/ENO3		SSPRK3/ LLLF/ENO3	
$\Delta x = \Delta y$	Σφάλμα	Τάξη	Σφάλμα	Τάξη	Σφάλμα	Τάξη	Σφάλμα	Τάξη
0.1	7.43E-02		1.16E-01		4.79E-02		7.46E-02	
0.05	1.98E-02	1.91	2.58E-02	2.16	6.11E-03	2.97	7.99E-03	3.22
0.025	3.86E-03	2.36	4.43E-03	2.54	7.33E-04	3.06	8.51E-04	3.23
0.0125	7.64E-04	2.34	7.73E-04	2.52	1.04E-04	2.81	1.11E-04	2.93
0.00625	1.78E-04	2.10	1.83E-04	2.08	3.86E-05	1.44	2.39E-05	2.22
	SSPRK3/ OS/WENO3		SSPRK3/ LLLF/WENO3		SSPRK3/ OS/WENO5		SSPRK3/ LLLF/WENO5	
$\Delta x = \Delta y$	Σφάλμα	Τάξη	Σφάλμα	Τάξη	Σφάλμα	Τάξη	Σφάλμα	Τάξη
0.1	7.24E-02		1.04E-01		1.66E-02		3.29E-02	
0.05	1.39E-02	2.38	1.90E-02	2.46	2.55E-03	2.71	1.37E-03	4.59
0.025	2.43E-03	2.52	2.78E-03	2.77	1.08E-04	4.56	1.31E-04	3.38
0.0125	2.47E-04	3.30	2.52E-04	3.46	3.44E-06	4.97	3.55E-06	5.21
0.00625	2.91E-05	3.08	2.92E-05	3.11	1.19E-07	4.86	1.19E-07	4.90



Σχήμα 6.2 Σφάλμα στην υπολογιζόμενη ισουψή μηδέν ($\|\mathbf{R}-\mathbf{R}_{\text{real}}\|_F/\|\mathbf{R}_{\text{real}}\|_F$) καθώς το $\Delta x=\Delta y$ μειώνεται για το πρόβλημα 6.A. Εξετάζονται τα σχήματα Euler/OS/1, SSPRK2/OS/ENO2S, SSPRK2/OS/ENO2, SSPRK2/OS/ENO3, SSPRK3/OS/WENO3, SSPRK3/OS/WENO5 ($t=0.25$, $\Delta t=0.0001$).

Από τον Πίνακα 6.1 προκύπτουν τα παρακάτω:

A) Το σχήμα προσέγγισης της Χαμιλτονιανής (OS, LLLF) δεν επηρεάζει το σφάλμα και την παρατηρούμενη τάξη ακρίβειας.

B) Η παρατηρούμενη τάξη ακρίβειας (§B.4) ως προς $\Delta x=\Delta y$ συμπίπτει με τη θεωρητική (§B.4) για όλα τα σχήματα.³¹ Αυτό σημαίνει ότι το σφάλμα στη λύση που οφείλεται στην ολοκλήρωση στο χρόνο είναι αρκετά μικρό όταν $\Delta t=0.0001$, δηλαδή το σφάλμα είναι

$$e = c_1 \Delta t^m + c_2 \Delta x^n \approx c_2 \Delta x^n$$

όπου m, n είναι η θεωρητική τάξη ακρίβειας ως προς Δt , Δx αντίστοιχα. Μια ακόμη ένδειξη για τη μικρή τιμή του όρου $c_1 \Delta t^m$ είναι ότι το σφάλμα δεν επηρεάζεται από το σχήμα ολοκλήρωσης στο χρόνο. Για παράδειγμα, η μεταβολή και η τιμή του σφάλματος για τα σχήματα Euler/OS/WENO5, SSPRK2/OS/WENO5 και SSPRK3/OS/WENO5 είναι ίδια, αν και το σχήμα ολοκλήρωσης στο χρόνο είναι 1^{ης}, 2^{ης} και 3^{ης} τάξης ακρίβειας αντίστοιχα.

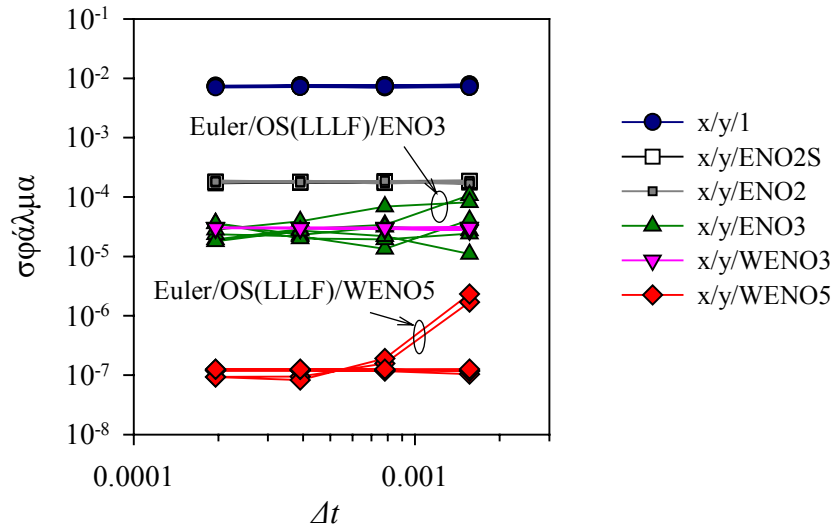
³¹ Για τα σχήματα που χρησιμοποιούν το σχήμα ENO3 για την προσέγγιση των χωρικών παραγώγων, η παρατηρούμενη τάξη ακρίβειας είναι μικρότερη από την πραγματική στην τελευταία διαίρεση των $\Delta x, \Delta y$. Αυτό μπορεί να οφείλεται είτε στο ότι ο όρος $c_1 \Delta t^m$ του σφάλματος δεν είναι αμελητέος για τα σχήματα που χρησιμοποιούν ENO3 υπό τις διαμερίσεις στο χώρο και στο χρόνο που εξετάζονται, είτε στο ότι το σφάλμα δεν έχει εισέλθει στην ασυμπτωτική περιοχή και χρειάζεται περαιτέρω μείωση του $\Delta x=\Delta y$ για να προσεγγίσει η παρατηρούμενη τη θεωρητική τάξη ακρίβειας. Τέλος, μπορεί να συμβαίνει και αυτό που αναφέρουν οι Shu [Shu (1990)], Jiang και Shu [Jiang & Shu (1996)] και Jiang και Peng [Jiang & Peng (2000)]: Ο εκφυλισμός της ακρίβειας των σχημάτων ENO που οφείλεται στην απότομη μεταβολή του σχήματος προσέγγισης των μερικών παραγώγων (abrupt stencil changes) από σημείο σε σημείο, ακόμη και σε περιοχές όπου η λύση είναι λεία. Ο Shu αναφέρει μάλιστα αναφέρει μείωση της τάξης ακρίβειας κατά 1 [Shu (1990)].

Στη συνέχεια εξετάζεται η ευαισθησία των σχημάτων στο βήμα ολοκλήρωσης ως προς χρόνο (Δt). Στον Πίνακα 6.Π και στο Σχήμα 6.3 φαίνονται το σφάλμα καθώς μειώνεται το Δt για το πρόβλημα 6.Α, χρησιμοποιώντας όλα τα διαθέσιμα σχήματα. Η ολοκλήρωση γίνεται μέχρι $t=0.25$, ενώ $\Delta x=\Delta y=0.00625$.

Πίνακας 6.Π Σφάλμα στην υπολογιζόμενη ισοϋψή μηδέν ($\|\mathbf{R}-\mathbf{R}_{\text{real}}\|_F/\|\mathbf{R}_{\text{real}}\|_F$), καθώς το Δt μειώνεται για το πρόβλημα 6.Α. Εξετάζονται όλα τα διαθέσιμα σχήματα ($t=0.25$, $\Delta x=\Delta y=0.00625$).

Δt	Euler/ OS/1	Euler/ LLLF/1	Euler/ OS/ENO2	Euler/ LLLF/ENO2
0.0015625	7.68E-03	7.21E-03	1.65E-04	1.73E-04
0.00078125	7.65E-03	7.04E-03	1.79E-04	1.81E-04
0.000390625	7.49E-03	7.22E-03	1.82E-04	1.74E-04
0.0001953125	7.51E-03	7.25E-03	1.90E-04	1.77E-04
Δt	Euler/ OS/ENO2S	Euler/ LLLF/ENO2S	Euler/ OS/ENO3	Euler/ LLLF/ENO3
0.0015625	1.80E-04	1.76E-04	1.07E-04	8.15E-05
0.00078125	1.73E-04	1.77E-04	3.40E-05	6.89E-05
0.000390625	1.82E-04	1.77E-04	2.87E-05	3.91E-05
0.0001953125	1.81E-04	1.70E-04	1.94E-05	2.83E-05
Δt	Euler/ OS/WENO3	Euler/ LLLF/WENO3	Euler/ OS/WENO5	Euler/ LLLF/WENO5
0.0015625	2.76E-05	2.77E-05	1.70E-06	2.34E-06
0.00078125	2.90E-05	2.90E-05	1.57E-07	1.92E-07
0.000390625	2.98E-05	2.96E-05	9.50E-08	8.23E-08
0.0001953125	2.98E-05	3.01E-05	9.40E-08	9.33E-08
Δt	SSPRK2/ OS/1	SSPRK2/ LLLF/1	SSPRK2/ OS/ENO2	SSPRK2/ LLLF/ENO2
0.0015625	7.85E-03	7.07E-03	1.89E-04	1.81E-04
0.00078125	7.64E-03	6.99E-03	1.83E-04	1.75E-04
0.000390625	7.61E-03	7.12E-03	1.81E-04	1.89E-04
0.0001953125	7.44E-03	7.35E-03	1.88E-04	1.74E-04
Δt	SSPRK2/ OS/ENO2S	SSPRK2/ LLLF/ENO2S	SSPRK2/ OS/ENO3	SSPRK2/ LLLF/ENO3
0.0015625	1.84E-04	1.88E-04	2.75E-05	2.43E-05
0.00078125	1.85E-04	1.85E-04	3.16E-05	1.93E-05
0.000390625	1.78E-04	1.78E-04	2.29E-05	2.00E-05
0.0001953125	1.75E-04	1.81E-04	3.61E-05	3.59E-05
Δt	SSPRK2/ OS/WENO3	SSPRK2/ LLLF/WENO3	SSPRK2/OS/ WENO5	SSPRK2/LLLF/ WENO5
0.0015625	3.05E-05	3.04E-05	1.04E-07	1.16E-07
0.00078125	2.99E-05	3.06E-05	1.17E-07	1.24E-07
0.000390625	3.06E-05	3.02E-05	1.19E-07	1.25E-07
0.0001953125	3.06E-05	3.00E-05	1.20E-07	1.26E-07
Δt	SSPRK3/ OS/1	SSPRK3/ LLLF/1	SSPRK3/ OS/ENO2	SSPRK3/ LLLF/ENO2
0.0015625	7.80E-03	7.18E-03	1.82E-04	1.69E-04
0.00078125	7.50E-03	7.26E-03	1.68E-04	1.87E-04
0.000390625	7.55E-03	7.14E-03	1.83E-04	1.79E-04
0.0001953125	7.23E-03	6.99E-03	1.81E-04	1.82E-04
Δt	SSPRK3/ OS/ENO2S	SSPRK3/ LLLF/ENO2S	SSPRK3/ OS/ENO3	SSPRK3/ LLLF/ENO3
0.0015625	1.84E-04	1.86E-04	4.10E-05	1.10E-05
0.00078125	1.79E-04	1.78E-04	1.34E-05	2.20E-05
0.000390625	1.74E-04	1.79E-04	2.18E-05	2.72E-05
0.0001953125	1.81E-04	1.81E-04	2.36E-05	1.79E-05

Δt	SSPRK3/ OS/WENO3	SSPRK3/ LLLF/WENO3	SSPRK3/ OS/WENO5	SSPRK3/ LLLF/WENO5
0.0015625	3.06E-05	3.04E-05	1.20E-07	1.27E-07
0.00078125	3.05E-05	3.01E-05	1.20E-07	1.26E-07
0.000390625	3.05E-05	3.00E-05	1.20E-07	1.26E-07
0.0001953125	3.05E-05	2.99E-05	1.20E-07	1.26E-07



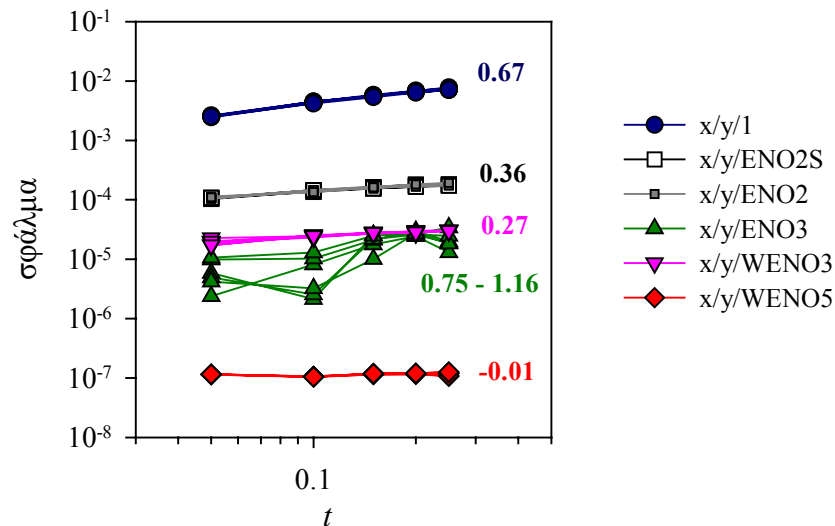
Σχήμα 6.3 Σφάλματος στην υπολογιζόμενη ισοϋνή μηδέν ($\|\mathbf{R}-\mathbf{R}_{\text{real}}\|_{\text{F}}/\|\mathbf{R}_{\text{real}}\|_{\text{F}}$) καθώς το Δt μειώνεται για το πρόβλημα 6.A. Εξετάζονται όλα τα διαθέσιμα σχήματα. Είναι x =Euler ή SSPRK2 ή SSPRK3 και y =OS ή LLLF ($t=0.25$, $\Delta x=\Delta y=0.00625$).

Από τον Πίνακα 6.II προκύπτει ότι το σφάλμα είναι σταθερό παρά τη μείωση του Δt , για όλα σχεδόν τα σχήματα. Αυτό αποτελεί μια ένδειξη για το ότι το σφάλμα που οφείλεται στη χρονική ολοκλήρωση ($c_1\Delta t^m$) είναι μικρό σε σχέση με αυτό που οφείλεται στη χωρική διαμέριση ($c_2\Delta t^n$). Στον Πίνακα 6.II και στο Σχήμα 6.3, οι διαφοροποιήσεις στην τιμή του σφάλματος οφείλονται στο σχήμα προσέγγισης των χωρικών παραγώγων και όχι στο σχήμα ολοκλήρωσης στο χρόνο ή στο σχήμα προσέγγισης της Χαμιλτονιανής.

Για τα Euler/OS/ENO3, Euler/LLLF/ENO3 η μικρή μείωση του σφάλματος με τη μείωση του Δt μπορεί να οφείλεται στο ότι ο όρος $c_1\Delta t^m$ του σφάλματος δεν είναι αμελητέος (υπάρχει ένδειξη για αυτό και από τον Πίνακα 6.I). Σε αυτό συνηγορεί και το ότι η τάξη μείωσης του σφάλματος είναι λίγο μικρότερη από το 1 (τάξη ακρίβειας ως προς χρόνο του σχήματος Euler).

Τα σχήματα Euler/OS/WENO5 και Euler/LLLF/WENO5 εμφανίζουν μεγαλύτερη μείωση (~10 φορές) του σφάλματος όταν το βήμα ολοκλήρωσης στο χρόνο μεταβάλλεται από 0.0015625 σε 0.00078125. Αυτή η μείωση μπορεί να οφείλεται στο ότι τα σχήματα Euler/OS/WENO5 και Euler/LLLF/WENO5 δεν είναι ευσταθή για $\Delta t=0.0015625$ όταν $\Delta x=\Delta y=0.00625$. Ωστόσο, εξετάζοντας αν ισχύει η συνθήκη ισχυρής ευστάθειας (§6.3) για τα σχήματα Euler/OS/WENO5 και Euler/LLLF/WENO5 όταν $\Delta t=0.0015625$ και $\Delta x=\Delta y=0.00625$, προκύπτει ότι $\|\mathbf{u}^{n+1}\|_{\infty} \leq \|\mathbf{u}^n\|_{\infty}$. Συνεπώς, τα σχήματα είναι ευσταθή.

Στη συνέχεια εξετάζεται η μεταβολή του σφάλματος στο χρόνο για όλα τα σχήματα. Στο Σχήμα 6.4 φαίνεται το σφάλμα σε διάφορες χρονικές στιγμές για όλα τα σχήματα όταν $\Delta x = \Delta y = 0.00625$, $\Delta t = 0.0001$. Το σφάλμα προσαρμόζεται σε καμπύλη $c_3 t^p$, και υπολογίζεται για κάθε σχήμα η τιμή της παραμέτρου p που εκφράζει την τάξη αύξησης του σφάλματος με το χρόνο.



Σχήμα 6.4 Σφάλμα στην υπολογιζόμενη ισοϋψή μηδέν ($\|\mathbf{R} - \mathbf{R}_{\text{real}}\|_F / \|\mathbf{R}_{\text{real}}\|_F$) καθώς ο χρόνος ολοκλήρωσης αυξάνεται για το πρόβλημα 6.A. Εξετάζονται όλα τα διαθέσιμα σχήματα. Για κάθε ομάδα σχημάτων φαίνεται η κλίση αύξησης σε λογαριθμικό διάγραμμα, p , όταν το σφάλμα μεταβάλλεται ως $c_3 t^p$. Είναι $x = \text{Euler}$ ή SSPRK2 ή SSPRK3 και $y = \text{OS}$ ή LLLF ($\Delta x = \Delta y = 0.00625$, $\Delta t = 0.0001$).

Από το Σχήμα 6.4 προκύπτουν:

A) Η εξέλιξη του σφάλματος στο χρόνο εξαρτάται μόνο από το σχήμα προσέγγισης των χωρικών παραγώγων των σχημάτων.

B) Το σφάλμα για όλα σχεδόν τα σχήματα εμφανίζει μικρή αύξηση με το χρόνο. Στα σχήματα υψηλότερης τάξης ο ρυθμός αύξησης είναι χαμηλότερος. Εξαιρέσεις αποτελούν τα σχήματα που χρησιμοποιούν ENO3 για την προσέγγιση των χωρικών παραγώγων.

Γ) Όλα σχεδόν τα σχήματα εμφανίζουν ομαλή μεταβολή του σφάλματος με την αύξηση του χρόνου. Η μη ομαλή μεταβολή του σφάλματος για τα σχήματα που χρησιμοποιούν ENO3 μάλλον οφείλεται στην απότομη μεταβολή του σχήματος προσέγγισης των μερικών παραγώγων (abrupt stencil changes) από σημείο σε σημείο.

6.6.2 Πρόβλημα 6.B: Εξέλιξη συνόρου με ασυνέχεια στην κλίση

Επιλύεται με τη μέθοδο των ισοϋψών πρόβλημα εξέλιξης συνόρου που αποτελείται από τμήμα περιφέρειας κύκλου και ευθύγραμμο τμήμα (Σχήμα 6.5) και κινείται με ταχύτητα

κάθετη σε αυτό και ίση με 1. Το σύνορο αυτό τη χρονική στιγμή $t=0$ περιγράφεται από τη συνάρτηση

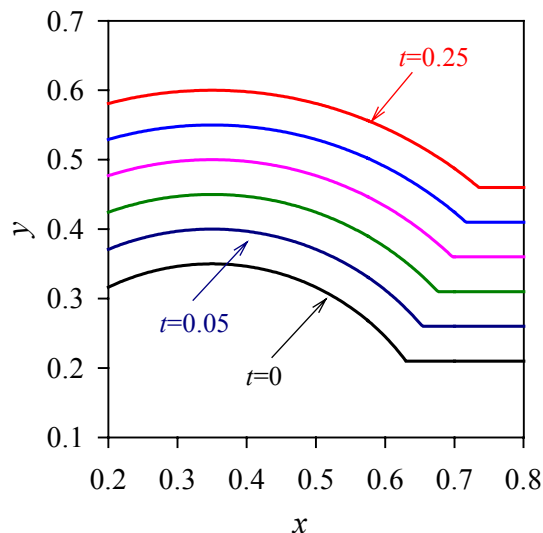
$$y_{real}(x, t=0) = \begin{cases} y_1 + \sqrt{r_0^2 - (x - x_1)^2}, & x \leq x_0 \\ y_2, & x > x_0 \end{cases}, \quad (6.82)$$

όπου $y_1=0$, $x_1=0.35$, $r_0=0.35$, $x_0=0.63$ και $y_2=y_{real}(x_0, 0)$. Για τον υπολογισμό της θέσης του συνόρου στο χρόνο, επιλύεται η Εξ. (6.1) στο υπολογιστικό χωρίο $\Omega=[0.2,0.8] \times [0.1,0.7]$, με $F=1$ και $u(x,y,t=0)=q(x,y)$,³¹ οπότε και προκύπτει η συνάρτηση ισοϋψών σε κάθε χρονική στιγμή. Η θέση του συνόρου σε κάθε χρονική στιγμή προκύπτει από την ισοϋψή μηδέν της συνάρτησης ισοϋψών. Το χαρακτηριστικό αυτού του προβλήματος είναι ότι η λύση εμφανίζει ασυνέχεια στην κλίση. Η πραγματική λύση, δηλαδή η θέση του συνόρου, όπως προκύπτει με τη μέθοδο των χαρακτηριστικών είναι η συνάρτηση

$$y_{real}(x, t) = \begin{cases} y_1 + \sqrt{(Ft + r_0)^2 - (x - x_1)^2}, & x \leq x_s(t) \\ y_2 + Ft, & x > x_s(t) \end{cases}, \quad (6.83)$$

όπου $x_s(t)$ είναι η εξίσωση εξέλιξης της ασυνέχειας στην κλίση στο επίπεδο (x, t) :

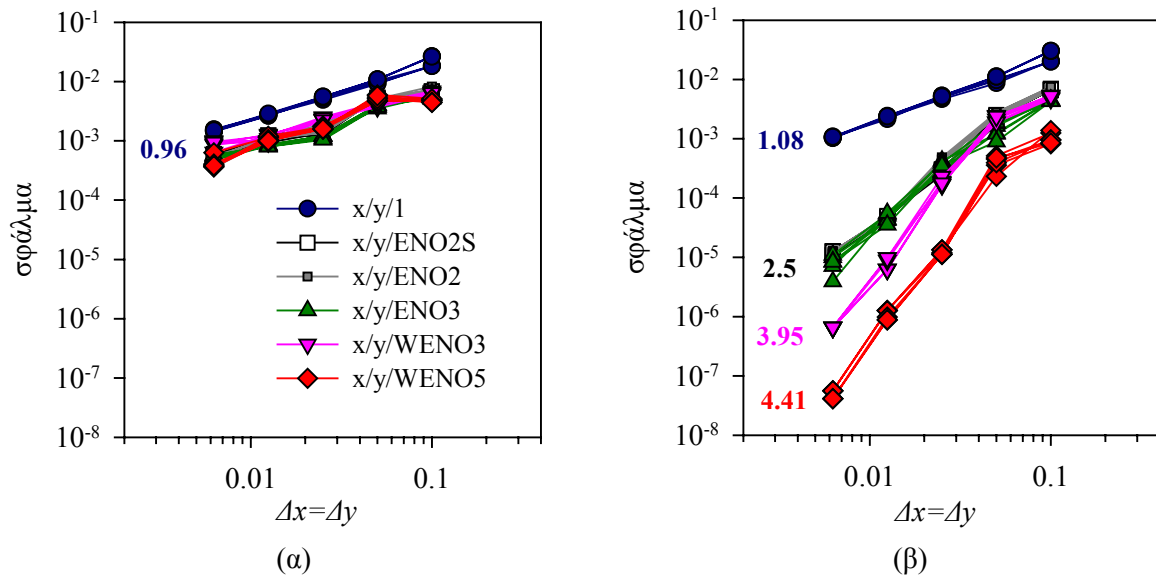
$$x_s(t) = x_1 + \sqrt{(x_1 - x_0)^2 + Ft(Ft + 2r_0)} \quad (6.84)$$



Σχήμα 6.5 Εξέλιξη συνόρου για το πρόβλημα 6.B. Στιγμιότυπα του συνόρου (ισοϋψούς μηδέν) σε διάφορες χρονικές στιγμές που απέχουν 0.05.

³¹ Η συνάρτηση $q(x,y)$ είναι η προσημασμένη απόσταση από σύνορο που περιγράφεται από τη συνάρτηση $y_{real}(x, 0)$.

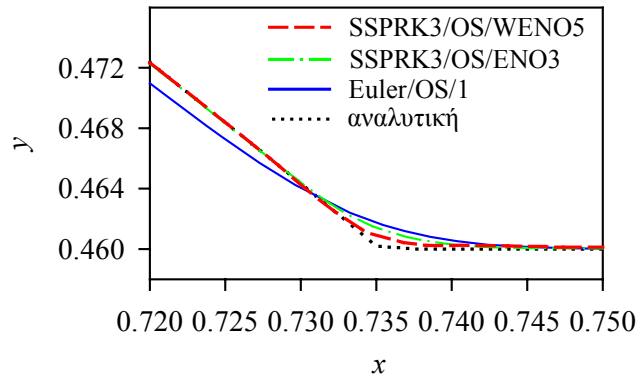
Εξετάζεται η ακρίβεια των διαθέσιμων σχημάτων ως προς $\Delta x = \Delta y$. Τα αποτελέσματα, τα οποία φαίνονται στο Σχήμα 6.6α, δείχνουν ότι κάθε σχήμα εκφυλίζεται σε $1^{η5}$ τάξης ακρίβειας λόγω της ασυνέχειας στην κλίση. Η ύπαρξη ασυνέχειας γεννά ένα σφάλμα στην αριθμητική λύση το οποίο τη «μολύνει». Η έκταση αυτής της «μόλυνσης» εκτιμάται συνήθως εμπειρικά [Oberkampf & Trucano (2000)].



Σχήμα 6.6 (α) Σφάλμα στην υπολογιζόμενη ισοϋψή μηδέν ($\|y - y_{real}\|_2 / \|y_{real}\|_2$) καθώς το $\Delta x = \Delta y$ μειώνεται για το πρόβλημα 6.B. Επίσης φαίνεται και η μέση παρατηρούμενη τάξη των σχημάτων. Εξετάζονται όλα τα σχήματα για $t=0.25$, $\Delta t=0.0001$ (x = Euler ή SSPRK2 ή SSPRK3, y =OS ή LLLF). (β) Τα ίδια με το (α), εξαιρώντας από τους υπολογισμούς ένα τμήμα της λύσης σε απόσταση 0.05 πριν και μετά το σημείο στο οποίο εμφανίζεται η ασυνέχεια [$x=x_s(t=0.25)=0.7342$].

Στη συνέχεια εξετάζεται ποια είναι η συμπεριφορά των σχημάτων όταν από τη λύση αφαιρεθεί ένα τμήμα της στη γειτονιά της ασυνέχειας στην κλίση. Στο Σχήμα 6.6β φαίνονται η μεταβολή του σφάλματος και η παρατηρούμενη τάξη ακρίβειας καθώς μειώνεται το $\Delta x = \Delta y$ για το πρόβλημα 6.B, εξαιρώντας από τους υπολογισμούς ένα τμήμα της λύσης σε απόσταση 0.05 πριν και μετά το σημείο στο οποίο εμφανίζεται η ασυνέχεια στην κλίση. Τα συμπεράσματα που προκύπτουν από το Σχήμα 6.6β είναι αντίστοιχα με αυτά του προβλήματος 6.A. Γενικά, η συμπεριφορά των σχημάτων στο πρόβλημα 6.B, αν εξαιρεθεί ένα μικρό τμήμα στη γειτονιά της ασυνέχειας από τους υπολογισμούς του σφάλματος, είναι αντίστοιχη με αυτή στο πρόβλημα 6.A.

Στο Σχήμα 6.7 φαίνεται η λύση στη γειτονιά της ασυνέχειας στην κλίση όπως προκύπτει χρησιμοποιώντας διαφορετικά αριθμητικά σχήματα. Με τα σχήματα υψηλότερης τάξης, η «μόλυνση» που γεννά η ασυνέχεια στην κλίση της λύσης είναι λιγότερο εκτεταμένη από ότι με τα σχήματα μικρότερης τάξης.



Σχήμα 6.7 Αναλυτική (πραγματική) και αριθμητικές λύσεις (με τα σχήματα Euler/OS/1, SSPRK3/OS/ENO3 και SSPRK3/OS/WENO5) του προβλήματος 6.B στη γειτονιά της ασυνέχειας στην κλίση [$x=x_s(t=0.25)=0.7342$].

6.6.3 Πρόβλημα 6.Γ: Κυρτή και μη Χαμιλτονιανή

Το πρόβλημα αφορά εξέλιξη συνόρου που αντιστοιχεί σε διεργασία εγχάραξης επιφάνειας με ιονοβολή (§1.3.2.3), κατά την οποία ιόντα προσπίπτουν στην εγχαρασόμενη επιφάνεια και απομακρύνουν με μηχανικό τρόπο τμήματά της. Σε κάποιες περιπτώσεις, η απόδοση και άρα η ταχύτητα της ιονοβολής εξαρτάται από τη γωνία πρόσπτωσης των ιόντων στην επιφάνεια. Έστω ότι η ταχύτητα μετακίνησης του συνόρου είναι $(1+A)\cos\theta - A\cos^3\theta$, όπου θ είναι η γωνία που σχηματίζει η διεύθυνση των ιόντων με το κάθετο διάνυσμα στο σύνορο. Έστω ότι τα ιόντα έχουν διεύθυνση αυτή του άξονα y , οπότε και $\cos\theta = u_y / |\nabla u|$. Το σύνορο τη χρονική στιγμή $t=0$ περιγράφεται από τη συνάρτηση:

$$y_{real}(x, t=0) = \begin{cases} y_1, & x \leq x_1 \\ ax + b, & x_1 < x \leq x_2 \\ y_2, & x > x_2 \end{cases}, \quad (6.85)$$

όπου $y_1=0.8$, $x_1=0.6$, $y_2=0.5$, $x_2=0.9$, $a=-1$ και $b=1.4$.

Επιλύεται η Εξ. (6.1) στο υπολογιστικό χωρίο $\Omega=[0,1] \times [0,1]$, με

$$F = (1+A) \frac{u_y}{|\nabla u|} - A \left(\frac{u_y}{|\nabla u|} \right)^3 \quad (6.86)$$

και $u(x,y,t=0)=q(x,y)^{\text{ρι}}$, οπότε και προκύπτει η συνάρτηση ισοϋψών σε κάθε χρονική στιγμή. Η θέση του συνόρου σε κάθε χρονική στιγμή προκύπτει από την ισοϋψή μηδέν της συνάρτησης ισοϋψών.

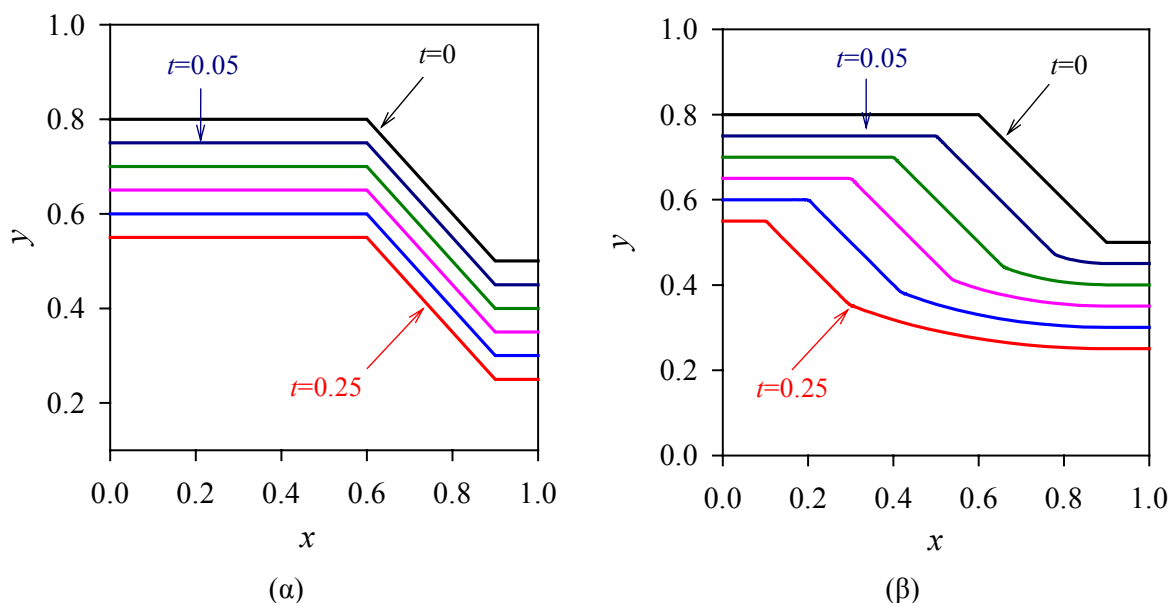
^{ρι} Η $q(x,y)$ είναι η προσημασμένη απόσταση από σύνορο που περιγράφεται από τη συνάρτηση $y_{real}(x, 0)$.

Επιλύονται δύο προβλήματα με διαφορετικές τιμές για τη παράμετρο A . Στο πρώτο είναι $A=0$, οπότε η Χαμιλτονιανή είναι κυρτή (§6.4). Σε αυτή την περίπτωση, προκύπτει, με τη μέθοδο των χαρακτηριστικών, λύση που περιγράφεται από τη συνάρτηση

$$y_{real}(x,t) = \begin{cases} y_1 + Ft, & x \leq x_1 \\ ax + (b + Ft), & x_1 < x \leq x_2 \\ y_2 + Ft, & x > x_2 \end{cases}. \quad (6.87)$$

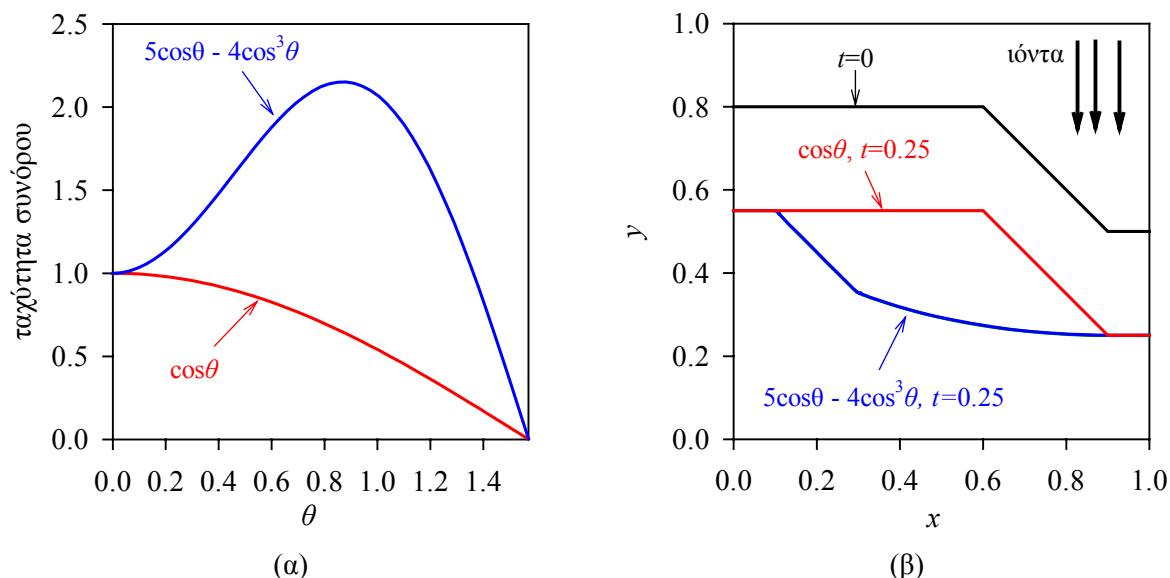
Στο δεύτερο πρόβλημα είναι $A=4>0$, οπότε η Χαμιλτονιανή δεν είναι κυρτή (§6.4). Η πραγματική λύση του προβλήματος σε αυτή την περίπτωση δεν είναι γνωστή. Το δεύτερο πρόβλημα μελετάται ακριβώς για να συγκριθούν οι δύο διαθέσιμες προσεγγίσεις της Χαμιλτονιανής (OS , $LLLF$). Ο Sethian προτείνει τη χρησιμοποίηση του σχήματος $LLLF$ για τις περιπτώσεις όπου η Χαμιλτονιανή είναι κυρτή [Sethian (1999), σ. 69].

Στιγμιότυπα της λύσης σε διάφορες χρονικές στιγμές φαίνονται στο Σχήμα 6.8.



Σχήμα 6.8 Εξέλιξη συνόρου για το πρόβλημα 6.Γ. Στιγμιότυπα του συνόρου (ισοϋψούς μηδέν) σε διάφορες χρονικές στιγμές που απέχουν 0.05. Η ταχύτητα του συνόρου είναι $(1+A)\cos\theta - A\cos^3\theta$, όπου $\cos\theta = u_y / |\nabla u|$. (α) Πραγματική λύση, $A=0$. (β) Αριθμητική λύση, $A=4$ ($\Delta t=0.0001$, $\Delta x=\Delta y=0.00625$, $SSPRK3/LLLF/WENO5$).

Τόσο στο πρώτο, όσο και στο δεύτερο πρόβλημα τα αποτελέσματα είναι τα ίδια, ανεξάρτητα από το σχήμα προσέγγισης της Χαμιλτονιανής. Στο Σχήμα 6.9 εξηγείται η διαφορά στην τελική θέση του συνόρου στα δύο προβλήματα. Ενώ τα οριζόντια τμήματα του συνόρου (όπου $\theta=0$) μετακινούνται με την ίδια ταχύτητα και στα δύο προβλήματα, το κεκλιμένο τμήμα του συνόρου μετακινείται ταχύτερα στο δεύτερο πρόβλημα (Σχήμα 6.9α).



Σχήμα 6.9 (α) Η ταχύτητα του συνόρου σε δύο περιπτώσεις ιονοβολής συναρτήσει της γωνίας θ (η γωνία που σχηματίζει η διεύθυνση των ιόντων με το κάθετο διάνυσμα στο σύνορο). (β) Η θέση του συνόρου τη χρονική στιγμή $t=0.25$ για το πρόβλημα 6.Γ για τις δύο περιπτώσεις ιονοβολής. Τα ιόντα έχουν διεύθυνση του άξονα y . Το κεκλιμένο τμήμα του συνόρου μετακινείται ταχύτερα στη δεύτερη περίπτωση ιονοβολής όπου η ταχύτητα είναι $5\cos\theta - 4\cos^3\theta$.

6.6.4 Συμπεράσματα

Τα γενικά συμπεράσματα από τη μελέτη των παραπάνω προβλημάτων (§6.6.1–§6.6.3) αφορούν στη χρήση των εξεταζόμενων αριθμητικών σχημάτων σε προβλήματα εξέλιξης συνόρου και συνοψίζονται στα παρακάτω.

Το σφάλμα στην αριθμητική λύση που οφείλεται στη χρονική ολοκλήρωση είναι γενικά μικρό. Η διαπίστωση αυτή δεν ισχύει μόνο για το συγκεκριμένο πρόβλημα. Οι Osher και Fedkiw αναφέρουν ότι στην πράξη το σφάλμα που οφείλεται στη διακριτοποίηση στο χώρο είναι πολύ σημαντικότερο από το αντίστοιχο της διακριτοποίησης στο χρόνο [Osher & Fedkiw (2003), σ. 37]. Συνεπώς, είναι περισσότερο κρίσιμη η χρησιμοποίηση αριθμητικών σχημάτων υψηλής τάξης στο χώρο, από ότι στο χρόνο, όπου στις περισσότερες περιπτώσεις είναι αρκετό το σχήμα Euler. Αυτό είναι σημαντικό ιδιαίτερα όταν ο υπολογισμός της ταχύτητας F σε κάθε χρονικό βήμα έχει υψηλό υπολογιστικό κόστος, διότι το πλήθος υπολογισμών της F εξαρτάται από την τάξη του σχήματος ολοκλήρωση στο χρόνο: ένα σχήμα 1^{ns} τάξης, απαιτεί υπολογισμό της F σε μία χρονική στιγμή, ενώ ένα σχήμα 3^{ns} τάξης απαιτεί υπολογισμό της F σε 3 χρονικές στιγμές. Στα προβλήματα που εξετάστηκαν (6.A, 6.B και 6.Γ) δεν υπάρχει κόστος υπολογισμού της F , αφού θεωρείται ότι είναι γνωστή.

Στα προβλήματα που επιλύονται, το σχήμα προσέγγισης της Χαμιλτονιανής (OS ή LLLF) δεν επηρεάζει το σφάλμα και την παρατηρούμενη τάξη ακρίβειας. Αυτό συμβαίνει ακόμη και στην περίπτωση όπου η Χαμιλτονιανή δεν είναι κυρτή (πρόβλημα 6.Γ),

περίπτωση όπου ο Sethian αναφέρει ότι το κατάλληλο σχήμα προσέγγισης είναι το LLLF [Sethian (1999), σ. 69].

Γενικά, η χρησιμοποίηση αριθμητικών σχημάτων υψηλής τάξης στο χώρο βελτιώνει την ακρίβεια των υπολογισμών είτε η λύση είναι λεία, είτε η λύση εμφανίζει ασυνέχεια στην κλίση. Επίσης, σχήμα υψηλότερης τάξης στο χώρο συνεπάγεται μικρότερο ρυθμό αύξησης του σφάλματος στο χρόνο (Σχήμα 6.4).

6.7 Αξιολόγηση

Η σημασία της μελέτης των αριθμητικών σχημάτων επίλυσης της εξίσωσης ισοϋψών περικλείεται στα συμπεράσματα της §6.6.4 και έγκειται στο ότι αυτά τα συμπεράσματα μπορούν να οδηγήσουν στην επιλογή του κατάλληλου σχήματος. Τη σημασία της μελέτης συμπληρώνουν οι παρακάτω επισημάνσεις.

Τα αριθμητικά σχήματα της §6.2 έχουν δοκιμαστεί σε προβλήματα εξισώσεων Hamilton-Jacobi που δεν αφορούν εξέλιξη συνόρου, δηλαδή σε προβλήματα με διαφορετική Χαμιλτονιανή [Shu (1990), Osher & Shu (1991), Jiang & Peng (2000)]. Ωστόσο, πολλά από αυτά τα σχήματα δεν έχουν εφαρμοστεί σε προβλήματα εξέλιξης συνόρου. Για παράδειγμα, τα σχήματα στα οποία η προσέγγιση της Χαμιλτονιανής είναι OS και έχουν εφαρμοστεί σε προβλήματα εξέλιξης συνόρου είναι μέχρι 2^{ης} τάξης στο χρόνο (SSPRK2) και στο χώρο (ENO2S). Η εφαρμογή τους ξεκίνησε από τους Osher και Sethian [Osher & Sethian (1988)] και συνεχίστηκε από το Sethian, ο οποίος μάλιστα αναφέρει ότι για όλες σχεδόν τις πρακτικές εφαρμογές (αναφερόμενος στα προβλήματα εξέλιξης συνόρου) τα σχήματα μέχρι 2^{ης} τάξης στο χώρο επαρκούν [Sethian (1999), σ. 64]. Από τη μελέτη των σχημάτων της §6.2 φαίνεται ότι αξίζει τον κόπο να χρησιμοποιηθούν σχήματα υψηλότερης τάξης ακόμη και σε περιπτώσεις ασυνέχειας στην κλίση.

Η εμπειρία και ο κώδικας που αναπτύχθηκε για την αξιολόγηση των αριθμητικών σχημάτων της §6.2 επιτρέπει την εφαρμογή και άλλων σχημάτων, είτε χρονικής ολοκλήρωσης, είτε προσέγγισης της Χαμιλτονιανής, είτε προσέγγισης των χωρικών παραγώγων και μάλιστα και σε διαφορετικά από την εξέλιξη συνόρου προβλήματα. Επίσης, η εφαρμογή ή και ανάπτυξη αριθμητικών σχημάτων σε τριγωνοποιημένα χωρία {triangulated domains, [Sethian (1999), σ. 100]}, λόγω της ευελιξίας που προσφέρει αυτός ο τρόπος διαμέρισης, θα μπορούσε να είναι το επόμενο βήμα. Ωστόσο, η πρώτη προτεραιότητα δεν αφορά στην ανάπτυξη ή εφαρμογή νέων σχημάτων, αλλά στη χρησιμοποίηση ειδικών τεχνικών {localized level set method, [Peng et al. (1999)] και narrow band method [Sethian (1999), σ. 80-85]} για τον περιορισμό επίλυσης της εξίσωσης ισοϋψών σε υπολογιστικό χωρίο σε στενή ζώνη στη γειτονιά της ισοϋψούς μηδέν (αυτή είναι που ενδιαφέρει στο «γενικό» πρόβλημα εξέλιξης συνόρου). Με αυτό τον τρόπο θα αυξηθεί σημαντικά η ταχύτητα επίλυσης της εξίσωσης ισοϋψών.

Κεφάλαιο 7

Επίλυση της εξίσωσης Eikonal

Η επίλυση της εξίσωσης Eikonal είναι απαραίτητη τόσο στο «γενικό» πρόβλημα εξέλιξης συνόρου (§5.4), όσο και στο «στατικό» (§5.5). Περιγράφονται τρεις μέθοδοι επίλυσης. Οι δύο πρώτες μέθοδοι είναι επαναληπτικές και διαφοροποιούνται στο αριθμητικό σχήμα που χρησιμοποιείται για τη διακριτοποίηση: στη μία το σχήμα είναι Galerkin-πεπερασμένων στοιχείων και στην άλλη το σχήμα είναι τύπου Godunov (πεπερασμένων διαφορών). Η τρίτη μέθοδος επίλυσης είναι η μέθοδος ταχυ-βηματισμού, η οποία επιλύει το μη γραμμικό πρόβλημα της εξίσωσης Eikonal άμεσα, χωρίς επαναληπτική διαδικασία. Οι μέθοδοι επίλυσης συγκρίνονται και αξιολογείται η ταχύτητα και η ακρίβειά τους.

7.1 Εισαγωγή

Σε αυτό το κεφάλαιο εξετάζεται η αριθμητική επίλυση του μη γραμμικού προβλήματος συνοριακών τιμών

$$\left\{ \begin{array}{l} |\nabla u(\mathbf{x})| = f(\mathbf{x}), f(\mathbf{x}) > 0, \mathbf{x} \in \Omega \\ u(\mathbf{x}) = g(\mathbf{x}), \mathbf{x} \in \Gamma, \Gamma \subset \Omega \end{array} \right\}^{\mathfrak{R}} \quad (7.1)$$

όπου $g(\mathbf{x})$ γνωστή συνάρτηση. Η Εξ. (7.1) καλείται εξίσωση Eikonal, [Sethian (1999), σ. 5] και ανήκει στην γενική κατηγορία στατικών εξισώσεων Hamilton-Jacobi. Η Εξ. (7.1) είναι υπερβολική, συνεπώς είναι πιθανό (§5.6) να προκύψουν ασυνέχειες στην παράγωγο της λύσης. Τότε, είναι αναγκαίο να οριστούν ασθενείς λύσεις. Η ορθή ασθενής λύση προκύπτει από την επιβολή της συνθήκης εντροπίας (§5.7, §5.8).

Αν $g(\mathbf{x}) = 0$, η Εξ. (7.1) περιγράφει εξέλιξη συνόρου (καμπύλης σε δύο, επιφάνειας σε τρεις διαστάσεις) που κινείται με ταχύτητα κάθετη σε αυτό και ίση με

$$F(\mathbf{x}) = 1/f(\mathbf{x}). \quad (7.2)$$

Πρόκειται για το βήμα (B) του «στατικού» προβλήματος εξέλιξης συνόρου [Εξ. (5.26) ή (5.48)], όπου η άγνωστη συνάρτηση $u(\mathbf{x})$ είναι ο χρόνος άφιξης του συνόρου στη θέση \mathbf{x} . Η καμπύλη Γ της Εξ. (7.1) είναι το σύνορο τη χρονική στιγμή $t=0$.

Αν η $F(\mathbf{x}) = 1$ και $g(\mathbf{x}) = 0$, η λύση u της Εξ. (7.1) είναι η απόσταση από το σύνορο (καμπύλη ή επιφάνεια) Γ . Η επίλυση του προβλήματος υπολογισμού της απόστασης [$F(\mathbf{x}) = 1$ και $g(\mathbf{x}) = 0$] είναι αναγκαία για την κατασκευή της αρχικής συνθήκης της εξίσωσης ισοϋψών [Εξ. (5.19) ή (5.46)] στο βήμα (A) του «γενικού» προβλήματος εξέλιξης συνόρου.

Στις επόμενες παραγράφους, περιγράφονται και αξιολογούνται διαφορετικά αριθμητικά σχήματα και μέθοδοι επίλυσης της Εξ. (7.1). Η αξιολόγηση περιλαμβάνει την ευστάθεια του αριθμητικού σχήματος, την ακρίβεια και ποιότητα της λύσης και την ταχύτητα επίλυσης. Χρησιμοποιούνται τα παρακάτω προβλήματα-παραδείγματα, στα οποία η συνάρτηση $f(\mathbf{x})$, δηλαδή η ταχύτητα μετατόπισης του συνόρου [Εξ. (7.2)], θεωρείται γνωστή:

Πρόβλημα 7.A:
$$\left\{ \begin{array}{l} |\nabla u(\mathbf{x})| = 1, \mathbf{x} \in \Omega = [0, 2] \times [0, 2] \\ u(\mathbf{x}) = 0, \mathbf{x} \in \partial\Omega \end{array} \right\},$$

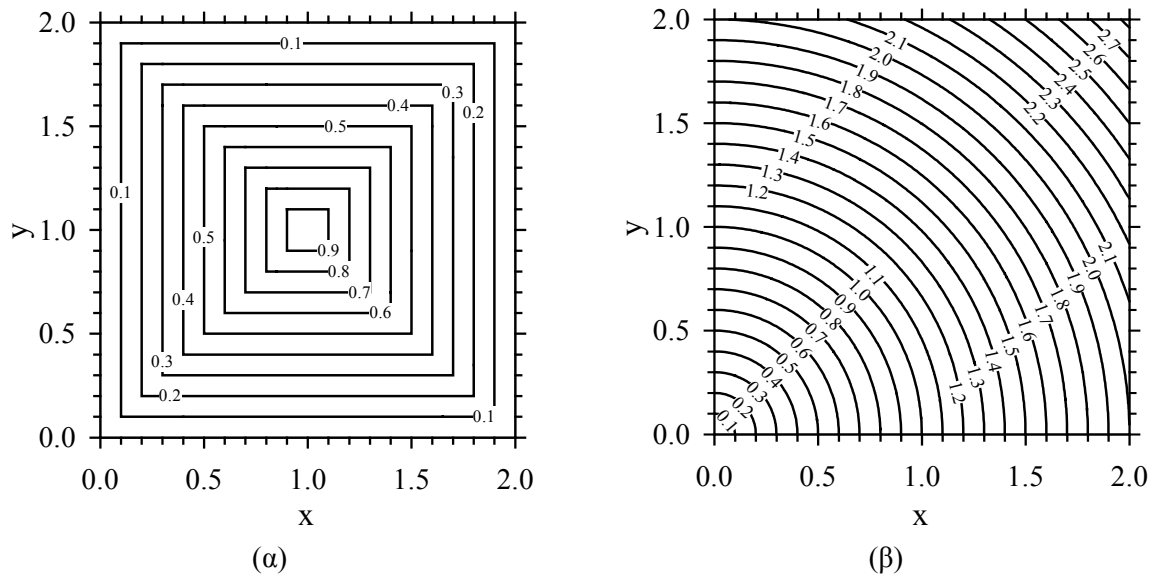
με πραγματική λύση $u = \min(x, 2-x, y, 2-y)$.

⁹⁸ Στο υπόλοιπο του κεφαλαίου χρησιμοποιείται το σύμβολο u για την άγνωστη συνάρτηση, αντί του συμβόλου φ (για την προσημασμένη απόσταση) και T (για τη συνάρτηση του χρόνου άφιξης) που χρησιμοποιήθηκε στο Κεφ. 5. Ο συμβολισμός φ και T αναφέρεται σε πεπλεγμένες συναρτήσεις περιγραφής συνόρου και ο συμβολισμός u αφορά στην άγνωστη συνάρτηση σε ένα αριθμητικό πρόβλημα.

Πρόβλημα 7.B:
$$\left\{ \begin{array}{l} |\nabla u(\mathbf{x})| = 1, \mathbf{x} \in \Omega = [0,2] \times [0,2] \\ u(\mathbf{x}) = \text{αποσταση απο το } (0,0), \mathbf{x} \in \partial\Omega \end{array} \right\},$$

με πραγματική λύση $u = \sqrt{x^2 + y^2}$.

Η πραγματική λύση για το πρόβλημα 7.A φαίνεται στο Σχήμα 7.1α και είναι η απόσταση από το σύνορο $\partial\Omega$. Από μια άλλη σκοπιά, η λύση στο πρόβλημα 7.A⁹¹ είναι η εξέλιξη συνόρου, το οποίο τη χρονική στιγμή $t=0$ είναι το $\partial\Omega$, και κινείται ιστροπικά προς την κατεύθυνση συρρίκνωσής του με σταθερή ταχύτητα $F=1$. Στο Σχήμα 7.1β φαίνεται η πραγματική λύση για το πρόβλημα 7.B, δηλαδή η απόσταση από το σημείο $(0,0)$. Από μια άλλη σκοπιά, η λύση στο πρόβλημα 7.B περιγράφει την ιστροπική διαστολή μιας γωνίας με κορυφή το σημείο $(0,0)$ και πλευρές που εκτείνονται από το $(0,0)$ προς αρνητικά x και y .



Σχήμα 7.1 Ισοϋνείες της πραγματικής λύσης του προβλήματος (α) 7.A, (β) 7.B.

Η μέθοδος επίλυσης της εξίσωσης Eikonal προσδιορίζεται από 3 αλληλοεξαρτώμενα χαρακτηριστικά: α) τον τρόπο επιλογής της ορθής ασθενούς λύσης, β) το αριθμητικό σχήμα διακριτοποίησης, και γ) τη μέθοδο επίλυσης του συστήματος μη γραμμικών εξισώσεων που προκύπτει από τη διακριτοποίηση.

Στην §7.2 περιγράφεται η πρώτη μέθοδος επίλυσης της Εξ. (7.1), κατά την οποία η επιβολή της συνθήκης εντροπίας και η επιλογή της ορθής ασθενούς λύσης γίνεται με τη μέθοδο εξάλειψης ιξώδους όρου [EIO, vanishing viscosity method, Crandall & Lions (1984)]. Για τη διακριτοποίηση χρησιμοποιείται η μέθοδος Galerkin-πεπερασμένων στοιχείων (Galerkin-ΠΣ), ενώ το προκύπτον σύστημα μη γραμμικών εξισώσεων επιλύεται με

⁹¹ Και στα δύο προβλήματα χρειάζεται η επιβολή συνθήκης εντροπίας (§5.7, §5.8). Το πρόβλημα 7.A συνδέεται με το παράδειγμα στα Σχήματα 5.7α, 5.7β και 5.7γ, ενώ το πρόβλημα 7.B με αυτό στα Σχήματα 5.7α, 5.7δ και 5.7ε.

τη μέθοδο Newton-Raphson (NR). Το αρκτικόλεξο EIO/Galerkin-ΠΣ/NR περιγράφει την πρώτη προσέγγιση επίλυσης.

Στη δεύτερη μέθοδο επίλυσης (§7.3), χρησιμοποιείται για τη διακριτοποίηση σχήμα πεπερασμένων διαφορών κατά την κατεύθυνση διάδοσης πληροφορίας (upwind) τύπου Godunov [Sethian (1999), σ. 68], το οποίο περιέχει τη συνθήκη εντροπίας για την επιλογή της ορθής ασθενούς λύσης. Το σύστημα μη γραμμικών εξισώσεων επιλύεται με τη μέθοδο NR. Η δεύτερη προσέγγιση συμβολίζεται ως Godunov/NR.

Στην τρίτη μέθοδο (§7.4), χρησιμοποιείται το ίδιο σχήμα διακριτοποίησης με τη δεύτερη μέθοδο. Η διαφορά έγκειται στη χρησιμοποίηση άμεσου τρόπου επίλυσης του συστήματος μη γραμμικών εξισώσεων που προκύπτει από τη διακριτοποίηση, με τη μέθοδο ταχυ-βηματισμού [fast marching method, FMM, Sethian (1999b)], χωρίς επαναληπτική διαδικασία, όπως στην πρώτη και δεύτερη μέθοδο. Με τη χρήση της μεθόδου ταχυ-βηματισμού (TB), επιτυγχάνεται η άμεση επίλυση του μη γραμμικού προβλήματος της εξίσωσης Eikonal, αξιοποιώντας τη μονοτονία της λύσης κατά μήκος των προβολών των χαρακτηριστικών και χρησιμοποιώντας αλγόριθμους ταξινόμησης χαμηλής πολυπλοκότητας (υψηλής ταχύτητας). Η τρίτη μέθοδος περιγράφεται από το αρκτικόλεξο Godunov/TB.

Το κεφάλαιο ολοκληρώνεται με ένα παράδειγμα (§7.5) που δείχνει την επίδραση της αριθμητικής επίλυσης της εξίσωσης Eikonal στην ακρίβεια υπολογισμών στο «γενικό» πρόβλημα εξέλιξης συνόρου (§5.4) και με τα συμπεράσματα και προτάσεις για τη συνέχεια της μελέτης (§7.6). Ο κώδικας υλοποίησης των τριών μεθόδων που εφαρμόζονται στην επίλυση της εξίσωσης Eikonal επαληθεύεται στην §A.5.2.

7.2 Επίλυση της εξίσωσης Eikonal με τη μέθοδο εξάλειψης ιξώδους όρου και σχήμα Galerkin-πεπερασμένων στοιχείων

7.2.1 Η μέθοδος εξάλειψης ιξώδους όρου

Ένας από τους τρόπους για την επιβολή της συνθήκης εντροπίας και την επιλογή της ορθής ασθενούς λύσης της εξίσωσης Eikonal, είναι με τη μέθοδο εξάλειψης ιξώδους όρου (EIO, vanishing viscosity method). Σύμφωνα με τη μέθοδο EIO, ένας ιξώδης όρος προστίθεται στην εξίσωση Eikonal [Εξ. (7.1)], οπότε και προκύπτει το αντίστοιχο ιξώδες πρόβλημα:

$$\left\{ \begin{array}{l} |\nabla u^\varepsilon(\mathbf{x})| - \varepsilon \nabla^2 u^\varepsilon(\mathbf{x}) = f(\mathbf{x}), f(\mathbf{x}) > 0, \mathbf{x} \in \Omega \\ u(\mathbf{x}) = g(\mathbf{x}), \mathbf{x} \in \Gamma, \Gamma \subset \Omega \end{array} \right\}. \quad (7.3)$$

Ο ιξώδης όρος $\varepsilon \nabla^2 u^\varepsilon$ ουσιαστικά είναι ένας όρος αριθμητικής διάχυσης που αμβλύνει τις γωνίες και επιβάλλει στην λύση να παραμείνει λεία σε όλο το χωρίο Ω [Sethian (1999b)]. Η λύση της Εξ. (7.3) συγκλίνει σε αυτή της Εξ. (7.1), καθώς ο συντελεστής $\varepsilon \rightarrow 0$,

$$\lim_{\varepsilon \rightarrow 0} u^\varepsilon = u \quad \text{ῥῆ} \quad (7.4)$$

Η λύση στο όριο $\varepsilon \rightarrow 0$ είναι η ορθή ασθενής λύση, η λύση που ικανοποιεί τη συνθήκη εντροπίας [Sethian (1999b)].

7.2.2 Το αριθμητικό σχήμα Galerkin-ΠΣ

Η διακριτοποίηση της Εξ. (7.3) γίνεται με το σχήμα Galerkin-ΠΣ και περιλαμβάνει [Μπουντουβής (1992)]:

A) Την προσέγγιση της λύσης u από μια πεπερασμένη σειρά συναρτήσεων

$$u(\mathbf{x}) = \sum_{j=1}^N u_j \varphi^j(\mathbf{x}) \quad (7.5)$$

όπου N είναι το πλήθος των κόμβων του πλέγματος, u_j οι τιμές της άγνωστης συνάρτησης στους κόμβους του πλέγματος και φ^j οι συναρτήσεις βάσης, οι οποίες είναι πολυώνυμα συνήθως πρώτου ή δεύτερου βαθμού.

B) Την αναζήτηση λύσης που μηδενίζει καθένα από τα σταθμισμένα υπόλοιπα Galerkin, R_i :

$$R_i = \iint_D (|\nabla u^\varepsilon| - f - \varepsilon \nabla^2 u^\varepsilon) \varphi^i dx dy, \quad i=1,2,\dots,N, \quad (7.6)$$

όπου οι συναρτήσεις στάθμισης φ^i είναι οι ίδιες συναρτήσεις που χρησιμοποιούνται για την κατασκευή της προσεγγιστικής λύσης.

7.2.3 Διαδικασία επίλυσης

7.2.3.1 Το σύστημα μη γραμμικών εξισώσεων

Για τη λύση του συστήματος μη γραμμικών εξισώσεων [Εξ. (7.6)] χρησιμοποιείται η επαναληπτική μέθοδος Newton-Raphson (NR). Η προσέγγιση της λύσης στην $(k+1)$ -επανάληψη προκύπτει από την προσέγγιση στην k -επανάληψη με επίλυση του συστήματος:

^{ῥῆ} Ο εκθέτης ε δεν αφορά σε ύψωση σε δύναμη ή σε παράγωγο, είναι απλά συμβολισμός της λύσης της Εξ. (7.3).

$$\mathbf{J}^{(k)} \delta \mathbf{u}^{(k+1)} = -\mathbf{R}^{(k)} \quad (7.7)$$

όπου $\mathbf{u}^{(k+1)} = \mathbf{u}^{(k)} + \delta \mathbf{u}^{(k+1)}$, $\mathbf{R} = (R_1, R_2, \dots, R_N)$, και \mathbf{J} ο Ιακωβιανός πίνακας του συστήματος,

$$J_{ij} = \frac{\partial R_i}{\partial u_j}. \quad (7.8)$$

Τα σταθμισμένα υπόλοιπα, μετά από παραγοντική ολοκλήρωση του γραμμικού όρου $\nabla^2 u^\varepsilon$ και εφαρμογή του θεωρήματος Green στο επίπεδο, γίνονται

$$\begin{aligned} R_i = & \iint_D \varphi^i \sqrt{\left(\frac{\partial u^\varepsilon}{\partial x}\right)^2 + \left(\frac{\partial u^\varepsilon}{\partial y}\right)^2} dx dy - \iint_D \varphi^i f dx dy + \\ & + \iint_D \varepsilon \left(\frac{\partial \varphi^i}{\partial x} \frac{\partial u^\varepsilon}{\partial x} + \frac{\partial \varphi^i}{\partial y} \frac{\partial u^\varepsilon}{\partial y} \right) dx dy - \oint_{\partial D} \varepsilon \varphi^i \left(\frac{\partial u^\varepsilon}{\partial x} dy - \frac{\partial u^\varepsilon}{\partial y} dx \right), \quad i=1,2,\dots,N. \end{aligned} \quad (7.9)$$

Τα στοιχεία του Ιακωβιανού πίνακα του συστήματος είναι:

$$\begin{aligned} J_{ij} = \frac{\partial R_i}{\partial u_j} = & \iint_D \varphi^i \frac{\frac{\partial u^\varepsilon}{\partial x} \frac{\partial \varphi^j}{\partial x} + \frac{\partial u^\varepsilon}{\partial y} \frac{\partial \varphi^j}{\partial y}}{\sqrt{\left(\frac{\partial u^\varepsilon}{\partial x}\right)^2 + \left(\frac{\partial u^\varepsilon}{\partial y}\right)^2}} dx dy + \\ & + \iint_D \varepsilon \left(\frac{\partial \varphi^i}{\partial x} \frac{\partial \varphi^j}{\partial x} + \frac{\partial \varphi^i}{\partial y} \frac{\partial \varphi^j}{\partial y} \right) dx dy - \oint_{\partial D} \frac{\partial}{\partial u_j} \left[\varepsilon \varphi^i \left(\frac{\partial u^\varepsilon}{\partial x} dy - \frac{\partial u^\varepsilon}{\partial y} dx \right) \right], \quad i=1,2,\dots,N, j=1,2,\dots,N. \end{aligned} \quad (7.10)$$

Οι όροι $\partial u^\varepsilon / \partial x$ και $\partial u^\varepsilon / \partial y$ που συμμετέχουν στις Εξ. (7.9) και (7.10) αφορούν την k -επανάληψη: Τόσο τα υπόλοιπα R_i , όσο και ο Ιακωβιανός πίνακας \mathbf{J} μεταβάλλονται κατά την επαναληπτική διαδικασία, αφού εξαρτώνται από τη λύση στην τρέχουσα επανάληψη. Τα στοιχεία των πινάκων \mathbf{J} και $-\mathbf{R}$ τροποποιούνται κατάλληλα με την επιβολή των συνοριακών συνθηκών.

Σε κάθε επανάληψη της μεθόδου NR είναι απαραίτητη η επίλυση ενός γραμμικού συστήματος [Εξ. (7.7)]. Ο τρόπος διακριτοποίησης με τη μέθοδο Galerkin-ΠΣ προσδίδει ειδικά χαρακτηριστικά στον πίνακα \mathbf{J} του συστήματος της Εξ. (7.7). Εξαιτίας της περιορισμένης επικάλυψης των συναρτήσεων βάσης, ο πίνακας \mathbf{J} είναι αραιός (sparse). Ειδικότερα, ο \mathbf{J} είναι πίνακας-ταινία με αρκετά μηδενικά εντός της ταινίας. Η δομή του πίνακα, δηλαδή η διάταξη των μη μηδενικών στοιχείων (sparsity pattern), εξαρτάται από το εύρος επικάλυψης των συναρτήσεων βάσης και την αρίθμηση των κόμβων στο πλέγμα. Σε

μα γραμμή του πίνακα J υπάρχουν τόσα μη μηδενικά στοιχεία όσα και το πλήθος των συναρτήσεων βάσης που επικαλύπτονται. Η θέση τους πριν και μετά τη διαγώνιο εξαρτάται από την αρίθμηση των κόμβων του πλέγματος.

Επειδή ο πίνακας J είναι αραιός, η επίλυση του συστήματος της Εξ. (7.7) γίνεται με μέθοδο μετώπου [frontal, Irons (1970)]. Πρόκειται για άμεση μέθοδο επίλυσης που εκμεταλλεύεται τον τρόπο κατασκευής του πίνακα J σε προβλήματα όπου χρησιμοποιείται σχήμα πεπερασμένων στοιχείων: ο πίνακας J οικοδομείται στοιχείο-στοιχείο αθροίζοντας τις συνεισφορές από κάθε στοιχείο. Το σημαντικό στη μέθοδο μετώπου είναι ότι στη διαδικασία οικοδόμησης του πίνακα J παρεμβάλλονται βήματα απαλοιφής Gauss και αυτό επιτρέπει την αποφυγή αποθήκευσης ολόκληρου του πίνακα J . Συνεπώς, τη θέση του αραιού και υψηλής διάστασης πίνακα J , παίρνει ένας συμπαγής μικρής διάστασης πίνακας, ο πίνακας μετώπου (frontal matrix), ο οποίος επιτρέπει τη χρήση κατάλληλων ταχέων μεθόδων χειρισμού του. Επίσης, λόγω της μικρής διάστασής του, ο πίνακας μετώπου διατηρείται [Duff & Scott (1999)] στη λανθάνουσα μνήμη (CACHE) που είναι υψηλής ταχύτητας, χωρίς συνήθως να χρειάζεται κύρια μνήμη (RAM) για την αποθήκευσή του. Οι απαιτήσεις σε μνήμη και το πλήθος των πράξεων εξαρτώνται από το μέγεθος του πίνακα μετώπου. Η διάσταση του πίνακα μετώπου εξαρτάται [Duff & Scott (1999)] από την αρίθμηση των πεπερασμένων στοιχείων καθώς και από το αν απαιτείται οδήγηση (pivoting) για την απαλοιφή. Ο Irons αναφέρει [Irons (1970)] ότι η μέθοδος μετώπου για συμμετρικούς και θετικά ορισμένους πίνακες χρειάζεται λιγότερο από $\frac{1}{2}n^2N$ πολλαπλασιασμούς για την επίλυση N εξισώσεων ($2n$ είναι η διάσταση της ταινίας του πίνακα του γραμμικού συστήματος). Η μέθοδος μετώπου είναι συγκριτικά ταχύτερη σε σχέση με τις μεθόδους που δεν εκμεταλλεύονται την αραιότητα του πίνακα. Για παράδειγμα, η απαλοιφή Gauss και η παραγοντοποίηση LU είναι πολυπλοκότητας $O(N^3)$ [Press et al. (1997)]. Επίσης, η μέθοδος μετώπου είναι ταχύτερη και εμφανίζει λιγότερες απαιτήσεις σε μνήμη [Hood (1976)], αν και είναι πιο περίπλοκη στην εφαρμογή της, από τις μεθόδους ταινίας (band algorithms).

7.2.3.2 Ο δείκτης κατάστασης του Ιακωβιανού πίνακα και η σύγκλιση της NR

Η σύγκλιση της NR εξαρτάται από την κατάσταση του γραμμικού συστήματος της Εξ. (7.7). Γενικά, ένα γραμμικό σύστημα εξισώσεων είναι κακής κατάστασης (ill-conditioned), αν μικρές σχετικά αλλαγές στα δεδομένα του συστήματος επιφέρουν σχετικά μεγάλες αλλαγές στη λύση. Αντίθετα, ένα σύστημα γραμμικών εξισώσεων είναι καλής κατάστασης (well-conditioned), αν μικρές σχετικά αλλαγές στα δεδομένα του συστήματος επιφέρουν σχετικά μικρές αλλαγές στη λύση.

Ο δείκτης κατάστασης (ΔK) του πίνακα A του γραμμικού συστήματος $Ax=b$ είναι μέτρο για την κατάσταση του γραμμικού συστήματος [Παπαγεωργίου & Τσίτουρας (2000) σ. 102]. Ο ΔK για ομαλό πίνακα A ορίζεται ως

$$K = K(\mathbf{A}) = \|\mathbf{A}\| \|\mathbf{A}^{-1}\|, \quad (7.11)$$

όπου $\|\cdot\|$ μια φυσική νόρμα. Αν ο ΔΚ πίνακα \mathbf{A} είναι μικρός, τότε το σύστημα $\mathbf{Ax}=\mathbf{b}$ είναι καλής κατάστασης. Αν είναι μεγάλος, τότε το σύστημα είναι κακής κατάστασης.

Σε ένα γραμμικό σύστημα $\mathbf{Ax}=\mathbf{b}$, τα αναπόφευκτα σφάλματα στρογγυλοποίησης στους συντελεστές a_{ij} και b_i οδηγούν ουσιαστικά στην επίλυση ενός ελαφρά διαφοροποιημένου συστήματος $\mathbf{A}'\mathbf{x}=\mathbf{b}'$. Η ακρίβεια προσέγγισης $\tilde{\mathbf{x}}$ της λύσης μπορεί να μετρηθεί από το μέγεθος των υπολοίπων $\mathbf{r}' = \mathbf{A}'\tilde{\mathbf{x}} - \mathbf{b}'$, αλλά και το μέγεθος του σφάλματος $\mathbf{e} = \mathbf{x}_r - \tilde{\mathbf{x}}$ (\mathbf{x}_r η άγνωστη πραγματική λύση του $\mathbf{Ax}=\mathbf{b}$). Αυτό που είναι δυνατό να υπολογιστεί είναι το \mathbf{r}' και όχι το \mathbf{e} , αφού συνήθως δεν γνωρίζουμε την πραγματική λύση \mathbf{x}_r . Έστω ότι για κάποια προσέγγιση $\tilde{\mathbf{x}}$ της λύσης η ποσότητα $\|\mathbf{r}'\|$ είναι μικρή. Όταν ο ΔΚ του πίνακα \mathbf{A} είναι μικρός, τότε και η ποσότητα $\|\mathbf{e}\|$ είναι μικρή. Όταν ο ΔΚ είναι μεγάλος, η ποσότητα $\|\mathbf{e}\|$ δεν είναι μικρή, δηλαδή η εκτίμηση $\tilde{\mathbf{x}}$ της λύσης δεν είναι ακριβής.

Η σχέση του ΔΚ ομαλού πίνακα \mathbf{A} με το σχετικό σφάλμα αποδεικνύεται ότι είναι [ο.π, σ. 102]

$$\frac{\|\mathbf{e}\|}{\|\mathbf{x}_r\|} \leq K(\mathbf{A}) \frac{\|\mathbf{r}'\|}{\|\mathbf{b}'\|}, \quad \mathbf{r}' = \mathbf{A}'\mathbf{x}_r - \mathbf{b}', \quad \mathbf{x}_r \neq \mathbf{0}, \quad \mathbf{b}' \neq \mathbf{0}, \quad (7.12)$$

όπου $\|\cdot\|$ μια φυσική νόρμα.

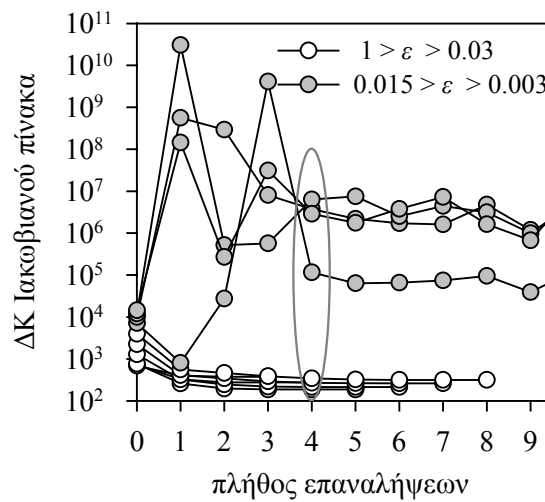
Έστω ότι ο ΔΚ του Ιακωβιανού πίνακα της NR [Εξ. (7.7)] είναι μεγάλος. Η επίλυση του γραμμικού συστήματος σε κάθε επανάληψη οδηγεί, λόγω μικρών σφαλμάτων στρογγυλοποίησης και του μεγάλου ΔΚ του Ιακωβιανού πίνακα, σε εκτίμηση της λύσης που διαφέρει από την πραγματική για κάθε επανάληψη. Τα σφάλματα συσσωρεύονται και ενισχύονται κατά την επαναληπτική διαδικασία, αφού οι εκτιμήσεις της λύσης χρησιμοποιούνται για την κατασκευή του Ιακωβιανού πίνακα και των σταθμισμένων υπολοίπων στην επόμενη επανάληψη, με ενδεχόμενο αποτέλεσμα την αδυναμία σύγκλισης της NR. Ακόμη κι αν η NR συγκλίνει, μεγάλος ΔΚ του Ιακωβιανού πίνακα αυξάνει [Εξ. (7.12)] το σφάλμα της εκτίμησης της λύσης.

Στα αποτελέσματα που παρουσιάζονται παρακάτω, για τον υπολογισμό του ΔΚ χρησιμοποιούνται οι ρουτίνες *sgetrf* και *sgecon* της βιβλιοθήκης LAPACK (www.netlib.org/lapack). Ο ΔΚ προκύπτει από την Εξ. (7.11) υπολογίζοντας μια εκτίμηση για την ποσότητα $\|\mathbf{A}^{-1}\|$. Η νόρμα που χρησιμοποιείται είναι η $\|\cdot\|_1$.

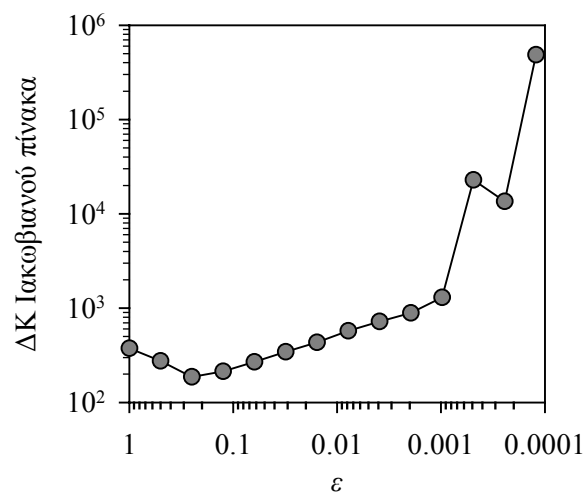
Ο ΔΚ του Ιακωβιανού πίνακα μεταβάλλεται από επανάληψη σε επανάληψη της NR. Στο Σχήμα 7.2α φαίνεται ο ΔΚ του Ιακωβιανού πίνακα της μεθόδου NR σαν συνάρτηση του πλήθους επαναλήψεων, για διαφορετικά ε . Για κάθε τιμή του ε χρησιμοποιείται η ίδια αρχική εκτίμηση. Για κάθε τιμή του ε , ο ΔΚ από την 4η επανάληψη και μετά είναι περίπου σταθερός. Αυτό οφείλεται στο ότι η προσέγγιση της λύσης (από την οποία εξαρτάται ο Ιακωβιανός πίνακας) δεν αλλάζει σημαντικά μετά την 4η επανάληψη. Παρατηρούνται δύο

επίπεδα τιμών του ΔK , με το υψηλότερο επίπεδο να αντιστοιχεί στις μικρές τιμές του ε . Στα υψηλά επίπεδα τιμών του ΔK , η NR δεν συγκλίνει.

Στο Σχήμα 7.2β περιγράφονται οι μεταβολές του ΔK του Ιακωβιανού πίνακα σαν συνάρτηση του συντελεστή ε : φαίνονται οι τιμές του ΔK στην 4η επανάληψη (Σχήμα 7.2α), αντιπροσωπευτικές της τιμής του ε και ανεξάρτητες από την αρχική εκτίμηση της λύσης. Παρατηρείται ασυμπτωτική τάση του ΔK προς το άπειρο, καθώς η τιμή του ε τείνει στο 0 (ή μια μεγάλη βηματική αύξηση του ΔK όταν το ε μειωθεί κάτω από κάποιο όριο). Η αντίστροφα, παρατηρείται μείωση του ΔK του Ιακωβιανού πίνακα της NR καθώς αυξάνεται ο συντελεστής ε . Αν και η προσθήκη του ιξώδους όρου στην εξίσωση Eikonol γίνεται με στόχο την επιλογή της ορθής ασθενούς λύσης, ταυτόχρονα συμβάλλει στη βελτίωση της κατάστασης του γραμμικοποιημένου συστήματος της Εξ. (7.7) και στην επιτυχία σύγκλισης της NR. Η προσθήκη του ιξώδους όρου γενικά σταθεροποιεί σχήματα κεντρικών διαφορών {[Osher & Fedkiw (2003), σ. 47], [Levy (2002), Κεφ. 3, σ. 6]}.



(α)



(β)

Σχήμα 7.2 (α) Ο ΔK του Ιακωβιανού πίνακα της NR σαν συνάρτηση του πλήθους επαναλήψεων, για διαφορετικές τιμές του συντελεστή ε . Η ίδια αρχική εκτίμηση χρησιμοποιείται σε κάθε ε . Οι ΔK μετά την 4η επανάληψη είναι αντιπροσωπευτικοί κάθε επαναληπτικής διαδικασίας. (β) Ο ΔK (στην 4η

επανάληψη, όπως σημειώνεται στο Σχήμα 7.2α) του Ιακωβιανού πίνακα της NR σαν συνάρτηση του συντελεστή ε . Ο ΔK τείνει στο άπειρο καθώς ο συντελεστής ε τείνει στο 0. Τα αποτελέσματα αφορούν στο πρόβλημα 7.A. Το πλήθος κόμβων του τετραγωνικού πλέγματος που χρησιμοποιείται είναι 1681 και οι συναρτήσεις βάσης είναι γραμμικές.

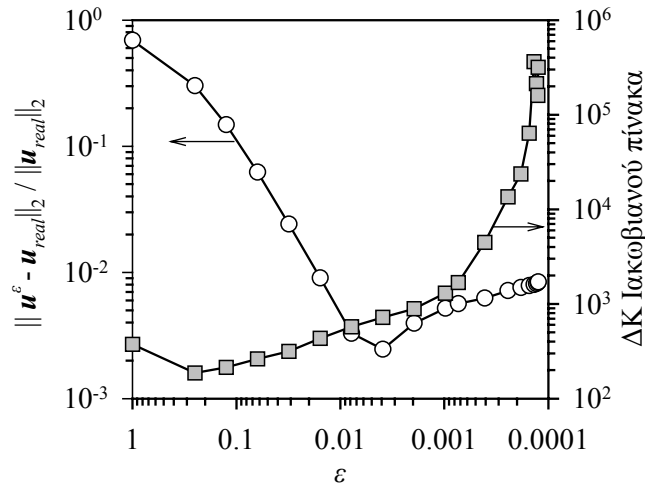
7.2.3.3 Διαδικασία εξάλειψης ιξώδους όρου

Η λύση της Εξ. (7.3) για $\varepsilon=0$ προσεγγίζεται σταδιακά, χρησιμοποιώντας διαδοχικά μικρότερα ε . Η διαδικασία ξεκινά με κάποια τιμή του ε αρκετά μεγάλη, ώστε ο ΔK να είναι σχετικά μικρός και να εξασφαλιστεί η σύγκλιση της NR (π.χ. $\varepsilon=1$). Ως αρχική εκτίμηση της λύσης u^ε για κάποιο ε , χρησιμοποιείται η λύση που προέκυψε από την αμέσως προηγούμενη επιτυχημένη επίλυση με μεγαλύτερο ε . Το βήμα μείωσης του ε μπορεί να είναι είτε σταθερό και πολύ μικρό, είτε προσαρμοζόμενο, δηλαδή αρκετά μεγάλο για να επιταχύνει τη διαδικασία, αλλά και αρκετά μικρό, ώστε η διαφορά λύσεων δύο διαδοχικών προβλημάτων να είναι μικρή και η αρχική εκτίμηση της λύσης να οδηγεί σε σύγκλιση τη NR.

7.2.4 Αξιολόγηση της μεθόδου

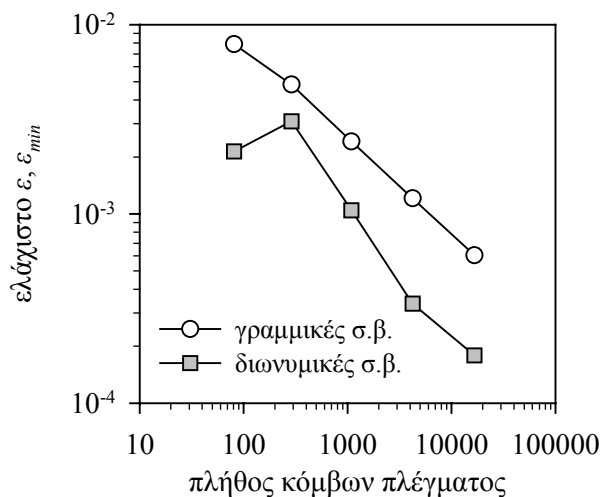
Αρχικά εξετάζεται η επίδραση του συντελεστή ε του ιξώδους όρου στην ακρίβεια της λύσης και έπειτα παρουσιάζεται και σχολιάζεται η συμπεριφορά του σφάλματος (απόκλιση από την πραγματική λύση) με την πύκνωση του πλέγματος. Στη συνέχεια, γίνεται αναφορά στην ποιότητα της λύσης και την εμφάνιση διακυμάνσεων σε αυτή και τέλος σχολιάζεται η ταχύτητα επίλυσης.

Στο Σχήμα 7.3 φαίνεται η απόκλιση της λύσης u^ε του ιξώδους προβλήματος [Εξ. (7.3)] από την πραγματική λύση u_{real} της εξίσωσης Eikonal [Εξ. (7.1) ή Εξ. (7.3) με $\varepsilon=0$], συναρτήσει του συντελεστή ε , ο οποίος μεταβάλλεται από την τιμή 1 μέχρι την ελάχιστη δυνατή τιμή με κατάλληλα προσαρμοζόμενο βήμα. Στο Σχήμα 7.3 φαίνεται και η μεταβολή του ΔK του Ιακωβιανού πίνακα συναρτήσει του συντελεστή ε . Με τη μείωση του ε η u^ε προσεγγίζει την u_{real} , αφού μειώνεται ο όρος διάχυσης $\varepsilon \nabla^2 u^\varepsilon$. Για ε μεγαλύτερα από μια οριακή τιμή, η απόκλιση της λύσης σταθεροποιείται (ελαφρά αυξάνεται). Αυτό συμβαίνει διότι η μείωση του ε , εκτός από τη μείωση του όρου $\varepsilon \nabla^2 u^\varepsilon$, προκαλεί αύξηση του ΔK και άρα [Εξ. (7.12)] του σφάλματος της αριθμητικής λύσης. Για το παράδειγμα του Σχήματος 7.3, η ελάχιστη τιμή του ε για την οποία η NR συγκλίνει είναι περίπου 1.3×10^{-4} .



Σχήμα 7.3 Απόκλιση ($\|u^\epsilon - u_{real}\|_2 / \|u_{real}\|_2$) της λύσης u^ϵ του ιξώδους προβλήματος [Εξ. (7.3)] από την πραγματική λύση u_{real} της εξίσωσης Eikonal [Εξ. (7.1) ή Εξ. (7.3) με $\epsilon=0$], καθώς ο συντελεστής ϵ μειώνεται βηματικά, τείνοντας προς το μηδέν. Ως αρχική εκτίμηση της λύσης u^ϵ για κάποιο ϵ , χρησιμοποιείται η λύση που προέκυψε από την αμέσως προηγούμενη επίλυση με μεγαλύτερο ϵ . Φαίνεται επίσης ο ΔK του Ιακωβιανού πίνακα της NR συναρτήσεως του ϵ . Τα αποτελέσματα αφορούν στο πρόβλημα 7.A, το πλήθος κόμβων του τετραγωνικού πλέγματος που χρησιμοποιείται είναι 1681 και οι συναρτήσεις βάσης είναι γραμμικές.

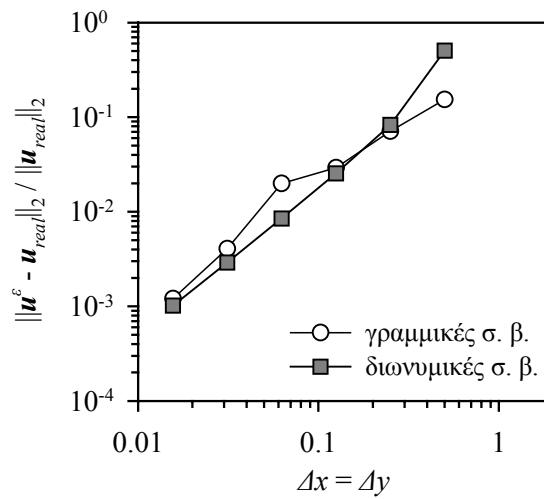
Η ελάχιστη τιμή του ϵ για την οποία η NR συγκλίνει, ϵ_{min} , είναι ανεξάρτητη από τον αλγόριθμο μείωσης του ϵ , εξαρτάται από την πυκνότητα της διαμέρισης και τις συναρτήσεις βάσης που χρησιμοποιούνται. Στο Σχήμα 7.4 φαίνεται το ϵ_{min} , συναρτήσεως του πλήθους των κόμβων του τετραγωνικού πλέγματος διακριτοποίησης και των συναρτήσεων βάσης στο πρόβλημα 7.B.



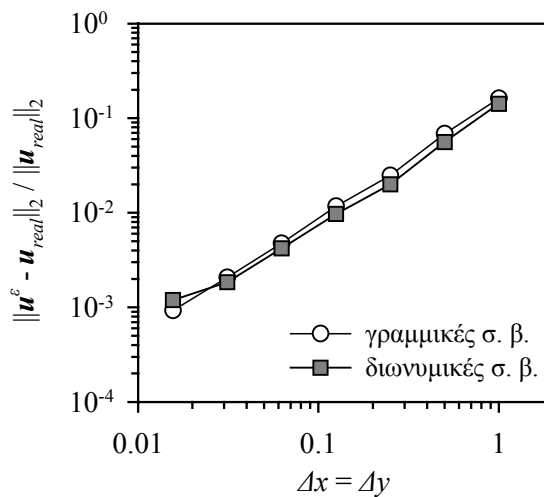
Σχήμα 7.4 Η ελάχιστη τιμή του συντελεστή ϵ που οδηγεί σε σύγκλιση τη NR (ϵ_{min}), συναρτήσεως του πλήθους των κόμβων τετραγωνικού πλέγματος. Οι μεταβολές αφορούν στο πρόβλημα 7.B και εξαρτώνται από τις συναρτήσεις βάσης (σ.β) που χρησιμοποιούνται. Η διαδικασία μείωσης του ϵ σταματά όταν το ϵ γίνει μικρότερο από το 10^{-5} ή το βήμα μείωσής του γίνει μικρότερο από 10^{-6} .

Γενικά, με την αύξηση του πλήθους των κόμβων του πλέγματος, το ε_{min} ελαττώνεται. Για τα προβλήματα και τις διαμερίσεις που εξετάστηκαν και τη μορφή των καμπυλών μεταβολής (Σχήμα 7.4) φαίνεται ότι θα χρειαστεί μεγάλη πυκνότητα πλέγματος ώστε το ε_{min} να προσεγγίσει το μηδέν. Πρακτικά, είναι μάλλον αδύνατο να βρεθεί λύση της Εξ. (7.3) για $\varepsilon=0$. Αυτό έχει σαν αποτέλεσμα οι λύσεις που προκύπτουν από το ιξώδες πρόβλημα να ενσωματώνουν, εκτός από το σφάλμα αποκοπής (§B.3.1) του αριθμητικού σχήματος που χρησιμοποιείται, και ένα ακόμη σφάλμα το οποίο οφείλεται στην προσθήκη του ιξώδους όρου $\varepsilon \nabla^2 u^\varepsilon$.

Στο Σχήμα 7.5 φαίνεται η απόκλιση της λύσης u^ε του ιξώδους προβλήματος [Εξ. (7.3)] με $\varepsilon=\varepsilon_{min}$ από την πραγματική λύση u_{real} της εξίσωσης Eikonal [Εξ. (7.1) ή Εξ. (7.3) με $\varepsilon=0$], συναρτήσει της πυκνότητας διαμέρισης.



(α)



(β)

Σχήμα 7.5 Απόκλιση ($\|u^\varepsilon - u_{real}\|_2 / \|u_{real}\|_2$) της λύσης u^ε του ιξώδους προβλήματος [Εξ. (7.3)] με $\varepsilon = \varepsilon_{min}$ από την πραγματική λύση u_{real} της εξίσωσης Eikonal [Εξ. (7.1) ή Εξ. (7.3) με $\varepsilon=0$], συναρτήσει της πυκνότητας διαμέρισης, χρησιμοποιώντας γραμμικές και διωνυμικές συναρτήσεις βάσης (σ.β). (α) Αποτελέσματα για το πρόβλημα 7.A. Η παρατηρούμενη τάξη ακρίβειας είναι 1.4 για τις

γραμμικές και 1.7 για τις διωνυμικές σ.β. (β) Αποτελέσματα για το πρόβλημα 7.B. Η παρατηρούμενη τάξη ακρίβειας είναι 1.2 για τις γραμμικές και τις διωνυμικές σ.β.

Η θεωρητική τάξη ακρίβειας για τη μέθοδο EIO/Galerkin-ΠΣ/NR είναι $n=2$ (§A.5.2.1), είτε χρησιμοποιούνται γραμμικές, είτε διωνυμικές συναρτήσεις βάσης. Η παρατηρούμενη τάξη ακρίβειας (§B.4) είναι 1.4 (1.2) για τις γραμμικές και 1.7 (1.2) για τις διωνυμικές συναρτήσεις βάσης για το πρόβλημα 7.A (7.B). Η απόκλιση της παρατηρούμενης τάξης ακρίβειας στα προβλήματα 7.A και 7.B από τη θεωρητική οφείλεται κυρίως στη διαφοροποίηση της προς επίλυση εξίσωσης Eikonol με την προσθήκη του ιξώδους όρου. Η απόκλιση ουσιαστικά οφείλεται στο ότι δε συγκρίνεται η αριθμητική και η πραγματική λύση της ίδιας εξίσωσης [του ιξώδους προβλήματος, Εξ. (7.3)], αλλά η αριθμητική λύση του ιξώδους προβλήματος (με τον ελάχιστο δυνατό συντελεστή ε) με την πραγματική λύση της εξίσωσης Eikonol [Εξ. (7.1) ή Εξ. (7.3) με $\varepsilon=0$].

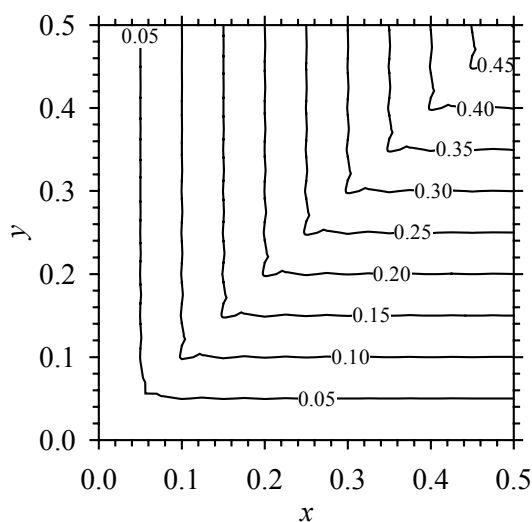
Στο Σχήμα 7.6α φαίνονται ισοϋψείς της λύσης του προβλήματος 7.A σε τμήμα του υπολογιστικού χωρίου, όπως προκύπτει με τη μέθοδο EIO/Galerkin-ΠΣ/NR με διωνυμικές συναρτήσεις βάσης για $\varepsilon=\varepsilon_{min}$ ($\varepsilon_{min}=9.7\times 10^{-4}$ για το παράδειγμα). Η λύση εμφανίζει διακυμάνσεις στη γειτονιά της ασυνέχειας στην κλίση της. Αν η τιμή του ε αυξηθεί, ο ιξώδης όρος $\varepsilon \nabla^2 u^\varepsilon$ – όρος αριθμητικής διάχυσης που αμβλύνει τις γωνίες και επιβάλλει στην λύση να παραμείνει λεία – αυξάνεται και η λύση δεν εμφανίζει διακυμάνσεις. Στο Σχήμα 7.6β φαίνονται οι ισοϋψείς της λύσης με τη μέθοδο EIO/Galerkin-ΠΣ/NR όταν $\varepsilon=0.01$, οι οποίες δεν εμφανίζουν διακυμάνσεις. Επίσης στο πρόβλημα 7.B, η λύση, η οποία είναι λεία (Σχήμα 7.1β), δεν εμφανίζει διακυμάνσεις, όποια κι αν είναι η τιμή του ε . Συνεπώς, είναι μάλλον η ασυνέχεια στην κλίση της λύσης που προκαλεί τις διακυμάνσεις στη γειτονιά της ασυνέχειας.

Σημαντικό στοιχείο σε μια μέθοδο επίλυσης, εκτός από την ακρίβεια των υπολογισμών, είναι και η ταχύτητα επίλυσης. Η προσέγγιση επίλυσης με τη μέθοδο EIO απαιτεί την επίλυση πολλών μη γραμμικών συστημάτων με τη NR (1 για κάθε ε , στη διαδικασία μείωσής του), γεγονός που συνεπάγεται υψηλό υπολογιστικό κόστος, ακόμη κι αν χρησιμοποιείται η μέθοδος μετώπου για την επίλυση του γραμμικού συστήματος σε κάθε επανάληψη.

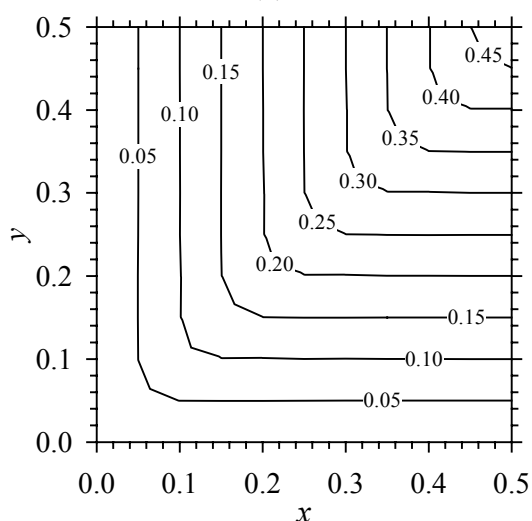
Συνοψίζοντας, η μέθοδος EIO/Galerkin-ΠΣ/NR χαρακτηρίζεται από το ε_{min} , δηλαδή την ελάχιστη τιμή του συντελεστή ε του ιξώδους όρου $\varepsilon \nabla^2 u^\varepsilon$ που επιτρέπει τη σύγκλιση της NR. Περαιτέρω μείωση του ε μέχρι την τιμή 0 δεν στάθηκε δυνατή λόγω της υψηλής τιμής του ΔK του Ιακωβιανού πίνακα που παρεμποδίζει τη σύγκλιση της NR. Η προσθήκη του ιξώδους όρου αυξάνει την απόκλιση της αριθμητικής λύσης του ιξώδους προβλήματος από την πραγματική λύση της εξίσωσης Eikonol. Η μείωση του συντελεστή ε μειώνει αυτήν την απόκλιση, από την άλλη πλευρά όμως προκαλεί αύξηση του ΔK του Ιακωβιανού πίνακα της NR και άρα αύξηση του σφάλματος.

Ορισμένα ακόμη χαρακτηριστικά της μεθόδου EIO/Galerkin-ΠΣ/NR παρουσιάζονται συγκριτικά με αυτά των άλλων δύο προσεγγίσεων, Godunov/NR και Godunov/TB, στις

§7.3.3 και §7.4.8. Ο κώδικας που υλοποιεί την επίλυση της εξίσωσης Eikonal με τη μέθοδο EIO/Galerkin-ΠΣ/NR επαληθεύεται στην §Α.5.2.1.



(α)



(β)

Σχήμα 7.6 (α) Ισοϋψείς της λύση u^ϵ ($\epsilon = \epsilon_{min} = 9.7 \times 10^{-4}$) του προβλήματος 7.A χρησιμοποιώντας τη μέθοδο EIO/Galerkin-ΠΣ/NR (διωνυμικές συναρτήσεις βάσης). (β) Όμοια με (α), με $\epsilon = 0.01$. Το πλήθος κόμβων του τετραγωνικού πλέγματος που χρησιμοποιείται είναι 6561.

7.3 Επίλυση της εξίσωσης Eikonal επαναληπτικά με σχήμα πεπερασμένων διαφορών τύπου Godunov

7.3.1 Το αριθμητικό σχήμα πεπερασμένων διαφορών

Τα σχήματα πεπερασμένων διαφορών που έχουν προταθεί για τη διακριτοποίηση της εξίσωσης Eikonal χρησιμοποιούν τεχνικές από υπερβολικούς νόμους διατήρησης (§5.7). Η χρήση τέτοιων σχημάτων επιτρέπει την επίλυση της εξίσωσης Eikonal χωρίς την προσθήκη

ιξώδους όρου σε αυτή. Αποδεικνύεται [Sethian (1996), σ. 12] ότι η λύση που προκύπτει είναι η ιξώδης λύση της μεθόδου εξάλειψης ιξώδους όρου (§7.2).

Ο Sethian πρότεινε [Sethian (1996), σ. 90] για τη διακριτοποίηση της εξίσωσης Eikonal το ίδιο σχήμα που ο ίδιος με τον Osher είχαν προτείνει [Osher & Sethian (1988)] για την προσέγγιση της βαθμίδας της συνάρτησης ισοϋψών στην εξίσωση ισοϋψών:⁹¹

$$\left[\max\left((u_x^-)_{ij}, 0\right)^2 + \min\left((u_x^+)_{ij}, 0\right)^2 + \max\left((u_y^-)_{ij}, 0\right)^2 + \min\left((u_y^+)_{ij}, 0\right)^2 \right]^{1/2} = f_{ij}, (7.13)$$

προσεγγίζοντας τις μερικές παραγώγους με 1^{ης} τάξης πεπερασμένες διαφορές,

$$(u_x^-)_{ij} = D^{-x}u_{ij} = \frac{u_{i,j} - u_{i-1,j}}{\Delta x}, (7.14)$$

$$(u_x^+)_{ij} = D^{+x}u_{ij} = \frac{u_{i+1,j} - u_{i,j}}{\Delta x}, (7.15)$$

$$(u_y^-)_{ij} = D^{-y}u_{ij} = \frac{u_{i,j} - u_{i,j-1}}{\Delta y}, (7.16)$$

$$(u_y^+)_{ij} = D^{+y}u_{ij} = \frac{u_{i,j+1} - u_{i,j}}{\Delta y}, (7.17)$$

όπου οι δείκτες i, j αφορούν τη θέση του κόμβου στο πλέγμα (Σχήμα 7.7α).

Ο Sethian επίσης χρησιμοποίησε [Sethian (1999b)] ένα σχήμα τύπου Godunov, το οποίο ο ίδιος αποδίδει στους Rouy και Tourin [Rouy & Tourin (1992)],

$$\left[\max\left((u_x^-)_{ij}, -(u_x^+)_{ij}, 0\right)^2 + \max\left((u_y^-)_{ij}, -(u_y^+)_{ij}, 0\right)^2 \right]^{1/2} = f_{ij}, (7.18)$$

προσεγγίζοντας τις μερικές παραγώγους επίσης με 1^{ης} τάξης πεπερασμένες διαφορές [Εξ. (7.14) – (7.17)].

Τα δύο παραπάνω σχήματα είναι 1^{ης} τάξης, διότι οι προσεγγίσεις των μερικών παραγώγων είναι 1^{ης} τάξης. Έχει προταθεί και σχήμα 2^{ης} τάξης [Sethian (1999b), Chopp (2001)], στο οποίο οι μερικές παράγωγοι της Εξ. (7.18) προσεγγίζονται με 2^{ης} τάξης ακρίβειας πεπερασμένες διαφορές, όταν οι απαιτούμενες τιμές της u είναι γνωστές:

⁹¹ Στις σχετικές εργασίες του Sethian, τα αριθμητικά σχήματα [Εξ. (7.12) και (7.17)] χρησιμοποιήθηκαν στο πλαίσιο επίλυσης της εξίσωσης Eikonal με τη μέθοδο ταχυ-βηματισμού (§7.4).

$$(u_x^-)_{ij} = D^{-x}u_{ij} + s^{-x} \frac{\Delta x}{2} D^{-x-x}u_{ij}, \quad (7.19)$$

$$(u_x^-)_{ij} = D^{+x}u_{ij} - s^{+x} \frac{\Delta x}{2} D^{+x+x}u_{ij}, \quad (7.20)$$

$$(u_y^-)_{ij} = D^{-y}u_{ij} + s^{-y} \frac{\Delta y}{2} D^{-y-y}u_{ij}, \quad (7.21)$$

$$(u_y^-)_{ij} = D^{-y}u_{ij} - s^{+y} \frac{\Delta y}{2} D^{+y+y}u_{ij}, \quad (7.22)$$

$$\acute{\omicron}\pi\omicron\upsilon \quad D^{\pm p \pm q}u_{ij} = D^{\pm p}(D^{\pm q}u_{ij}), \quad (7.23)$$

και

$$s^{-x} = \begin{cases} 1, & \text{αν } u_{i-2,j}, u_{i-1,j} \text{ γνωστά και } u_{i-2,j} \leq u_{i-1,j} \\ 0, & \text{αλλιώς} \end{cases}, \quad (7.24)$$

$$s^{+x} = \begin{cases} 1, & \text{αν } u_{i+2,j}, u_{i+1,j} \text{ γνωστά και } u_{i+2,j} \leq u_{i+1,j} \\ 0, & \text{αλλιώς} \end{cases}, \quad (7.25)$$

$$s^{-y} = \begin{cases} 1, & \text{αν } u_{i,j-2}, u_{i,j-1} \text{ γνωστά και } u_{i,j-2} \leq u_{i,j-1} \\ 0, & \text{αλλιώς} \end{cases}, \quad (7.26)$$

$$s^{+y} = \begin{cases} 1, & \text{αν } u_{i,j+2}, u_{i,j+1} \text{ γνωστά και } u_{i,j+2} \leq u_{i,j+1} \\ 0, & \text{αλλιώς} \end{cases}. \quad (7.27)$$

Αν οι παράμετροι $s^{+x}, s^{-x}, s^{+y}, s^{-y}$ είναι μηδενικές, τότε το σχήμα γίνεται 1^{ης} τάξης. Το αν προτεινόμενο σχήμα 2^{ης} τάξης συμπεριφέρεται σαν τέτοιο εξαρτάται [Sethian (1999b)] από το σε πόσα σημεία μεταπίπτει σε 1^{ης} τάξης. Αν αυτά είναι λίγα, τότε πράγματι συμπεριφέρεται σαν 2^{ης} τάξης. Έχουν προταθεί και σχήματα 3^{ης} τάξης [Chopp (2001)] ανάλογα των παραπάνω.

7.3.2 Διαδικασία επίλυσης

Το αριθμητικό σχήμα που χρησιμοποιείται είναι αυτό που περιγράφεται από την Εξ. (7.18) με μερικές παραγώγους 1^{ης} τάξης [Εξ. (7.14) – (7.17)]. Το μη γραμμικό σύστημα

εξισώσεων που προκύπτει λύνεται με τη μέθοδο NR. Η προσέγγιση της λύσης στην $(k+1)$ -επανάληψη προκύπτει από την προσέγγιση στην k -επανάληψη, με επίλυση του συστήματος

$$\mathbf{J}^{(k)} \delta \mathbf{u}^{(k+1)} = -\mathbf{R}^{(k)}, \quad (7.28)$$

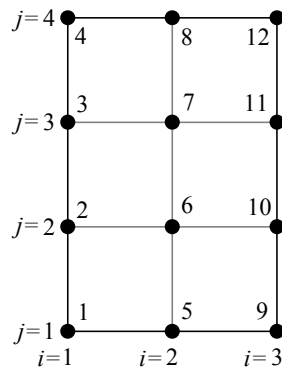
όπου $\mathbf{u}^{(k+1)} = \mathbf{u}^{(k)} + \delta \mathbf{u}^{(k+1)}$. Τα υπόλοιπα R_m σε αυτή την περίπτωση είναι

$$R_m = \left[\max(D^{-x}u_m, -D^{+x}u_m, 0)^2 + \max(D^{-y}u_m, -D^{+y}u_m, 0)^2 \right]^{1/2} - f_m, \quad m = 1, 2, \dots, N. \quad (7.29)$$

N είναι το πλήθος των αγνώστων, το πλήθος των κόμβων του πλέγματος διακριτοποίησης. Τα στοιχεία του Ιακωβιανού πίνακα είναι

$$J_{mn} = \frac{\partial R_m}{\partial u_n} = \frac{1}{\sqrt{\max(D^{-x}u_m, -D^{+x}u_m, 0)^2 + \max(D^{-y}u_m, -D^{+y}u_m, 0)^2}} \times \left\{ \begin{aligned} & \max(D^{-x}u_m, -D^{+x}u_m, 0) \frac{\partial}{\partial u_n} [\max(D^{-x}u_m, -D^{+x}u_m, 0)] + \\ & + \max(D^{-y}u_m, -D^{+y}u_m, 0) \frac{\partial}{\partial u_n} [\max(D^{-y}u_m, -D^{+y}u_m, 0)] \end{aligned} \right\}, \quad m=1, 2, \dots, N, \quad n=1, 2, \dots, N, \quad (7.30)$$

Οι δείκτες m, n αντιστοιχούν στον αύξοντα αριθμό κομβικού αγνώστου του πλέγματος. Για την αρίθμηση του Σχήματος 7.7α είναι $m(i, j) = n(i, j) = (i-1)n_y + j$ (n_y το πλήθος των κόμβων του πλέγματος κατά την y -διεύθυνση). Τονίζεται ότι οι δείκτες i, j αφορούν τη θέση του κόμβου στο πλέγμα, ενώ οι m, n τις γραμμές και στήλες του Ιακωβιανού πίνακα. Οι Εξ. (7.29) και (7.30) τροποποιούνται κατάλληλα με την επιβολή των συνοριακών συνθηκών.



(α)

$$\begin{bmatrix} x & x & 0 & 0 & x & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ x & x & x & 0 & 0 & x & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & x & x & x & 0 & 0 & x & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & x & x & x & 0 & 0 & x & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ x & 0 & 0 & x & x & x & 0 & 0 & x & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & x & 0 & 0 & x & x & x & 0 & 0 & x & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & x & 0 & 0 & x & x & x & 0 & 0 & x & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & x & 0 & 0 & x & x & x & 0 & 0 & 0 & x \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & x & 0 & 0 & x & x & x & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & x & 0 & 0 & x & x & x & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & x & 0 & 0 & x & x & x \end{bmatrix}$$

(β)

Σχήμα 7.7 (α) Ενδεικτικό πλέγμα διαμέρισης με 3 κόμβους κατά τον x -άξονα, 4 κόμβους κατά τον y -άξονα και 12 κόμβους συνολικά. Η αρίθμηση των κόμβων είναι στήλη-στήλη και από κάτω προς τα

πάνω. Για παράδειγμα στη θέση $i=2, j=2$ βρίσκεται ο κόμβος με αριθμό $(i-1)n_y + j = (2-1)4 + 2 = 6$ (n_y το πλήθος των κόμβων του πλέγματος κατά την y -διεύθυνση). (β) Μορφή του Ιακωβιανού πίνακα του συστήματος της Εξ. (7.28) για το πλέγμα του Σχήματος 7.7α. Ο Ιακωβιανός πίνακας είναι πίνακας-ταινία, τριδιαγώνιος με 2 ακόμη στοιχεία σε κάθε γραμμή μη μηδενικά.

Ο Ιακωβιανός πίνακας J της Εξ. (7.28) είναι αραιός. Είναι πίνακας-ταινία, τριδιαγώνιος με 2 ακόμη μη μηδενικά στοιχεία σε κάθε γραμμή. Στη γραμμή m τα 2 επιπλέον μη μηδενικά στοιχεία βρίσκονται στις στήλες $m-n_y$ και $m+n_y$. Στο Σχήμα 7.7β σημειώνονται τα μη μηδενικά στοιχεία για τον Ιακωβιανό πίνακα που αντιστοιχεί στο πλέγμα του Σχήματος 7.7α. Λόγω της μορφής του πίνακα, και για τη μείωση του χώρου αποθήκευσης και του πλήθους των πράξεων, αποθηκεύονται μόνο τα μη μηδενικά στοιχεία του. Μια ευρέως χρησιμοποιούμενη τεχνική συμπαγούς αποθήκευσης τυχαίου αραιού πίνακα, η αραιή αποθήκευση μέσω γραμμών {row-indexed sparse storage mode, [Press et al. (1997), σ. 78]}, σαρώνει τον αραιό πίνακα γραμμή-γραμμή, και χρησιμοποιεί δύο μονοδιάστατους πίνακες: στον πρώτο αποθηκεύει τα μη μηδενικά στοιχεία, και στο δεύτερο ακέραιες μεταβλητές που δίνουν τη θέση κάθε στοιχείου του πρώτου μονοδιάστατου πίνακα στον αρχικό αραιό πίνακα. Απαιτεί την αποθήκευση μόνο $2p$ περίπου στοιχείων, όπου p είναι το πλήθος των μη μηδενικών στοιχείων του αραιού πίνακα. Αν N είναι η διάσταση του Ιακωβιανού πίνακα, τα μη μηδενικά στοιχεία του είναι περίπου $5N$. Συνεπώς, αντί να αποθηκευτούν N^2 στοιχεία, με την παραπάνω τεχνική συμπαγούς αποθήκευσης αποθηκεύονται μόνο $10N$ στοιχεία. Χρησιμοποιείται μία ακόμη τεχνική συμπαγούς αποθήκευσης, η οποία εκμεταλλεύεται το ότι η μορφή του αραιού πίνακα J είναι γνωστή. Με αυτή την τεχνική, μόνο οι 5 διαγώνιοι που περιέχουν μη μηδενικά στοιχεία (Σχήμα 7.7β) αποθηκεύονται σε πίνακα $N \times 5$.

Σημειώνεται ότι και οι δύο τεχνικές αποθήκευσης που περιγράφηκαν στην προηγούμενη παράγραφο χρησιμοποιούνται για την άμεση, εξαρχής κατασκευή, του Ιακωβιανού πίνακα σε συμπαγή μορφή. Κι αυτό γιατί πίνακες με μεγάλη διάσταση είναι δυνατό να μην χωρούν στη κύρια μνήμη (RAM) του συστήματος που χρησιμοποιείται. Τότε επιστρατεύεται για την αποθήκευσή τους χώρος στο σκληρό δίσκο, γεγονός που οδηγεί σε εντυπωσιακή επιβράδυνση στη διαχείριση των στοιχείων του πίνακα. Αναφέρεται ενδεικτικά ότι για την περίπτωση ενός πλέγματος 100×100 κόμβων, οι άγνωστοι είναι 10^4 και το πλήθος των στοιχείων του Ιακωβιανού πίνακα 10^8 . Για την αποθήκευση όλων των στοιχείων σε διπλή ακρίβεια (*double precision*) θα χρειαστούν περίπου 760 Mbytes ($\approx 10^8 \times 8 / 1024^2$). Αν όμως ο πίνακας αποθηκευτεί συμπαγώς, τότε χρειάζονται μόνο 0.760 Mbytes ($\approx 10 \times 10^4 \times 8 / 1024^2$).

Η επίλυση του γραμμικού συστήματος της Εξ. (7.28) σε κάθε επανάληψη της NR γίνεται⁹¹ με την επαναληπτική μέθοδο διαδοχικής υπερχαλάρωσης (Successive Over Relaxation, SOR), ειδικά προσαρμοσμένη ώστε να διαχειρίζεται τη συμπαγή μορφή του Ιακωβιανού πίνακα. Η προσαρμογή αυτή επιταχύνει την επίλυση του γραμμικού συστήματος

⁹¹ Έχει δοκιμασθεί και η μέθοδος ταυτόχρονης υπερχαλάρωσης για τη μέθοδο Jacobi {Jacobi over relaxation, JOR, [Παπαγεωργίου & Τσίτουρας (2000), σ. 165]}. Στις περισσότερες περιπτώσεις, η παράμετρος χαλάρωσης που χρησιμοποιείται και για τις δύο μεθόδους είναι ίση με 1, με αποτέλεσμα οι μέθοδοι SOR και JOR να ανάγονται σε Gauss-Seidel και Jacobi αντίστοιχα.

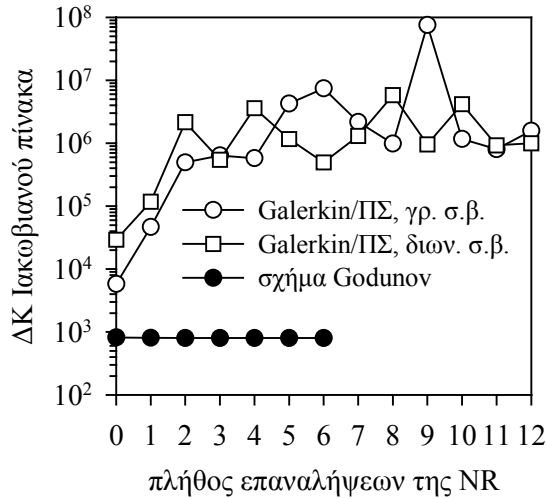
καθώς μειώνει σημαντικά το πλήθος των πράξεων. Η SOR προσαρμόστηκε και στις δύο τεχνικές συμπαγούς αποθήκευσης του Ιακωβιανού. Μάλιστα, η τεχνική συμπαγούς αποθήκευσης τυχαίου αραιού πίνακα είναι αριστοποιημένη για τον πολλαπλασιασμό του συμπαγούς πίνακα με διάνυσμα από δεξιά, τη μόνη πράξη που είναι απαραίτητη στη μέθοδο SOR. Η ταχύτητα κατασκευής του Ιακωβιανού πίνακα σε συμπαγή μορφή και επίλυσης του αντίστοιχου γραμμικού συστήματος ήταν περίπου η ίδια και με τις δύο τεχνικές αποθήκευσης.

7.3.3 Αξιολόγηση – Σύγκριση με τη μέθοδο εξάλειψης ιξώδους όρου

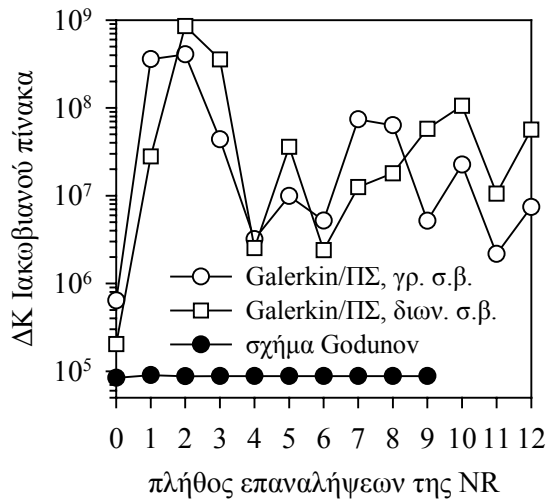
Η αξιολόγηση της μεθόδου Godunov/NR γίνεται συγκριτικά με τη μέθοδο EIO/Galerkin-ΠΣ/NR. Συγκρίνονται τόσο το αριθμητικό σχήμα, όσο και η επαναληπτική μέθοδος επίλυσης του αντίστοιχου συστήματος μη γραμμικών εξισώσεων. Τα θέματα που εξετάζονται είναι η σύγκλιση των αντίστοιχων επαναληπτικών μεθόδων και ο ΔΚ των Ιακωβιανών πινάκων, η αρχική εκτίμηση της λύσης, η μείωση του σφάλματος με την πυκνωση του πλέγματος, η ποιότητα της λύσης, καθώς και η ταχύτητα επίλυσης.

Το αριθμητικό σχήμα τύπου Godunov οδηγεί σε Ιακωβιανό πίνακα με ΔΚ μικρότερο από αυτόν του σχήματος Galerkin-ΠΣ (όταν $\varepsilon=0$). Στο Σχήμα 7.8 φαίνεται η επίδραση του αριθμητικού σχήματος διακριτοποίησης στο ΔΚ του Ιακωβιανού πίνακα. Ειδικότερα, φαίνεται η μεταβολή του ΔΚ των Ιακωβιανών πινάκων των δύο μεθόδων από επανάληψη σε επανάληψη της NR για τα προβλήματα 7.A και 7.B. Για το πρόβλημα 7.A, ο ΔΚ που προκύπτει από το αριθμητικό σχήμα τύπου Godunov δεν ξεπερνά την τιμή 10^3 , ενώ ο ΔΚ του Ιακωβιανού της NR όταν χρησιμοποιείται το σχήμα Galerkin-ΠΣ (για $\varepsilon=0$) φτάνει μέχρι και 10^7 . Για το λόγο αυτό, η NR συγκλίνει όταν χρησιμοποιείται το σχήμα τύπου Godunov, και δεν συγκλίνει όταν χρησιμοποιείται το σχήμα Galerkin-ΠΣ για $\varepsilon=0$.

Απαραίτητη προϋπόθεση για τη σύγκλιση της επαναληπτικής μεθόδου NR, όταν χρησιμοποιείται το αριθμητικό σχήμα τύπου Godunov, είναι η κατάλληλη αρχική εκτίμηση. Για τυχαία αρχική εκτίμηση, και λόγω της ειδικής μορφής του αριθμητικού σχήματος [Εξ. (7.18)], είναι πιθανό είτε να μηδενίζεται ο παρονομαστής της Εξ. (7.30) που δίνει τα στοιχεία του Ιακωβιανού πίνακα, είτε ο Ιακωβιανός πίνακας να είναι ιδιάζων, είτε διαγώνιο στοιχείο του Ιακωβιανού πίνακα να μηδενίζεται (και στην επαναληπτική μέθοδο επίλυσης του γραμμικού συστήματος να συμβαίνει διαίρεση με το μηδέν). Κατάλληλη αρχική εκτίμηση που υπερβαίνει τις παραπάνω δυσκολίες ήταν, για τις περιπτώσεις που εξετάστηκαν, η λύση αντίστοιχου ιξώδους προβλήματος [Εξ. (7.3)] με τη μέθοδο EIO/Galerkin-ΠΣ/NR και με τιμή του συντελεστή ε , $2 < \varepsilon < 0.1$. Γενικά, η εύρεση κατάλληλης αρχικής εκτίμησης για την επίλυση της εξίσωσης Eikonal με τη μέθοδο Godunov/NR δεν είναι το ίδιο εύκολη με την περίπτωση της μεθόδου EIO/Galerkin-ΠΣ/NR.



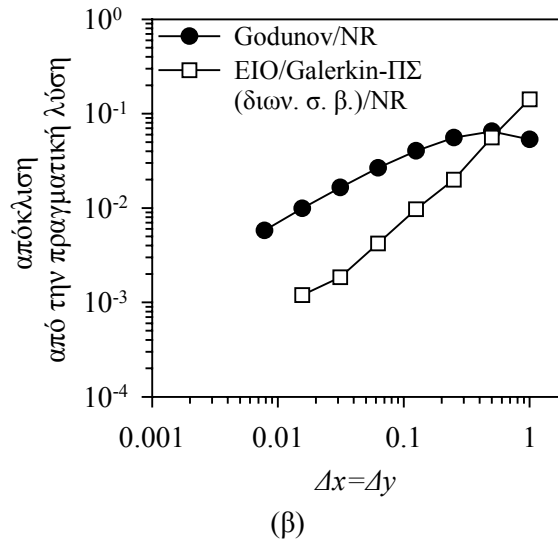
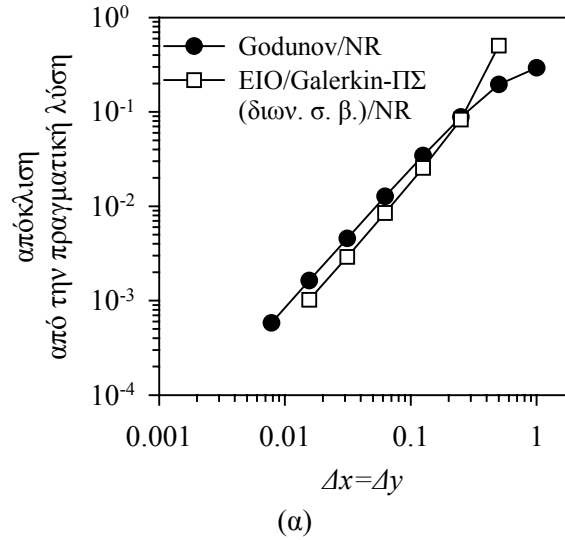
(α)



(β)

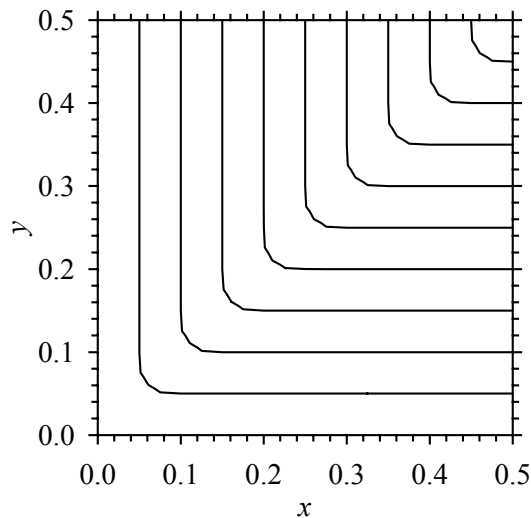
Σχήμα 7.8 Ο ΔΚ του Ιακωβιανού πίνακα της επαναληπτικής μεθόδου NR συναρτήσεως του πλήθους επαναλήψεων όταν χρησιμοποιείται το αριθμητικό σχήμα τύπου Godunov [Εξ. (7.18)] για τη διακριτοποίηση της εξίσωσης Eikonal. Φαίνεται επίσης ο ΔΚ του Ιακωβιανού, όταν το σχήμα Galerkin-ΠΣ χρησιμοποιείται ($\epsilon=0$), τόσο με γραμμικές, όσο και με διωνυμικές συναρτήσεις βάσης (σ.β). Το πλήθος κόμβων του τετραγωνικού πλέγματος που χρησιμοποιείται είναι 1681. Χρησιμοποιείται η ίδια αρχική εκτίμηση της λύσης για κάθε επαναληπτική διαδικασία. (α) Αποτελέσματα για το πρόβλημα 7.A. (β) Αποτελέσματα για το πρόβλημα 7.B.

Στο Σχήμα 7.9 συγκρίνεται η απόκλιση από την πραγματική λύση για τις μεθόδους Godunov/NR και EIO/Galerkin-ΠΣ/NR. Για το πρόβλημα 7.A (Σχήμα 7.9α), η διαφορά δεν είναι σημαντική. Αντίθετα, για το πρόβλημα 7.B υπάρχει διαφορά, με τη μέθοδο EIO/Galerkin-ΠΣ/NR να δίνει γενικά ακριβέστερα αποτελέσματα.

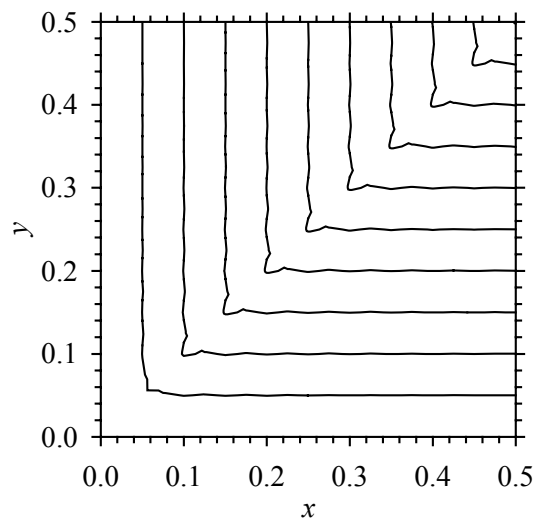


Σχήμα 7.9 Απόκλιση της αριθμητικής λύσης από την πραγματική λύση ($\|\mathbf{u} - \mathbf{u}_{real}\|_2 / \|\mathbf{u}_{real}\|_2$ ή $\|\mathbf{u}^\varepsilon(\varepsilon=\varepsilon_{min}) - \mathbf{u}_{real}\|_2 / \|\mathbf{u}_{real}\|_2$), όταν χρησιμοποιούνται οι μέθοδοι Godunov/NR και EIO/Galerkin-ΠΣ/NR (διδωνυμικές συναρτήσεις βάσης), συναρτήσει της πυκνότητας διαμέρισης. (α) Αποτελέσματα για το πρόβλημα 7.A. (β) Αποτελέσματα για το πρόβλημα 7.B.

Στο Σχήμα 7.10 φαίνονται ισοϋψείς της λύσης του προβλήματος 7.A, όπως προκύπτει με τη μέθοδο Godunov/NR (Σχήμα 7.10α), και οι ίδιες ισοϋψείς με τη μέθοδο EIO/Galerkin-ΠΣ/NR με διωνυμικές συναρτήσεις βάσης για $\varepsilon=\varepsilon_{min}$ (Σχήμα 7.10β) για την ίδια διαμέριση. Η λύση με τη μέθοδο Godunov/NR δεν εμφανίζει τις διακυμάνσεις στη γειτονιά της ασυνέχειας στην κλίση της που προκύπτουν όταν χρησιμοποιείται η μέθοδος EIO/Galerkin-ΠΣ/NR. Σημειώνεται ότι στο πρόβλημα 7.B, η λύση δεν εμφανίζει διακυμάνσεις, όποια μέθοδος κι αν χρησιμοποιείται. Η μέθοδος Godunov/NR φαίνεται ότι αντιμετωπίζει καλύτερα την ασυνέχεια στην κλίση της λύσης από τη μέθοδο EIO/Galerkin-ΠΣ/NR.



(α)



(β)

Σχήμα 7.10 (α) Ισοϋψείς της αριθμητικής λύσης u του προβλήματος 7.A με τη μέθοδο Godunov/NR. (β) Οι ίδιες με (α) ισοϋψείς για την αριθμητική λύση u^ϵ ($\epsilon = \epsilon_{min} = 9.7 \times 10^{-4}$) του προβλήματος 7.A χρησιμοποιώντας τη μέθοδο EIO/Galerkin-ΠΣ/NR (διωνυμικές συναρτήσεις βάσης). Το πλήθος κόμβων του τετραγωνικού πλέγματος που χρησιμοποιείται είναι 6561.

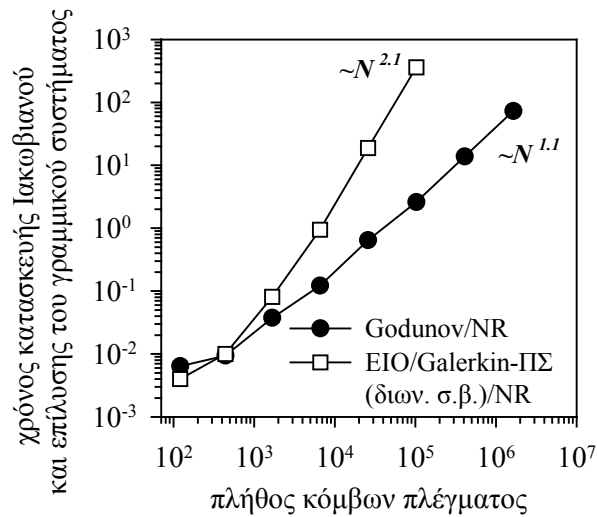
Και οι δύο μέθοδοι περιλαμβάνουν την επίλυση συστήματος μη γραμμικών εξισώσεων με τη NR και χρησιμοποιούν τεχνικές συμπαγούς αποθήκευσης και διαχείρισης των Ιακωβιανών πινάκων. Στο Σχήμα 7.11 ουσιαστικά αξιολογείται η ταχύτητα κατασκευής και αποθήκευσης του Ιακωβιανού πίνακα και η επίλυση του αντίστοιχου γραμμικού συστήματος σε μία επανάληψη της NR. Παρουσιάζεται μέτρηση επίδοσης [Horowitz et al. (1998), σ. 40] των δύο μεθόδων στα προβλήματα 7.A (Σχήμα 7.11α) και 7.B (Σχήμα 7.11β). Υπολογίζεται ο χρόνος κατασκευής του Ιακωβιανού πίνακα και επίλυσης του αντίστοιχου γραμμικού συστήματος, σαν συνάρτηση του πλήθους των αγνώστων και για τις δύο μεθόδους (Godunov/NR και EIO/Galerkin-ΠΣ/NR). Προφανώς, ο χρόνος εξαρτάται από την κωδικοποίηση και τον μεταγλωττιστή, όπως και από τα χαρακτηριστικά του συστήματος που χρησιμοποιείται (π.χ. ταχύτητα επεξεργαστή, λανθάνουσα μνήμη, κύρια μνήμη).

Σημειώνεται ότι δεν υπολογίζεται ο χρόνος στη χειρίστη περίπτωση, ώστε να προσδιοριστεί η πολυπλοκότητα της μεθόδου. Υπολογίζεται ο χρόνος για συγκεκριμένα παραδείγματα, κι αυτό είναι μια ένδειξη για τη διαφορά στην πολυπλοκότητα (ή ταχύτητα) των δύο μεθόδων. Η ένδειξη ισχυροποιείται, αφού όπως φαίνεται από το Σχήμα 7.11, οι μετρήσεις είναι περίπου ίδιες και για τα δύο προβλήματα. Η ταχύτητα είναι συγκριτικά υψηλότερη όταν χρησιμοποιείται η μέθοδος Godunov/NR. Για υψηλά N ($N =$ το πλήθος των κόμβων του πλέγματος) ο χρόνος που απαιτείται για την κατασκευή του Ιακωβιανού πίνακα και την επίλυση του αντίστοιχου γραμμικού συστήματος υπολογίζεται ότι είναι ανάλογος με $N^{2.1}$ για το πρόβλημα 7.A και N^2 για το πρόβλημα 7.B, με τη μέθοδο EIO/Galerkin-ΠΣ/NR. Το αποτέλεσμα για τη μέθοδο EIO/Galerkin-ΠΣ/NR είναι συμβατό με την εκτίμηση N^2 του Irons για τη μέθοδο μετώπου σε συμμετρικό και θετικά ορισμένο πίνακα [Irons (1970)]. Ο αντίστοιχος χρόνος για τη μέθοδο Godunov/NR είναι ανάλογος του $N^{1.1}$ για το πρόβλημα 7.A και N για το πρόβλημα 7.B. Για παράδειγμα, για το πρόβλημα 7.A και με το υπολογιστικό σύστημα που χρησιμοποιήθηκε, όταν οι άγνωστοι είναι 103041, ο χρόνος για την κατασκευή Ιακωβιανού πίνακα και την επίλυση του γραμμικού συστήματος είναι 360 sec με τη μέθοδο EIO/Galerkin-ΠΣ/NR, και 2.6 sec με τη μέθοδο Godunov/NR. Υπενθυμίζεται ότι οι μετρήσεις αφορούν μία επανάληψη.

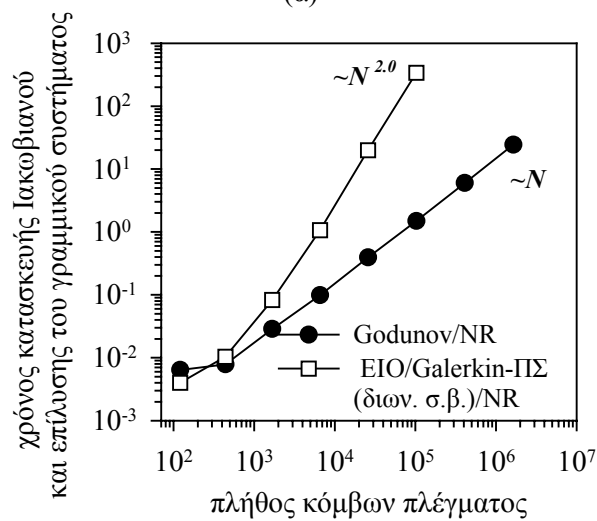
Το υπολογιστικό κόστος της μεθόδου EIO/Galerkin-ΠΣ/NR είναι πολύ μεγαλύτερο από αυτό της μεθόδου Godunov/NR, διότι απαιτεί την επίλυση πολλών συστημάτων μη γραμμικών εξισώσεων, για διαδοχικά μικρότερες τιμές του ε μέχρι $\varepsilon \rightarrow 0$. Με τη μέθοδο Godunov/NR επιλύεται ένα μόνο σύστημα μη γραμμικών εξισώσεων.

Συνοψίζοντας, με τη χρησιμοποίηση της μεθόδου Godunov/NR, η ταχύτητα επίλυσης της εξίσωσης Eikonal αυξάνεται εντυπωσιακά, περίπου N φορές (N το πλήθος των αγνώστων) στα προβλήματα που εξετάστηκαν. Στο πρόβλημα 7.A, όπου υπάρχει ασυνέχεια στην κλίση της λύσης, η ποιότητα της λύσης βελτιώνεται με τη μέθοδο Godunov/NR, αφού δεν υπάρχουν διακυμάνσεις στη γειτονιά της ασυνέχειας και η ακρίβεια είναι περίπου ίδια με αυτή της μεθόδου EIO/Galerkin-ΠΣ/NR. Στο πρόβλημα 7.B, η λύση είναι ακριβέστερη με τη μέθοδο EIO/Galerkin-ΠΣ/NR, ενώ διακυμάνσεις στη λύση δεν υπάρχουν, όποια μέθοδος κι αν χρησιμοποιηθεί. Κατάλληλη αρχική εκτίμηση της λύσης για τη μέθοδο Godunov/NR μπορεί να προκύψει από την επίλυση αντίστοιχου ιξώδους προβλήματος με τη μέθοδο EIO/Galerkin-ΠΣ/NR (για κάποια τιμή του συντελεστή ε , $2 < \varepsilon < 0.1$).

Τέλος, ο κώδικας επίλυσης της εξίσωσης Eikonal με τη μέθοδο Godunov/NR επαληθεύεται στην §A.5.2.2. Ορισμένα ακόμη χαρακτηριστικά της μεθόδου Godunov/NR παρουσιάζονται συγκριτικά με την τρίτη προσέγγιση επίλυσης της εξίσωσης Eikonal στην §7.4.8.



(α)



(β)

Σχήμα 7.11 Ο χρόνος κατασκευής Ιακωβιανού πίνακα και επίλυσης του αντίστοιχου γραμμικού συστήματος σε μια επανάληψη της NR, σαν συνάρτηση του πλήθους των αγνώστων και για τις δύο μεθόδους [EIO/Galerkin-ΠΣ/NR (διδωνυμικές συναρτήσεις βάσης), Godunov/NR]. Χρησιμοποιείται και στις δύο περιπτώσεις η ίδια αρχική εκτίμηση. (α) Αποτελέσματα για το πρόβλημα 7.A. (β) Αποτελέσματα για το πρόβλημα 7.B.

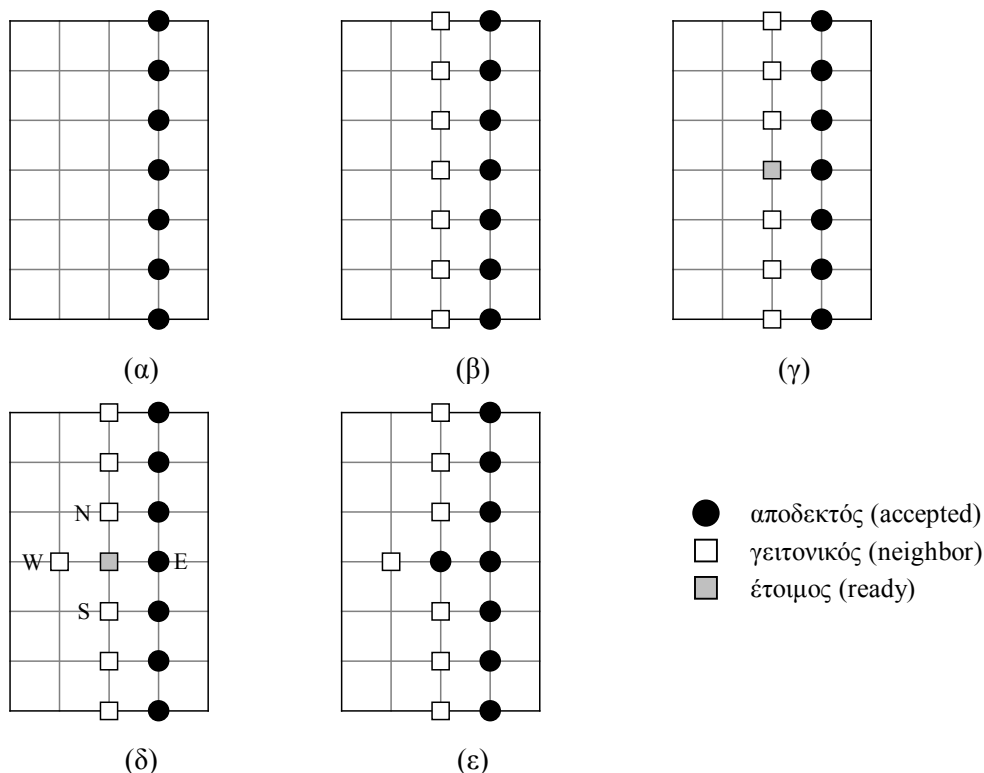
7.4 Επίλυση της εξίσωσης Eikonal με τη μέθοδο ταχυ-βηματισμού

Η μέθοδος ταχυ-βηματισμού (fast marching method) βασίζεται σε σχήματα πεπερασμένων διαφορών όπως αυτά που περιγράφηκαν στην §7.3.1. Το πλεονέκτημά της είναι ότι επιλύει το μη γραμμικό πρόβλημα της εξίσωσης Eikonal χωρίς επαναληπτική διαδικασία. Φαινομενικά, αντιμετωπίζει το πρόβλημα συνοριακών τιμών της εξίσωσης Eikonal σαν πρόβλημα αρχικών τιμών [Sethian (1999b)]: ξεκινά τους υπολογισμούς από ένα σύνορο [την καμπύλη Γ της Εξ. (7.1)] και βηματίζει χρησιμοποιώντας κατάλληλο αριθμητικό σχήμα και ταχείς αλγόριθμους ταξινόμησης.

Στις επόμενες παραγράφους περιγράφεται ο γενικός αλγόριθμος ταχυ-βηματισμού (§7.4.1). Ακολουθεί συζήτηση για το πώς μπορεί η μέθοδος TB να λύσει ένα μη γραμμικό πρόβλημα χωρίς επαναληπτική διαδικασία (§7.4.2). Επίσης, γίνεται μια λεπτομερής περιγραφή των σημαντικών σημείων του αλγόριθμου: υπολογισμός δοκιμαστικής τιμής (§7.4.3), ο ταχύς αλγόριθμος ταξινόμησης που χρησιμοποιείται για την εύρεση ελαχίστου (§7.4.4) και η πολυπλοκότητα της μεθόδου (§7.4.5). Έπειτα, περιγράφεται διαδικασία προσαρμογής συνόρου και προεκβολής των συνθηκών Dirichlet της εξίσωσης Eikonal σε αριθμητικό πλέγμα (§7.4.6), προκειμένου να προσδιοριστεί το σύνολο των σημείων από το οποίο θα ξεκινήσει ο βηματισμός της μεθόδου TB. Στη συνέχεια, αφού παρουσιαστεί ένας από την αρχή έως το τέλος υπολογισμός με τη μέθοδο TB (§7.4.7), η μέθοδος αξιολογείται συγκριτικά (§7.4.8) με τις προηγούμενες (EIO/Galerkin-ΠΣ/NR και Godunov/NR).

7.4.1 Ο αλγόριθμος ταχυ-βηματισμού

Το σημείο εκκίνησης του αλγόριθμου TB είναι το σύνολο Γ της Εξ. (7.1) πάνω στο οποίο ορίζονται οι συνθήκες Dirichlet [συνάρτηση $g(x)$, $x \in \Gamma$ της Εξ. (7.1)]. Στη διακριτοποιημένη μορφή της Εξ. (7.1), το σύνολο Γ αντιστοιχεί σε κόμβους του αριθμητικού πλέγματος, οι οποίοι καλούνται στο εξής κόμβοι Dirichlet, και η συνάρτηση $g(x)$ αντιστοιχεί σε διακριτές τιμές στους κόμβους Dirichlet.



Σχήμα 7.12 Βηματισμός της μεθόδου TB για ευθύγραμμο τμήμα του συνόρου Γ της Εξ. (7.1). (α) Οι κόμβοι Dirichlet χαρακτηρίζονται ως αποδεκτοί (μαύροι κύκλοι). Οι τιμές της άγνωστης συνάρτησης

στους αποδεκτούς κόμβους είναι ίσες με τις αντίστοιχες συνθήκες Dirichlet. (β) Στους γειτονικούς κόμβους (άσπρα τετράγωνα) υπολογίζονται δοκιμαστικές τιμές της άγνωστης συνάρτησης με βάση το αριθμητικό σχήμα. (γ) Εντοπισμός του έτοιμου κόμβου (γκρι τετράγωνο), δηλαδή του κόμβου που φέρει την ελάχιστη δοκιμαστική τιμή. (δ) Ο κόμβος W εισάγεται στο σύνολο των γειτονικών κόμβων και οι δοκιμαστικές τιμές της άγνωστης συνάρτησης στους W, N, S ανανεώνονται με βάση το αριθμητικό σχήμα. (ε) Ο έτοιμος κόμβος εισάγεται στο σύνολο των αποδεκτών.

Η μέθοδος TB χρησιμοποιεί τις τιμές στους κόμβους Dirichlet και βηματίζει υπολογίζοντας την άγνωστη συνάρτηση [λύση της Εξ. (7.1)] σε κατάλληλα επιλεγμένους κόμβους. Κατά τον βηματισμό της μεθόδου, οι κόμβοι του πλέγματος χαρακτηρίζονται ως α) αποδεκτοί (accepted nodes), με την έννοια ότι σε αυτούς έχει ολοκληρωθεί ο υπολογισμός της άγνωστης συνάρτησης και β) γειτονικοί (neighbor nodes) των αποδεκτών. Το σύνολο των γειτονικών κόμβων είναι το μέτωπο επίλυσης: στο δυναμικό σύνολο των γειτονικών κόμβων ξεκινούν και συνεχίζονται οι υπολογισμοί της άγνωστης συνάρτησης και οι ταξινομήσεις. Ο αλγόριθμος TB περιγράφεται γραφικά για τμήμα συνόρου στο Σχήμα 7.12 και περιλαμβάνει τα παρακάτω βήματα:

A) Χαρακτηρισμός των κόμβων Dirichlet ως αποδεκτών. Συμβολίζονται με μαύρους κύκλους στο Σχήμα 7.12. Η τιμή της άγνωστης συνάρτησης στους αποδεκτούς κόμβους είναι ίση με την αντίστοιχη συνθήκη Dirichlet, ενώ σε όλους τους υπόλοιπους κόμβους θεωρείται ∞ .

B) Εντοπισμός των κόμβων που γειτνιάζουν με τους αποδεκτούς και δεν ανήκουν στο σύνολο των αποδεκτών. Οι κόμβοι αυτοί χαρακτηρίζονται ως γειτονικοί. Στο Σχήμα 7.12 συμβολίζονται με λευκά τετράγωνα.

Γ) Υπολογισμός δοκιμαστικής τιμής της u σε κάθε γειτονικό κόμβο με βάση το αριθμητικό σχήμα που χρησιμοποιείται για τη διακριτοποίηση της Εξ. (7.1) [π.χ. το σχήμα της Εξ. (7.18)]. Αν στην εξίσωση που προκύπτει από το αριθμητικό σχήμα μετέχουν κόμβοι που δεν είναι αποδεκτοί, οι αντίστοιχες τιμές της άγνωστης συνάρτησης που τροφοδοτούνται στην εξίσωση είναι ∞ . Για τον υπολογισμό δοκιμαστικής τιμής της άγνωστης συνάρτησης σε κόμβο, ουσιαστικά δεν χρησιμοποιούνται δοκιμαστικές τιμές της σε άλλους γειτονικούς, παρά μόνο οι τιμές στους αποδεκτούς (§7.4.3).

Δ) Εύρεση της ελάχιστης τιμής της άγνωστης συνάρτησης στο σύνολο δοκιμαστικών τιμών των γειτονικών κόμβων. Ο κόμβος που φέρει την ελάχιστη τιμή χαρακτηρίζεται ως έτοιμος (ready node). Στο Σχήμα 7.12, ο έτοιμος κόμβος συμβολίζεται με γκρι τετράγωνο.

E) Εισαγωγή των κόμβων που γειτνιάζουν με τον έτοιμο στο σύνολο των γειτονικών, αν δεν ανήκουν ήδη σε αυτό ή στο σύνολο των αποδεκτών.

ΣΤ) Ανανέωση, με βάση το χρησιμοποιούμενο αριθμητικό σχήμα, των δοκιμαστικών τιμών της άγνωστης συνάρτησης στους κόμβους που γειτνιάζουν με τον έτοιμο και δεν ανήκουν στο σύνολο των αποδεκτών. Αν στην εξίσωση που προκύπτει από το αριθμητικό σχήμα υπάρχει κόμβος που δεν είναι αποδεκτός ή έτοιμος, η αντίστοιχη τιμή που τροφοδοτείται στην εξίσωση είναι ∞ . Και σε αυτή την περίπτωση, για την ανανέωση των δοκιμαστικών τιμών της άγνωστης συνάρτησης δεν χρησιμοποιούνται δοκιμαστικές τιμές της, παρά μόνο οι τιμές στους αποδεκτούς και στον έτοιμο κόμβο.

Ζ) Εισαγωγή του έτοιμου κόμβου στο σύνολο των αποδεκτών.

Τα βήματα (Δ) έως και (Ζ) της παραπάνω διαδικασίας επαναλαμβάνονται όσο το σύνολο των γειτονικών κόμβων δεν είναι κενό.

7.4.2 Γιατί η μέθοδος ταχυ-βηματισμού μπορεί να χρησιμοποιηθεί στην επίλυση της εξίσωσης Eikonal

Η εξίσωση Eikonal [Εξ. (7.1)] είναι ένα μη γραμμικό υπερβολικό (είναι εξίσωση Hamilton Jacobi, §5.6) πρόβλημα συνοριακών τιμών. Όπως κάθε υπερβολικό πρόβλημα, μπορεί να επιλυθεί πάνω στις προβολές των χαρακτηριστικών. Σε αυτό ακριβώς βασίζεται η ιδέα για άμεσο τρόπο επίλυσης. Ο άμεσος τρόπος επίλυσης «χτίζει» τη λύση πάνω στις προβολές των χαρακτηριστικών [όπως η μέθοδος των χαρακτηριστικών δίνει τη λύση πάνω στις προβολές των χαρακτηριστικών (§5.9)].

Η εξίσωση Eikonal [Εξ. (7.1)] ορίζει το μέτρο του διανύσματος μέγιστης αύξησης της λύσης. Οι προβολές των χαρακτηριστικών είναι εφαπτόμενες στο διάνυσμα μέγιστης αύξησης. Επομένως, η εξίσωση Eikonal δίνει το μέτρο της αύξησης (που είναι η μέγιστη) πάνω στις προβολές των χαρακτηριστικών. Το πρώτο ζητούμενο του άμεσου τρόπου επίλυσης είναι να «βηματίσει» πάνω στις προβολές των χαρακτηριστικών, οι οποίες καθορίζονται από τη μέγιστη αύξηση της λύσης. Τα αριθμητικά σχήματα διακριτοποίησης της εξίσωσης Eikonal που περιγράφηκαν στην §7.3.1 είναι ειδικά σχεδιασμένα για να ικανοποιήσουν αυτό το ζητούμενο.

Επειδή η τιμή της λύσης αυξάνεται πάνω στις προβολές των χαρακτηριστικών, η τιμή της λύσης σε ένα τυχαίο σημείο (το οποίο προφανώς ανήκει σε κάποια προβολή χαρακτηριστικής) θα εξαρτάται μόνο από μικρότερες τιμές της λύσης. Το δεύτερο ζητούμενο του άμεσου τρόπου επίλυσης είναι να «χτίζει» τη λύση, ξεκινώντας από τις συνοριακές συνθήκες, από μικρότερες προς μεγαλύτερες τιμές.

Η μέθοδος TB χρησιμοποιεί αριθμητικό σχήμα διακριτοποίησης από την §7.3.1 και επομένως ικανοποιεί το πρώτο ζητούμενο του αλγορίθμου άμεσης επίλυσης. Επίσης, υπολογίζει τη λύση από μικρότερες προς μεγαλύτερες τιμές. Αυτό εκπληρώνει η εισαγωγή του κόμβου με την ελάχιστη δοκιμαστική τιμή (έτοιμου κόμβου) στο σύνολο των αποδεκτών σε κάθε βήμα του αλγορίθμου. Οι τιμές των έτοιμων κόμβων συνθέτουν τη λύση της

εξίσωσης Eikonol με τη μέθοδο TB. Συνεπώς, αν οι τιμές στους έτοιμους κόμβους σε κάθε βηματισμό είναι σε αύξουσα τάξη μεγέθους, τότε η μέθοδος TB εκπληρώνει την απαίτηση για υπολογισμούς από μικρότερες προς μεγαλύτερες τιμές. Το μόνο που θα μπορούσε να διαταράξει την αύξουσα σειρά διάταξης τιμών στους έτοιμους κόμβους είναι η ανανέωση των τιμών γύρω από τον εκάστοτε έτοιμο κόμβο. Θα δειχθεί στην §7.4.3 ότι η ανανέωση των δοκιμαστικών τιμών γύρω από τον έτοιμο κόμβο δεν είναι δυνατό να οδηγήσει σε τιμή μικρότερη από αυτήν του έτοιμου.

7.4.3 Υπολογισμός δοκιμαστικής τιμής

Για τον υπολογισμό της δοκιμαστικής τιμής $u_{i,j}$, χρησιμοποιείται το αριθμητικό σχήμα της Εξ. (7.18) με μερικές παραγώγους 1ης τάξης [Εξ. (7.14) – (7.17)]:

$$\max\left(\frac{u_{i,j} - u_{i-1,j}}{\Delta x}, -\frac{u_{i+1,j} - u_{i,j}}{\Delta x}, 0\right)^2 + \max\left(\frac{u_{i,j} - u_{i,j-1}}{\Delta y}, -\frac{u_{i,j+1} - u_{i,j}}{\Delta y}, 0\right)^2 = f_{ij}^2. \quad (7.31)$$

Έστω ότι ο κόμβος $(i-1,j)$ είναι ο έτοιμος, ο κόμβος $(i,j+1)$ ανήκει στο σύνολο των αποδεκτών, και οι κόμβοι $(i+1,j)$ και $(i,j-1)$ ανήκουν το σύνολο των γειτονικών. Εφόσον οι τιμές σε όλους τους κόμβους εκτός των αποδεκτών και του έτοιμου θεωρείται ότι είναι ∞ , η Εξ. (7.31) γίνεται:

$$\max\left(\frac{u_{i,j} - u_{i-1,j}}{\Delta x}, 0\right)^2 + \max\left(-\frac{u_{i,j+1} - u_{i,j}}{\Delta y}, 0\right)^2 = f_{ij}^2 \quad (7.32)$$

Η τιμή $u_{i,j}$ είναι ο άγνωστος της Εξ. (7.32), συνεπώς πριν τον υπολογισμό του δεν είναι δυνατό να υπολογιστούν οι συναρτήσεις \max της Εξ. (7.32). Έστω ότι οι τιμές $u_{i-1,j}$ και $u_{i,j+1}$ είναι μικρότερες από την $u_{i,j}$ (η παραδοχή θα ελεγχθεί μετά τη λύση). Συνεπώς η Εξ. (7.32) γίνεται:

$$\left(\frac{u_{i,j} - u_{i-1,j}}{\Delta x}\right)^2 + \left(-\frac{u_{i,j+1} - u_{i,j}}{\Delta y}\right)^2 - f_{ij}^2 = 0 \quad (7.33)$$

Λύνοντας την παραπάνω εξίσωση προκύπτουν δύο λύσεις. Ο Sethian [Sethian (1996b)], οι Helmsen et al. [Helmsen et al. (1996)] και ο Chopp [Chopp (2001)] αναφέρουν ότι επιλέγεται η μεγαλύτερη των δύο λύσεων χωρίς να εξηγούν γιατί. Στη συνέχεια περιγράφεται γιατί επιλέγεται η μεγαλύτερη λύση του τριωνύμου της Εξ. (7.33) και κυρίως πως εξασφαλίζεται ότι το τριώνυμο της Εξ. (7.33) έχει λύσεις.

Έστω ότι ο κόμβος B στο Σχήμα 7.13 ανήκει στο σύνολο των αποδεκτών και οι A,E,C,D ανήκουν στο σύνολο των γειτονικών. Έστω ότι ο A είναι ο κόμβος με την ελάχιστη δοκιμαστική τιμή, δηλαδή ο έτοιμος κόμβος. Η εξίσωση υπολογισμού της δοκιμαστικής τιμής στον κόμβο E, με βάση την Εξ. (7.33) είναι:

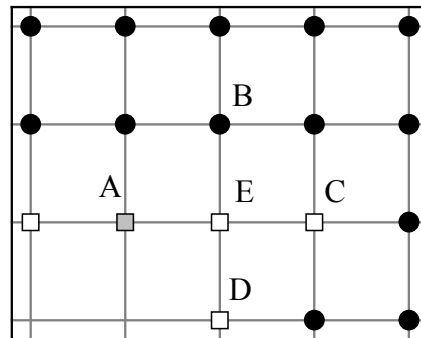
$$\left(\frac{u_E - u_A}{\Delta x}\right)^2 + \left(\frac{u_E - u_B}{\Delta y}\right)^2 - f_E^2 = 0. \quad (7.34)$$

Για την κατασκευή του τριωνύμου έχει θεωρηθεί ότι

$$u_E \geq u_A \text{ και } u_E \geq u_B. \quad (7.35)$$

Επίσης, επειδή ο κόμβος A είναι ο έτοιμος και ο B αποδεκτός, ισχύει

$$u_A \geq u_B. \quad (7.36)$$



Σχήμα 7.13 Τμήμα πλέγματος. Ο κόμβος B ανήκει στο σύνολο των αποδεκτών (μαύροι κύκλοι) και οι A, C, D, E στο σύνολο των γειτονικών (λευκά τετράγωνα), με τον A να φέρει την ελάχιστη τιμή (έτοιμος κόμβος, γκρι τετράγωνο).

Το πρόβλημα υπολογισμού δοκιμαστικής τιμής στον κόμβο E (γεωμετρικά ισοδυναμεί με την) ανάγεται στην εύρεση των σημείων τομής της έλλειψης

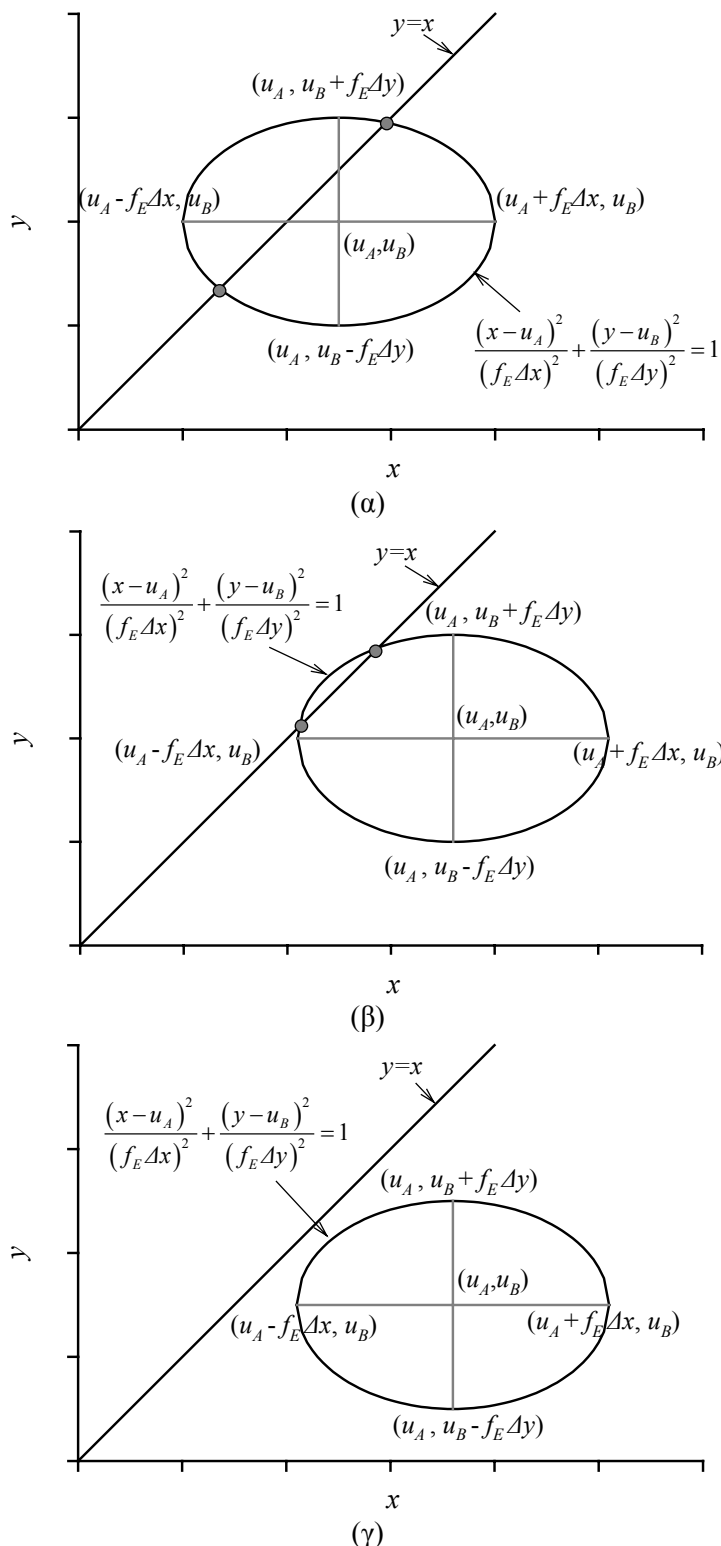
$$\frac{(x - u_A)^2}{(f_E \Delta x)^2} + \frac{(y - u_B)^2}{(f_E \Delta y)^2} = 1, \quad (7.37)$$

με την ευθεία

$$y=x. \quad (7.38)$$

Διακρίνονται τρεις περιπτώσεις: α) Υπάρχουν δύο σημεία τομής της ευθείας με την έλλειψη, και το ένα από τα αυτά βρίσκεται στο πρώτο τεταρτημόριο της έλλειψης (Σχήμα

7.14α). β) Υπάρχουν δύο σημεία τομής της ευθείας με την έλλειψη, χωρίς κάποιο από αυτά να βρίσκεται στο πρώτο τεταρτημόριο της έλλειψης (Σχήμα 7.14β). Οριακά σε αυτή την περίπτωση ανήκει και αυτή στην οποία η ευθεία εφάπτεται στην έλλειψη. γ) Δεν υπάρχουν σημεία τομής της ευθείας με την έλλειψη (Σχήμα 7.14γ).



Σχήμα 7.14 Γραφική παράσταση έλλειψης [Εξ. (7.37)] και ευθείας [Εξ. (7.38)]. (α) Δύο σημεία τομής, και το ένα από τα δύο σημεία βρίσκεται στο πρώτο τεταρτημόριο της έλλειψης. (β) Δύο

σημεία τομής, χωρίς κάποιο από αυτά να βρίσκεται στο πρώτο τεταρτημόριο της έλλειψης. Οριακά σε αυτή την περίπτωση ανήκει και αυτή στην οποία η ευθεία εφάπτεται στην έλλειψη. (γ) Κανένα σημείο τομής.

Για να είναι η διακρίνουσα του τριωνύμου θετική θα πρέπει να υπάρχουν δύο σημεία τομής ευθείας-έλλειψης [περιπτώσεις (α) και (β), Σχήματα 7.14α και 7.14β] και για να ικανοποιούνται οι ανισώσεις (7.35) για τη ρίζα u_E του τριωνύμου, θα πρέπει να υπάρχει σημείο τομής στο πρώτο τεταρτημόριο της έλλειψης [περίπτωση (α), Σχήμα 7.14α]. Οι απαιτήσεις αυτές ικανοποιούνται ταυτόχρονα όταν η σχέση ευθείας-έλλειψης ανήκει στην περίπτωση (α), δηλαδή όταν η θέση και το σχήμα της έλλειψης που καθορίζονται από τα $u_A, u_B, f_E, \Delta x$ και Δy είναι τέτοια ώστε:

$$u_A + f_E \Delta x \geq u_B \quad (7.39)$$

και

$$u_B + f_E \Delta y \geq u_A. \quad (7.40)$$

Το ερώτημα είναι αν στο πρόβλημα υπολογισμού της δοκιμαστικής τιμής u_E [Εξ. (7.34)], ισχύουν οι ανισώσεις (7.39) και (7.40).

Η (7.39) συνεπάγεται ότι

$$u_A \geq u_B - f_E \Delta x \text{ που ισχύει, διότι } u_A \geq u_B \text{ [ανίσωση (7.35)].}$$

Το άθροισμα $u_{E,OLD} = u_B + f_E \Delta y$ στο πρώτο μέλος της ανίσωσης (7.40) είναι η δοκιμαστική τιμή του γειτονικού κόμβου Ε πριν την ανανέωση μέσω της Εξ. (7.34). Από το Σχήμα 7.13 φαίνεται ότι για τον υπολογισμό της $u_{E,OLD}$, μόνο ο αποδεκτός κόμβος Β είχε χρησιμοποιηθεί. Είναι $u_{E,OLD} \geq u_A$, διότι αν $u_{E,OLD} \leq u_A$, ο Ε και όχι ο Α θα ήταν ο έτοιμος κόμβος. Συνεπώς ισχύει και ο περιορισμός της ανίσωσης (7.40).

Λόγω της ισχύος των ανισώσεων (7.39) και (7.40), η διακρίνουσα του τριωνύμου της Εξ. (7.34) είναι πάντα θετική, υπάρχουν πάντα δύο λύσεις – σημεία τομής της ευθείας με την έλλειψη. Το θετικό πρόσημο της διακρίνουσας του τριωνύμου επιβεβαιώνεται επιβάλλοντας τις ανισώσεις (7.39) και (7.40) στην εξίσωση που δίνει τη διακρίνουσα του τριωνύμου της Εξ. (7.34):

$$\Delta = \frac{4}{\Delta x^2 \Delta y^2} \left[f_E^2 (\Delta x^2 + \Delta y^2) - (u_A - u_B)^2 \right]. \quad (7.41)$$

Το δεύτερο που προκύπτει από τις ανισώσεις (7.39) και (7.40), είναι ότι η μία από τις δύο λύσεις του τριωνύμου είναι μεγαλύτερη από u_A και u_B (Σχήμα 7.14α). Η δεύτερη λύση είναι μικρότερη από u_A και u_B (Σχήμα 7.14α) και λόγω των ανισώσεων (7.35) δεν είναι

αποδεκτή. Έτσι αιτιολογείται η επιλογή της μεγαλύτερης των δύο λύσεων του τριωνύμου της Εξ. (7.34). Με την επιλογή της μεγαλύτερης των δύο λύσεων εξασφαλίζεται ότι η ανανέωση των δοκιμαστικών τιμών γύρω από τον έτοιμο κόμβο A δεν είναι δυνατό να οδηγήσει σε τιμή μικρότερη από αυτήν του έτοιμου (§7.4.2).

Τα ίδια συμπεράσματα προκύπτουν και στην περίπτωση όπου $u_B \geq u_A$ αλλά και σε κάθε πιθανή διαμόρφωση κόμβων γύρω από τον κόμβο E .

7.4.4 Εύρεση ελαχίστης δοκιμαστικής τιμής με φίλτρο ελαχίστου

Η μέθοδος TB βασίζεται σε διεργασίες στο σύνολο των γειτονικών κόμβων: εύρεση του γειτονικού κόμβου με την ελάχιστη δοκιμαστική τιμή [βήμα (Δ)], εισαγωγή νέων κόμβων στο σύνολο των γειτονικών [βήμα (E)], ανανέωση δοκιμαστικών τιμών σε γειτονικούς κόμβους [βήμα (ΣT)] και διαγραφή κόμβου από το σύνολο των γειτονικών [βήμα (Z)].

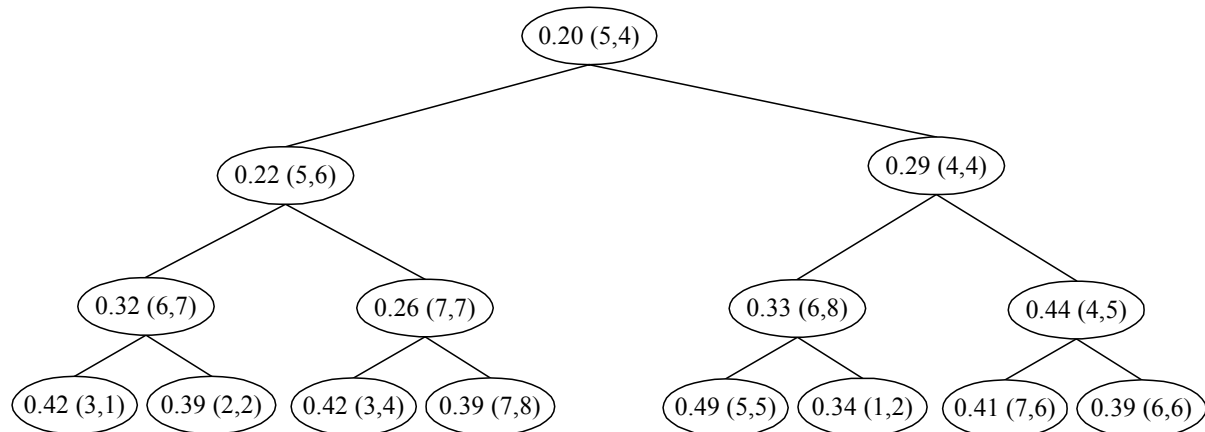
Οι παραπάνω διαδικασίες γίνονται ευκολότερες όταν οι γειτονικοί κόμβοι φιλοξενούνται σε φίλτρο ελαχίστου. Το φίλτρο ελαχίστου είναι υλοποίηση ουράς προτεραιότητας. Ουρά προτεραιότητας {priority queue, [Γεωργακόπουλος (2002), σ. 55]} καλείται μία δομή δεδομένων με την οποία είναι εφικτή η ταχεία εισαγωγή και διαγραφή στοιχείων συλλογής, καθώς και ο άμεσος εντοπισμός του ελαχίστου (μεγίστου) στοιχείου. Η υλοποίηση μιας δομής δεδομένων περιλαμβάνει το σχήμα καταχώρισης των δεδομένων και τους αλγόριθμους χειρισμού τους. Στο φίλτρο ελαχίστου, τα δεδομένα καταχωρούνται σε δυαδικό δένδρο (Παράρτημα Ε) που ικανοποιεί τη *συνθήκη φίλτρου* {*heap condition*, [Sedgewick (1992), σ. 149]} *ελαχίστου*: *κάθε κόμβος του δυαδικού δένδρου περιέχει στοιχείο μικρότερο ή ίσο από τα στοιχεία των θυγατρικών του κόμβων*. Οι αλγόριθμοι χειρισμού δεδομένων του φίλτρου ελαχίστου (π.χ. εισαγωγή, διαγραφή, εύρεση ελαχίστου) οφείλουν να διατηρούν αναλλοίωτη την παραπάνω συνθήκη.

Στην περίπτωση της μεθόδου TB, δεδομένα είναι οι γειτονικοί κόμβοι, ή πιο συγκεκριμένα είναι αντικείμενα με χαρακτηριστικά α) τη θέση γειτονικού κόμβου στο πλέγμα και β) τη δοκιμαστική τιμή της άγνωστης συνάρτησης σε αυτόν, που αποτελεί και το στοιχείο διάταξης του δεδομένου. Στο Σχήμα 7.15 φαίνεται η καταχώριση γειτονικών κόμβων σε φίλτρο ελαχίστου.

Το ελάχιστο στοιχείο βρίσκεται πάντα στην ρίζα (κορυφή) του δένδρου, συνεπώς η διαδικασία για την εύρεση ελαχίστου είναι $O(1)$. Επίσης, η διαδικασία ανανέωσης δοκιμαστικής τιμής της άγνωστης συνάρτησης σε γειτονικό κόμβο, είναι $O(\log_2 k)$, όπου k το πλήθος των γειτονικών κόμβων (των δεδομένων του δένδρου) ή $O(1)$, αν διατηρείται βοηθητικός πίνακας με τη θέση του γειτονικού κόμβου στο δυαδικό δένδρο. Αν για παράδειγμα, απαιτηθεί η ανανέωση της τιμής στον κόμβο (i,j) του πλέγματος, με τη χρησιμοποίηση του βοηθητικού πίνακα εντοπίζεται άμεσα η θέση του κόμβου στο δυαδικό

δένδρο. Οι διαδικασίες εισαγωγής και διαγραφής στοιχείου από το φίλτρο ελαχίστου είναι επίσης $O(\log_2 k)$.

Στο Παράρτημα Ε περιέχονται περισσότερες λεπτομέρειες για το φίλτρο ελαχίστου, όπως ο υπολογισμός της τάξης (πολυπλοκότητας) των αλγορίθμων χειρισμού δεδομένων και ο τρόπος αποθήκευσης των δεδομένων, καθώς και η σύγκριση του φίλτρου ελαχίστου με άλλους αλγορίθμους εύρεσης ελαχίστου. Υπάρχουν ακόμη πληροφορίες για τις βασικές έννοιες του δυαδικού δένδρου.



Σχήμα 7.15 Δυαδικό δένδρο που περιέχει τις δοκιμαστικές τιμές της άγνωστης συνάρτησης και τις θέσεις των γειτονικών κόμβων στο πλέγμα. Για παράδειγμα, ο γειτονικός κόμβος στη ρίζα (κορυφή) του δυαδικού δένδρου έχει δοκιμαστική τιμή $u=0.2$ και η θέση του στο πλέγμα είναι $i=5, j=4$.

7.4.5 Πολυπλοκότητα της μεθόδου ταχυ-βηματισμού

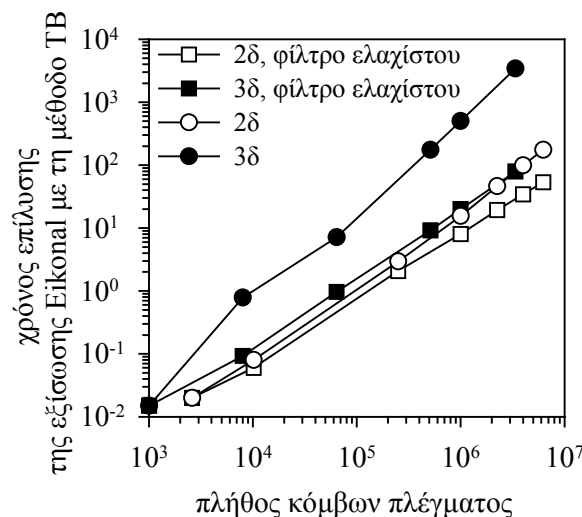
Η πολυπλοκότητα των αλγορίθμων χειρισμού των δεδομένων στο φίλτρο ελαχίστου καθορίζει και την πολυπλοκότητα της μεθόδου TB. Το πιο αργό στάδιο της μεθόδου είναι η εύρεση της ελάχιστης δοκιμαστικής τιμής της άγνωστης συνάρτησης στο σύνολο των γειτονικών [Osher & Fedkiw (2003), σ. 70]. Η μέθοδος TB είναι $O(M \log_2 N)$ [Sethian (1999b)] στη χειρίστη περίπτωση, όπου N είναι το πλήθος των κόμβων του πλέγματος.³⁸ Αν σε κάθε βήμα της μεθόδου TB βρίσκεται το ελάχιστο με μια απλή μέθοδο εντοπισμού ελαχίστου $O(N)$, τότε η μέθοδος TB θα είναι $O(N^2)$. Με τη χρησιμοποίηση του φίλτρου ελαχίστου, η μέθοδος TB επιταχύνεται κατά ένα παράγοντα ανάλογο του $N/\log_2 N$.

Στο Σχήμα 7.16 φαίνεται στην πράξη η επίδραση του αλγόριθμου εύρεσης ελαχίστης δοκιμαστικής τιμής στο χρόνο επίλυσης της εξίσωσης Eikonal με τη μέθοδο TB [Σπετσιέρης (2004)]. Για την εύρεση της ελάχιστης δοκιμαστικής τιμής της άγνωστης συνάρτησης στο σύνολο των γειτονικών κόμβων χρησιμοποιείται α) φίλτρο ελαχίστου και β) μια απλή μέθοδος $O(N)$ που σαρώνει κάθε φορά τις δοκιμαστικές τιμές και εντοπίζει την ελάχιστη με

³⁸ Στις περισσότερες εργασίες η πολυπλοκότητα αναφέρεται ως $M \log N$, η οποία είναι ίδια με την $M \log_2 N$, αφού $M \log N = M \log_2 N / \log_2 10$. Η πολυπλοκότητα της μεθόδου TB καθορίζεται από τις διαδικασίες χειρισμού των δεδομένων του φίλτρου ελαχίστου. Ο όρος $\log_2 N$ εκφράζει (Παράρτημα Ε) το ύψος του πλήρως ισορροπημένου δυαδικού δένδρου στο οποίο αποθηκεύεται το σύνολο των γειτονικών κόμβων.

διαδοχικές συγκρίσεις. Στο Σχήμα 7.16, φαίνεται ο χρόνος επίλυσης συναρτήσει του πλήθους των κόμβων του αριθμητικού πλέγματος για το πρόβλημα 7.A (πρόβλημα σε δύο διαστάσεις, 2δ). Στο ίδιο σχήμα, φαίνονται αντίστοιχα αποτελέσματα για ένα πρόβλημα σε τρεις διαστάσεις (3δ). Και για τα δύο προβλήματα, και ειδικά για το πρόβλημα σε τρεις διαστάσεις, φαίνεται το πλεονέκτημα χρησιμοποίησης του φίλτρου ελαχίστου. Αναφέρεται χαρακτηριστικά ότι για ένα πλέγμα 150x150x150, ο χρόνος επίλυσης είναι περίπου 80s με φίλτρο ελαχίστου και περίπου 1h χωρίς φίλτρο ελαχίστου.

Από το Σχήμα 7.16 μπορεί να επιβεβαιωθεί στην πράξη η πολυπλοκότητα της μεθόδου TB με το φίλτρο ελαχίστου. Ένα σημείο που αξίζει αναφοράς είναι ότι για το ίδιο πλήθος κόμβων, ο χρόνος επίλυσης για το πρόβλημα σε δύο διαστάσεις είναι μικρότερος (2-3 φορές) από αυτόν για το πρόβλημα σε τρεις διαστάσεις. Αυτό οφείλεται στο ότι στην πράξη ο χρόνος επίλυσης είναι ανάλογος του $M \log_2 M$, όπου M είναι το μέσο πλήθος γειτονικών κόμβων κατά τη διαδικασία επίλυσης. Το πλήθος των γειτονικών κόμβων σε προβλήματα σε τρεις διαστάσεις είναι γενικά μεγαλύτερο από τα αντίστοιχα σε δύο.

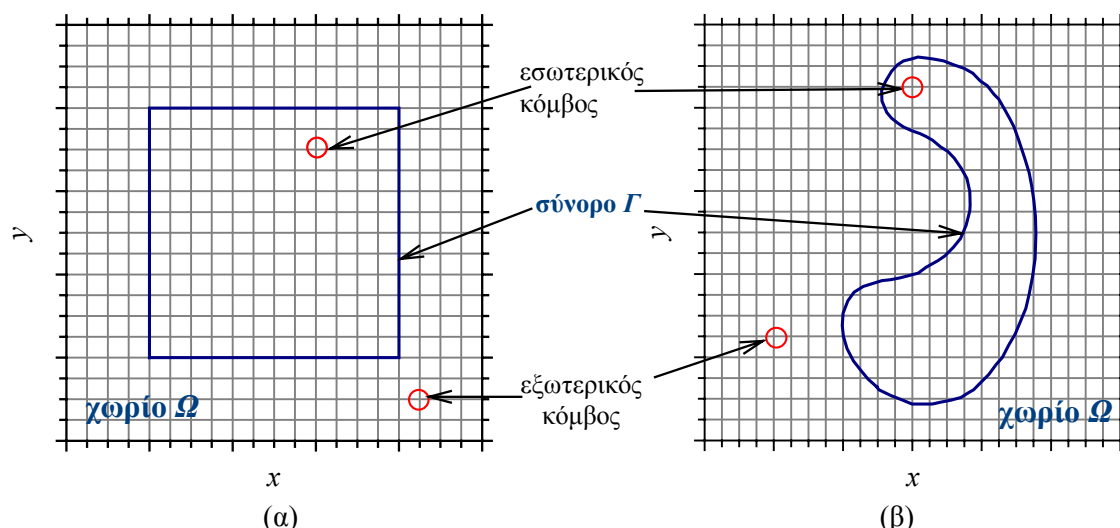


Σχήμα 7.16 Επίδραση του αλγορίθμου εύρεσης της ελάχιστης δοκιμαστικής τιμής στο χρόνο επίλυσης της εξίσωσης Eikonal με τη μέθοδο Godunov/TB [Σπετσιέρης (2004)]. Ο χρόνος επίλυσης συναρτήσει του πλήθους των κόμβων του αριθμητικού πλέγματος χρησιμοποιώντας φίλτρο ελαχίστου και μια απλή μέθοδο $O(N)$ που σαρώνει κάθε φορά τις δοκιμαστικές τιμές και εντοπίζει την ελάχιστη με διαδοχικές συγκρίσεις. Παρουσιάζονται αποτελέσματα για το πρόβλημα 7.A (πρόβλημα σε δύο διαστάσεις, 2δ) με τετραγωνικό αριθμητικό πλέγμα, και για ένα πρόβλημα σε τρεις διαστάσεις (3δ) με κυβικό αριθμητικό πλέγμα.

7.4.6 Προσαρμογή τυχαίου συνόρου σε αριθμητικό πλέγμα και επιβολή των συνθηκών Dirichlet της εξίσωσης Eikonal

Στα προβλήματα 7.A και 7.B το σύνορο Γ πάνω στο οποίο ορίζονται συνθήκες Dirichlet [συνάρτηση $g(\mathbf{x})$ της Εξ. (7.1)] ταυτίζεται με το σύνορο $\partial\Omega$ του υπολογιστικού χωρίου Ω . Στη γενική περίπτωση ωστόσο, το σύνορο Γ είναι οποιαδήποτε κλειστή καμπύλη

στο Ω . Στο Σχήμα 7.17 φαίνονται δύο παραδείγματα. Όταν το σύνορο Γ δεν ταυτίζεται με το σύνορο $\partial\Omega$, χωρίζεται το υπολογιστικό χωρίο σε εξωτερικό και εσωτερικό του συνόρου Γ και τους κόμβους του αριθμητικού πλέγματος σε εξωτερικούς και εσωτερικούς.



Σχήμα 7.17 Το σύνορο Γ πάνω στο οποίο ορίζονται οι συνθήκες Dirichlet της εξίσωσης Eikonal. Το Γ χωρίζει τους κόμβους του πλέγματος σε εσωτερικούς και εξωτερικούς. (α) Τα σημεία τομής του συνόρου Γ με το πλέγμα είναι κόμβοι του πλέγματος. (β) Τα σημεία τομής του συνόρου Γ με το πλέγμα δεν είναι μόνο κόμβοι του πλέγματος.

Και στις δύο περιπτώσεις, για την επίλυση της εξίσωσης Eikonal, χρειάζεται η προσαρμογή του συνόρου Γ στο αριθμητικό πλέγμα. Η διαφορά στα δύο σύνορα του Σχήματος 7.17, είναι ότι αυτό του Σχήματος 7.17α τέμνει το αριθμητικό πλέγμα μόνο σε κόμβους του πλέγματος, ενώ το αντίστοιχο του Σχήματος 7.17β τέμνει το πλέγμα και σε άλλα σημεία. Έτσι, στο σύνορο του Σχήματος 7.17α και μετά την προσαρμογή του στο αριθμητικό πλέγμα, η επιβολή των συνθηκών Dirichlet είναι άμεση μέσω της συνάρτησης $g(\mathbf{x})$ της Εξ. (7.1). Στην περίπτωση του συνόρου του Σχήματος 7.17β, εκτός από την προσαρμογή χρειάζεται και προεκβολή των συνθηκών Dirichlet που υπαγορεύει η συνάρτηση $g(\mathbf{x})$, $\mathbf{x} \in \Gamma$, της Εξ. (7.1), σε κόμβους του πλέγματος.

Το πρόβλημα που μελετάται στην παρούσα παράγραφο, αφορά σε τυχαίο κλειστό σύνορο Γ ,³¹ πάνω στο οποίο ορίζονται οι συνθήκες Dirichlet που περιγράφονται από τη συνάρτηση $g(\mathbf{x})$, $\mathbf{x} \in \Gamma$ και συνίσταται από τα παρακάτω διαδοχικά βήματα: α) Προσαρμογή του Γ σε αριθμητικό πλέγμα (§7.4.6.1). β) Εντοπισμός των κόμβων Dirichlet, δηλαδή των κόμβων στους οποίους θα αποδοθούν οι συνθήκες Dirichlet (§7.4.6.2). γ) Προεκβολή των συνθηκών Dirichlet στους κόμβους του βήματος (β) (§7.4.6.3). Τα βήματα (α) και (β) είναι γενικά και δεν απαιτούν τη μέθοδο TB. Η μέθοδος TB χρησιμοποιείται στο βήμα (γ), και για αυτό το λόγο το συνολικό πρόβλημα μελετάται και επιλύεται στο πλαίσιο της μεθόδου TB.

³¹ που δεν τέμνει το εαυτό του.

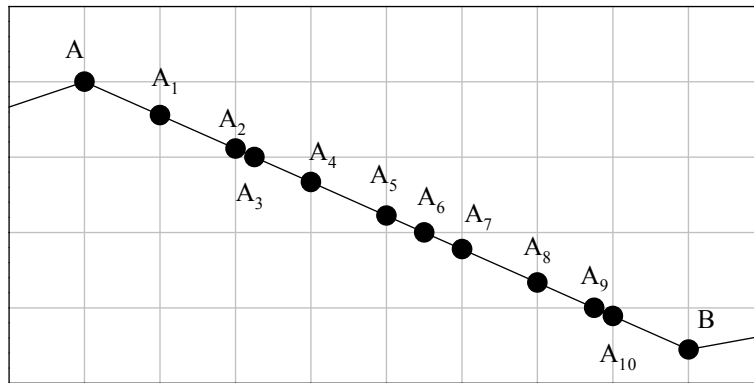
Το πρόβλημα προσαρμογής τυχαίου συνόρου σε αριθμητικό πλέγμα και επιβολής των συνθηκών Dirichlet της εξίσωσης Eikonal αφορά κάθε προσέγγιση επίλυσης της εξίσωσης Eikonal, δηλαδή και τις μεθόδους EIO/Galerkin-ΠΣ/NR και Godunov/NR. Θα μπορούσε να θεωρηθεί και σαν αυτόνομο βήμα των αλγορίθμων επίλυσης τόσο του «στατικού» (Σχήμα 5.10) όσο και του «γενικού» (Σχήμα 5.9) προβλήματος εξέλιξης συνόρου.

7.4.6.1 Αλγόριθμος προσαρμογής συνόρου σε αριθμητικό πλέγμα

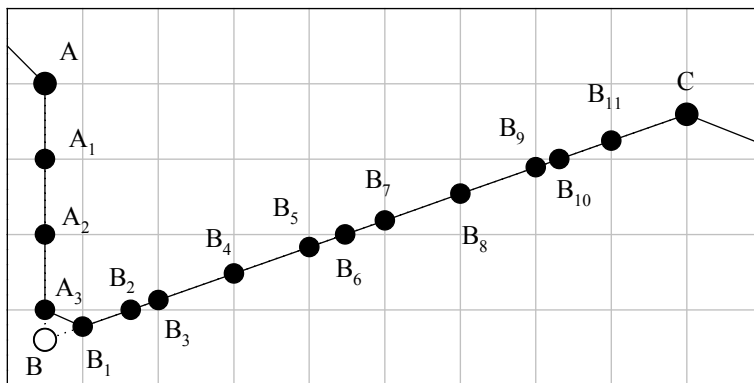
Η προσαρμογή συνόρου σε αριθμητικό καρτεσιανό πλέγμα ανάγεται στην εύρεση των σημείων τομής αυτού με τις πλεγματικές γραμμές. Υπάρχει μια πρόσθετη απαίτηση: τα σημεία τομής του συνόρου με τις πλεγματικές γραμμές θα πρέπει να διαταχθούν με βάση το μήκος τόξου του συνόρου, διότι ενδεχομένως απαιτηθεί ολοκλήρωση πάνω στο σύνορο σε άλλο βήμα της συνολικής διαδικασίας εξέλιξης συνόρου με τη μέθοδο των ισοϋψών (§3).

Η διακριτή μορφή του συνόρου είναι σειρά σημείων που ορίζουν ευθύγραμμο τμήματα. Έστω ευθύγραμμο τμήμα συνόρου AB (Σχήμα 7.18α). Για την προσαρμογή του στο πλέγμα, αρχικά προσδιορίζονται τα σημεία τομής του με τις πλεγματικές γραμμές: σημεία A, A_3, A_6, A_9 για τις x -γραμμές και $A, A_1, A_2, A_4, A_5, A_7, A_8, A_{10}, B$ για τις y -γραμμές στο Σχήμα 7.18α. Στη συνέχεια, υπολογίζονται οι αποστάσεις όλων των σημείων τομής από την αρχή του τμήματος (σημείο A στο Σχήμα 7.18α). Με βάση τις αποστάσεις από την αρχή του τμήματος, τα σημεία τομής ταξινομούνται και προστίθενται με αύξουσα σειρά απόστασης στη λίστα των σημείων ορισμού του προσαρμοσμένου στο πλέγμα συνόρου. Τα τμήματα του συνόρου υποβάλλονται στην παραπάνω διαδικασία διαδοχικά (αρχικά το 1^ο, έπειτα το 2^ο, κοκ). Με τον τρόπο αυτό ικανοποιείται η πρόσθετη απαίτηση της προσαρμογής για τη διάταξη των σημείων τομής.

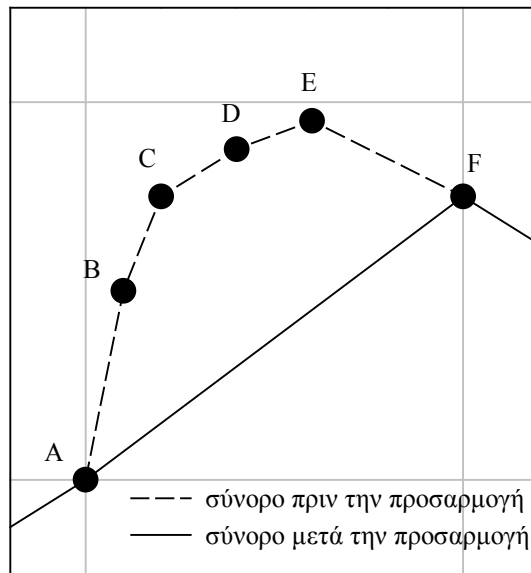
Τα προ της προσαρμογής σημεία του τμήματος συνόρου στο Σχήμα 7.18α είναι τα A και B, ενώ μετά την προσαρμογή τα σημεία είναι τα $A, A_1, A_2, A_3, A_4, A_5, A_6, A_7, A_8, A_9, A_{10}, B$. Το σχήμα του συνόρου δεν αλλάζει με την προσαρμογή. Γενικά, το σχήμα του συνόρου δεν αλλοιώνεται με την προσαρμογή, μόνον αν το αρχικό και τελικό σημείο κάθε ευθύγραμμου τμήματος του συνόρου ανήκει σε πλεγματική γραμμή. Το ευθύγραμμο τμήμα στο Σχήμα 7.18α ικανοποιεί αυτή την απαίτηση. Αναγκαία συνθήκη για τη διατήρηση του σχήματος του συνόρου είναι τα ευθύγραμμο τμήματα που συνθέτουν το σύνορο να έχουν μήκος μεγαλύτερο από τις πλεγματικές σταθερές. Αυτό δεν αποτελεί και ικανή συνθήκη, όπως φαίνεται στο Σχήμα 7.18β. Η αλλοίωση του σχήματος του συνόρου είναι εντονότερη όταν τα ευθύγραμμο τμήματα που το ορίζουν είναι μικρότερα από τις πλεγματικές σταθερές. Στο Σχήμα 7.18γ το τμήμα ABCDEF του συνόρου αντικαθίσταται μετά την προσαρμογή με το ευθύγραμμο τμήμα AF. Γενικά, κατά την προσαρμογή συνόρου σε πλέγμα δεν μπορεί να αποφευχθεί η αλλοίωση του σχήματος του συνόρου, παρά μόνο να περιοριστεί με πυκνή διαμέριση.



(α)



(β)



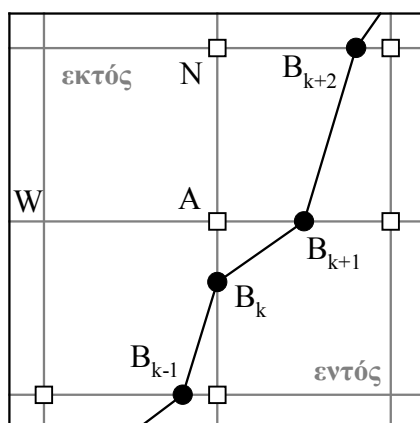
(γ)

Σχήμα 7.18 Προσαρμογή τμήματος συνόρου σε πλέγμα. (α) Το ευθύγραμμο τμήμα AB (που ορίζεται από τα διαδοχικά σημεία A, B του συνόρου) προσαρμόζεται σε πλέγμα. Τα σημεία του συνόρου μετά την προσαρμογή είναι τα $A, A_1, A_2, A_3, A_4, A_5, A_6, A_7, A_8, A_9, A_{10}, B$. Τα σημεία A και B ανήκουν σε πλεγματικές γραμμές και άρα η προσαρμογή διατηρεί το σχήμα του συνόρου. (β) Τα ευθύγραμμα τμήματα συνόρου AB και BC προσαρμόζονται σε πλέγμα. Το B δεν ανήκει σε πλεγματική γραμμή και το σχήμα του συνόρου αλλοιώνεται: το νέο σύνολο δεν περιέχει το σημείο B. (γ) Τα ευθύγραμμα

τμήματα συνόρου AB, BC, CD, DE και EF προσαρμόζονται σε πλέγμα. Οι πλεγματικές σταθερές είναι μεγαλύτερες από τα ευθύγραμμα τμήματα και η προσαρμογή αλλοιώνει το σχήμα του συνόρου.

7.4.6.2 Εντοπισμός των κόμβων του πλέγματος στους οποίους αποδίδονται οι συνθήκες Dirichlet

Ο αλγόριθμος εντοπισμού των κόμβων του πλέγματος στους οποίους αποδίδονται οι συνθήκες Dirichlet (κόμβοι Dirichlet) που ακολουθεί, έχει δύο προϋποθέσεις: α) Το σύνορο Γ , πάνω στο οποίο ορίζονται οι συνθήκες Dirichlet $[g(x), x \in \Gamma]$ της εξίσωσης Eikonal [Εξ. (7.1)], θα πρέπει να είναι προσαρμοσμένο στο αριθμητικό πλέγμα (§7.4.6.1). β) Συμβατικά, θα πρέπει τα σημεία που ορίζουν το σύνορο Γ να είναι με τέτοια σειρά, ώστε αριστερά να βρίσκεται το εξωτερικό του συνόρου. Ο αλγόριθμος εντοπίζει κόμβους Dirichlet στο εξωτερικό και εσωτερικό του συνόρου Γ και συλλέγει πληροφορίες για τη θέση του συνόρου Γ ως προς αυτούς, απαραίτητες για τον υπολογισμό των αντίστοιχων τιμών Dirichlet σε αυτούς (§7.4.6.3).



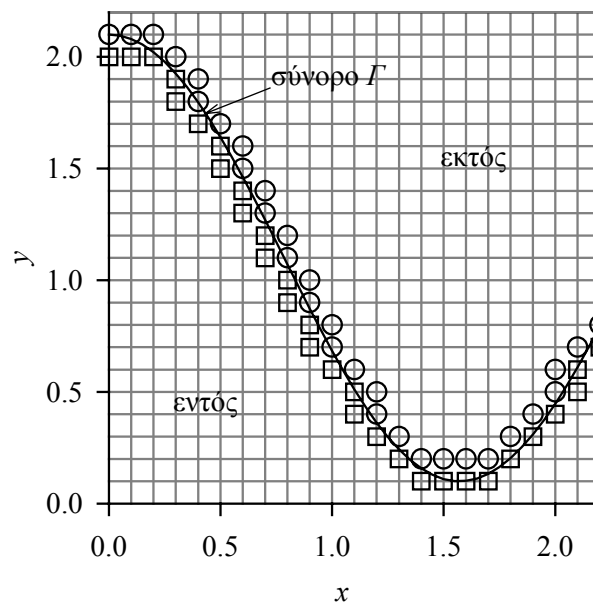
Σχήμα 7.19 Τμήμα συνόρου που ορίζεται από τα σημεία $B_{k-1}, B_k, B_{k+1}, B_{k+2}$ (μαύροι κύκλοι) που δεν είναι κόμβοι του πλέγματος. Οι κόμβοι Dirichlet (άσπρα τετράγωνα) διακρίνονται σε εξωτερικούς και εσωτερικούς.

Το σύνολο των κόμβων Dirichlet αποτελείται από κόμβους του πλέγματος στη γειτονιά του συνόρου Γ , και πιο συγκεκριμένα από κόμβους του πλέγματος που έχουν ένα τουλάχιστο πρώτο γείτονα στην άλλη πλευρά του συνόρου Γ . Πρώτοι γείτονες ενός κόμβου σε πλέγμα ορίζονται ο προηγούμενος και επόμενος του εν λόγω κόμβου στις πλεγματικές γραμμές που ανήκει. Για την εύρεση των κόμβων Dirichlet, εξετάζονται σειριακά όλα τα σημεία ορισμού του συνόρου Γ . Για κάθε σημείο του Γ εντοπίζεται η θέση του στο καρτεσιανό αριθμητικό πλέγμα με παρεμβολή. Με βάση τη θέση του Γ πριν και μετά το εξεταζόμενο σημείο ορισμού του, χαρακτηρίζονται ως κόμβοι Dirichlet ένας ή περισσότεροι κόμβοι του πλέγματος στη γειτονιά του σημείου. Επίσης, αποθηκεύονται τα σημεία του

συνόρου που αυτός ή αυτοί γειτνιάζουν και ο αντίστοιχος προσανατολισμός των σημείων ως προς τους κόμβους Dirichlet. Για παράδειγμα στο Σχήμα 7.19, όταν εξεταζόμενο σημείο του συνόρου είναι το B_k , προκύπτει ότι α) ο κόμβος A είναι κόμβος Dirichlet στο εξωτερικό του συνόρου και β) έχει στα νότιά του το σημείο B_k του συνόρου. Όταν εξεταζόμενο σημείο του συνόρου είναι το B_{k+1} , προκύπτει ότι α) ο κόμβος A είναι κόμβος Dirichlet στο εξωτερικό του συνόρου και β) έχει στα ανατολικά του το σημείο B_{k+1} του συνόρου.

Μετά την εξέταση όλων των σημείων του συνόρου Γ , και προκειμένου να συμπληρωθούν οι πληροφορίες για κάθε κόμβο Dirichlet, ακολουθεί σύνθεση των πληροφοριών για τους κόμβους Dirichlet. Με το πέρας των παραπάνω διαδικασιών α) είναι γνωστοί οι κόμβοι Dirichlet στο εξωτερικό της καμπύλης και β) είναι γνωστά τα σημεία της καμπύλης με τα οποία κάθε εξωτερικός κόμβος Dirichlet γειτνιάζει, καθώς και ο προσανατολισμός τους ως προς αυτόν. Αξιοποιώντας τον προσανατολισμό του συνόρου ως προς κάθε εξωτερικό κόμβο Dirichlet, προκύπτουν οι κόμβοι Dirichlet και από την άλλη πλευρά, στο εσωτερικό του συνόρου.

Στο Σχήμα 7.20 και στον Πίνακα 7.III περιγράφεται παράδειγμα εφαρμογής του αλγόριθμου εντοπισμού των κόμβων Dirichlet για ένα τμήμα συνόρου Γ : Στο Σχήμα 7.20 φαίνονται οι εξωτερικοί και εσωτερικοί κόμβοι Dirichlet και στον Πίνακα 7.III φαίνονται οι πληροφορίες για τον προσανατολισμό του συνόρου Γ ως προς κάθε εξωτερικό κόμβο Dirichlet.



Σχήμα 7.20 Εξωτερικοί (κύκλοι) και εσωτερικοί (τετράγωνα) κόμβοι Dirichlet για τμήμα συνόρου Γ . Πληροφορίες για τους εξωτερικούς κόμβους υπάρχουν στον Πίνακα 7.I.

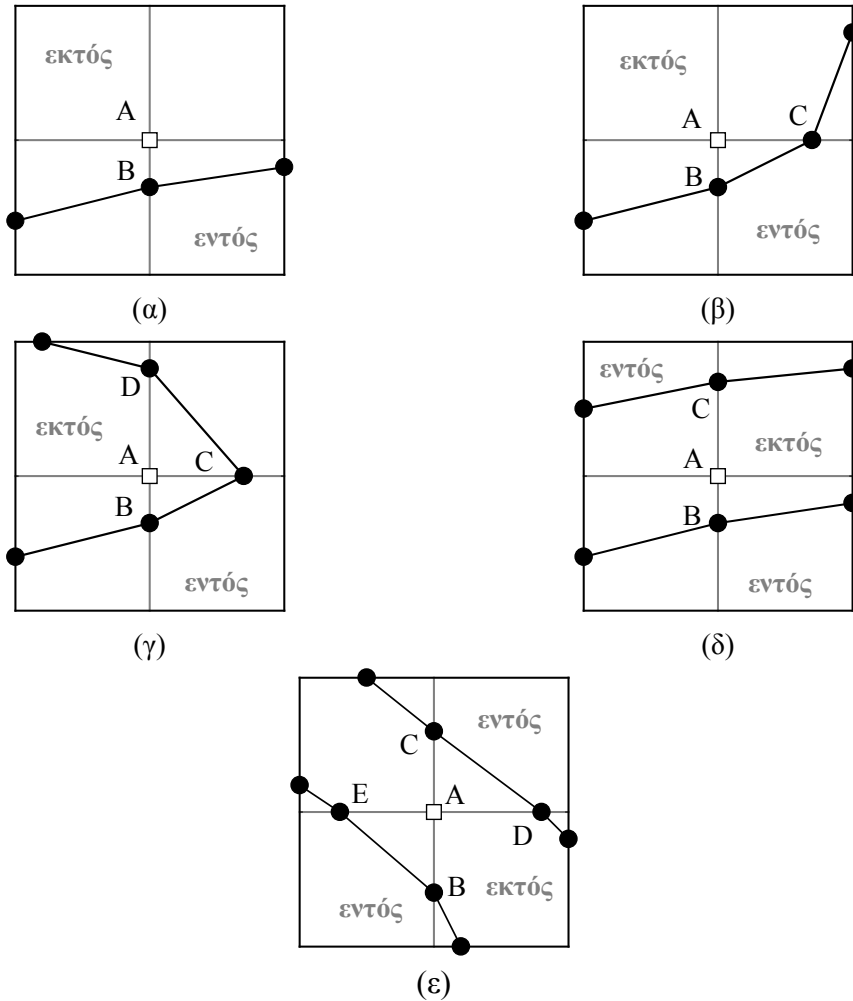
Πίνακας 7.1 Οι πληροφορίες για τους κόμβους Dirichlet για το τμήμα συνόρου Γ του Σχήματος 7.20. x, y είναι οι συντεταγμένες των εξωτερικών κόμβων Dirichlet. Οι κεφαλίδες E, W, N και S είναι τα αρχικά των αγγλικών λέξεων East (Ανατολή), West (Δύση), North (Βορράς) και South (Νότος), και οι αντίστοιχες στήλες περιέχουν πληροφορία για τον προσανατολισμό του συνόρου ως προς τον κόμβο Dirichlet. Η τιμή 0 στη στήλη E σημαίνει ότι δεν υπάρχει σημείο του συνόρου ανατολικά του κόμβου Dirichlet. Αντίθετα, αν η τιμή στη στήλη E είναι 1, τότε υπάρχει σημείο του συνόρου ανατολικά του κόμβου Dirichlet και το σημείο αυτό του συνόρου φαίνεται στη στήλη nE. Για παράδειγμα, ο κόμβος Dirichlet με συντεταγμένες (1.7,0.2), έχει το σημείο 38 του συνόρου στα ανατολικά του και το σημείο 37 του συνόρου στα νότια του.

x	y	E	W	N	S	nE	nW	nN	nS	x	y	E	W	N	S	nE	nW	nN	nS
0	2.1	0	1	0	1	0	1	0	1	1	0.7	0	1	0	1	0	24	0	25
0.1	2.1	0	0	0	1	0	0	0	2	1.1	0.6	0	1	0	1	0	26	0	27
0.2	2.1	0	0	0	1	0	0	0	3	1.2	0.5	0	1	0	0	0	28	0	0
0.3	2	0	1	0	1	0	4	0	5	1.2	0.4	0	1	0	1	0	29	0	30
0.4	1.9	0	1	0	0	0	6	0	0	1.3	0.3	0	1	0	1	0	31	0	32
0.4	1.8	0	1	0	1	0	7	0	8	1.4	0.2	0	1	0	1	0	33	0	34
0.5	1.7	0	1	0	1	0	9	0	10	1.5	0.2	0	0	0	1	0	0	0	35
0.6	1.6	0	1	0	0	0	11	0	0	1.6	0.2	0	0	0	1	0	0	0	36
0.6	1.5	0	1	0	1	0	12	0	13	1.7	0.2	1	0	0	1	38	0	0	37
0.7	1.4	0	1	0	0	0	14	0	0	1.8	0.3	1	0	0	1	40	0	0	39
0.7	1.3	0	1	0	1	0	15	0	16	1.9	0.4	1	0	0	1	42	0	0	41
0.8	1.2	0	1	0	0	0	17	0	0	2	0.5	1	0	0	1	44	0	0	43
0.8	1.1	0	1	0	1	0	18	0	19	2	0.6	1	0	0	0	45	0	0	0
0.9	1	0	1	0	0	0	20	0	0	2.1	0.7	1	0	0	1	47	0	0	46
0.9	0.9	0	1	0	1	0	21	0	22	2.2	0.8	0	0	0	1	0	0	0	48
1	0.8	0	1	0	0	0	23	0	0										

7.4.6.3 Προεκβολή των συνθηκών Dirichlet

Οι τιμές στους κόμβους Dirichlet υπολογίζονται με βάση το αριθμητικό σχήμα επίλυσης της εξίσωσης Eikonal [Εξ. (7.18) με 1^{ns} τάξης μερικές παραγώγους, Εξ. (7.14) – (7.17)]. Για παράδειγμα, για τον υπολογισμό της τιμής στον κόμβο A του Σχήματος 7.19 χρησιμοποιούνται οι γνωστές συνθήκες Dirichlet στα σημεία του συνόρου B_k και B_{k+1} . Στους κόμβους W και N, δυτικά και βόρεια του κόμβου A αντίστοιχα, η τιμή της άγνωστης συνάρτησης θεωρείται ∞ .

Όλες οι πιθανές περιπτώσεις προσανατολισμού κόμβου Dirichlet ως προς σύνορο, ανάγονται σε 5 [Adalsteinsson & Sethian (1999)] και περιγράφονται στο Σχήμα 7.21. Η τιμή στον κόμβο A, u_A , του Σχήματος 7.21 υπολογίζεται για κάθε μία από αυτές τις περιπτώσεις.



Σχήμα 7.21 Οι 5 πιθανές περιπτώσεις προσανατολισμού συνόρου ως προς τον κόμβο A.

Στο Σχήμα 7.21α, μόνο ένας γείτονας του κόμβου A είναι στην άλλη πλευρά του συνόρου. Από το αριθμητικό σχήμα προκύπτει ότι η τιμή στον κόμβο A δίδεται από την εξίσωση:

$$u_A - u_B = f_A \cdot (y_A - y_B) \quad (7.42)$$

όπου f_A η τιμή της συνάρτησης f της Εξ. (7.1) στον κόμβο A.

Στο Σχήμα 7.21β, δύο γείτονες του κόμβου A βρίσκονται στην άλλη πλευρά του συνόρου. Η τιμή στον κόμβο A υπολογίζεται από την εξίσωση:

$$\left(-\frac{u_C - u_A}{x_C - x_A} \right)^2 + \left(\frac{u_A - u_B}{y_A - y_B} \right)^2 = f_A^2. \quad (7.43)$$

Στο Σχήμα 7.21γ, η τιμή στον κόμβο A υπολογίζεται από την εξίσωση:

$$\left(-\frac{u_C - u_A}{x_C - x_A} \right)^2 + \left[\max \left(\frac{u_A - u_B}{y_A - y_B}, -\frac{u_D - u_A}{y_D - y_A}, 0 \right) \right]^2 = f_A^2. \quad (7.44)$$

Στο Σχήμα 7.21δ, η u_A υπολογίζεται από την εξίσωση:

$$\max \left(\frac{u_A - u_B}{y_A - y_B}, -\frac{u_C - u_A}{y_C - y_A}, 0 \right) = f_A. \quad (7.45)$$

Στο Σχήμα 7.21ε, η u_A υπολογίζεται από την εξίσωση:

$$\left[\max \left(\frac{u_A - u_E}{x_A - x_E}, -\frac{u_D - u_A}{x_D - x_A}, 0 \right) \right]^2 + \left[\max \left(\frac{u_A - u_B}{y_A - y_B}, -\frac{u_C - u_A}{y_C - y_A}, 0 \right) \right]^2 = f_A^2. \quad (7.46)$$

Οι τιμές u_B , u_C , u_D και u_E των Εξ. (7.42) – (7.46) προκύπτουν άμεσα από τη συνάρτηση $g(\mathbf{x})$ της Εξ. (7.1). Για παράδειγμα, $u_B = g(x_B, y_B)$.

Οι Εξ. (7.42) – (7.46) αποτελούν γενίκευση της προσέγγισης που έχει προταθεί [Adalsteinsson & Sethian (1999)] για την εύρεση τιμών στο, αναγκαίο για την εκκίνηση της μεθόδου TB, σύνολο κόμβων. Οι αντίστοιχες εξισώσεις των Adalsteinsson και Sethian είναι απλοποιημένες αφού αφορούν το πρόβλημα υπολογισμού της προσημασμένης απόστασης από τυχαίο σύνολο Γ : $|\nabla u(\mathbf{x})| = 1$, $\mathbf{x} \in \Omega$ και $u(\mathbf{x}) = 0$, $\mathbf{x} \in \Gamma$. Οι Εξ. (7.42) – (7.46) μπορούν να εφαρμοστούν στη γενική περίπτωση επίλυσης της εξίσωσης Eikonal: $|\nabla u(\mathbf{x})| = f(\mathbf{x}) > 0$, $\mathbf{x} \in \Omega$ και $u(\mathbf{x}) = g(\mathbf{x})$, $\mathbf{x} \in \Gamma$.

Πρέπει να σημειωθεί ότι στην εργασία των Adalsteinsson και Sethian, δεν περιέχεται αλγόριθμος προσαρμογής του συνόρου Γ στο πλέγμα (§7.4.6.1), ούτε αλγόριθμος εντοπισμού των κόμβων Dirichlet (§7.4.6.2). Επίσης, δεν είναι σαφές, αν οι κόμβοι Dirichlet εισάγονται στο σύνολο των αποδεκτών [βήμα (A) του αλγόριθμου TB] ή στο σύνολο των αρχικών γειτονικών [βήμα (B) του αλγόριθμου TB]. Ο Chorp αναφέρει ρητά ότι οι κόμβοι αυτοί εισάγονται στο σύνολο των αποδεκτών [Chorpp (2001)]. Στην περίπτωση τυχαίας καμπύλης Γ (που δεν διέρχεται μόνο από κόμβους του πλέγματος), η εισαγωγή των κόμβων Dirichlet στο σύνολο των αρχικών γειτονικών γενικά πλεονεκτεί. Για παράδειγμα, για τον υπολογισμό της τιμής στον κόμβο N του Σχήματος 7.19, αν αυτός εισαχθεί στο σύνολο των αρχικών γειτονικών, χρησιμοποιούνται δύο κόμβοι, ο A και ο B_{k+2} ,³¹ ενώ αν εισαχθεί στο σύνολο των αποδεκτών χρησιμοποιείται μόνο η τιμή στον κόμβο B_{k+2} .

Συνοψίζοντας, στη γενική περίπτωση τυχαίου συνόρου Γ , το βήμα (A) του αλγορίθμου TB παραλείπεται: δεν υπάρχουν αρχικά αποδεκτοί κόμβοι. Στο βήμα (B), ο εντοπισμός των αρχικών γειτονικών κόμβων γίνεται με τον αλγόριθμο που περιγράφηκε, δηλαδή οι κόμβοι Dirichlet εισάγονται στο σύνολο των αρχικών γειτονικών. Οι Εξ. (7.42) – (7.46)

³¹ Η τιμή στον κόμβο A χρησιμοποιείται αν αυτός εισαχθεί πριν τον κόμβο N στο σύνολο των αποδεκτών.

χρησιμοποιούνται για τον υπολογισμό των δοκιμαστικών τιμών σε αυτούς. Η τελική τιμή σε κόμβο Dirichlet υπολογίζεται όταν αυτός εισάγεται στο σύνολο των αποδεκτών.

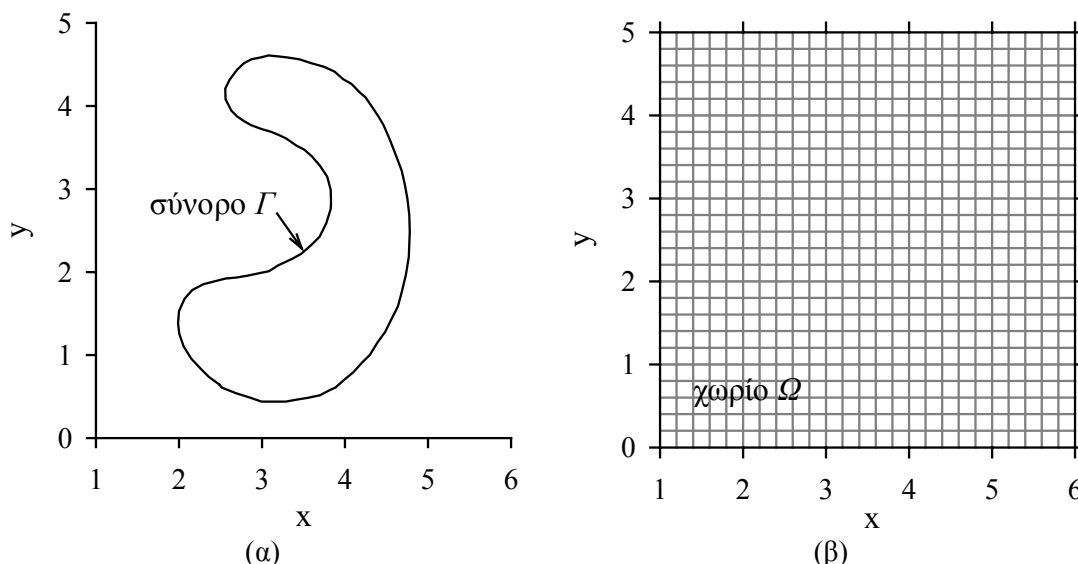
Σημειώνεται ότι με την ολοκλήρωση υπολογισμού των τιμών στους κόμβους Dirichlet, οι κόμβοι Dirichlet και οι επιβληθείσες τιμές σε αυτούς μπορούν να χρησιμοποιηθούν ως συνοριακές συνθήκες για την επίλυση της εξίσωσης Eikonal και με τις δύο άλλες μεθόδους [EIO/Galerkin-ΠΣ/NR (§7.2) και Godunov/NR (§7.3)].

7.4.7 Παράδειγμα υπολογισμού με τη μέθοδο ταχυ-βηματισμού. Βηματισμός στο εξωτερικό και εσωτερικό του συνόρου

Η μέθοδος TB εφαρμόζεται στο πρόβλημα υπολογισμού της προσημασμένης απόστασης από το τυχαίο σύνολο Γ του Σχήματος 7.22α. Στο εσωτερικό του συνόρου Γ , η απόσταση θεωρείται αρνητική και στο εξωτερικό θετική. Το πρόβλημα διατυπώνεται με την εξίσωση:

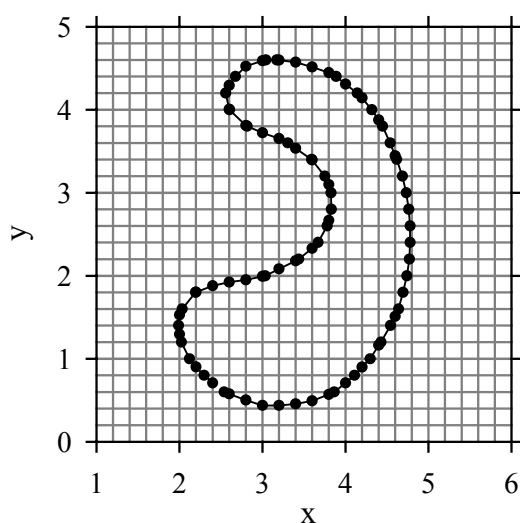
$$\left\{ \begin{array}{l} |\nabla u(\mathbf{x})| = 1, \mathbf{x} \in [1,6] \times [0,5] \\ u(\mathbf{x}) = 0, \mathbf{x} \in \Gamma \end{array} \right\}, \text{ όπου } \Gamma \text{ το σύνολο του Σχήματος 7.22α.} \quad (7.47)$$

Τα δεδομένα του προβλήματος υπολογισμού της προσημασμένης απόστασης από το κλειστό σύνολο Γ είναι μια σειρά σημείων που ορίζουν το σύνολο Γ (Σχήμα 7.22α), καθώς και το πλέγμα στο οποίο θα λυθεί η Εξ. (7.47) (Σχήμα 7.22β).



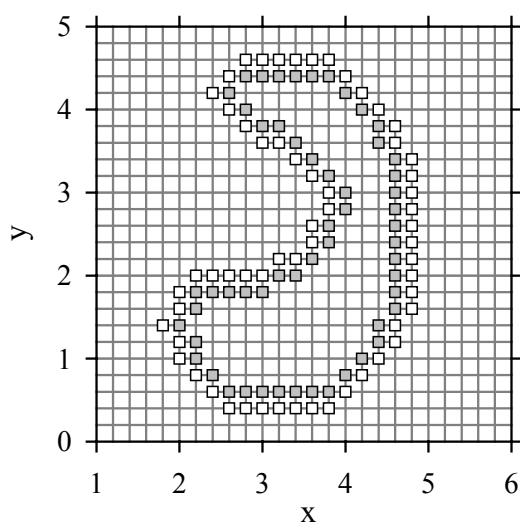
Σχήμα 7.22 (α) Τυχαίο κλειστό σύνολο Γ που ορίζεται από μια σειρά σημείων (x_i, y_i) . (β) Καρτεσιανό πλέγμα στο οποίο επιλύεται το πρόβλημα υπολογισμού της προσημασμένης απόστασης από το σύνολο Γ .

Αρχικά γίνεται προσαρμογή του συνόρου Γ στο πλέγμα (§7.4.6.1). Στο Σχήμα 7.23 φαίνεται η προσαρμογή του κλειστού συνόρου Γ (Σχήμα 7.22α) στο αριθμητικό πλέγμα επίλυσης (Σχήμα 7.22β).



Σχήμα 7.23 Προσαρμογή τυχαίου κλειστού συνόρου (σύνоро Γ , Σχήμα 7.22α) σε αριθμητικό πλέγμα (Σχήμα 7.22β). Εύρεση των σημείων τομής του συνόρου Γ με το αριθμητικό πλέγμα.

Στη συνέχεια εντοπίζονται οι αρχικοί γειτονικοί κόμβοι (κόμβοι Dirichlet, §7.4.6.2) και υπολογίζονται οι δοκιμαστικές τιμές της άγνωστης συνάρτησης σε αυτούς (§7.4.6.3). Στο Σχήμα 7.24 φαίνονται οι εσωτερικοί και εξωτερικοί αρχικοί γειτονικοί κόμβοι για το σύνορο Γ του Σχήματος 7.23.

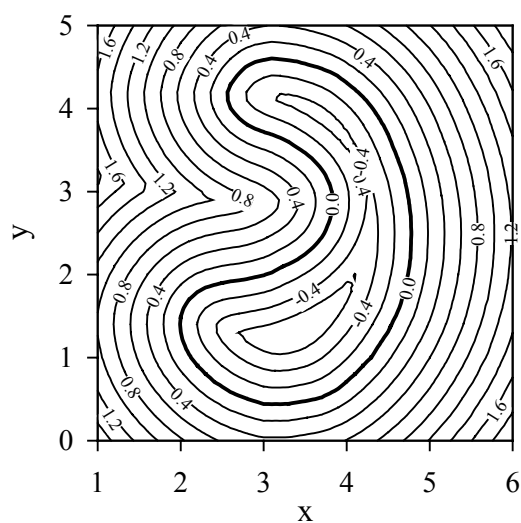


Σχήμα 7.24 Εξωτερικοί (λευκά τετράγωνα) και εσωτερικοί (γκρι τετράγωνα) αρχικοί γειτονικοί κόμβοι για το κλειστό σύνορο του Σχήματος 7.18.

Ακολουθεί βηματισμός με τη μέθοδο TB στο εξωτερικό του συνόρου και στη συνέχεια στο εσωτερικό του. Κατά το βηματισμό στο εξωτερικό του συνόρου, οι εσωτερικοί αρχικοί γειτονικοί κόμβοι δρουν σαν ένα φράγμα που παρεμποδίζει την προέλαση του συνόλου των γειτονικών κόμβων στο εσωτερικό του συνόρου. Μετά την ολοκλήρωση των υπολογισμών στο

εξωτερικό του συνόρου Γ , ακολουθεί βηματισμός στο εσωτερικό του. Ως αποδεκτοί χαρακτηρίζονται όλοι οι εξωτερικοί του συνόρου κόμβοι, στους οποίους έχει ολοκληρωθεί ο υπολογισμός της άγνωστης συνάρτησης. Το πρόσημο στους αποδεκτούς αλλάζει και ως αρχικοί γειτονικοί θεωρούνται οι κόμβοι *Dirichlet* στο εσωτερικό. Μετά την ολοκλήρωση του βηματισμού στο εσωτερικό, αλλάζει πρόσημο η υπολογισμένη συνάρτηση (ώστε να είναι αρνητική στο εσωτερικό και θετική στο εξωτερικό) και προκύπτει η λύση του προβλήματος.

Η προσημασμένη απόσταση για το τυχαίο σύνορο Γ του Σχήματος 7.22α περιγράφεται από τις ισοϋψείς του Σχήματος 7.25. Από μια άλλη σκοπιά, οι ισοϋψείς εκφράζουν τους χρόνους άφιξης του συνόρου Γ όταν αυτό κινείται με ταχύτητα σταθερή και κάθετη σε αυτό, ίση με $F=1$ ($f=1/F=1$). Οι ισοϋψείς δίνουν τις διαδοχικές θέσεις του συνόρου στο χρόνο.



Σχήμα 7.25 Ισοϋψείς της προσημασμένης απόστασης από το σύνορο Γ του Σχήματος 7.22α. Το σύνορο Γ είναι η ισοϋψής μηδέν. Οι ισοϋψείς ισοδύναμα εκφράζουν τις διαδοχικές θέσεις του συνόρου Γ όταν αυτό κινείται ισοτροπικά με ταχύτητα $F=1$, με φορά προς το εξωτερικό (θετικές τιμές) ή προς το εσωτερικό (αρνητικές τιμές).

7.4.8 Σύγκριση της μεθόδου ταχ-βηματισμού με τις άλλες μεθόδους επίλυσης

Η μέθοδος Godunov/TB δεν περιλαμβάνει επαναληπτική διαδικασία για την επίλυση της εξίσωσης Eikonal, συνεπώς δεν χρειάζεται κατάλληλη αρχική εκτίμηση της λύσης, όπως η μέθοδος Godunov/NR (§7.3.3).

Η μέθοδος Godunov/TB χρησιμοποιεί για την επίλυση της εξίσωσης Eikonal το σχήμα τύπου Godunov που χρησιμοποιείται και στη μέθοδο Godunov/NR. Αυτό που αλλάζει στις δύο μεθόδους είναι ο τρόπος επίλυσης. Ο μόνος πιθανός λόγος για να υπάρχει διαφορά στα αποτελέσματα των δύο μεθόδων,⁹¹ είναι να είναι σημαντικά τα σφάλματα στρογγυλοποίησης (λόγω της επαναληπτικής διαδικασίας) με τη μέθοδο Godunov/NR. Στα

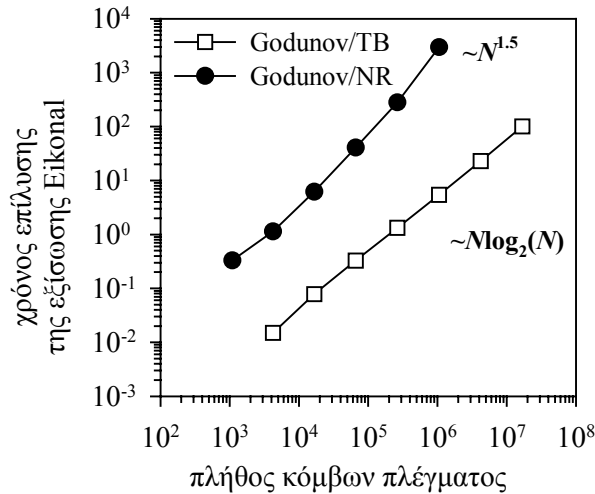
⁹¹ αν οι αντίστοιχοι κώδικες έχουν επαληθευθεί.

προβλήματα 7.A και 7.B, η επίδραση της πυκνότητας διαμέρισης στην ακρίβεια της λύσης με τη μέθοδο Godunov/TB είναι ίδια με αυτή που παρουσιάστηκε στην §7.3.3. Συνεπώς, στα προβλήματα 7.A και 7.B, τα σφάλματα στρογγυλοποίησης δεν ήταν σημαντικά. Τα σφάλματα στρογγυλοποίησης δεν είναι σημαντικά ούτε για το κοινό πρόβλημα που χρησιμοποιείται για την επαλήθευση των κωδίκων των μεθόδων Godunov/NR και Godunov/TB στις §A.5.2.2 και §A.5.2.3. Ακόμη κι αν στα προβλήματα που εξετάστηκαν δεν υπάρχουν διαφορές στα αποτελέσματα, η προσέγγιση με τη μέθοδο Godunov/TB γενικά πλεονεκτεί σε ακρίβεια έναντι των επαναληπτικών μεθόδων επίλυσης (όταν χρησιμοποιούνται τα ίδια αριθμητικά σχήματα και σε περιπτώσεις προβλημάτων όπου τα σφάλματα στρογγυλοποίησης είναι σημαντικά), διότι λύνει αναλυτικά το αριθμητικό σχήμα. Οι επαναληπτικές μέθοδοι λύνουν προσεγγιστικά, με όριο ανοχής, τις εξισώσεις του αριθμητικού σχήματος.

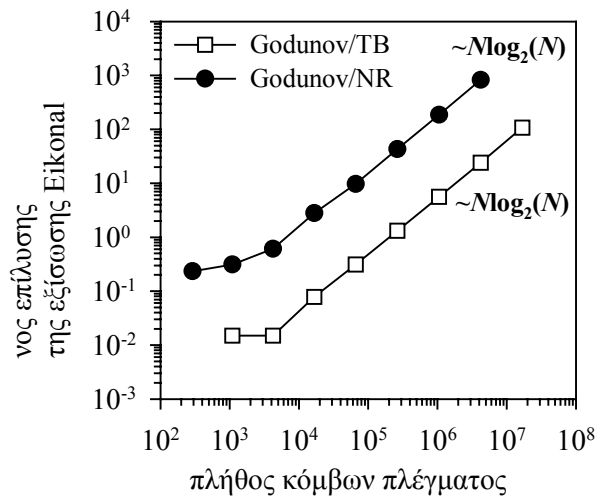
Η άμεση, χωρίς επαναληπτική διαδικασία, επίλυση της εξίσωσης Eikonal καθιστά τη μέθοδο Godunov/TB ταχύ αλγόριθμο επίλυσης. Η ταχύτητα της μεθόδου TB οφείλεται και στην επιλογή του φίλτρου ελαχίστου (§7.4.5, Παράρτημα E) για τη διατήρηση και ταξινόμηση του συνόλου των γειτονικών κόμβων, αφού το αργό στάδιο στον αλγόριθμο TB είναι η εύρεση του γειτονικού κόμβου με την ελάχιστη δοκιμαστική τιμή. Στο Σχήμα 7.26 φαίνεται ο απαιτούμενος χρόνος εκτέλεσης για την επίλυση των προβλημάτων 7.A και 7.B χρησιμοποιώντας τις μεθόδους Godunov/NR και Godunov/TB για διαφορετικές διαμερίσεις. Ο χρόνος επίλυσης με τη μέθοδο Godunov/TB υπολογίζεται ανάλογος του $M\log_2 N$ και για τα δύο προβλήματα, ενώ με τη μέθοδο Godunov/NR⁹¹ είναι ανάλογος του $N^{1.5}$ για το πρόβλημα 7.A, και του $M\log_2(N)$ για το πρόβλημα 7.B. Αν και στο πρόβλημα 7.B οι χρόνοι επίλυσης και για τις δύο μεθόδους μεταβάλλονται με τον ίδιο νόμο ($\sim M\log_2 N$), ο χρόνος επίλυσης είναι 35 φορές μεγαλύτερος με τη μέθοδο Godunov/NR. Σημειώνεται ότι η επίδοση της μεθόδου Godunov/NR, και γενικά κάθε επαναληπτικής μεθόδου, εξαρτάται από την αρχική εκτίμηση. Η αναγκαία αρχική εκτίμηση της λύσης για τη μέθοδο Godunov/NR, προκύπτει από το αντίστοιχο ιξώδες πρόβλημα [Εξ. (7.3)] όταν $\varepsilon=1$, και φαίνεται να πλεονεκτεί έναντι άλλων αρχικών εκτιμήσεων όσον αφορά την ταχύτητα σύγκλισης της NR.

Η σειρά παρουσίασης των προσεγγίσεων επίλυσης είναι η ιστορική: αρχικά υλοποιήθηκε η μέθοδος EIO/Galerkin-ΠΣ/NR, χωρίς και με τον επιλύτη μετώπου, έπειτα η μέθοδος Godunov/NR, με επιλύτη τη SOR χωρίς και με συμπαγή διαχείριση του πίνακα του γραμμικού συστήματος, και μετά η μέθοδος Godunov/TB, χωρίς και με το φίλτρο ελαχίστου. Το από κέρδος της μετάβασης από μία προσέγγιση στην επόμενη ήταν ο χρόνος επίλυσης, ο οποίος μειώθηκε σημαντικά.

⁹¹ Στην §7.3.3 υπολογίστηκε, για τα προβλήματα 7.A και 7.B, ο χρόνος για την κατασκευή του Ιακωβιανού πίνακα και την επίλυση του αντίστοιχου γραμμικού συστήματος σε μία επανάληψη της NR και βρέθηκε περίπου ανάλογος του πλήθους των κόμβων του πλέγματος ($\sim N^{1.1}$ για το πρόβλημα 7.A και $\sim N$ για το πρόβλημα 7.B). Η επίλυση της εξίσωσης Eikonal επαναληπτικά περιλαμβάνει μια σειρά από κατασκευές Ιακωβιανών και επιλύσεις των αντίστοιχων γραμμικών συστημάτων. Ο λόγος για τον οποίο οι μετρήσεις επίδοσης για τη επίλυση μεταβάλλονται ($\sim N^{1.5}$ για το πρόβλημα 7.A και $\sim M\log_2 N$ για το πρόβλημα 7.B), είναι διότι καθώς το πλήθος των κόμβων του πλέγματος αυξάνεται, αυξάνεται και το πλήθος των επαναλήψεων της NR.



(α)



(β)

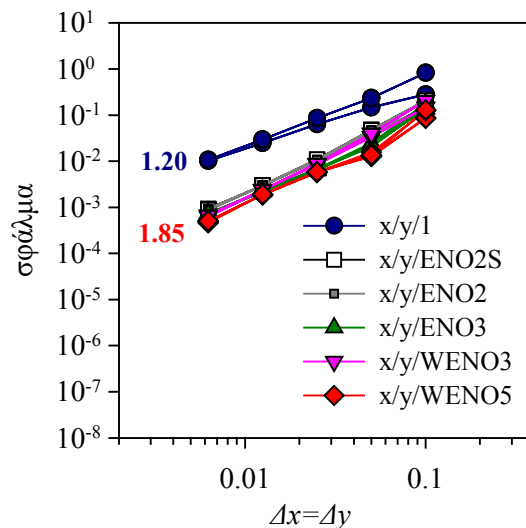
Σχήμα 7.26 Συνολικός χρόνος εκτέλεσης για την επίλυση (α) του προβλήματος 7.A και (β) του προβλήματος 7.B, συναρτήσει της πυκνότητας διαμέρισης, χρησιμοποιώντας τις μεθόδους Godunov/NR, Godunov/TB. Η αναγκαία αρχική εκτίμηση της λύσης για τη μέθοδο Godunov/NR προκύπτει από το αντίστοιχο ιξώδες πρόβλημα [Εξ. (7.3)] όταν $\varepsilon=1$ και ικανοποιεί τον περιορισμό να μην οδηγεί στα προβλήματα που περιγράφονται στην §7.3.3 (π.χ. ιδιάζων Ιακωβιανός πίνακας).

7.5 Επίδραση της αριθμητικής επίλυσης της εξίσωσης Eikonal στην ακρίβεια υπολογισμών στο «γενικό» πρόβλημα εξέλιξης συνόρου (§5.4)

Εξετάζεται η επίδραση της ακρίβειας υπολογισμού της αρχικής συνθήκης της εξίσωσης ισοϋψών (η οποία προκύπτει από την επίλυση της εξίσωσης Eikonal με τη μέθοδο Godunov/TB) στη θέση του συνόρου. Επιλύεται το πρόβλημα 6.A (§6.6.1), όπου α) η ταχύτητα F είναι γνωστή σε όλο το υπολογιστικό χωρίο και δεν απαιτείται προεκβολή τιμών από το σύνορο σε όλο το υπολογιστικό χωρίο και β) η ακρίβεια εύρεσης της ισοϋψούς είναι τέτοια που δεν αλλοιώνει αυτή της αριθμητικής λύσης της εξίσωσης ισοϋψών (Κεφ. 8). Έτσι

(§6.6), η ακρίβεια της θέσης του συνόρου εξαρτάται μόνο την ακρίβεια υπολογισμού της αρχικής συνθήκης και την ακρίβεια των αριθμητικών σχημάτων επίλυσης της εξίσωσης ισοϋψών.

Στο Σχήμα 7.27 φαίνονται η μεταβολή του σφάλματος στη θέση του συνόρου και η παρατηρούμενη τάξη ακρίβειας καθώς μειώνεται το $\Delta x = \Delta y$ για το πρόβλημα 6.A (§6.6.1). Χρησιμοποιούνται όλα τα διαθέσιμα σχήματα για την επίλυση της εξίσωσης ισοϋψών (§6.2) και η μέθοδος Godunov/TB για τον υπολογισμό της αρχικής συνθήκης της ίδιας εξίσωσης.



Σχήμα 7.27 Σφάλμα στην υπολογιζόμενη ισοϋψή μηδέν ($\|\mathbf{R} - \mathbf{R}_{\text{real}}\|_F / \|\mathbf{R}_{\text{real}}\|_F$) και παρατηρούμενη τάξη ακρίβειας, καθώς το $\Delta x = \Delta y$ μειώνεται για το πρόβλημα 6.A (§6.6.1). Εξετάζονται όλα τα διαθέσιμα σχήματα για την επίλυση της εξίσωσης ισοϋψών (§6.2) και η μέθοδος Godunov/TB για τον υπολογισμό της αρχικής συνθήκης της ίδιας εξίσωσης ($x = \text{Euler}$ ή SSPRK2 ή SSPRK3 , $y = \text{OS}$ ή LLLF , $t = 0.25$, $\Delta t = 0.0001$).

Όταν η αρχική συνθήκη της εξίσωσης ισοϋψών υπολογίζεται αναλυτικά και δεν περιέχει αριθμητικά σφάλματα, η ακρίβεια της θέσης του συνόρου είναι η θεωρητική των σχημάτων διακριτοποίησης (§6.6.1, Πίνακας 6.I, Σχήμα 6.2). Στην περίπτωση όπου υπολογίζεται η αρχική συνθήκη με την επίλυση της εξίσωσης Eikonal με τη μέθοδο Godunov/TB, η παρατηρούμενη τάξη ακρίβειας ελαττώνεται για τα σχήματα υψηλότερης τάξης. Αυτό οφείλεται στην τάξη ακρίβειας της μεθόδου υπολογισμού της αρχικής συνθήκης που είναι $p=1$, αλλά και στην, αναγκαία για τον υπολογισμό της αρχικής συνθήκης, διαδικασία προσαρμογής του αρχικού συνόρου στο πλέγμα (§7.4.6.1).

7.6 Αξιολόγηση

Ο στόχος δεν ήταν η επισκόπηση των μεθόδων επίλυσης της εξίσωσης Eikonal. Ο στόχος ήταν η ακριβής και γρήγορη επίλυση της εξίσωσης Eikonal, τόσο στο πλαίσιο του «γενικού» προβλήματος εξέλιξης συνόρου (υπολογισμός αρχικής συνθήκης εξίσωσης

ισοϋψών, §5.4), όσο και στο πλαίσιο του «στατικού» προβλήματος (υπολογισμός χρόνου άφιξης συνόρου, §5.5).

Η συνεισφορά του κεφαλαίου, αφορά α) στη συγκριτική και λεπτομερή παρουσίαση 3 διαφορετικών μεθόδων επίλυσης της εξίσωσης Eikonal (EIO/Galerkin-ΠΣ/NR και Godunov/NR και Godunov/TB), β) στη μελέτη και αποσαφήνιση λεπτομερειών του αλγορίθμου TB που δεν περιγράφονται στη βιβλιογραφία (§7.4), γ) στον αλγόριθμο προσαρμογής τυχαίου συνόρου σε αριθμητικό πλέγμα και την επιβολή των συνθηκών Dirichlet της εξίσωσης Eikonal (§7.4.6), και δ) στη μικρή τροποποίηση των βημάτων (A) και (B) του αλγορίθμου TB (§7.4.6.3).

Οι δύο πρώτες μέθοδοι (EIO/Galerkin-ΠΣ/NR και Godunov/NR) ανήκουν στη γενική κατηγορία επαναληπτικών μεθόδων για την επίλυση της εξίσωσης Eikonal.

Η μέθοδος Godunov/TB ανήκει στη δεύτερη κατηγορία μεθόδων που λύνουν άμεσα, χωρίς επαναληπτική διαδικασία. Η μέθοδος TB είναι $O(N \log_2 N)$, και οι πρώτοι που την παρουσίασαν και εφάρμοσαν σε προβλήματα εξέλιξης συνόρου ήταν οι Sethian [Sethian (1996c), Sethian (1996b)] και οι Helmsen et al. [Helmsen et al. (1996)]. Στην εργασία των Helmsen et al., η μέθοδος αναφέρεται ως στατικός αλγόριθμος ισοϋψών (steady level set algorithm). Ο όρος που χρησιμοποίησε ο Sethian για την περιγραφή της μεθόδου, ήταν μέθοδος ταχυ-βηματισμού (fast marching method), ο οποίος και επικράτησε. Οι Osher και Fedkiw αναφέρουν [Osher & Fedkiw (2003), σ. 73] ότι ο εμπνευστής της μεθόδου ήταν ο Tsitsiklis [Tsitsiklis (1995)] και ότι οι εργασίες των Sethian και Helmsen et al. την επαναδιατύπωσαν, αποσαφήνισαν και εφάρμοσαν σε προβλήματα εξέλιξης συνόρου. Οι Sethian και Vladimirsky εφάρμοσαν τη μέθοδο TB σε μη καρτεσιανά πλέγματα [Sethian (1999b), Sethian & Vladimirsky (2000)].

Υπάρχει μία τρίτη κατηγορία μεθόδων για την επίλυση του «στατικού» προβλήματος εξέλιξης συνόρου, οι οποίες βασίζονται στην επίλυση του ισοδύναμου «γενικού» προβλήματος εξέλιξης συνόρου και στην αντιστοιχία (§5.5) των ισοϋψών της συνάρτησης χρόνου άφιξης (λύση του «στατικού» προβλήματος) με τις ισοϋψείς μηδέν της συνάρτησης ισοϋψών (λύση του «γενικού» προβλήματος). Ωστόσο, αν η επίλυση του ισοδύναμου «γενικού» προβλήματος εξέλιξης συνόρου γίνει σε όλο το υπολογιστικό χωρίο, οι μέθοδοι αυτές είναι αργές συγκριτικά με τη μέθοδο TB. Για την επιτάχυνση των μεθόδων αυτής της κατηγορίας, έχουν προταθεί τεχνικές που περιορίζουν την επίλυση σε μια στενή ζώνη γύρω από την ισοϋψή μηδέν. Ο Chop εισήγαγε [Chopp (1993)], και οι Adalsteinsson και Sethian εφάρμοσαν [Adalsteinsson & Sethian (1995)] σε προβλήματα εξέλιξης συνόρου, τη μέθοδο στενής ζώνης (narrow band method), η οποία λύνει τοπικά γύρω από την ισοϋψή μηδέν την εξίσωση ισοϋψών. Οι Peng et al. επίσης παρουσίασαν [Peng et al. (1999)] την τοπικά εντοπισμένη μέθοδο των ισοϋψών (localized level set method), αναφέροντας ότι είναι $O(N)$. Τόσο ο Sethian, όσο και ο Osher σε νεότερες εργασίες τους συγκρίνουν τις μεθόδους με τη μέθοδο TB. Ο Sethian αναφέρει αναφέρει η μέθοδος στενής ζώνης είναι $O(kN)$, όπου k το εύρος της ζώνης [Sethian (1999), σ. 100]. Επίσης, σημειώνει ότι ένα σημαντικό πλεονέκτημα της μεθόδου TB είναι ότι, αν και επιλύει πρόβλημα που δίνει την εξέλιξη συνόρου στο

χρόνο, δε χρειάζεται η ικανοποίηση του κριτηρίου Courant-Friedrichs-Lewy (CFL) για την ευστάθεια του αριθμητικού σχήματος που χρησιμοποιείται. Τέλος, ισχυρίζεται ότι η πολυπλοκότητα των δύο μεθόδων αφορά στη χειρίστη περίπτωση. Η πραγματική ταχύτητα της μεθόδου TB εξαρτάται από το πλήθος των γειτονικών κόμβων, το οποίο είναι πολύ μικρότερο από το συνολικό πλήθος των κόμβων του πλέγματος N (με βάση το οποίο εκτιμάται η πολυπλοκότητα). Οι Osher και Fedkiw διορθώνουν την εκτίμηση για την πολυπλοκότητα της τοπικά εντοπισμένης μεθόδου των ισοϋψών σε $M \log_2 N$ [Osher & Fedkiw (2001)]. Επίσης, αναφέρουν ότι στην πράξη η επίλυση με τη μέθοδο TB ολοκληρώνεται σε χρόνους περίπου μια τάξη μικρότερους, τόσο από την τοπικά εντοπισμένη μέθοδο των ισοϋψών, όσο και από τη μέθοδο στενής ζώνης.

Η ταχύτητα της μεθόδου TB φαίνεται να είναι μεγαλύτερη από αυτές των προσεγγίσεων της τρίτης κατηγορίας. Επίσης, είναι ταχύτερη [Sethian (1999b)] από τις πρώτες επαναληπτικές μέθοδοι που προτάθηκαν. Πρόσφατα, προτάθηκαν ταχείες επαναληπτικές μέθοδοι (μέθοδοι της πρώτης κατηγορίας): Οι Tsai et al. περιγράφουν τον ταχύ αλγόριθμο σάρωσης (fast sweeping algorithm) που χρησιμοποιεί τη διάδοση πληροφορίας πάνω στις προβολές των χαρακτηριστικών και είναι $O(N)$ [Tsai et al. (2003)]. Οι Kao et al. περιγράφουν μέθοδο σάρωσης με χρόνο επίλυσης ανάλογο του N , του $M \log_2 N$ και N^k , $k < 2$, ο οποίος εξαρτάται από το πρόβλημα που επιλύεται [Kao et al. (2004)]. Τέλος, ο Kim περιγράφει μια μέθοδο $O(N)$, η οποία ομοιάζει με τη μέθοδο TB και την οποία καλεί μέθοδο βηματισμού ομάδων [Group Marching method, Kim (2001)]. Για τη σύγκριση της ταχύτητας των αλγορίθμων σάρωσης με τη μέθοδο TB θα πρέπει να ληφθεί υπόψη ότι οι χρόνοι επίλυσης με τη μέθοδο TB είναι στην πράξη ανάλογοι του $M \log_2 M$, όπου M το μέσο πλήθος των γειτονικών κόμβων, το οποίο είναι σημαντικά μικρότερο από το πλήθος των κόμβων, N .

Τόσο η μέθοδος TB που υλοποιήθηκε, όσο και οι ταχείς αλγόριθμοι σάρωσης είναι μόνο 1^{ns} τάξης ακρίβειας. Για τη βελτίωση της ακρίβειας της μεθόδου TB έχουν προταθεί σχήματα 2^{ns} τάξης [Sethian (1999b)] ακόμη και 3^{ns} τάξης [Chopp (2001)]. Η πραγματική ακρίβειά τους εξαρτάται από το πλήθος των σημείων στα οποία εκφυλίζονται σε σχήματα μικρότερης τάξης [o.π]. Ένα σχήμα υψηλής τάξης χρειάζεται τιμές σε περισσότερους από ένα γείτονες για την εκτίμηση των μερικών παραγώγων. Οι τιμές σε αυτούς τους γείτονες δεν είναι πάντα γνωστές, κυρίως στα πρώτα στάδια βηματισμού της μεθόδου και για αυτό το λόγο η τάξη ακρίβειας του αριθμητικού σχήματος πέφτει. Χαρακτηριστικό παράδειγμα είναι το σχήμα 2^{ns} τάξης στην §7.3.2. Ένα ακόμη σημείο που χρειάζεται προσοχή στη χρησιμοποίηση σχημάτων υψηλότερης τάξης και ισχύει για κάθε κατηγορία μεθόδων, είναι ότι όταν χρειάζεται προεκβολή των συνθηκών Dirichlet στο αριθμητικό πλέγμα, τότε η ακρίβεια αυτής της προεκβολής επηρεάζει τη συνολική ακρίβεια της μεθόδου. Για τη χρησιμοποίηση σχήματος υψηλής τάξης πρέπει να είναι υψηλή και η τάξη της προεκβολής των συνθηκών Dirichlet.

Για τη βελτίωση της ακρίβειας της μεθόδου Godunov/TB που υλοποιήθηκε, θα μπορούσαν να εφαρμοστούν τεχνικές αντίστοιχες με αυτές που χρησιμοποιούνται για την

αποκατάσταση της συνάρτησης ισοϋψών σε προσημασμένη απόσταση {re-initialization, [Peng et al. (1999)], [Osher & Fedkiw (2003), σ. 66]}. Η εφαρμογή αφορά στη βελτίωση της λύσης με τη μέθοδο Godunov/TB, επαναληπτικά λύνοντας μέχρι τη μόνιμη κατάσταση το πρόβλημα,

$$u_t + \text{sign}(u)(|\nabla u| - f) = 0, \quad (7.48)$$

χρησιμοποιώντας υψηλής τάξης ακρίβειας προσεγγίσεις για τις μερικές παραγώγους. Τα πρώτα αποτελέσματα [Σπετσιέρης (2004)] δείχνουν ότι μπορεί να επιτευχθεί βελτίωση της ακρίβειας, αλλά αυτή η προσέγγιση χρειάζεται περαιτέρω διερεύνηση καθώς δε συγκλίνει γρήγορα στη μόνιμη κατάσταση.

Αντίθετα με τη μέθοδο TB, στις μεθόδους της τρίτης κατηγορίας μπορούν να χρησιμοποιηθούν σχήματα υψηλής τάξης (π.χ. τα σχήματα της §7.2.3). Σχήματα υψηλότερης τάξης θα μπορούσαν να χρησιμοποιηθούν για την προσέγγιση των μερικών παραγώγων στο αριθμητικό σχήμα της Εξ. (7.18) κατά την επίλυση με τη μέθοδο Godunov/NR.

Τέλος, υπενθυμίζεται ότι στο κεφάλαιο επιλύεται η εξίσωση Eikonal, δηλαδή το δεύτερο μέλος της Εξ. (7.1) είναι $f=f(\mathbf{x})$.⁹¹ Είναι ενδιαφέρον να μελετηθεί και η γενική περίπτωση όπου $f=f(x, y, u, u_x, u_y)$, ώστε να επεκταθεί η θεώρηση του «στατικού» προβλήματος και σε γενικότερα προβλήματα εξέλιξης συνόρου (π.χ. ανισοτροπική εγχάραξη). Οι Sethian και Vladimirov τροποποίησαν τη μέθοδο TB και την εφαρμόζουν σε γενικά προβλήματα όπου $f=f(x, y, u, u_x, u_y)$ [Sethian & Vladimirov (2001), Sethian & Vladimirov (2003)].

⁹¹ Στο κεφάλαιο παρουσιάστηκαν παραδείγματα όπου $f=1$.

Κεφάλαιο 8

Εύρεση ισοϋψούς συνάρτησης

Περιγράφεται αλγόριθμος εύρεσης ισοϋψούς συνάρτησης που βασίζεται στον υπολογισμό του κάθετου διανύσματος στις ισοϋψείς της συνάρτησης. Για την εύρεση ισοϋψούς, α) απαιτείται να είναι γνωστό ένα σημείο της ζητούμενης ισοϋψούς και β) επιλύεται ένα σύστημα συνήθων διαφορικών εξισώσεων με ζεύγος μεθόδων Runge-Kutta υψηλής τάξης ακρίβειας (Παράρτημα Δ). Παραλλαγές του αλγόριθμου αξιολογούνται στο πλαίσιο του «γενικού» προβλήματος εξέλιξης συνόρου και τα αποτελέσματα συγκρίνονται με αυτά του αλγορίθμου του MATLAB για την εύρεση ισοϋψούς συνάρτησης.

8.1 Εισαγωγή

Η εύρεση της ισοψούς μηδέν της συνάρτησης ισοψών αποτελεί το βήμα (B) του αλγορίθμου του «γενικού» προβλήματος εξέλιξης συνόρου (§5.10). Η ισοψής μηδέν της συνάρτησης ισοψών είναι το κινούμενο σύνορο του οποίου η εξέλιξη έμμεσα παρακολουθείται με την εξέλιξη της συνάρτησης ισοψών. Η εύρεση των ισοψών της συνάρτησης χρόνου άφιξης του συνόρου αποτελεί το βήμα (Γ) του αλγορίθμου του «στατικού» προβλήματος εξέλιξης συνόρου (§5.10). Οι ισοψείς του συνάρτησης χρόνου άφιξης δίνουν τη θέση του συνόρου στις αντίστοιχες των ισοψών χρονικές στιγμές.

Στις παραγράφους που ακολουθούν περιγράφεται ο αλγόριθμος εύρεσης ισοψούς συνάρτησης (§8.2). Επίσης, περιγράφεται ο τρόπος υπολογισμού του κάθετου διανύσματος στις ισοψείς της συνάρτησης που αποτελεί κεντρικό σημείο του αλγορίθμου (§8.3). Στη συνέχεια μελετάται η ακρίβεια του προτεινόμενου αλγορίθμου στην εύρεση της ισοψούς μηδέν της συνάρτησης ισοψών (§8.4). Ειδικότερα, εξετάζεται αν ο προτεινόμενος αλγόριθμος μπορεί να διατηρήσει την ακρίβεια των αριθμητικών σχημάτων επίλυσης (§6.2) της εξίσωσης ισοψών. Το κεφάλαιο ολοκληρώνεται με σύντομες παρατηρήσεις (§8.5). Η επαλήθευση του κώδικα που υλοποιεί τον αλγόριθμο εύρεσης ισοψούς βρίσκεται στο Παράρτημα Δ.

8.2 Αλγόριθμος

Για την εύρεση ισοψούς συνάρτησης $u(x,y)$ αξιοποιείται ο τρόπος υπολογισμού του κάθετου στις ισοψείς της u διανύσματος,

$$\mathbf{n} = \frac{\nabla u}{|\nabla u|}. \quad (8.1)$$

Αν το κάθετο διάνυσμα σε ισοψή c ($c \in \mathbb{R}$) της u είναι το \mathbf{n} , τότε εφαπτόμενο σε αυτή είναι το διάνυσμα

$$\mathbf{G} = \mathbf{H} - (\mathbf{H} \cdot \mathbf{n})\mathbf{n}, \quad (8.2)$$

όπου \mathbf{H} τυχαίο διάνυσμα.

Αν είναι γνωστό ένα σημείο (x_0, y_0) της ισοψούς c , τότε είναι δυνατό κινούμενοι συνεχώς εφαπτομενικά σε αυτή να τη διανύσουμε. Ο γεωμετρικός τόπος των σημείων της ισοψούς c της u προκύπτει από τη διανυσματική εξίσωση:

$$\frac{d\mathbf{R}}{ds} = \mathbf{G}, \quad \mathbf{R}(s=0) = \mathbf{R}_0 = (x_0, y_0) = [x(s=0), y(s=0)], \quad (8.3)$$

όπου \mathbf{R} το διάνυσμα θέσης της ισοϋψούς c , $\mathbf{G} = \mathbf{H} - (\mathbf{H} \cdot \mathbf{n})\mathbf{n}$ διάνυσμα εφαπτόμενο στην ισοϋψή c , \mathbf{R}_0 ένα διάνυσμα θέσης της ισοϋψούς c και s το μήκος τόξου της ισοϋψούς c .

Στη συνέχεια φαίνεται γιατί με την επιλογή του \mathbf{G} [Εξ. (8.2)] προκύπτει από την Εξ. (8.3) ισοϋψής της u . Είναι

$$\frac{du(x,y)}{ds} = \frac{\partial u}{\partial x} \frac{dx}{ds} + \frac{\partial u}{\partial y} \frac{dy}{ds} = \nabla u \cdot \frac{d\mathbf{R}}{ds}. \quad (8.4)$$

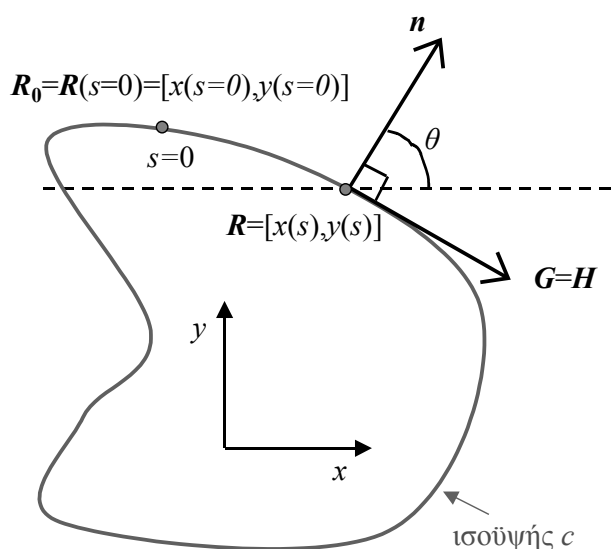
Με τις Εξ. (8.1), (8.2) και (8.3) η Εξ. (8.4) γίνεται

$$\frac{du(x,y)}{ds} = \nabla u \cdot \left[\mathbf{H} - \left(\mathbf{H} \cdot \frac{\nabla u}{|\nabla u|} \right) \frac{\nabla u}{|\nabla u|} \right] = \nabla u \cdot \mathbf{H} - \mathbf{H} \cdot \nabla u = 0 \quad (8.5)$$

Η Εξ. (8.5) λέει ότι αν $\frac{d\mathbf{R}}{ds} = \mathbf{G}$, τότε $\frac{du(x,y)}{ds} = 0$, δηλαδή $u(x,y) = c$. Η ακριβής τιμή του c καθορίζεται από την αρχική συνθήκη της Εξ. (8.3), δηλαδή από το σε ποια ισοϋψή της u δείχνει το \mathbf{R}_0 .

Για την επίλυση της Εξ. (8.3) είναι απαραίτητη η επιλογή διανύσματος \mathbf{H} . Για την απλοποίηση των υπολογισμών, επιλέγεται διάνυσμα $\mathbf{H} \perp \mathbf{n}$, συνεπώς από την Εξ. (8.2) προκύπτει

$$\mathbf{G} = \mathbf{H}. \quad (8.6)$$



Σχήμα 8.1 Το διάνυσμα \mathbf{n} είναι κάθετο στη ζητούμενη ισοϋψή c , το $\mathbf{G} = \mathbf{H}$ το εφαπτόμενο. Ξεκινώντας από σημείο $\mathbf{R}_0 = \mathbf{R}(s=0) = (x_0, y_0)$ και κινούμενοι εφαπτομενικά (κατά την κατεύθυνση του \mathbf{G}) είναι δυνατό να διανύσουμε την ισοϋψή c . θ είναι η γωνία που σχηματίζει το κάθετο διάνυσμα με τον άξονα x .

Η επιλογή $\mathbf{H} \perp \mathbf{n}$ δεν καθορίζει μονοσήμαντα το διάνυσμα \mathbf{H} , καθώς υπάρχουν δύο εφαπτόμενα διανύσματα (με αντίθετη φορά) σε σημείο καμπύλης. Η συμβατική επιλογή είναι το \mathbf{H} (άρα και το \mathbf{G}) να έχει δεξιά το εσωτερικό της ισοϋψούς σε όλο το μήκος της. Τότε, αν θ είναι η γωνία που σχηματίζει το κάθετο στην ισοϋψή με την οριζόντια (άξονας x στο Σχήμα 8.1) τότε το διάνυσμα \mathbf{H} θα «προηγείται» κατά γωνία $\pi/2$ (Σχήμα 8.1). Έτσι, το διάνυσμα \mathbf{H} μπορεί να γραφεί ως

$$\mathbf{H} = |\mathbf{H}| \cos\left(\theta - \frac{\pi}{2}\right) \mathbf{i} + |\mathbf{H}| \sin\left(\theta - \frac{\pi}{2}\right) \mathbf{j}, \quad (8.7)$$

όπου \mathbf{i}, \mathbf{j} τα μοναδιαία διανύσματα στους άξονες x και y .

Αυτό που μένει για τον ακριβή ορισμό του \mathbf{H} είναι το μέτρο του. Για να εκφράζει η μεταβλητή s το μήκος τόξου της ισοϋψούς, πρέπει

$$\left| \frac{d\mathbf{R}}{ds} \right| = \sqrt{\left(\frac{dx}{ds}\right)^2 + \left(\frac{dy}{ds}\right)^2} = 1. \quad (8.8)$$

Η Εξ. (8.8) συνεπάγεται λόγω των Εξ. (8.3) και (8.6) ότι

$$\sqrt{H_1^2 + H_2^2} = 1 \Rightarrow |\mathbf{H}| = 1, \quad (8.9)$$

όπου H_1 και H_2 οι συνιστώσες του \mathbf{H} κατά x και y αντίστοιχα.

Τελικά για την εύρεση ισοϋψούς c συνάρτησης χρειάζεται να λυθεί το σύστημα συνήθων διαφορικών εξισώσεων (ΣΔΕ)

$$\frac{dx}{ds} = H_1 = \cos\left(\theta - \frac{\pi}{2}\right), \quad x(s=0) = x_0, \quad (8.10)$$

$$\frac{dy}{ds} = H_2 = \sin\left(\theta - \frac{\pi}{2}\right), \quad y(s=0) = y_0,$$

όπου (x_0, y_0) σημείο της ισοϋψούς c .

Η γωνία θ είναι συνάρτηση του κάθετου στην ισοϋψή c διανύσματος, \mathbf{n} ,

$$\theta = \begin{cases} a \cos(n_1), & n_2 \geq 0 \\ 2\pi - a \cos(n_1), & n_2 < 0 \end{cases}, \quad (8.11)$$

όπου n_1 και n_2 οι συνιστώσες του \mathbf{n} , κατά x και y .

Ο προτεινόμενος αλγόριθμος εύρεσης της ισοϋψούς c συνάρτησης απαιτεί να είναι γνωστό ένα σημείο της ισοϋψούς c , (x_0, y_0) . Οι συντεταγμένες του σημείου μπορούν να προσδιοριστούν με παρεμβολή στις γνωστές κομβικές τιμές της συνάρτησης.

Τα χαρακτηριστικά του αλγορίθμου που περιγράφηκε συμπληρώνονται από τον τρόπο υπολογισμού του κάθετου διανύσματος \mathbf{n} , δηλαδή τη διακριτοποίηση της Εξ. (8.1) (§8.3), και τη μέθοδο επίλυσης του συστήματος ΣΔΕ της Εξ. (8.10). Στο Παράρτημα Δ περιγράφονται αναλυτικά, δοκιμάζονται και αξιολογούνται ζεύγη μεθόδων Runge-Kutta 5(4) και 4(5) με ελεγχόμενο βήμα και επαληθεύεται ο κώδικας που τα υλοποιεί.

8.3 Υπολογισμός του κάθετου διανύσματος

Το κάθετο διάνυσμα σε ισοϋψή επιφάνεια που εκφράζεται από τη συνάρτηση $z=u(x, y)$ είναι

$$\mathbf{n} = \frac{u_x}{(u_x^2 + u_y^2)^{1/2}} \mathbf{i} + \frac{u_y}{(u_x^2 + u_y^2)^{1/2}} \mathbf{j}. \quad (8.12)$$

Αν η συνάρτηση $u(x, y)$ είναι γνωστή, τότε για τον υπολογισμό του \mathbf{n} , αρκεί ο αναλυτικός υπολογισμός των μερικών παραγώγων της Εξ. (8.12). Στην πράξη, αφού η u είναι αποτέλεσμα αριθμητικών υπολογισμών, είναι γνωστή μόνο σε διακριτά σημεία, στους κόμβους του υπολογιστικού χωρίου. Για αυτή την περίπτωση, δοκιμάστηκαν οι παρακάτω τρόποι υπολογισμού του κάθετου διανύσματος:

Α) Η συνάρτηση u προσεγγίζεται από μια πεπερασμένη σειρά συναρτήσεων,

$$u(x, y) = \sum_{j=1}^N u_j \varphi^j(x, y), \quad (8.13)$$

όπου u_j οι τιμές της συνάρτησης u στους κόμβους του υπολογιστικού χωρίου, φ^j οι συναρτήσεις βάσης (πολύωνυμα συνήθως 1^{ου} ή 2^{ου} βαθμού των x, y) και N το πλήθος των κόμβων του υπολογιστικού χωρίου.

$$u_x = \sum_{j=1}^N u_j \frac{\partial \varphi^j}{\partial x} \text{ και} \quad (8.14)$$

$$u_y = \sum_{j=1}^N u_j \frac{\partial \varphi^j}{\partial y}.$$

Χρησιμοποιούνται γραμμικές συναρτήσεις βάσης.

B) Οι Sethian και Strain πρότειναν τον παρακάτω τρόπο υπολογισμού για το κάθετο διάνυσμα σε κόμβο που βρίσκεται στη θέση i, j του υπολογιστικού χωρίου [Sethian & Strain (1992), Sethian (1999), σ. 70-71]:

$$n_{ij} = \frac{n_{ij}^*}{|n_{ij}^*|}, \quad (8.15)$$

όπου

$$n_{ij}^* = \left\{ \frac{(u_x^+)_{ij}}{\left[(u_x^+)_{ij}^2 + (u_y^+)_{ij}^2 \right]^{1/2}} + \frac{(u_x^-)_{ij}}{\left[(u_x^-)_{ij}^2 + (u_y^+)_{ij}^2 \right]^{1/2}} + \frac{(u_x^+)_{ij}}{\left[(u_x^+)_{ij}^2 + (u_y^-)_{ij}^2 \right]^{1/2}} + \frac{(u_x^-)_{ij}}{\left[(u_x^-)_{ij}^2 + (u_y^-)_{ij}^2 \right]^{1/2}} \right\} \mathbf{i} +$$

$$+ \left\{ \frac{(u_y^+)_{ij}}{\left[(u_x^+)_{ij}^2 + (u_y^+)_{ij}^2 \right]^{1/2}} + \frac{(u_y^-)_{ij}}{\left[(u_x^-)_{ij}^2 + (u_y^+)_{ij}^2 \right]^{1/2}} + \frac{(u_y^+)_{ij}}{\left[(u_x^+)_{ij}^2 + (u_y^-)_{ij}^2 \right]^{1/2}} + \frac{(u_y^-)_{ij}}{\left[(u_x^-)_{ij}^2 + (u_y^-)_{ij}^2 \right]^{1/2}} \right\} \mathbf{j}, \quad (8.16)$$

προσεγγίζοντας τις μερικές παραγώγους με $1^{\text{ης}}$ τάξης πεπερασμένες διαφορές:

$$(u_x^-)_{ij} = \frac{u_{i,j} - u_{i-1,j}}{\Delta x}, \quad (u_x^+)_{ij} = \frac{u_{i+1,j} - u_{i,j}}{\Delta x}, \quad (u_y^-)_{ij} = \frac{u_{i,j} - u_{i,j-1}}{\Delta y}, \quad (u_y^+)_{ij} = \frac{u_{i,j+1} - u_{i,j}}{\Delta y}. \quad (8.17)$$

Οι Εξ. (8.15), (8.16) και (8.17) εφαρμόζονται με κατάλληλες μετατροπές και σε σημεία που δεν είναι κόμβοι του πλέγματος.

Γ) Υιοθετείται η προσέγγιση που περιγράφεται από τις Εξ. (8.15) και (8.16) με τη διαφορά ότι δεν χρησιμοποιούνται αποκλειστικά $1^{\text{ης}}$ τάξης διαφορές για την προσέγγιση των μερικών παραγώγων: Οι μερικές παράγωγοι της Εξ. (8.16) μπορούν να προσεγγιστούν με τα υψηλότερης τάξης ENO και WENO σχήματα που περιγράφονται στην §6.2.3 και χρησιμοποιούνται κατά την επίλυση της εξίσωσης ισοϋψών [Εξ. (6.1)]. Το σχήμα που επιλέγεται για την προσέγγιση των μερικών παραγώγων της Εξ. (8.16) είναι το ίδιο με αυτό που χρησιμοποιείται για την προσέγγιση των χωρικών παραγώγων της εξίσωσης ισοϋψών.

Ο υπολογισμός του καθέτου διανύσματος από την Εξ. (8.16), ανεξάρτητα με το αν χρησιμοποιούνται $1^{\text{ης}}$ ή υψηλότερης τάξης προσεγγίσεις για τις μερικές παραγώγους, αφορά μόνο τους κόμβους του υπολογιστικού χωρίου. Ο υπολογισμός του καθέτου διανύσματος

κατά τη διαδικασία επίλυσης του συστήματος της Εξ. (8.10) είναι αναγκαίος σε σημεία που δεν είναι κόμβοι.

Το κάθετο διάνυσμα σε τυχαίο σημείο του υπολογιστικού χωρίου προκύπτει με παρεμβολή στις τιμές n_{ij} . Πρόκειται για πρόβλημα παρεμβολής διανυσματικής συνάρτησης $n(x,y)$ σε δύο διαστάσεις. Το πρόβλημα επιλύεται με κατασκευή πολυωνύμων παρεμβολής με την ιδιότητα οι τιμές τους στους κόμβους του υπολογιστικού χωρίου να είναι ίσες με τις τιμές της προσεγγιζόμενης συνάρτησης. Ο βαθμός των πολυωνύμων παρεμβολής της συνάρτησης $n(x,y)$ σχετίζεται με το βαθμό των αντίστοιχων πολυωνύμων της συνάρτησης $u(x,y)$ από την οποία προκύπτει η $n(x,y)$ [Εξ. (8.16)]. Για την προσέγγιση της διανυσματικής συνάρτησης $n(x,y)$ κατασκευάζονται τοπικά πολυώνυμα παρεμβολής³¹ με τον αλγόριθμο Neville [Press et al. (1997), σ. 108-110].

8.4 Μελέτη ακρίβειας

Η μελέτη ακρίβειας αφορά κυρίως την εφαρμογή ενδιαφέροντος, δηλαδή την εύρεση ισοϋψούς μηδέν της αριθμητικής λύσης της εξίσωσης ισοϋψών.³² Στη συνέχεια, εξετάζεται η επίδραση του τρόπου υπολογισμού του κάθετου διανύσματος, n , στην ακρίβεια των υπολογισμών. Επίσης, συγκρίνεται η ακρίβεια του προτεινόμενου αλγόριθμου με τον αλγόριθμο για την εύρεση ισοϋψών που είναι διαθέσιμος στο MATLAB.

Στο πλαίσιο του «γενικού» προβλήματος εξέλιξης συνόρου (§5.4), η συνάρτηση στην οποία εφαρμόζεται ο αλγόριθμος εύρεσης ισοϋψούς είναι η συνάρτηση ισοϋψών, δηλαδή η αριθμητική λύση της εξίσωσης ισοϋψών:

$$u_t + F|\nabla u| = 0, u(x,t=0) = q(x), x \in \Omega, \quad (8.18)$$

όπου $q(x)$ η αρχική συνθήκη και Ω το υπολογιστικό χωρίο.

Αναζητείται η ισοϋψής μηδέν της συνάρτησης ισοϋψών και επιθυμητό είναι η διαδικασία εύρεσης ισοϋψούς να μην αλλοιώνει την ακρίβεια της συνάρτησης ισοϋψών [αριθμητικής λύσης u της Εξ. (8.18)]. Είναι δύσκολο να οριστεί ένα κοινό μέτρο για την ακρίβεια της συνάρτησης ισοϋψών $u(x,y)$ και της ισοϋψούς της u , $R(s)$. Η πρώτη είναι βαθμωτή συνάρτηση δύο μεταβλητών και η δεύτερη διανυσματική συνάρτηση μίας μεταβλητής, συνεπώς η τιμή του σφάλματος δεν μπορεί να αποτελέσει μέτρο για την ακρίβεια. Αντί της τιμής του σφάλματος, εξετάζεται η μεταβολή του σφάλματος και στις δύο

³¹ Το πολυώνυμο βαθμού k που παρεμβάλλει μια συνάρτηση f σε $k+1$ σημεία (οι τιμές του στα σημεία αυτά είναι ίσες με τις τιμές της προσεγγιζόμενης συνάρτησης) είναι μοναδικό [Παπαγεωργίου & Τσίτουρας (2000), σ. 195]. Συνεπώς, τα πολυώνυμα Lagrange, Newton ή αυτά που κατασκευάζονται με τον αλγόριθμο Neville, και παρεμβάλλουν μια συνάρτηση σε συγκεκριμένο πλήθος σημείων, είναι διαφορετικές εκφράσεις του ίδιου πολυωνύμου.

³² Το πρώτο βήμα στην μελέτη είναι η επαλήθευση του κώδικα επίλυσης συστήματος διαφορικών εξισώσεων με τα ζεύγη μεθόδων Runge-Kutta 5(4) και 4(5) που χρησιμοποιούνται (Παράρτημα Δ).

λύσεις $[u(x,y)$ και $\mathbf{R}(s)]$ καθώς το πλέγμα διακριτοποίησης για την Εξ. (8.18) πυκνώνει, δηλαδή υπολογίζεται η παρατηρούμενη τάξη ακρίβειας κάθε λύσης. Αν η παρατηρούμενη τάξη ακρίβειας για την $\mathbf{R}(s)$ δεν είναι μικρότερη από αυτή της $u(x,y)$, θεωρείται ότι η ακρίβεια των υπολογισμών δεν αλλοιώνεται με την εύρεση της ισοϋψούς.

Εξετάζονται δύο προβλήματα, ένα όπου η ισοϋψής μηδέν είναι λεία και ένα όπου υπάρχει ασυνέχεια στην κλίση της ισοϋψούς. Στο πρόβλημα 8.A, υπολογίζεται η ισοϋψής μηδέν της συνάρτησης ισοϋψών που προκύπτει από την αριθμητική επίλυση της Εξ. (8.18) με παραμέτρους:

$$\text{Πρόβλημα 8.A: } \left\{ \begin{array}{l} \Omega = [0,1] \times [0,1], F = 1 \text{ και} \\ q(x,y) = \sqrt{(x-0.5)^2 + (y-0.5)^2} - 0.1 \end{array} \right\}^{\text{91}}$$

Τη χρονική στιγμή $t=0.25$, η πραγματική λύση της Εξ. (8.18) (πρόβλημα 8.A) είναι (Σχήμα 8.2α)

$$u_{real}(x,y,t=0.25) = \sqrt{(x-0.5)^2 + (y-0.5)^2} - 0.35,$$

και η πραγματική ισοϋψής μηδέν της $u_{real}(x,y,t=0.25)$, όταν $\mathbf{R}_0 = \mathbf{R}(s=0) = (x_0, y_0) = (0.15, 0.5)$ είναι (Σχήμα 8.2β):

$$\mathbf{R}_{real}(s) = [x(s), y(s)] = \left[0.15 + 0.35 \cos\left(\pi - \frac{s}{0.35}\right), 0.5 + 0.35 \sin\left(\pi - \frac{s}{0.35}\right) \right]. \quad (8.19)$$

Στο πρόβλημα 8.B, υπολογίζεται η ισοϋψής μηδέν της συνάρτησης ισοϋψών που προκύπτει από την αριθμητική επίλυση της Εξ. (8.18) με παραμέτρους:

$$\text{Πρόβλημα 8.B: } \left\{ \begin{array}{l} \Omega = [0,1] \times [0,1], F = -1 \text{ και} \\ q(x,y) = \text{προσημασμένη απόσταση από τετράγωνο πλευράς 0.7} \\ \text{με σημείο τομής των διαγωνίων του το } (0.5, 0.5) \end{array} \right\}.$$

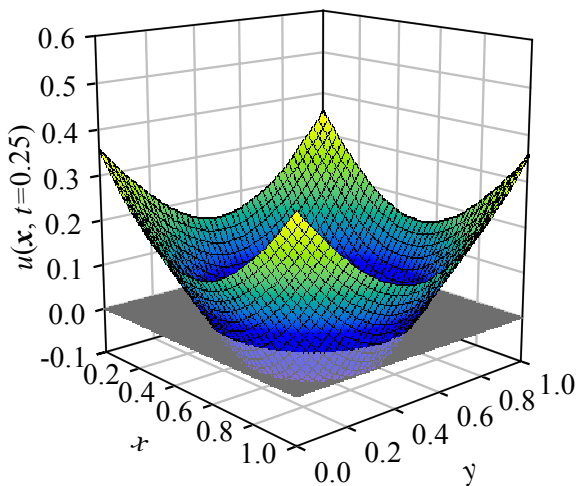
Τη χρονική στιγμή $t=0.25$, η πραγματική λύση της Εξ. (8.18) (πρόβλημα 8.B) είναι (Σχήμα 8.2γ)

$$u_{real}(x,y,t=0.25) = \text{προσημασμένη απόσταση από τετράγωνο πλευράς 0.2 με σημείο τομής των διαγωνίων του το } (0.5, 0.5).$$

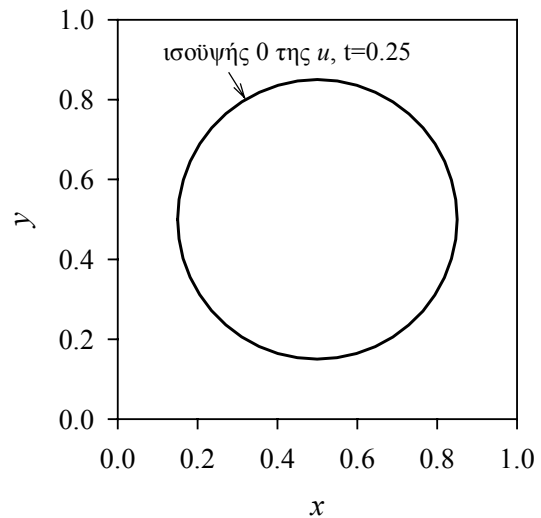
⁹¹ Η $q(x,y)$ είναι η προσημασμένη απόσταση από κύκλο ακτίνας 0.1 και κέντρου (0.5,0.5).

Η πραγματική ισοϋψής μηδέν της $u_{real}(x,y,t=0.25)$, όταν $\mathbf{R}_0=\mathbf{R}(s=0)=(x_0,y_0)=(0.4,0.5)$ είναι (Σχήμα 8.2δ):

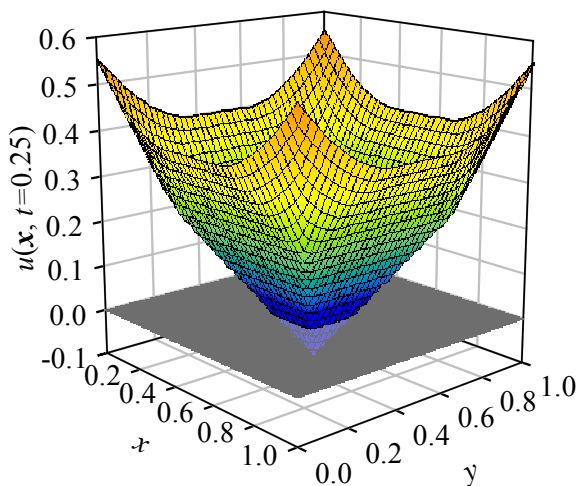
$$\mathbf{R}_{real}(s)=[x(s),y(s)] \left\{ \begin{array}{ll} [0.4,0.5+s], & 0 \leq s \leq 0.1 \\ [0.4+(s-0.1),0.6], & 0.1 < s \leq 0.3 \\ [0.6,0.6-(s-0.3)], & 0.3 < s \leq 0.5 \\ [0.6-(s-0.5),0.4], & 0.5 < s \leq 0.7 \\ [0.4,0.4+(s-0.7)], & 0.7 < s < 0.8 \end{array} \right. . \quad (8.20)$$



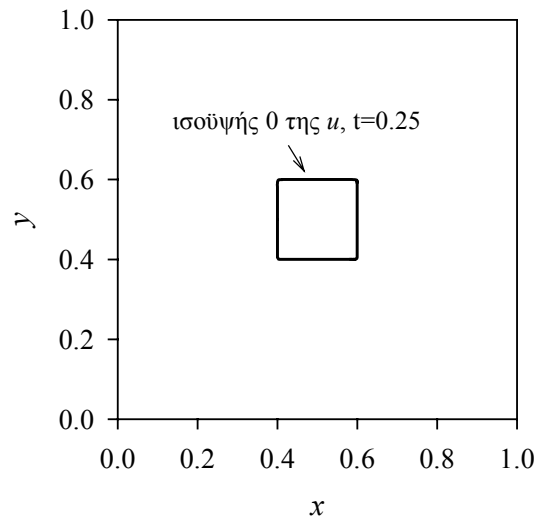
(α)



(β)



(γ)



(δ)

Σχήμα 8.2 (α) Η πραγματική συνάρτηση ισοϋψών για το πρόβλημα 8.A όταν $t=0.25$. (β) Η πραγματική ισοϋψής μηδέν της συνάρτησης ισοϋψών του (α). (γ) Τα ίδια με (α) για το πρόβλημα 8.B. (δ) Τα ίδια με (β) για το πρόβλημα 8.B.

Για τον υπολογισμό της συνάρτησης ισοϋψών [αριθμητική λύση Εξ. (8.18)] χρησιμοποιείται το αριθμητικό σχήμα SSPRK3/OS/WENO5 (§6.2). Στους Πίνακες 8.I και 8.II φαίνεται το σφάλμα στην υπολογιζόμενη συνάρτηση ισοϋψών $u(x,y,t=0.25)$, καθώς το

$\Delta x = \Delta y$ μειώνεται, για τα προβλήματα 8.A και 8.B αντίστοιχα. Στους ίδιους πίνακες φαίνεται και το σφάλμα της υπολογιζόμενης ισοϋψούς μηδέν και η παρατηρούμενη τάξη σε κάθε περίπτωση. Δοκιμάζονται οι τρεις τρόποι υπολογισμού του κάθετου διανύσματος της §8.3. Για το (Γ) τρόπο της §8.3 έχει χρησιμοποιηθεί σχήμα WENO5 για την προσέγγιση των μερικών παραγώγων της Εξ. (8.16) [το ίδιο με το σχήμα προσέγγισης των χωρικών παραγώγων της συνάρτησης ισοϋψών της Εξ. (8.18)] και πολυώνυμα παρεμβολής της συνάρτησης $n(x,y)$ βαθμού 1^{ου} έως και 4^{ου}. Δοκιμάζεται επίσης και ο αλγόριθμος που είναι διαθέσιμος στο MATLAB (συνάρτηση *contourc*), ο οποίος δίνει την ισοϋπή συνάρτησης εντοπίζοντας τα στοιχεία του υπολογιστικού χωρίου από τα οποία διέρχεται η ζητούμενη ισοϋψής και υλοποιώντας γραμμική παρεμβολή σε κάθε ένα από αυτά [MATLAB 6.5 help (2002)].

Για το πρόβλημα 8.A, όπου η ισοϋψής μηδέν είναι λεία, το συμπέρασμα που προκύπτει είναι ότι, αν χρησιμοποιηθούν ο (Α) ή ο (Β) τρόπος υπολογισμού του κάθετου διανύσματος της §8.3 ή χρησιμοποιηθεί ο διαθέσιμος αλγόριθμος από το MATLAB, η παρατηρούμενη τάξη ακρίβειας στην υπολογιζόμενη ισοϋπή μηδέν είναι χαμηλότερη από αυτή της υπολογιζόμενης συνάρτησης ισοϋψών. Αν ο (Γ) τρόπος της §8.3 χρησιμοποιηθεί, τα αποτελέσματα είναι καλύτερα. Σημαντικός είναι ο ρόλος του βαθμού των πολυωνύμων παρεμβολής: όταν ο βαθμός είναι ≥ 3 , οι παρατηρούμενες τάξεις στην υπολογιζόμενη συνάρτηση ισοϋψών και στην υπολογιζόμενη ισοϋπή μηδέν αυτής συμφωνούν.

Πίνακας 8.1 Μεταβολή του σφάλματος της υπολογιζόμενης συνάρτησης ισοϋψών [της αριθμητικής λύσης της Εξ. (8.18)] ($\|u - u_{real}\|_2 / \|u_{real}\|_2$) και της υπολογιζόμενης ισοϋψούς ($\|R - R_{real}\|_F / \|R_{real}\|_F$), καθώς το $\Delta x = \Delta y$ μειώνεται για το πρόβλημα 8.A. Φαίνονται αποτελέσματα και για τους τρεις τρόπους υπολογισμού του κάθετου διανύσματος της §8.3. Για το (Γ) τρόπο της §8.3 έχει χρησιμοποιηθεί σχήμα WENO5 για την προσέγγιση των χωρικών παραγώγων της Εξ. (8.16) και ο βαθμός των πολυωνύμων παρεμβολής (β.π.π) για τη συνάρτηση $n(x,y)$ είναι 1 έως και 4. Φαίνονται επίσης τα αποτελέσματα και για τον αλγόριθμο εύρεσης ισοϋψούς που είναι διαθέσιμος στο MATLAB (συνάρτηση *contourc*). Σε κάθε περίπτωση υπολογίζεται η παρατηρούμενη τάξη ακρίβειας.

$\Delta x = \Delta y$	Υπολογιζόμενη συνάρτηση ισοϋψών [TVDRK3/Godunov/WENO5]		Υπολογιζόμενη ισοϋψής [(A) συναρτήσεις βάσης]		Υπολογιζόμενη ισοϋψής [(B) Sethian & Strain]		Υπολογιζόμενη ισοϋψής [αλγόριθμος MATLAB]	
	Σφάλμα	Τάξη	Σφάλμα	Τάξη	Σφάλμα	Τάξη	Σφάλμα	Τάξη
0.1	1.13E+00		1.91E-03		1.96E-03		2.80E-02	
0.05	1.74E-01	2.69	1.24E-03	0.63	1.22E-03	0.68	3.80E-03	2.88
0.025	7.89E-03	4.47	3.69E-04	1.75	3.59E-04	1.77	3.52E-04	3.43
0.0125	2.49E-04	4.99	1.90E-04	0.96	1.95E-04	0.88	1.50E-04	1.23
0.00625	7.14E-06	5.12	1.38E-04	0.46	1.64E-04	0.25	3.21E-05	2.22
$\Delta x = \Delta y$	Υπολογιζόμενη ισοϋψής [(Γ), WENO5, β.π.π=1]		Υπολογιζόμενη ισοϋψής [(Γ), WENO5, β.π.π=2]		Υπολογιζόμενη ισοϋψής [(Γ), WENO5, β.π.π=3]		Υπολογιζόμενη ισοϋψής [(Γ), WENO5, β.π.π=4]	
	Σφάλμα	Τάξη	Σφάλμα	Τάξη	Σφάλμα	Τάξη	Σφάλμα	Τάξη
0.1	8.22E-04		4.08E-03		5.63E-04		7.43E-04	
0.05	1.68E-03	-1.03	1.03E-03	1.99	1.65E-03	-1.55	1.74E-03	-1.23
0.025	2.21E-04	2.92	1.48E-04	2.79	1.61E-04	3.36	1.68E-04	3.37
0.0125	2.91E-06	6.25	6.59E-06	4.49	5.01E-06	5.00	4.98E-06	5.08
0.00625	4.56E-06	-0.65	1.33E-06	2.30	1.34E-07	5.22	1.20E-07	5.37

Για το πρόβλημα 8.B, όπου η ισοϋψής μηδέν εμφανίζει ασυνεχή κλίση σε κάποια σημεία της, το συμπέρασμα που προκύπτει είναι ότι όλοι οι τρόποι υπολογισμού του καθέτου δίνουν σχεδόν το ίδιο αποτέλεσμα για την ισοϋψή μηδέν. Η παρατηρούμενη τάξη στην ισοϋψή μηδέν είναι ίδια σε κάθε περίπτωση με την παρατηρούμενη τάξη ακρίβειας της υπολογιζόμενης συνάρτησης ισοϋψών.

Πίνακας 8.11 Μεταβολή του σφάλματος της υπολογιζόμενης συνάρτησης ισοϋψών [της αριθμητικής λύσης της Εξ. (8.18)] ($\|\mathbf{u} - \mathbf{u}_{real}\|_2 / \|\mathbf{u}_{real}\|_2$) και της υπολογιζόμενης ισοϋψούς ($\|\mathbf{R} - \mathbf{R}_{real}\|_F / \|\mathbf{R}_{real}\|_F$), καθώς το $\Delta x = \Delta y$ μειώνεται για το πρόβλημα 8.B. Φαίνονται αποτελέσματα και για τους τρεις τρόπους υπολογισμού του καθέτου διανύσματος της §8.3. Για το (Γ) τρόπο της §8.3 έχει χρησιμοποιηθεί σχήμα WENO5 για την προσέγγιση των χωρικών παραγώγων της Εξ. (8.16) και ο βαθμός των πολυωνύμων παρεμβολής (β.π.π) για τη συνάρτηση $\mathbf{n}(x,y)$ είναι 1 έως και 4. Φαίνονται επίσης τα αποτελέσματα και για τον αλγόριθμο εύρεσης ισοϋψούς που είναι διαθέσιμος στο MATLAB (συνάρτηση *contour*). Σε κάθε περίπτωση υπολογίζεται η παρατηρούμενη τάξη ακρίβειας.

$\Delta x = \Delta y$	Υπολογιζόμενη συνάρτηση ισοϋψών [TVDRK3/Godunov/WENO5]		Υπολογιζόμενη ισοϋψής [(A) συναρτήσεις βάσης]		Υπολογιζόμενη ισοϋψής [(B) Sethian & Strain]		Υπολογιζόμενη ισοϋψής [αλγόριθμος MATLAB]	
	Σφάλμα	Τάξη	Σφάλμα	Τάξη	Σφάλμα	Τάξη	Σφάλμα	Τάξη
0.1	7.72E-01		1.08E-01		1.07E-01		2.24E-01	
0.05	3.27E-01	1.24	5.89E-02	0.88	5.92E-02	0.85	9.21E-02	1.28
0.025	1.42E-01	1.21	3.50E-02	0.75	3.27E-02	0.86	5.27E-02	0.81
0.0125	6.27E-02	1.18	1.75E-02	1.00	1.69E-02	0.95	2.73E-02	0.95
0.00625	2.69E-02	1.22	8.98E-03	0.97	9.16E-03	0.88	1.38E-02	0.98

$\Delta x = \Delta y$	Υπολογιζόμενη ισοϋψής [(Γ), WENO5, β.π.π=1]		Υπολογιζόμενη ισοϋψής [(Γ), WENO5, β.π.π=2]		Υπολογιζόμενη ισοϋψής [(Γ), WENO5, β.π.π=3]		Υπολογιζόμενη ισοϋψής [(Γ), WENO5, β.π.π=4]	
	Σφάλμα	Τάξη	Σφάλμα	Τάξη	Σφάλμα	Τάξη	Σφάλμα	Τάξη
0.1	9.91E-02		1.15E-01		1.07E-01		9.40E-02	
0.05	6.31E-02	0.65	2.65E-02	2.11	4.63E-02	1.21	4.22E-02	1.16
0.025	3.17E-02	0.99	2.06E-02	0.36	2.66E-02	0.80	2.47E-02	0.77
0.0125	1.70E-02	0.90	1.20E-02	0.78	1.38E-02	0.94	1.40E-02	0.82
0.00625	8.31E-03	1.03	5.99E-03	1.00	8.08E-03	0.78	7.24E-03	0.95

Και για τα δύο παραδείγματα, ο προτεινόμενος αλγόριθμος εύρεσης ισοϋψούς χρησιμοποιώντας τον (Γ) τρόπο της §8.3 για τον υπολογισμό του καθέτου διανύσματος διατηρεί την παρατηρούμενη ακρίβεια της υπολογιζόμενης συνάρτησης ισοϋψών. Στα ίδια συμπεράσματα καταλήγει κανείς, αν χρησιμοποιήσει για τον αριθμητικό υπολογισμό της συνάρτησης ισοϋψών [αριθμητική επίλυση της Εξ. (8.18)] και τα υπόλοιπα σχήματα της §6.2 και εφαρμόσει το αντίστοιχο αριθμητικό σχήμα για την προσέγγιση των μερικών παραγώγων της Εξ. (8.16) [π.χ. αν το αριθμητικό σχήμα SSPRK3/OS/WENO3 χρησιμοποιηθεί για την επίλυση της Εξ. (8.18), το αριθμητικό σχήμα WENO3 εφαρμόζεται για την προσέγγιση των χωρικών παραγώγων της Εξ. (8.16)]. Στα παραδείγματα που εξετάστηκαν, ο ενδεδειγμένος βαθμός των πολυωνύμων παρεμβολής για τον υπολογισμό του καθέτου διανύσματος [(Γ) τρόπος] είναι $\geq k - 1$, όπου k η τάξη ακρίβειας προσέγγισης των χωρικών παραγώγων. Για παράδειγμα, όταν χρησιμοποιείται το σχήμα WENO3, ο ενδεδειγμένος βαθμός παρεμβολής είναι ≥ 2 .

8.5 Αξιολόγηση

Η εύρεση ισοϋψούς της συνάρτησης ισοϋψών είναι το βήμα του αλγορίθμου του «γενικού» προβλήματος εξέλιξης συνόρου (§5.10) στο οποίο από την πεπλεγμένη απεικόνιση συνόρου (συνάρτηση ισοϋψών) προκύπτει η άμεση (§5.2). Στο σύνολο των εργασιών που αφορούν στην επίλυση προβλημάτων εξέλιξης συνόρου με τη μέθοδο των ισοϋψών, ο υπολογισμός της ισοϋψούς μηδέν, δηλαδή του κινούμενου συνόρου, θεωρείται δεδομένος και δεν δίνονται περαιτέρω διευκρινήσεις επί των απαιτήσεων που πρέπει αυτός να ικανοποιεί. Στην προηγούμενη παράγραφο φάνηκε (Πίνακες 8.I και 8.II) ότι ο αλγόριθμος εύρεσης της ισοϋψούς μηδέν υπολογιζόμενης συνάρτησης ισοϋψών μπορεί να αλλοιώσει την ακρίβεια υπολογισμού της συνάρτησης ισοϋψών και να κάνει άσκοπη τη χρήση σχημάτων υψηλής τάξης ακρίβειας για την επίλυση της εξίσωσης ισοϋψών.

Το αριθμητικό πρόβλημα του αλγορίθμου που περιγράφεται είναι ένα σύστημα συνήθων διαφορικών εξισώσεων, το οποίο επιλύεται με ζεύγος μεθόδων Runge-Kutta υψηλής τάξης ακρίβειας. Η χρησιμοποίηση ζεύγους μεθόδων Runge-Kutta εμφανίζει το πλεονέκτημα του μεταβλητού και προσαρμοζόμενου βήματος ολοκλήρωσης.

Ο αλγόριθμος που περιγράφεται διατηρεί την ακρίβεια της αριθμητικής λύσης της εξίσωσης ισοϋψών, τουλάχιστο για τα παραδείγματα που εξετάστηκαν. Μπορεί να χρησιμοποιηθεί γενικά σε προβλήματα εύρεσης ισοϋψών συνάρτησης και δίνει εκτός από τα σημεία της ισοϋψούς και τη σειρά τους. Ο ακριβής εντοπισμός του πρώτου σημείου της ισοϋψούς είναι κρίσιμος στους αριθμητικούς υπολογισμούς, διότι ο αλγόριθμος της §8.2 δίνει την ισοϋψή στην οποία ανήκει το πρώτο σημείο. Στο ίδιο πλαίσιο, ένα πιθανό μειονέκτημα του προτεινόμενου αλγορίθμου είναι ότι αν κατά το βηματισμό επίλυσης αλλάξει, λόγω αριθμητικού σφάλματος, η ισοϋψής πάνω στην οποία γίνεται ο βηματισμός, αυτός θα συνεχιστεί πάνω στη νέα ισοϋψή. Τέλος, στα πλαίσια επέκτασης της μεθόδου ισοϋψών σε τρεις διαστάσεις, θα πρέπει και ο αλγόριθμος εύρεσης ισοϋψούς να τροποποιηθεί κατάλληλα, ώστε να υπολογίζει ισοεπιφάνειες.

Κεφάλαιο 9

Προεκβολή ταχύτητας συνόρου στο υπολογιστικό χωρίο επίλυσης της εξίσωσης ισοϋψών

Η προεκβολή της ταχύτητας του συνόρου στο υπολογιστικό χωρίο είναι αναγκαία για την επίλυση της εξίσωσης ισοϋψών. Περιγράφονται συνοπτικά οι μέθοδοι για την προεκβολή της ταχύτητας που έχουν χρησιμοποιηθεί, και με μεγαλύτερη λεπτομέρεια η επιλεγείσα μέθοδος των Adalsteinsson και Sethian [Adalsteinsson & Sethian (1999)]. Η μέθοδος αυτή εκμεταλλεύεται την ταχύτητα της μεθόδου ταχυ-βηματισμού (§7.4) και διατηρεί τη συνάρτηση ισοϋψών ως προσημασμένη απόσταση από το σύνορο. Μέσα από την επίλυση δύο προβλημάτων προεκβολής, σημειώνεται η επίδραση της προεκβολής ταχύτητας του συνόρου στην ακρίβεια υπολογισμού της θέσης του συνόρου με τη μέθοδο των ισοϋψών.

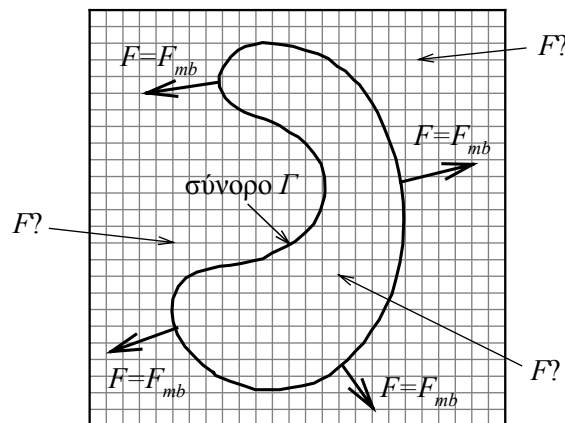
9.1 Εισαγωγή

Για την αριθμητική επίλυση της εξίσωσης ισοϋψών⁹¹

$$u_t + F|\nabla u| = 0, \text{ όπου } u(\mathbf{x}, t=0) = q(\mathbf{x}), \mathbf{x} \in \Omega, \quad (9.1)$$

χρειάζεται να είναι γνωστή η ταχύτητα F σε όλο το υπολογιστικό χωρίο Ω . Στο πλαίσιο εξέλιξης συνόρου με τη μέθοδο των ισοϋψών, σε πολλές περιπτώσεις η ταχύτητα F είναι γνωστή μόνο πάνω στην ισοϋψή μηδέν, δηλαδή το κινούμενο σύνορο. Για παράδειγμα, σε εφαρμογές όπως η εγχάραξη και η απόθεση, δεν υπάρχει φυσικός ορισμός της ταχύτητας εγχάραξης και απόθεσης σε σημεία διαφορετικά του κινούμενου συνόρου. Αν F_{mb} είναι η ταχύτητα του κινούμενου συνόρου, για την επίλυση της Εξ. (9.1) χρειάζεται να γίνει προεκβολή της F_{mb} σε όλο το υπολογιστικό χωρίο Ω , οπότε και προκύπτει η F [βήμα (Δ) αλγορίθμου «γενικού» προβλήματος εξέλιξης συνόρου, §5.10]. Η σχέση μεταξύ F και F_{mb} είναι

$$F = F_{mb} \text{ για } \mathbf{x} \in \Omega: u(\mathbf{x}, t) = 0. \quad (9.2)$$



Σχήμα 9.1 Το πρόβλημα προεκβολής της ταχύτητας F_{mb} του κινούμενου συνόρου (ισοϋψούς μηδέν) στο υπολογιστικό χωρίο. Απόδοση τιμών στη συνάρτηση F .

Οι τιμές της F σε σημεία διαφορετικά του κινούμενου συνόρου δεν έχουν φυσική σημασία, αντιπροσωπεύουν την ταχύτητα των ισοϋψών εκτός της μηδενικής. Θεωρητικά, η ταχύτητα των ισοϋψών εκτός της μηδενικής δεν επηρεάζει την εξέλιξη της ισοϋψούς μηδέν. Ωστόσο, επιδρά σημαντικά στην αριθμητική επίλυση της Εξ. (9.1): η διακριτοποίηση στο χώρο απαιτεί τιμές της u και της F και σε σημεία διαφορετικά της ισοϋψούς μηδέν.

⁹¹ Στο υπόλοιπο του κεφαλαίου χρησιμοποιείται το σύμβολο u για την άγνωστη συνάρτηση, αντί του συμβόλου φ που χρησιμοποιήθηκε στο Κεφ. 5. Ο συμβολισμός φ αναφέρεται σε έμμεση συνάρτηση περιγραφής συνόρου και ο συμβολισμός u αφορά στην άγνωστη συνάρτηση σε ένα αριθμητικό πρόβλημα.

Στις επόμενες παραγράφους περιγράφονται μέθοδοι προεκβολής της ταχύτητας του συνόρου σε όλο το υπολογιστικό χωρίο επίλυσης της εξίσωσης ισοϋψών (§9.2), και με μεγαλύτερη λεπτομέρεια (§9.3) η μέθοδος που προτείνουν οι Adalsteinsson και Sethian [Adalsteinsson & Sethian (1999)]. Εξετάζεται η επίδραση της προεκβολής ταχύτητας του κινούμενου συνόρου στο υπολογιστικό χωρίο στον υπολογισμό της θέσης του συνόρου με τη μέθοδο των ισοϋψών (§9.4). Τέλος, αναφέρονται τα βασικά συμπεράσματα της μελέτης (§9.5). Η επαλήθευση του κώδικα που υλοποιεί τη μέθοδο προεκβολής που επιλέγεται βρίσκεται στην §A.5.3.

9.2 Μέθοδοι προεκβολής της ταχύτητας του συνόρου

Ο μαθηματικός περιορισμός που πρέπει η ταχύτητα F να ικανοποιεί, είναι πλησιάζοντας στο σύνορο να παίρνει τις τιμές της ταχύτητας στο σύνορο, F_{mb} [Adalsteinsson & Sethian (1999)]:

$$\lim_{x \rightarrow a} F(\mathbf{x}) = F_{mb}(\mathbf{a}), \quad (9.3)$$

όπου \mathbf{a} είναι σημείο του συνόρου.

Ο περιορισμός της Εξ. (9.3) δίνει μεγάλη ελευθερία στη μέθοδο προεκβολής. Οι επιπλέον της Εξ. (9.3), περιορισμοί είναι η ακρίβεια της αριθμητικής λύσης της εξίσωσης ισοϋψών (για την επίλυση της οποίας είναι απαραίτητη η προεκβολή της ταχύτητας) και το υπολογιστικό κόστος της μεθόδου προεκβολής.

Στη συνέχεια περιγράφονται μέθοδοι που έχουν χρησιμοποιηθεί για τον υπολογισμό της F :

A) Σε προβλήματα εξέλιξης συνόρου – διεπιφάνειας ρευστών, στην ταχύτητα F μπορεί να αποδοθεί η πραγματική ταχύτητα των ρευστών [Sussman et al. (1994)].

B) Στην ταχύτητα F σε σημείο \mathbf{x} του υπολογιστικού χωρίου αποδίδεται τιμή ίση με την F_{mb} στο κοντινότερο στο \mathbf{x} σημείο του συνόρου [Hsiau et al. (1997)]. Η εύρεση του κοντινότερου στο σημείο \mathbf{x} σημείου του συνόρου έχει υψηλό υπολογιστικό κόστος.

Γ) Οι Adalsteinsson και Sethian προτείνουν την παρακάτω εξίσωση [Adalsteinsson & Sethian (1999)]

$$\nabla F \cdot \nabla u = 0, \quad (9.4)$$

για την προεκβολή της F στο υπολογιστικό χωρίο επίλυσης της εξίσωσης ισοϋψών.

Πρακτικά, η Εξ. (9.4) συνεπάγεται ότι οι ισοϋψείς της F είναι κάθετες στις ισοϋψείς της u . Στη συνέχεια αναδεικνύεται μια σημαντική συνέπεια της Εξ. (9.4). Έστω F, u παραγωγίσιμες συναρτήσεις. Είναι

$$\frac{d|\nabla u|^2}{dt} = \frac{d}{dt}(\nabla u \cdot \nabla u) = 2\nabla u \cdot \frac{d}{dt}\nabla u = 2\nabla u \cdot \nabla u_t. \quad (9.5)$$

Από την Εξ. (9.1) προκύπτει ότι

$$\nabla u_t = -\nabla(F|\nabla u|) \quad (9.6)$$

Συνεπώς η Εξ. (9.5) γίνεται

$$\frac{d|\nabla u|^2}{dt} = -2\nabla u \cdot \nabla(F|\nabla u|) = -2F\nabla u \cdot \nabla|\nabla u| - 2|\nabla u|\nabla u \cdot \nabla F. \quad (9.7)$$

Λόγω της Εξ. (9.4), η Εξ. (9.7) γίνεται

$$\frac{d|\nabla u|^2}{dt} = -2F\nabla u \cdot \nabla|\nabla u|. \quad (9.8)$$

Μια λύση της Εξ. (9.8) είναι η $|\nabla u| = c$, η οποία αν u είναι η προσημασμένη απόσταση από το κινούμενο σύνορο τη χρονική στιγμή $t=0$, είναι η $|\nabla u| = 1$. Επομένως, αν $\nabla F \cdot \nabla u = 0 \Rightarrow |\nabla u| = 1$, με την προϋπόθεση ότι η λύση $|\nabla u| = 1$ είναι η μοναδική λύση της Εξ. (9.8). Αυστηρότερα [χωρίς την απόδειξη για τη μοναδικότητα της λύσης της Εξ. (9.8)], η $\nabla F \cdot \nabla u = 0$ είναι αναγκαία συνθήκη για να διατηρηθεί η u προσημασμένη απόσταση. Από την Εξ. (9.7) είναι φανερό ότι μια τυχαία επιλογή της F οδηγεί την u σε απόκλιση από την προσημασμένη απόσταση.

Οι απαραίτητες βοηθητικές συνθήκες για την επίλυση της Εξ. (9.4) περιγράφονται στην §9.4. Οι Adalsteinsson και Sethian χρησιμοποιούν τη μέθοδο ταχυ-βηματισμού για την επίλυση της Εξ. (9.4) [Adalsteinsson & Sethian (1999)].

Δ) Οι Peng et al. προτείνουν, για την προεκβολή της F_{mb} σε όλο το υπολογιστικό χωρίο, την επίλυση της υπερβολικής εξίσωσης [Peng et al. (1999)]

$$F_t + S(u)\mathbf{n} \cdot \nabla F = 0, \quad (9.9)$$

όπου \mathbf{n} είναι το κάθετο στις ισοϋψείς της u διάνυσμα [Εξ. (5.7)], τ ο χρόνος και $S(u)$ η συνάρτηση που δίνει το πρόσημο της u ,

$$S(u) = \begin{cases} -1, & u < 0 \\ 0, & u = 0 \\ 1, & u > 0 \end{cases}, \quad (9.10)$$

η οποία συνήθως προσεγγίζεται από την

$$\hat{S}(u) = \frac{u}{\sqrt{u^2 + \delta^2}}, \quad (9.11)$$

όπου δ μια μικρή σταθερά που παρεμποδίζει τη διαίρεση με το μηδέν.

Η Εξ. (9.9) λύνεται μέχρι τη μόνιμη κατάσταση. Για την επίλυση της Εξ. (9.9) μπορούν να χρησιμοποιηθούν αριθμητικά σχήματα αντίστοιχα της §6.2.

Η Εξ. (9.9) προεκβάλλει την ταχύτητα F_{mb} του συνόρου σε όλο το υπολογιστικό χωρίο διατηρώντας την F σταθερή πάνω στις προβολές των χαρακτηριστικών. Οι προβολές των χαρακτηριστικών στο επίπεδο (x,y) είναι κάθετες στις ισοϋψείς της u (§5.9). Επομένως, από την επίλυση της Εξ. (9.9) προκύπτει και πάλι ότι οι ισοϋψείς της u θα είναι κάθετες στις ισοϋψείς της F . Η Εξ. (9.9) σχετίζεται με την Εξ. (9.4), αφού στη μόνιμη κατάσταση η Εξ. (9.9) γίνεται

$$\mathbf{n} \cdot \nabla F = 0 \Rightarrow \nabla u \cdot \nabla F = 0, \quad (9.12)$$

δηλαδή η Εξ. (9.4).

Εκτός από τις παραπάνω μεθόδους, έχουν χρησιμοποιηθεί και άλλες προσεγγίσεις για την προεκβολή της ταχύτητας συνόρου [Richards et al. (2001)].

Οι μέθοδοι (B),³¹ (Γ) και (Δ) γενικά διατηρούν τη συνάρτηση ισοϋψών ως προσημασμένη απόσταση από το σύνορο. Η διατήρηση της συνάρτησης ισοϋψών ως προσημασμένη απόσταση διευκολύνει τόσο την επίλυση της εξίσωσης ισοϋψών, όσο και την εύρεση των ισοϋψών της συνάρτησης ισοϋψών: αποφεύγονται οι απότομες ή οι πολύ μικρές μεταβολές κλίσης. Με την μέθοδο (Α) η συνάρτηση ισοϋψών δεν διατηρείται ως προσημασμένη απόσταση. Σε αυτή την περίπτωση, για να ξαναγίνει η συνάρτηση ισοϋψών προσημασμένη απόσταση από το σύνορο, χρειάζεται να εφαρμοστεί η διαδικασία αποκατάστασης της συνάρτησης ισοϋψών σε προσημασμένη απόσταση [re-initialization, Peng et al. (1999), Adalsteinsson & Sethian (1999)].

Η μέθοδος (B) εμφανίζει υψηλό υπολογιστικό κόστος. Η μέθοδος (Δ) μπορεί να λυθεί με αριθμητικά σχήματα υψηλής τάξης. Επιλέγεται η μέθοδος (Γ), η οποία αξιοποιεί τη

³¹ Οι Zhao et al. απέδειξαν ότι η μέθοδος προεκβολής (B) διατηρεί τη συνάρτηση ισοϋψών ως προσημασμένη απόσταση [Zhao et al. (1996)].

μέθοδο ταχυ-βηματισμού, λόγω της υψηλής ταχύτητας της μεθόδου, αλλά και της κεκτημένης εξοικείωσης με τη μέθοδο ταχυ-βηματισμού (§7.4).

9.3 Αλγόριθμος προεκβολής ταχύτητας συνόρου των Adalsteinsson και Sethian

Από τις μεθόδους που περιγράφηκαν στην §9.2 επιλέγεται η μέθοδος (Γ), δηλαδή η επίλυση της εξίσωσης,

$$\left\{ \begin{array}{l} \nabla u(\mathbf{x}) \cdot \nabla F(\mathbf{x}) = 0, \mathbf{x} \in \Omega \\ F(\mathbf{x}) = F_{mb}(\mathbf{x}), \mathbf{x} \in \Gamma, \Gamma \subset \Omega \end{array} \right\}, \quad (9.13)$$

η οποία διατηρεί τη συνάρτηση ισοϋψών προσημασμένη απόσταση. Για την επίλυση της Εξ. (9.13) χρειάζεται η διακριτοποίηση των βαθμίδων ∇u και ∇F . Οι Adalsteinsson και Sethian κατασκευάζουν την προσημασμένη απόσταση από το σύνορο, u^t , χρησιμοποιώντας σχήμα τύπου Godunov [Εξ. (7.18)] και τη μέθοδο ταχυ-βηματισμού [Adalsteinsson & Sethian (1999)]. Κάθε φορά που ένας γειτονικός κόμβος εισάγεται στο σύνολο των αποδεκτών (αλγόριθμος στην §7.4.1), υπολογίζεται και η προεκβολή της ταχύτητας F_{mb} στον κόμβο αυτό. Το σχήμα διακριτοποίησης της ∇F εξαρτάται από τους κόμβους που χρησιμοποιήθηκαν για τον υπολογισμό της προσημασμένης απόστασης στον πρόσφατα αποδεκτό κόμβο. Αν για παράδειγμα για τον υπολογισμό της απόστασης u^t στον κόμβο (i, j) χρησιμοποιήθηκαν οι αποστάσεις στους κόμβους $(i + 1, j)$ και $(i, j - 1)$, τότε για τον υπολογισμό της ταχύτητας F στον κόμβο (i, j) χρησιμοποιείται η σχέση:

$$\left(\frac{u_{i+1,j}^t - u_{i,j}^t}{\Delta x}, \frac{u_{i,j}^t - u_{i,j-1}^t}{\Delta y} \right) \cdot \left(\frac{F_{i+1,j} - F_{i,j}}{\Delta x}, \frac{F_{i,j} - F_{i,j-1}}{\Delta y} \right) = 0 \Rightarrow$$

$$F_{i,j} = \frac{F_{i+1,j} \frac{(u_{i,j}^t - u_{i+1,j}^t)}{(\Delta x)^2} + F_{i,j-1} \frac{(u_{i,j}^t - u_{i,j-1}^t)}{(\Delta y)^2}}{\frac{(u_{i,j}^t - u_{i+1,j}^t)}{(\Delta x)^2} + \frac{(u_{i,j}^t - u_{i,j-1}^t)}{(\Delta y)^2}}. \quad (9.14)$$

Όπως και στον αλγόριθμο ταχυ-βηματισμού, είναι απαραίτητο να εντοπιστεί το σύνολο των αρχικών αποδεκτών κόμβων και να υπολογιστεί η ταχύτητα F σε αυτούς. Η προεκβολή της ταχύτητας στο σύνολο των αρχικών αποδεκτών κόμβων γίνεται κατά αντιστοιχία με τον υπολογισμό της ταχύτητας σε κάθε αποδεκτό κόμβο, δηλαδή με την επίλυση της εξίσωσης $\nabla F \cdot \nabla u^t = 0$. Οι δυνατές περιπτώσεις για τη θέση ενός αρχικού

γειτονικού κόμβου σε σχέση με το σύνορο φαίνονται στο Σχήμα 7.21. Η ταχύτητα F_A υπολογίζεται από τις εξισώσεις

Για το Σχήμα 7.21α:

$$\left(\frac{u'_A - u'_B}{y_A - y_B}\right)\left(\frac{F_A - F_B}{y_A - y_B}\right) = 0 \Rightarrow F_A = F_B. \quad (9.15)$$

Για το Σχήμα 7.21β:

$$\left(-\frac{u'_C - u'_A}{x_C - x_A}, \frac{u'_A - u'_B}{y_A - y_B}\right) \cdot \left(-\frac{F_C - F_A}{x_C - x_A}, \frac{F_A - F_B}{y_A - y_B}\right) = 0. \quad (9.16)$$

Για το Σχήμα 7.21γ:

$$\left(-\frac{u'_C - u'_A}{x_C - x_A}, \frac{u'_A - u'_B}{y_A - y_B}\right) \cdot \left(-\frac{F_C - F_A}{x_C - x_A}, \frac{F_A - F_B}{y_A - y_B}\right) = 0, \text{ αν } \max\left(\frac{u'_A - u'_B}{y_A - y_B}, -\frac{u'_D - u'_A}{y_D - y_A}\right) = \frac{u'_A - u'_B}{y_A - y_B}, \quad (9.17)$$

ή

$$\left(-\frac{u'_C - u'_A}{x_C - x_A}, -\frac{u'_D - u'_A}{y_D - y_A}\right) \cdot \left(-\frac{F_C - F_A}{x_C - x_A}, -\frac{F_D - F_A}{y_D - y_A}\right) = 0, \text{ αν } \max\left(\frac{u'_A - u'_B}{y_A - y_B}, -\frac{u'_D - u'_A}{y_D - y_A}\right) = -\frac{u'_D - u'_A}{y_D - y_A}. \quad (9.18)$$

Για το Σχήμα 7.21δ:

$$\left(\frac{u'_A - u'_B}{y_A - y_B}\right)\left(\frac{F_A - F_B}{y_A - y_B}\right) = 0, \text{ αν } \max\left(\frac{u'_A - u'_B}{y_A - y_B}, -\frac{u'_D - u'_A}{y_D - y_A}\right) = \frac{u'_A - u'_B}{y_A - y_B}, \quad (9.19)$$

ή

$$\left(-\frac{u'_D - u'_A}{y_D - y_A}\right)\left(-\frac{F_D - F_A}{y_D - y_A}\right) = 0, \text{ αν } \max\left(\frac{u'_A - u'_B}{y_A - y_B}, -\frac{u'_D - u'_A}{y_D - y_A}\right) = -\frac{u'_D - u'_A}{y_D - y_A}, \quad (9.20)$$

Για το Σχήμα 7.21ε:

$$\left(-\frac{u'_C - u'_A}{x_C - x_A}, \frac{u'_A - u'_B}{y_A - y_B} \right) \cdot \left(-\frac{F_C - F_A}{x_C - x_A}, \frac{F_A - F_B}{y_A - y_B} \right) = 0, \alpha \nu$$

$$\max \left(\frac{u'_A - u'_E}{x_A - x_E}, -\frac{u'_C - u'_A}{x_C - x_A} \right) = -\frac{u'_C - u'_A}{x_C - x_A} \text{ και } \max \left(\frac{u'_A - u'_B}{y_A - y_B}, -\frac{u'_D - u'_A}{y_D - y_A} \right) = \frac{u'_A - u'_B}{y_A - y_B}. \quad (9.21)$$

ή

$$\left(\frac{u'_A - u'_E}{x_A - x_E}, \frac{u'_A - u'_B}{y_A - y_B} \right) \cdot \left(\frac{F_A - F_E}{x_A - x_E}, \frac{F_A - F_B}{y_A - y_B} \right) = 0, \alpha \nu$$

$$\max \left(\frac{u'_A - u'_E}{x_A - x_E}, -\frac{u'_C - u'_A}{x_C - x_A} \right) = \frac{u'_A - u'_E}{x_A - x_E} \text{ και } \max \left(\frac{u'_A - u'_B}{y_A - y_B}, -\frac{u'_D - u'_A}{y_D - y_A} \right) = \frac{u'_A - u'_B}{y_A - y_B}. \quad (9.22)$$

ή

$$\left(-\frac{u'_C - u'_A}{x_C - x_A}, -\frac{u'_D - u'_A}{y_D - y_A} \right) \cdot \left(-\frac{F_C - F_A}{x_C - x_A}, -\frac{F_D - F_A}{y_D - y_A} \right) = 0, \alpha \nu$$

$$\max \left(\frac{u'_A - u'_E}{x_A - x_E}, -\frac{u'_C - u'_A}{x_C - x_A} \right) = -\frac{u'_C - u'_A}{x_C - x_A} \text{ και } \max \left(\frac{u'_A - u'_B}{y_A - y_B}, -\frac{u'_D - u'_A}{y_D - y_A} \right) = -\frac{u'_D - u'_A}{y_D - y_A}. \quad (9.23)$$

ή

$$\left(\frac{u'_A - u'_E}{x_A - x_E}, -\frac{u'_D - u'_A}{y_D - y_A} \right) \cdot \left(\frac{F_A - F_E}{x_A - x_E}, -\frac{F_D - F_A}{y_D - y_A} \right) = 0, \alpha \nu$$

$$\max \left(\frac{u'_A - u'_E}{x_A - x_E}, -\frac{u'_C - u'_A}{x_C - x_A} \right) = \frac{u'_A - u'_E}{x_A - x_E} \text{ και } \max \left(\frac{u'_A - u'_B}{y_A - y_B}, -\frac{u'_D - u'_A}{y_D - y_A} \right) = -\frac{u'_D - u'_A}{y_D - y_A}. \quad (9.24)$$

Στις Εξ. (9.15) – (9.24) οι τιμές u'_B, u'_C, u'_D, u'_E και F_B, F_C, F_D, F_E είναι γνωστές (συνοριακές συνθήκες),

$$u'_B = u'_C = u'_D = u'_E = 0 \quad (9.25)$$

και

$$F_B=F_{mb}(x_B,y_B), F_C=F_{mb}(x_C,y_C), F_D=F_{mb}(x_D,y_D), F_E=F_{mb}(x_E,y_E). \quad (9.26)$$

Για να μπορούν να εφαρμοστούν Εξ. (9.15) – (9.24) θα πρέπει να είναι γνωστές οι τιμές της ταχύτητας F (F_{mb}) στα σημεία τομής του κινούμενου συνόρου με τις πλεγματικές γραμμές του υπολογιστικού χωρίου. Συνεπώς, αναγκαία για την εφαρμογή του αλγορίθμου είναι η προσαρμογή του συνόρου στο αριθμητικό πλέγμα (§7.4.6.1) και ο υπολογισμός της ταχύτητας F στα σημεία τομής του συνόρου με το αριθμητικό πλέγμα.

9.4 Επίδραση της προεκβολής της ταχύτητας του συνόρου στους υπολογισμούς

Γενικά, η ακρίβεια της θέσης του συνόρου μετά από χρόνο t , επηρεάζεται (§6.6): α) από την ακρίβεια της αρχικής συνάρτησης ισοϋψών [$q(x)$ στην Εξ. (9.1)]. Η συνάρτηση ισοϋψών τη χρονική στιγμή $t=0$ είναι η προσημασμένη απόσταση και ο αριθμητικός υπολογισμός της (Κεφ. 7) θα εισάγει σφάλματα στον υπολογισμό της θέσης του συνόρου (§7.5). β) Από την ακρίβεια προεκβολής της ταχύτητας F_{mb} μακριά από το σύνορο. γ) Από την ακρίβεια επίλυσης της εξίσωσης ισοϋψών με τα σχήματα της §6.2. δ) Από την ακρίβεια με την οποία υπολογίζεται η ισοϋψής μηδέν όταν είναι γνωστή η συνάρτηση ισοϋψών (Κεφ. 8).

Στα προβλήματα 9.A και 9.B, που περιγράφονται στη συνέχεια [Adalsteinsson & Sethian (1999)], προκειμένου να μελετηθεί η επίδραση της προεκβολής της ταχύτητας στην εξέλιξη συνόρου, η αρχική συνάρτηση ισοϋψών είναι η πραγματική προσημασμένη απόσταση, δεν υπολογίζεται αριθμητικά, και η ακρίβεια εύρεσης της ισοϋψούς είναι τέτοια που δεν αλλοιώνει αυτή της αριθμητικής λύσης της εξίσωσης ισοϋψών (§8.4). Εξετάζεται η ακρίβεια της θέσης του συνόρου με και χωρίς την προεκβολή της ταχύτητας F .

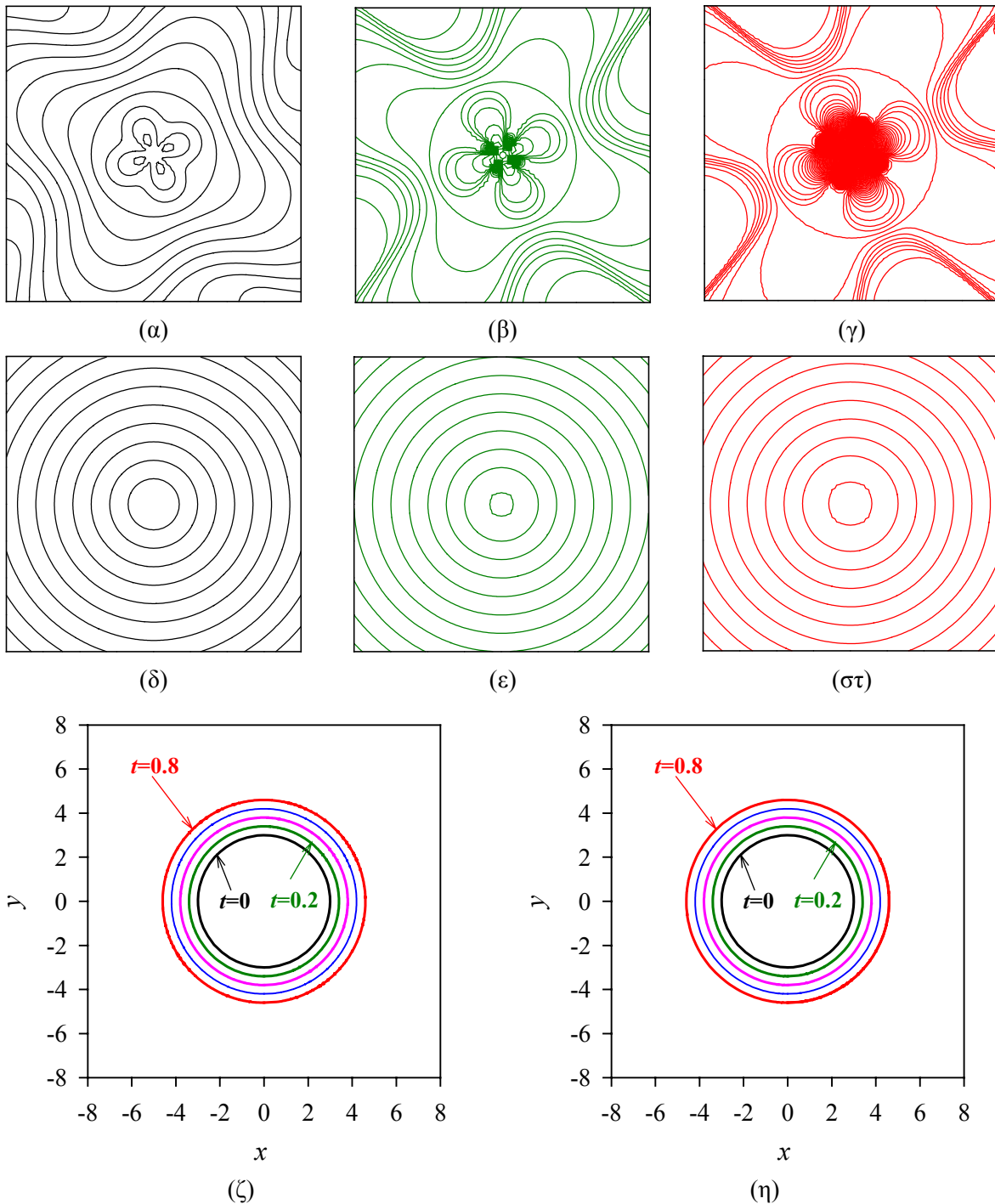
9.4.1 Πρόβλημα 9.A

Επιλύεται πρόβλημα διαστολής συνόρου με τη μέθοδο των ισοϋψών. Έστω ότι το σύνορο αρχικά είναι κύκλος με κέντρο το (0, 0) και ακτίνα $r_0=3$. Έστω ότι η ταχύτητα διαστολής του συνόρου είναι κάθετη σε αυτό και ίση με

$$F_{mb} = 2 \left[\sqrt{x^2 + y^2} - (3.0 + 2t) \right] \sin(4\theta) + 2, \quad (9.27)$$

όπου θ είναι η γωνία που σχηματίζει το διάνυσμα (x, y) με τον θετικό άξονα x . Για το σκοπό αυτό επιλύεται η Εξ. (9.1) στο υπολογιστικό χωρίο $\Omega=[-8,8] \times [-8,8]$ με αρχική συνθήκη

$$u(x, y, t = 0) = q(x, y) = \sqrt{x^2 + y^2} - r_0.^{91}$$



Σχήμα 9.2 Ισοϋψείς της συνάρτησης ισοϋψών σε διαφορετικές χρονικές στιγμές για το πρόβλημα 9.A, όταν η ταχύτητα F δίδεται από την Εξ. (9.27) (χωρίς προεκβολή) ή υπολογίζεται με προεκβολή: (α) χωρίς προεκβολή, $t=0.2$, (β) χωρίς προεκβολή, $t=0.5$, (γ) χωρίς προεκβολή, $t=0.8$, (δ) με προεκβολή, $t=0.2$, (ε) με προεκβολή, $t=0.5$. (στ) με προεκβολή, $t=0.8$. (ζ) Στιγμιότυπα του συνόρου (ισοϋψούς μηδέν της συνάρτησης ισοϋψών) σε διάφορες χρονικές στιγμές που απέχουν 0.2, όταν η ταχύτητα F δίδεται από την Εξ. (9.27) (χωρίς προεκβολή). (η) Το ίδιο με το (ζ) όταν η ταχύτητα F προκύπτει με

⁹¹ Η $q(x,y)$ είναι η προσημασμένη απόσταση από κύκλο ακτίνας r_0 και κέντρου $(0, 0)$.

προεκβολή ($\Delta x = \Delta y = 0.25$, $\Delta t = 0.0005$, χρησιμοποιείται αριθμητικό σχήμα Euler/OS/WENO5 για την επίλυση της εξίσωσης ισοϋψών).

Η ταχύτητα F α) δίδεται από την Εξ. (9.27) σε όλο το υπολογιστικό χωρίο Ω (F χωρίς προεκβολή) ή β) υπολογίζεται με προεκβολή των τιμών F_{mb} στο Ω με τη μέθοδο που περιγράφηκε στην §9.3.

Η θέση του συνόρου σε κάθε χρονική στιγμή προκύπτει από την ισοϋψή μηδέν της συνάρτησης ισοϋψών (Κεφ. 8). Η πραγματική λύση του προβλήματος είναι,

$$\mathbf{R}_{real}(s, t) = [x(s, t), y(s, t)] = \left[x_0 + (3 + 2t) \cos\left(\frac{3\pi}{2} - \frac{s}{3 + 2t}\right), y_0 + (3 + 2t) \sin\left(\frac{3\pi}{2} - \frac{s}{3 + 2t}\right) \right], \quad (9.28)$$

όπου $0 \leq s \leq 2\pi(3 + 2t)$. Η πραγματική λύση είναι ομόκεντροι κύκλοι με κέντρο $(0, 0)$ και ακτίνα $3 + 2t$.

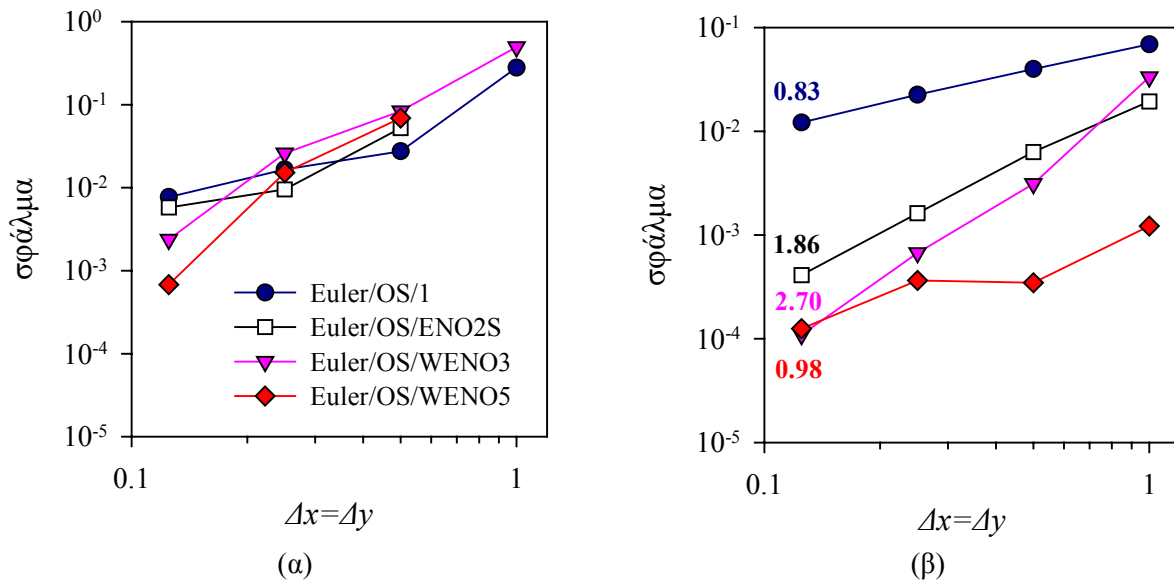
Στο Σχήμα 9.2 φαίνονται ισοϋψείς της συνάρτησης ισοϋψών σε διάφορες χρονικές στιγμές ($t = 0.2, 0.5, 0.8$), όπως προκύπτουν όταν η ταχύτητα F προκύπτει χωρίς (Σχήματα 9.2α, 9.2β, 9.2γ) και με προεκβολή (Σχήματα 9.2δ, 9.2ε, 9.2στ). Στα Σχήματα 9.2ζ και 9.2η φαίνονται και η θέση του συνόρου (ισοϋψής μηδέν) σε διάφορες χρονικές στιγμές.

Στα Σχήματα 9.2α, 9.2β, και 9.2γ (αποτελέσματα χωρίς προεκβολή) φαίνεται ότι οι ισοϋψείς της συνάρτησης ισοϋψών σε κάποιες περιοχές του υπολογιστικού πλησιάζουν, οπότε η βαθμίδα της συνάρτησης ισοϋψών είναι μεγάλη, και σε άλλες απομακρύνονται, οπότε η βαθμίδα της συνάρτησης ισοϋψών είναι μικρή. Στα Σχήματα 9.2δ, 9.2ε, 9.2στ (αποτελέσματα με προεκβολή) η συνάρτηση ισοϋψών παραμένει προσημασμένη απόσταση. Η διαφορά στην ακρίβια υπολογισμού των ισοϋψών μηδέν χωρίς και με προεκβολή δεν είναι εμφανής στα Σχήματα 9.2ζ, 9.2η. Προκειμένου να ποσοτικοποιηθεί η διαφορά ανάμεσα στις δύο τρόπους απόδοσης τιμών στην F , συγκρίνεται το σφάλμα σε κάθε περίπτωση.

Στο Σχήμα 9.3 φαίνεται το σφάλμα στον υπολογισμό της ισοϋψούς μηδέν συναρτήσεως του $\Delta x = \Delta y$. Το σφάλμα όταν δεν γίνεται προεκβολή είναι σχετικά μεγαλύτερο, διότι αν και η ταχύτητα πάνω στο σύνορο είναι σωστή, οι τιμές της ταχύτητας στο υπόλοιπο υπολογιστικό χωρίο Ω επηρεάζουν την αριθμητική επίλυση.

Το σφάλμα όταν γίνεται προεκβολή είναι γενικά μικρότερο. Μάλιστα, για τα σχήματα 2^{ης} (Euler/OS/ENO2S) και 3^{ης} (Euler/OS/WENO3) τάξης, η παρατηρούμενη τάξη ακρίβειας ως προς Δx πλησιάζει τη θεωρητική. Κάτι τέτοιο δεν συμβαίνει για το σχήμα 5^{ης} τάξης (Euler/OS/WENO5). Στη διαφορά της παρατηρούμενης από τη θεωρητική τάξη συμβάλλει η συσσώρευση σφαλμάτων κατά την εύρεση της θέσης του συνόρου. Στο πρόβλημα 9.A, η θέση του συνόρου καθορίζει την ταχύτητά του [Εξ. (9.27)]. Σημαντική επίδραση στην ακρίβεια μπορεί να έχει και η, αναγκαία για την εφαρμογή της μεθόδου προεκβολής, προσαρμογή του συνόρου (ισοϋψούς μηδέν) στο αριθμητικό πλέγμα του υπολογιστικού

χωρίου (§7.4.6.1). Επίσης, στη διαφορά συμβάλλει και το ότι το σχήμα προεκβολής της ταχύτητας είναι 1^{ης} τάξης.

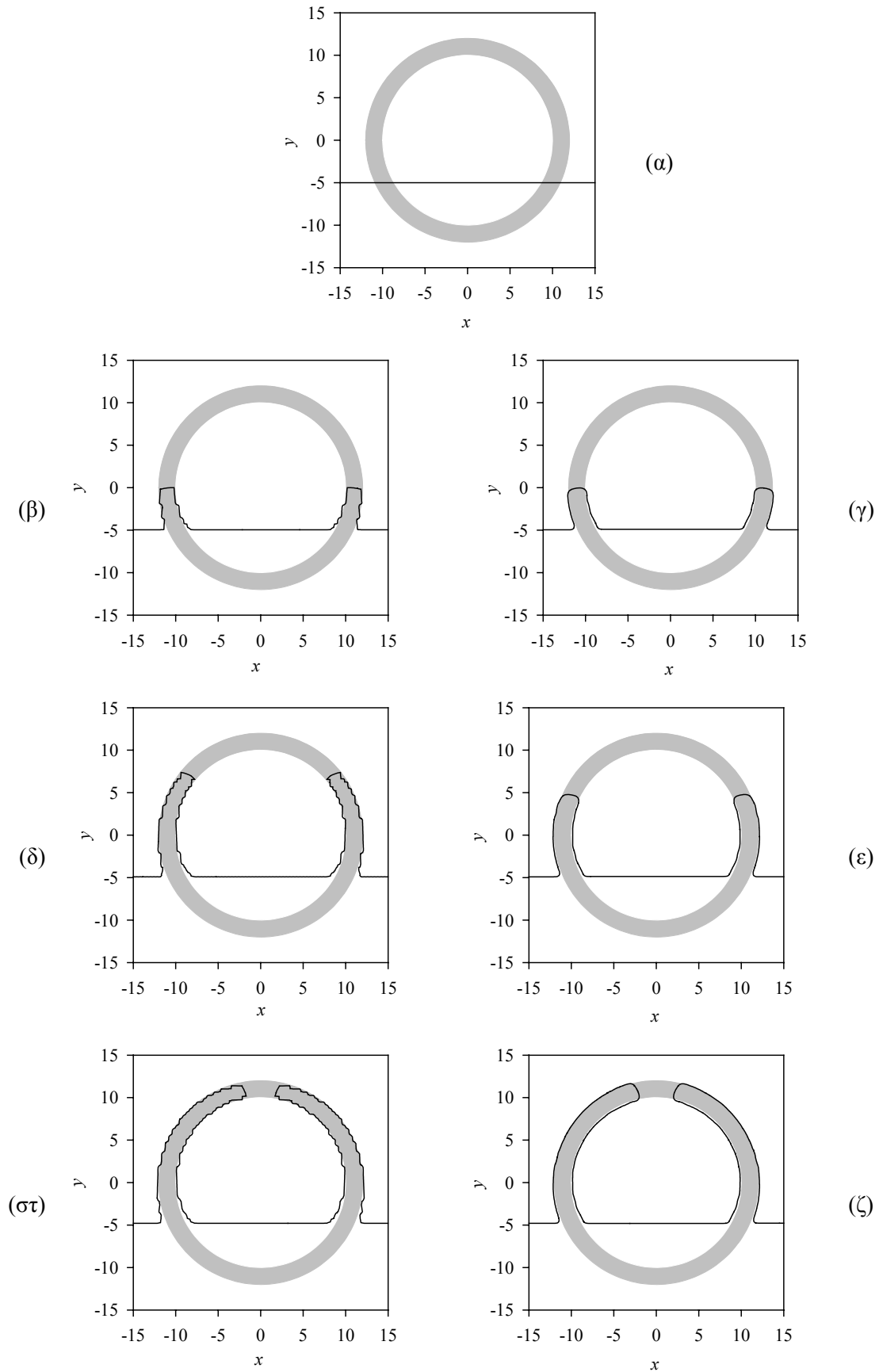


Σχήμα 9.3 Σφάλμα στην υπολογιζόμενη ισοϋψή μηδέν ($\|\mathbf{R}-\mathbf{R}_{\text{real}}\|_{\text{F}}/\|\mathbf{R}_{\text{real}}\|_{\text{F}}$), καθώς το $\Delta x=\Delta y$ μειώνεται για το πρόβλημα 9.A τη χρονική στιγμή $t=0.8$. Εξετάζονται τα σχήματα Euler/OS/1, Euler/OS/ENO2S, Euler/OS/WENO3 και Euler/OS/WENO5 ($\Delta t=0.0005$). (α) Χωρίς προεκβολή. (β) Με προεκβολή.

9.4.2 Πρόβλημα 9.B

Έστω πρόβλημα εξέλιξης συνόρου κατά την εγχάραξη δύο υλικών με διαφορετική ταχύτητα εγχάραξης. Η δομή των δύο υλικών είναι αυτή που φαίνεται στο Σχήμα 9.4α: Στη λευκή περιοχή αντιστοιχεί υλικό το οποίο εγχαράσσεται με ταχύτητα 1, και στη γκρίζα υλικό που εγχαράσσεται με ταχύτητα 100. Το σύνορο είναι η μαύρη γραμμή που φαίνεται στο Σχήμα 9.4α. Ένας τρόπος απόδοσης τιμών στην ταχύτητα F στους κόμβους του υπολογιστικού χωρίου είναι να αποδίδεται η ταχύτητα $F = 1$ ή 100, ανάλογα με την περιοχή στην οποία ανήκει ο κόμβος. Σε αυτή την περίπτωση η απόδοση γίνεται χωρίς προεκβολή. Ωστόσο, η απόδοση τιμών στην ταχύτητα F μπορεί να γίνει και με προεκβολή: η ταχύτητα F_{mb} σε κάθε σημείο του συνόρου υπολογίζεται με βάση την περιοχή στην οποία ανήκει το σημείο. Στη συνέχεια γίνεται προεκβολή της F_{mb} στο υπολογιστικό χωρίο.

Στο Σχήμα 9.4 φαίνεται η εξέλιξη του συνόρου χωρίς και με προεκβολή. Στα Σχήματα 9.4β, 9.4δ και 9.4στ φαίνεται το σύνορο σε τρεις χρονικές στιγμές, όπως προκύπτει χωρίς προεκβολή. Παρατηρείται ότι το σύνορο εμφανίζει διακυμάνσεις και αυτό οφείλεται στη μεγάλη βαθμίδα της ταχύτητας F στη γειτονιά του συνόρου. Στα Σχήματα 9.4γ, 9.4ε και 9.4ζ φαίνεται το σύνορο σε τρεις χρονικές στιγμές, όπως προκύπτει όταν γίνεται προεκβολή της ταχύτητας. Σε αυτή την περίπτωση, το σύνορο δεν εμφανίζει τις διακυμάνσεις. Η προεκβολή της ταχύτητας συμβάλλει στην καλύτερη ποιότητα της λύσης.



Σχήμα 9.4 Στιγμιότυπα εξέλιξης συνόρου για το πρόβλημα 9.B σε διάφορες χρονικές στιγμές χωρίς και με προεκβολή. Χρησιμοποιείται το αριθμητικό σχήμα Euler/OS/ENO2S, $\Delta x = \Delta y = 0.4$, $\Delta t = 0.0005$

(α) $t=0$, (β) $t=0.05$, χωρίς προεκβολή, (γ) $t=0.05$, με προεκβολή, (δ) $t=0.125$, χωρίς προεκβολή, (ε) $t=0.125$, με προεκβολή, (στ) $t=0.2$, χωρίς προεκβολή, (ζ) $t=0.2$, με προεκβολή.

9.5 Αξιολόγηση

Η προεκβολή της ταχύτητας του κινούμενου συνόρου στο υπολογιστικό χωρίο επίλυσης της εξίσωσης ισοϋψών είναι το βήμα (Δ) του αλγορίθμου του «γενικού» προβλήματος εξέλιξης συνόρου (§5.10). Ο προτεινόμενος αλγόριθμος [Adalsteinsson & Sethian (1999)] για την προεκβολή της ταχύτητας του συνόρου προϋποθέτει την προσαρμογή του συνόρου στο αριθμητικό πλέγμα επίλυσης και τον υπολογισμό της ταχύτητας στα σημεία τομής του συνόρου με το αριθμητικό πλέγμα. Επίσης, διατηρεί τη συνάρτηση ισοϋψών ως προσημασμένη απόσταση από το κινούμενο σύνορο και εκμεταλλεύεται την ταχύτητα της μεθόδου ταχυ-βηματισμού.

Από τα προβλήματα που επιλύθηκαν, φάνηκε ότι ο προτεινόμενος αλγόριθμος μπορεί να συμβάλλει στη βελτίωση της ακρίβειας του υπολογιζόμενου συνόρου συγκριτικά με την περίπτωση όπου δεν γίνεται προεκβολή, αλλά απόδοση τιμών με βάση καθορισμένη συνάρτηση (προβλήματα 9.A και 9.B). Ο προτεινόμενος αλγόριθμος φαίνεται να διατηρεί την ακρίβεια υπολογισμού της συνάρτησης ισοϋψών όταν χρησιμοποιούνται σχήματα 2^{15} και 3^{15} τάξης ακρίβειας για την προσέγγιση των χωρικών παραγώγων της συνάρτησης ισοϋψών. Για σχήματα υψηλότερης τάξης, η ακρίβεια υπολογισμού της συνάρτησης ισοϋψών αλλοιώνεται. Αυτό οφείλεται α) στο ότι το αριθμητικό σχήμα για την επίλυση του προβλήματος προεκβολής [Εξ. (9.13)] είναι 1^{15} τάξης ακρίβειας και β) στο σφάλμα κατά την απαραίτητη (για την εφαρμογή της μεθόδου) προσαρμογή του συνόρου στο αριθμητικό πλέγμα.

Για τη βελτίωση της ακρίβειας υπολογισμών θα μπορούσε να χρησιμοποιηθεί σχήμα υψηλότερης τάξης ακρίβειας για τη διακριτοποίηση της Εξ. (9.13). Για παράδειγμα, θα μπορούσαν να χρησιμοποιηθούν τα σχήματα 2^{15} [Sethian (1999b)] και 3^{15} τάξης [Chopp (2001)] που έχουν προταθεί για την επίλυση της εξίσωσης Eikonal με τη μέθοδο ταχυ-βηματισμού. Επίσης, θα μπορούσε να χρησιμοποιηθεί και η μέθοδος των Peng et al. που περιγράφηκε συνοπτικά στην §9.2 [Peng et al. (1999)].

Μέρος IV – Κεφάλαιο 10

Εφαρμογές

Το πλαίσιο προσομοίωσης εφαρμόζεται στην εξέλιξη τοπογραφίας σε διεργασίες εγχάραξης δομών μικροηλεκτρονικής και μικρο-ηλεκτρο-μηχανικών συστημάτων. Ιδιαίτερη έμφαση δίδεται στην εγχάραξη δομών SiO_2 , κατά την οποία προβλέπονται και ερμηνεύονται φαινόμενα απώλειας μικροσκοπικής ομοιομορφίας. Το πλαίσιο προσομοίωσης εφαρμόζεται και στη διεργασία πολυβηματικής εγχάραξης δομών Si με εναλλαγή αερίων πλάσματος που χρησιμοποιείται για την εγχάραξη βαθιών αυλακιών Si. Αναδεικνύονται οι δυνατότητες του πλαισίου για προσομοίωση κι άλλων προβλημάτων κατά την εγχάραξη δομών, όπως οι πτυχώσεις στη βάση των εγχαρασσόμενων δομών και η τραχύτητα εγχαρασσόμενης επιφάνειας. Σημειώνεται επίσης η ευελιξία του πλαισίου μέσα από εφαρμογές του σε άλλες διεργασίες, όπως η απόθεση και η εμφάνιση κατά τη λιθογραφία.

10.1 Εισαγωγή

Στο παρόν κεφάλαιο περιέχονται αποτελέσματα της εφαρμογής των μοντέλων και των αλγορίθμων που περιγράφηκαν στην εργασία. Ειδικότερα παρουσιάζονται:

A) Εφαρμογές του αλγόριθμου σύζευξης (Κεφ. 4, Μέρος II) του μοντέλου υπολογισμού των τοπικών ροών μέσα σε δομές (Κεφ. 2, Μέρος II) με το μοντέλο εγχάραξης επιφάνειας (Κεφ. 3, Μέρος II) στην εγχάραξη πρότυπων δομών (αυλάκια με κάθετα πλάγια τοιχώματα και πλήρως επίπεδη βάση και κυλινδρικές οπές). Κατασκευάζονται χάρτες εγχάραξης και εξηγούνται τα φαινόμενα που οδηγούν σε απώλεια μικροσκοπικής ομοιομορφίας σε εγχαρασόμενες δομές SiO_2 και Si με πλάσμα φθοριωμένων υδρογονανθράκων. Τα αποτελέσματα προσομοίωσης συγκρίνονται με πειραματικά (§10.2).

B) Εφαρμογές της μεθόδου των ισοϋψών (Μέρος III) ως αλγόριθμο εξέλιξης τοπογραφίας σε διεργασίες εγχάραξης, απόθεσης, εμφάνισης κατά τη λιθογραφία για τις οποίες η τοπική ταχύτητα του συνόρου είναι διαθέσιμη, δηλαδή προκαθορισμένη ή ήδη υπολογισμένη από κάποιο μοντέλο (§10.3).

Γ) Εφαρμογές του συνολικού πλαισίου προσομοίωσης α) στην εγχάραξη οπών SiO_2 , όπου προβλέπονται τα φαινόμενα υστέρησης και αντίστροφης υστέρησης εγχάραξης, β) στη διεργασία πολυβηματικής εγχάραξης αυλακιών Si με εναλλαγή αερίων πλάσματος και γ) στην εγχάραξη αυλακιών SiO_2 , οπότε και φανερώνεται πιθανός μηχανισμός για τις πτυχώσεις στη βάση των εγχαρασόμενων δομών (§10.4).

Δ) Πρώτα αποτελέσματα από τη χρήση του αλγόριθμου εξέλιξης τοπογραφίας του πλαισίου προσομοίωσης στην πρόβλεψη της τραχύτητας εγχαρασόμενης επιφάνειας (§10.5).

Στο τέλος του κεφαλαίου συνοψίζονται τα συμπεράσματα της μελέτης (§10.6).

10.2 Εφαρμογή σύζευξης των μοντέλων υπολογισμού των τοπικών ροών μέσα σε δομές και εγχάραξης επιφάνειας

10.2.1 Εγχάραξη εξαρτώμενη από το λόγο ασυμμετρίας των δομών

Η μελέτη στην παρούσα παράγραφο αποτελεί εφαρμογή της σύζευξης των μοντέλων εγχάραξης και υπολογισμού των τοπικών ροών μέσα σε δομές (Μέρος II). Ο στόχος της σύζευξης είναι η πρόβλεψη και η εξήγηση της απώλειας μικροσκοπικής ομοιομορφίας (§1.5) κατά την εγχάραξη δομών SiO_2 και Si με πλάσμα φθοριωμένων υδρογονανθράκων. Η απώλεια της μικροσκοπικής ομοιομορφίας προκύπτει από τη διαφορά στο ρυθμό εγχάραξης

δομών με διαφορά στις διαστάσεις (βάθος, πλάτος). Ο ρυθμός εγχάραξης δομών SiO₂ και Si (και άλλων υποστρωμάτων) έχει παρατηρηθεί πειραματικά ότι είναι συνάρτηση του λόγου ασυμμετρίας (*LA*) της δομής (λόγος του βάθους προς το πλάτος της δομής) και όχι των απόλυτων διαστάσεών της [Gottscho et al. (1992)]. Αυτή η σύνδεση του ρυθμού εγχάραξης με το *LA* της δομής περιγράφεται στη βιβλιογραφία από το αρκτικόλεξο ARDE {aspect ratio dependent etching, [ο.π.]}. Η απώλεια της μικροσκοπικής ομοιομορφίας είναι συνέπεια της εξάρτησης του ρυθμού εγχάραξης από το *LA*.

Η συνηθέστερη εκδοχή εξάρτησης του ρυθμού εγχάραξης από το *LA* είναι η υστέρηση εγχάραξης, όπου ο ρυθμός εγχάραξης είναι μικρότερος, κατά κάποιο τρόπο «υστερεί», στις στενότερες δομές SiO₂ [Joubert et al. (1994), Joubert et al. (1994b), Kato et al. (1994), Westerheim et al. (1995), Doh et al. (1997), Aoi et al. (1999)] και Si [Chin et al. (1985), Ulacia et al. (1988), Sato et al. (1991), Lukichev (1998)]. Σε ορισμένες περιπτώσεις, η υστέρηση εγχάραξης είναι τόσο έντονη, ώστε η εγχάραξη διακόπτεται και συμβαίνει απόθεση [Joubert et al. (1994)]. Πειραματικά έχει παρατηρηθεί και η αντίστροφη υστέρηση εγχάραξης (inverse RIE lag) σε δομές SiO₂ [Westerheim et al. (1995), Doemling et al. (1996)]: ο ρυθμός εγχάραξης είναι μεγαλύτερος στις στενότερες δομές. Σημειώνεται ότι όλες οι εκδοχές εξάρτησης της εγχάραξης από το *LA* μπορούν να συμβούν και σε μία και μόνη εγχαρασσόμενη δομή. Καθώς αυξάνεται ο χρόνος εγχάραξης, αυξάνεται το βάθος εγχάραξης, κι αν το πλάτος της δομής διατηρείται σταθερό, αυξάνεται και ο *LA* της δομής.

Η απαίτηση για μικροσκοπική ομοιομορφία υπαγορεύει την εξάλειψη της εξάρτησης του ρυθμού εγχάραξης από το *LA* της δομής. Ακριβέστερα, η εξάλειψη της εξάρτησης του ρυθμού εγχάραξης από το *LA* είναι αναγκαία συνθήκη για τη μικροσκοπική ομοιομορφία και γίνεται ικανή, όταν ο ρυθμός εγχάραξης παραμένει σταθερός συναρτήσει του *LA*.⁹¹

Αρκετές μελέτες έχουν συσχετίσει την εξάρτηση του ρυθμού εγχάραξης από το *LA* σε δομές SiO₂ και Si με την απόθεση πολυμερικού στρώματος [Oehrlein et al. (1994)] στην εγχαρασσόμενη επιφάνεια. Οι Gottscho et al. αναφέρουν ότι για την ερμηνεία και μελέτη της εξάρτησης της εγχάραξης από το *LA* είναι αναγκαίο να ληφθούν υπόψη όχι μόνο συστατικά που προκαλούν εγχάραξη (π.χ. άτομα F), αλλά και εκείνα που προκαλούν απόθεση (π.χ. ρίζες CF_x) [Gottscho et al. (1992)]. Οι Joubert et al. ισχυρίζονται ότι η υστέρηση εγχάραξης σε δομές SiO₂ προκαλείται από τη δημιουργία ενός πολυμερικού στρώματος στη βάση των δομών, του οποίου το πάχος αυξάνεται με την αύξηση του *LA* των δομών κατά τη διάρκεια της εγχάραξης [Joubert et al. (1994), Joubert et al. (1994c)]. Στο ίδιο συμπέρασμα καταλήγουν και οι Kato et al. [Kato et al. (1994)]. Επίσης αναφέρουν ότι αν το πάχος του πολυμερικού στρώματος αυξηθεί αρκετά, η εγχάραξη διακόπτεται. Με αντίστοιχο συλλογισμό οι Doemling et al. εξηγούν την αντίστροφη υστέρηση εγχάραξης σε δομές SiO₂

⁹¹ Οι Hwang και Giapis με μοντέλα Monte Carlo υπολόγισαν ότι, όταν ο ρυθμός εγχάραξης εξαρτάται μόνο από τη ροή ιόντων και ελλείπει απόθεσης παρεμποδιστή εγχάραξης, ο ρυθμός εγχάραξης εξαρτάται μόνο από το βάθος της εγχαρασσόμενης δομής [Hwang & Giapis (1997b)]. Μικροσκοπική ομοιομορφία είναι εφικτή και όταν ο ρυθμός εγχάραξης εξαρτάται μόνο από το βάθος της δομής, αν το αρχικό βάθος όλων των δομών σε ένα βήμα κατασκευής διάταξης μικροηλεκτρονικής ή μικρο-ηλεκτρο-μηχανικού συστήματος είναι το ίδιο.

[Doemling et al. (1996)]. Θεωρούν ότι οφείλεται στη μείωση του πάχους του πολυμερικού στρώματος στη βάση της δομών καθώς αυξάνεται ο AA κατά τη διάρκεια της εγχάραξης. Αυτή η μεταβολή του πάχους του πολυμερικού στρώματος (αύξηση στην υστέρηση εγχάραξης, μείωση στην αντίστροφη υστέρηση εγχάραξης) με την αύξηση του AA έχει συνδεθεί με τη μεταβολή στην ενέργεια και τη ροή ιόντων [Joubert et al. (1994c)] ή/και με τη μεταβολή των ροών των ουδέτερων συστατικών [Doemling et al. (1996)].

Στη συνέχεια, μέσα από τη σύζευξη των μοντέλων εγχάραξης επιφανειών SiO_2 και Si και υπολογισμού των τοπικών ροών μέσα σε δομές προβλέπονται τα φαινόμενα – εκδοχές της εξάρτησης του ρυθμού εγχάραξης από το AA των δομών και συνδέονται με τις συνθήκες στον κύριο όγκο ενός αντιδραστήρα πλάσματος φθοριωμένων υδρογονανθράκων. Οι συνθήκες στον κύριο όγκο απεικονίζονται σε χάρτες εγχάραξης (§10.2.2). Επίσης, ερμηνεύονται τα φαινόμενα εξάρτησης του ρυθμού εγχάραξης από το AA των δομών (§10.2.3) και τα αποτελέσματα συγκρίνονται με πειραματικά (§10.2.4).

10.2.2 Χάρτες εγχάραξης δομών SiO_2 και Si

Ο χάρτης εγχάραξης συνδέει τις συνθήκες στον κύριο όγκο αντιδραστήρα πλάσματος φθοριωμένων υδρογονανθράκων με τα φαινόμενα εξάρτησης του ρυθμού εγχάραξης από το AA των δομών [Kokkoris et al. (2002)]. Ο χάρτης εγχάραξης προκύπτει υπολογίζοντας το ρυθμό εγχάραξης των δομών σαν συνάρτηση του AA αυτών για πλήθος συνθηκών στον κύριο όγκο του αντιδραστήρα πλάσματος. Το σύνολο των συνθηκών διαιρείται σε περιοχές όπου συμβαίνει συγκεκριμένο φαινόμενο (π.χ. υστέρηση εγχάραξης). Θεωρείται ότι το πλάσμα στον κύριο όγκο του αντιδραστήρα αντιστοιχεί σε γενικό πλάσμα φθοριωμένων υδρογονανθράκων, που αποτελείται από άτομα F , ρίζες CF_x ($x=1,2,3$) και ιόντα CF_x^+ ($x=1,2,3$), όπως αυτό περιγράφεται στο Κεφ. 3. Έτσι, οι μεταβλητές που ορίζουν τις συνθήκες στον κύριο όγκο του αντιδραστήρα πλάσματος είναι οι ροές ατόμων F , ριζών CF_x , καθώς και η ροή, σύσταση και ενέργεια των ιόντων που φτάνουν από τον κύριο όγκο σε ελεύθερη επιφάνεια ($j_{F,0}$, $j_{CF_x,0}$, $j_{ION,0}$, $x_{CF_3^+}$, $x_{CF_2^+}$, E). Επίσης, τα ουδέτερα συστατικά (F , CF_x) θεωρείται ότι έχουν ισοτροπική κατανομή στον κύριο όγκο, ενώ τα ιόντα είναι μονο-ενεργητικά με κανονική γωνιακή κατανομή τυπικής απόκλισης $\sigma=2^\circ$. Για τη διαίρεση του χάρτη εγχάραξης σε περιοχές υπολογίζεται η % μεταβολή του ρυθμού εγχάραξης καθώς αυξάνεται ο AA σε σχέση με το ρυθμό εγχάραξης όταν $AA \rightarrow 0$. Έτσι, για την κατασκευή του χάρτη εγχάραξης δεν παίζει ρόλο η απόλυτη τιμή του ρυθμού εγχάραξης, αλλά μόνο η ανηγμένη στην τιμή όπου $AA \rightarrow 0$. Συνεπώς, για να κατασκευαστεί ο χάρτης, από τις μεταβλητές που ορίζουν τις συνθήκες στον κύριο όγκο, αρκεί να είναι γνωστές οι $R_{F,0} = j_{F,0} / j_{ION,0}$, $R_{CF_x,0} = j_{CF_x,0} / j_{ION,0}$, $x_{CF_3^+}$, $x_{CF_2^+}$ και E . Πριν την παρουσίαση του χάρτη εγχάραξης κρίνεται σκόπιμο να διευκρινιστούν τα εξής:

A) Οι δομές που εξετάζονται είναι πρότυπες: αυλάκια με κάθετα πλάγια τοιχώματα και πλήρως επίπεδη βάση και κυλινδρικές οπές.

B) Ο LA δομής ορίζεται ως το βάθος (βάθος εγχάραξης + πάχος μάσκας) προς το πλάτος της δομής. Θεωρείται ότι η μάσκα εγχάραξης είναι μη εγχαραζίμη και πολύ λεπτή και συνεπώς οι υπολογισμοί του ρυθμού εγχάραξης συναρτήσει του LA ξεκινούν από την τιμή $LA \rightarrow 0$.

Γ) Ο ρυθμός εγχάραξης υπολογίζεται στο μέσο της βάσης των δομών και είναι στιγμιαίος. Ο ρυθμός εγχάραξης σε κάποιο LA εκφράζει το στιγμιαίο ρυθμό εγχάραξης πρότυπης δομής με αυτό το LA και όχι μια μέση τιμή του ρυθμού εγχάραξης μέχρι η δομή να αποκτήσει αυτό το LA . Στην πλειοψηφία των περιπτώσεων τα πειραματικά δεδομένα αφορούν μέσες τιμές του ρυθμού εγχάραξης καθ' όλο το διάστημα εγχάραξης που χρειάστηκε για να φτάσει η δομή σε αυτό το LA .

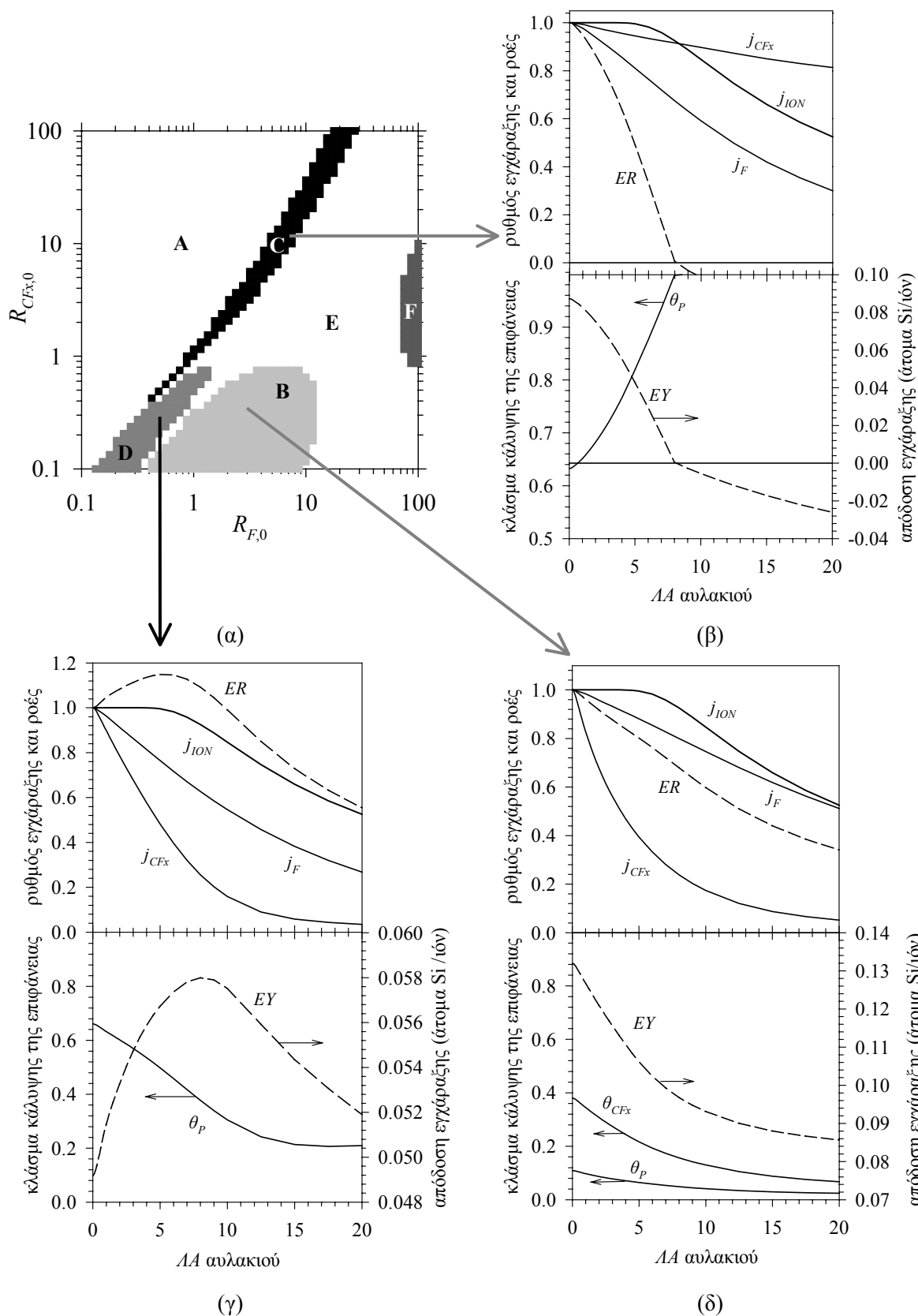
Δ) Τα ιόντα θεωρείται ότι κολλούν στην πρώτη σύγκρουση στην εγχαρασσόμενη επιφάνεια (ο φαινόμενος συντελεστής προσκόλλησης των ιόντων είναι $S_{E,ION}=1$), ενώ τα ουδέτερα συστατικά επανεκπέμπονται με μηχανισμό «διάχυτης» επανεκπομπής.

E) Ο ρυθμός εγχάραξης και οι φαινόμενοι συντελεστές προσκόλλησης των ουδέτερων συστατικών υπολογίζονται από το μοντέλο επιφάνειας στην §3.3 και ο υπολογισμός των τοπικών ροών στο εσωτερικό των δομών με το μοντέλο που περιγράφεται στο Κεφ. 2. Ο αλγόριθμος σύζευξης των δύο μοντέλων περιγράφεται στο Σχήμα 4.1.

ΣΤ) Ο χάρτης εγχάραξης αφορά την εξάρτηση του ρυθμού εγχάραξης από το LA των δομών και όχι την εξάρτηση του ρυθμού εγχάραξης από το χρόνο εγχάραξης.

Ο χάρτης εγχάραξης απεικονίζει την επίδραση δύο μεταβλητών από τις $R_{F,0}$, $R_{CFx,0}$, x_{CF3+} , x_{CF2+} και E στη μεταβολή του ρυθμού εγχάραξης από το LA της δομής. Στους χάρτες που παρουσιάζονται στη συνέχεια θεωρείται σταθερή η σύσταση και η ενέργεια των ιόντων (x_{CF3+} , x_{CF2+} και E) και μεταβάλλονται οι λόγοι $R_{F,0}$, $R_{CFx,0}$. Στο Σχήμα 10.1α φαίνεται χάρτης εγχάραξης για αυλάκια SiO_2 . Φαίνονται έξι διαφορετικές περιοχές, όπου λόγω της διαφοράς στις συνθήκες στον κύριο όγκο, συμβαίνει και διαφορετικό φαινόμενο. Στην περιοχή A συμβαίνει απόθεση, ενώ σε όλες τις υπόλοιπες περιοχές συμβαίνει εγχάραξη. Στην περιοχή B συμβαίνει υστέρηση εγχάραξης, ενώ στην περιοχή C έντονη υστέρηση και διακοπή εγχάραξης. Στην περιοχή D λαμβάνει χώρα αντίστροφη υστέρηση εγχάραξης. Στην περιοχή E ο ρυθμός εγχάραξης δε μεταβάλλεται σημαντικά καθώς ο LA αυξάνεται, ειδικά μακριά από την περιοχή απόθεσης (περιοχή A). Για συνθήκες κοντά στην περιοχή απόθεσης, ο ρυθμός εγχάραξης είναι σχεδόν σταθερός (μείωση <5%) από $LA \rightarrow 0$ μέχρι $LA=3$. Καθώς οι συνθήκες απομακρύνονται από την περιοχή απόθεσης, ο ρυθμός εγχάραξης είναι σχεδόν σταθερός από $LA \rightarrow 0$ μέχρι βαθμιαία $LA=4,5,6$ και 7. Στην περιοχή F ο ρυθμός εγχάραξης είναι σχεδόν

σταθερός μέχρι $\Lambda A=7$. Για κάποιες συνθήκες στην περιοχή F παρατηρείται ελαφρά αντίστροφη υστέρηση εγχάραξης και αυτό είναι που ξεχωρίζει την περιοχή F από την E.



Σχήμα 10.1 (α) Χάρτης εγχάραξης αυλακίων SiO_2 που απεικονίζει την επίδραση των συνθηκών στον κύριο όγκο αντιδραστήρα πλάσματος φορτωμένων υδρογονανθράκων στη μεταβολή του ρυθμού

εγχάραξης συναρτήσει του AA των αυλακίων. Η ενέργεια και η σύσταση των ιόντων θεωρούνται δεδομένες ($E=100$ eV, 10% CF_3^+ , 85% CF_2^+ , 5% CF^+) και μεταβάλλονται οι λόγοι $R_{F,0}$ και $R_{CF_x,0}$ (ροή ατόμων F και ριζών CF_x προς ροή ιόντων σε ελεύθερη επιφάνεια). Ο χάρτης χωρίζεται σε περιοχές όπου συμβαίνει συγκεκριμένο φαινόμενο. Α: απόθεση αντί εγχάραξης. Β: υστέρηση χωρίς διακοπή εγχάραξης. Γ: έντονη υστέρηση και διακοπή εγχάραξης. Δ: αντίστροφη υστέρηση εγχάραξης. Ε: σταθερός ρυθμός εγχάραξης (μεταβολή μικρότερη από 5%) για AA από 0 έως 3-7. Το άνω όριο του AA εξαρτάται από την απόσταση από την περιοχή απόθεσης, Α. Όσο πιο μακριά, τόσο υψηλότερο είναι το άνω όριο. F: σταθερός ρυθμός εγχάραξης για AA από 0 έως 7. Ήπια αντίστροφη υστέρηση εγχάραξης παρατηρείται για τις συνθήκες στην περιοχή F και αυτό την ξεχωρίζει από την περιοχή Ε. (β) Ο ρυθμός εγχάραξης (ER), η ροή ιόντων (j_{ION}) και ουδέτερων συστατικών (j_F και j_{CF_x}), ανηγμένα στις αντίστοιχες τιμές σε ελεύθερη επιφάνεια συναρτήσει του AA . Φαίνονται επίσης τα κλάσματα κάλυψης από πολυμερές (θ_P) και η απόδοση εγχάραξης (EY), συναρτήσει του AA . Οι συνθήκες αντιστοιχούν στο σημείο ($R_{F,0}=6$, $R_{CF_x,0}=10$) που βρίσκεται στην περιοχή C του χάρτη εγχάραξης του Σχήματος 10.1α. Οι μέσοι φαινόμενοι συντελεστές στο πλάγιο τοίχωμα του αυλακιού υπολογίζονται $S_{E,F}=0.0138$ και $S_{E,CF_x}=0.0028$. (γ) Το ίδιο με (β) σε συνθήκες που αντιστοιχούν στο σημείο ($R_{F,0}=0.5$, $R_{CF_x,0}=0.3$) του χάρτη του Σχήματος 10.1α. Υπολογίζεται ότι $S_{E,F}=0.0159$ και $S_{E,CF_x}=0.0374$. (δ) Το ίδιο με (β) σε συνθήκες που αντιστοιχούν στο σημείο ($R_{F,0}=3$, $R_{CF_x,0}=0.3$) του χάρτη του Σχήματος 10.1α. Στο Σχήμα 10.1δ φαίνεται και το κλάσμα κάλυψης από ρίζες CF_x (θ_{CF_x}) συναρτήσει του AA . Υπολογίζεται ότι $S_{E,F}=0.0076$ και $S_{E,CF_x}=0.0396$.

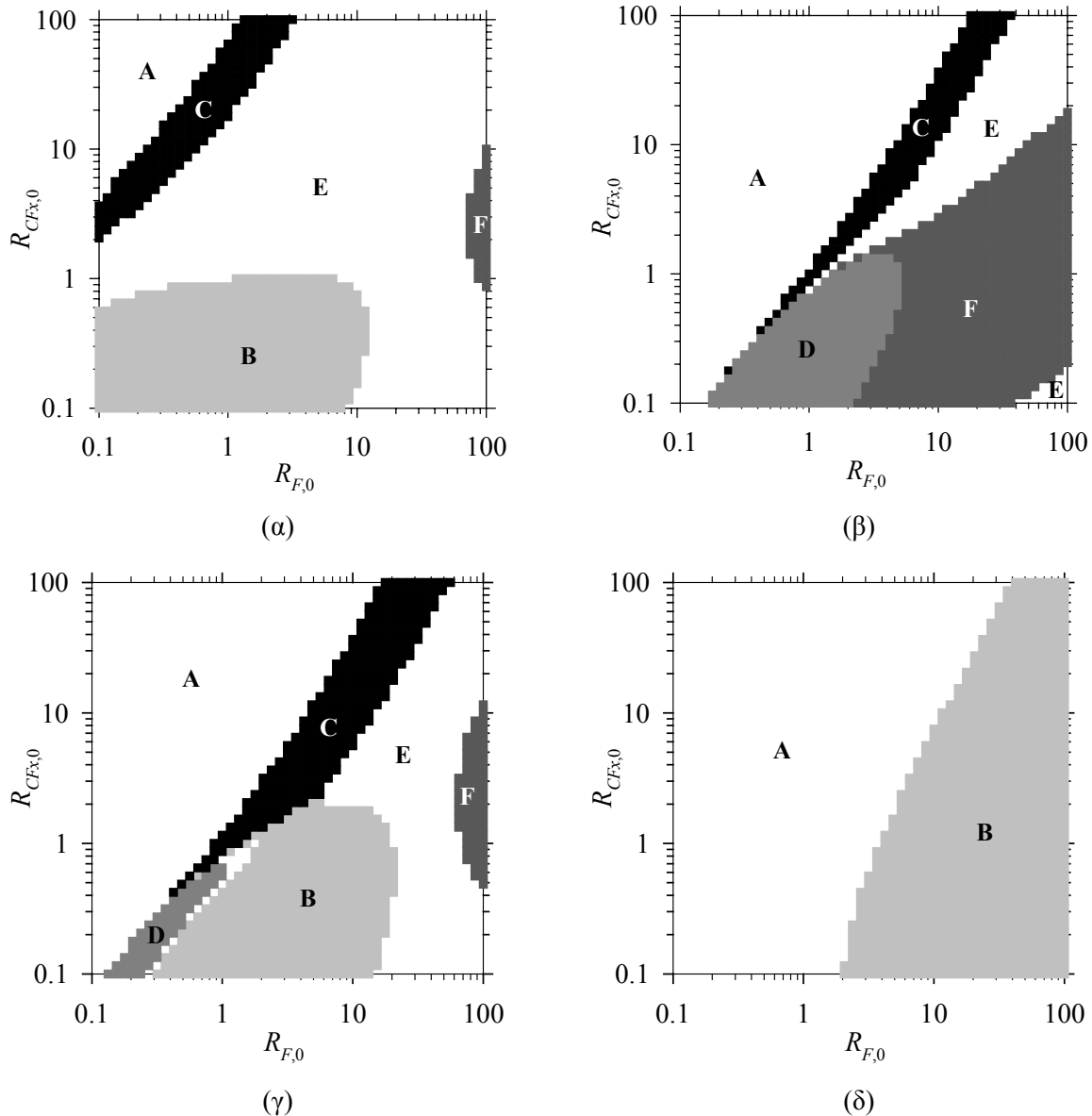
Γύρω από το Σχήμα 10.1α φαίνονται διαγράμματα μεταβολής του ανηγμένου ρυθμού εγχάραξης, των ανηγμένων ροών ουδέτερων συστατικών και ιόντων, του σημαντικού ανά περίπτωση κλάσματος κάλυψης της επιφάνειας και της απόδοσης εγχάραξης συναρτήσει του AA για συνθήκες που αντιστοιχούν στις περιοχές Β, Γ και Δ, με στόχο να εξηγηθούν τα φαινόμενα υστέρησης και αντίστροφης υστέρησης εγχάραξης (§10.2.3).

Οι περιοχές που φαίνονται στο χάρτη του Σχήματος 10.1α είναι διαφορετικές αν η ενέργεια των ιόντων είναι διαφορετική. Στο Σχήμα 10.2α φαίνεται ο ίδιος χάρτης εγχάραξης όταν η ενέργεια των ιόντων είναι 140 eV (αντί των 100 eV του χάρτη στο Σχήμα 10.1α). Παρατηρείται ότι σε υψηλότερη ενέργεια η περιοχή απόθεσης (περιοχή Α) συρρικνώνεται ενώ η περιοχή Ε επεκτείνεται. Η περιοχή F είναι σχεδόν σταθερή και στις δύο ενέργειες, ενώ η περιοχή D έχει μετακινηθεί έξω από τα όρια μεταβολής των $R_{F,0}$, $R_{CF_x,0}$ στο χάρτη που αντιστοιχεί σε ενέργεια 140 eV.

Στο Σχήμα 10.2β φαίνεται ο χάρτης εγχάραξης του Σχήματος 10.1α σε διαφορετική σύσταση ιόντων: 80% CF_3^+ , 10% CF_2^+ , 10% CF^+ (αντί της 10% CF_3^+ , 85% CF_2^+ , 5% CF^+ στο χάρτη του Σχήματος 10.1α). Στο χάρτη του Σχήματος 10.2β οι περιοχές F και D έχουν επεκταθεί. Στην περιοχή F του χάρτη στο Σχήμα 10.2β ο ρυθμός εγχάραξης είναι σταθερός μέχρι και $AA=8$. Επίσης η περιοχή Β δεν υπάρχει στο χάρτη του Σχήματος 10.2β.

Στο Σχήμα 10.2γ φαίνεται αντίστοιχος χάρτης εγχάραξης για οπές SiO_2 [Κουλίδης (2001), Kokkoris et al. (2002b)], ο οποίος ομοιάζει του αντίστοιχου για αυλάκια. Οι μεταβολές στις περιοχές του χάρτη εγχάραξης για οπές SiO_2 , όταν αλλάζει η ενέργεια ή η σύσταση των ιόντων, είναι αντίστοιχες με αυτές για τα αυλάκια [Κουλίδης (2001)]. Στο Σχήμα 10.2δ φαίνεται χάρτης εγχάραξης για αυλάκια Si. Οι περιοχές εγχάραξης είναι

λιγότερες στην περίπτωση του Si. Ουσιαστικά ο χάρτης χωρίζεται σε 2 περιοχές: Στην περιοχή A συμβαίνει απόθεση, ενώ στην περιοχή B υστέρηση εγχάραξης. Το φαινόμενο υστέρησης εγχάραξης είναι εντονότερο όσο πιο κοντά είναι οι συνθήκες στην περιοχή απόθεσης. Στην περίπτωση δομών Si η επίδραση της μεταβολής της ενέργειας ή της σύστασης των ιόντων μετατοπίζει τη διαχωριστική γραμμή μεταξύ των δύο περιοχών.



Σχήμα 10.2. Χάρτες εγχάραξης δομών SiO₂ και Si που απεικονίζουν την επίδραση των συνθηκών στον κύριο όγκο αντιδραστήρα πλάσματος φθοριωμένων υδρογονανθράκων στη μεταβολή του ρυθμού εγχάραξης συναρτήσει του AA των δομών. Σε κάθε χάρτη η ενέργεια και η σύσταση των ιόντων θεωρείται δεδομένη και μεταβάλλονται οι λόγοι $R_{F,0}$ και $R_{CF_x,0}$ (ροή ατόμων F και ριζών CF_x προς ροή ιόντων σε ελεύθερη επιφάνεια). Κάθε χάρτης χωρίζεται σε περιοχές όπου συμβαίνει συγκεκριμένο φαινόμενο. (α) Χάρτης εγχάραξης για αυλάκια SiO₂ ($E=140$ eV και 10% CF₃⁺, 85% CF₂⁺, 5% CF⁺). Ο χάρτης είναι ίδιος με αυτόν του Σχήματος 10.1α, αλλά σε υψηλότερη ενέργεια ιόντων. Στην περιοχή F ο ρυθμός εγχάραξης είναι σταθερός μέχρι $AA=7.5$, ενώ στην περιοχή E μέχρι $AA=3-7.5$. (β) Χάρτης εγχάραξης για αυλάκια SiO₂ ($E=100$ eV και 80% CF₃⁺, 10% CF₂⁺, 10% CF⁺).

Ο χάρτης είναι ίδιος με αυτόν του Σχήματος 10.1α, αλλά σε διαφορετική σύσταση ιόντων. Στην περιοχή F ο ρυθμός εγχάραξης είναι σταθερός μέχρι $LA=8$, ενώ στην περιοχή E μέχρι $LA=3-6.5$. (γ) Χάρτης εγχάραξης για οπές SiO_2 ($E=100$ eV και 10% CF_3^+ , 85% CF_2^+ , 5% CF^+). Ο χάρτης είναι ίδιος με αυτόν του Σχήματος 10.1α, αφορά ωστόσο οπές αντί αυλάκια SiO_2 . Η διαφορά με το χάρτη για τα αυλάκια SiO_2 είναι στην περιοχή E όπου ο ρυθμός εγχάραξης διατηρείται σταθερός μέχρι $LA=3$. (δ) Χάρτης εγχάραξης για αυλάκια Si ($E=100$ eV και 10% CF_3^+ , 85% CF_2^+ , 5% CF^+). Περιοχές: A: απόθεση αντί εγχάραξης. B: Υστέρηση εγχάραξης. Το φαινόμενο είναι εντονότερο κοντά στην περιοχή απόθεσης (περιοχή A) και οδηγεί σε διακοπή εγχάραξης.

Για τη περιγραφή της επίδραση της αέριας φάσης κατασκευάστηκε ένας ακόμη τύπος χαρτών εγχάραξης SiO_2 για αυλάκια [Kokkoris et al. (2001), Kokkoris et al. (2002)], και οπές [Κουλίδης (2001)] που απεικονίζουν τη μεταβολή των λόγων R_F , R_{CF_x} στο μέσο της βάσης των εγχαρασόμενων δομών. Με τον τρόπο που κατασκευάστηκαν οι χάρτες που παρουσιάστηκαν (Σχήματα 10.1α και 10.2) είναι δυνατό να κατασκευαστούν χάρτες όπου απεικονίζονται παράθυρα διεργασιών εγχάραξης (etching process window) που συνδέουν τις συνθήκες στον κύριο όγκο αντιδραστήρα πλάσματος με διαφορετικές απαιτήσεις εγχάραξης {π.χ. απαιτήσεις για επιλεκτικότητα εγχάραξης SiO_2/Si , υψηλή απόλυτη τιμή του ρυθμού εγχάραξης και ρυθμός εγχάραξης σταθερός συναρτήσει του LA [Kokkoris et al. (2001b)]}.

10.2.3 Ερμηνεία απώλειας μικροσκοπικής ομοιομορφίας

Για την διερεύνηση των φαινομένων υστέρησης και αντίστροφης υστέρησης εγχάραξης, που συνεπάγονται την απώλεια μικροσκοπικής ομοιομορφίας, επιλέγονται διαφορετικές συνθήκες από το χάρτη εγχάραξης αυλακίων SiO_2 του Σχήματος 10.1α και μελετάται σε κάθε περίπτωση η εξάρτηση του ρυθμού εγχάραξης από το LA . Ο ρυθμός εγχάραξης είναι ανάλογος του γινομένου της απόδοσης εγχάραξης (άτομα Si/προσπίπτον ιόν) και της ροής ιόντων [Εξ. (3.9)]. Έτσι, η μεταβολή του ρυθμού εγχάραξης συναρτήσει του LA εξαρτάται από την αντίστοιχη μεταβολή, τόσο της απόδοσης εγχάραξης, όσο και της ροής ιόντων.

1) Περιοχή B: Υστέρηση εγχάραξης χωρίς διακοπή εγχάραξης

Εξετάζεται η μεταβολή του ρυθμού εγχάραξης συναρτήσει του LA για συνθήκες που αντιστοιχούν στο σημείο ($R_{F,0}=3$, $R_{CF_x,0}=0.3$) που βρίσκεται στην περιοχή B του χάρτη εγχάραξης του Σχήματος 10.1α. Στο Σχήμα 10.1δ φαίνεται ο ρυθμός εγχάραξης, η ροή ιόντων και ουδέτερων συστατικών (F, CF_x). Ο ρυθμός εγχάραξης μειώνεται με την αύξηση του LA προκαλώντας υστέρηση εγχάραξης. Η ροή ιόντων είναι σταθερή μέχρι $LA=6$ και για $LA>6$ μειώνεται. Η σχετική μείωση της ροής ριζών CF_x είναι μεγαλύτερη από αυτή των ατόμων F, αφού ο φαινόμενος συντελεστής προσκόλλησης των ριζών CF_x στα πλάγια τοιχώματα του αυλακιού είναι υψηλότερος από αυτόν των ατόμων F ($S_{E,CF_x}=0.0396$,

$S_{E,F}=0.0076$).³¹ Υπό αυτές τις συνθήκες, το σημαντικό κλάσμα κάλυψης (αυτό που καθορίζει την απόδοση εγχάραξης) είναι το κλάσμα κάλυψης από ρίζες CF_x , θ_{CF_x} . Στο Σχήμα 10.1δ φαίνονται επίσης τα κλάσματα κάλυψης από ρίζες CF_x και πολυμερές, θ_{CF_x} και θ_P , και η απόδοση εγχάραξης, EY , συναρτήσει του AA .

Η μείωση του ρυθμού εγχάραξης με την αύξηση του AA οφείλεται στη μείωση της απόδοσης εγχάραξης για $AA < 6$. Για $AA > 6$, η μείωση του ρυθμού εγχάραξης οφείλεται, τόσο στη μείωση της απόδοσης εγχάραξης, όσο και στη μείωση της ροής των ιόντων. Σημειώνεται ότι αν και ο ρυθμός εγχάραξης συνεχώς μειώνεται, η εγχάραξη δεν διακόπτεται, αφού το κλάσμα κάλυψης από πολυμερές, θ_P , είναι μικρό και μειώνεται με την αύξηση του AA . Σύμφωνα με το μοντέλο εγχάραξης (Κεφ. 3), η εγχάραξη διακόπτεται όταν $\theta_P=1$.

2) Περιοχή C: Έντονη υστέρηση εγχάραξης και διακοπή εγχάραξης

Στο Σχήμα 10.1β φαίνονται ο ρυθμός εγχάραξης και οι ροές ιόντων και ουδέτερων συστατικών συναρτήσει του AA για τις συνθήκες που αντιστοιχούν στο σημείο ($R_{F,0}=6$, $R_{CF_x,0}=10$) στην περιοχή C του χάρτη εγχάραξης του Σχήματος 10.1α. Ο ρυθμός εγχάραξης μειώνεται με την αύξηση του AA προκαλώντας έντονη υστέρηση εγχάραξης και διακοπή εγχάραξης ($AA=8$). Σε αυτή την περίπτωση, ο φαινόμενος συντελεστής προσκόλλησης των ατόμων F στα πλάγια τοιχώματα είναι υψηλότερος από αυτόν των ριζών CF_x ($S_{E,F}=0.0138$, $S_{E,CF_x}=0.0028$). Επομένως, η σχετική μείωση στη ροή των ατόμων F είναι μεγαλύτερη από αυτή των ριζών CF_x . Στο Σχήμα 10.1β φαίνονται επίσης το κλάσμα κάλυψης από πολυμερές, θ_P , και η απόδοση εγχάραξης, EY , συναρτήσει του AA . Το θ_P είναι το κυρίαρχο κλάσμα κάλυψης και οι συνθήκες (σχετική μείωση στη ροή των ατόμων F μεγαλύτερη από αυτή των ριζών CF_x) ευνοούν την αύξησή του με την αύξηση του AA , προκαλώντας τη μείωση της απόδοσης εγχάραξης.

3) Περιοχή D: Αντίστροφη υστέρηση εγχάραξης

Στο Σχήμα 10.1γ φαίνονται ο ρυθμός εγχάραξης και οι ροές ιόντων και ουδέτερων συστατικών συναρτήσει του AA αυλακιού για τις συνθήκες που αντιστοιχούν στο σημείο ($R_{F,0}=0.5$, $R_{CF_x,0}=0.3$) στην περιοχή D του Σχήματος 10.1α. Ο ρυθμός εγχάραξης αυξάνεται με την αύξηση του AA προκαλώντας αντίστροφη υστέρηση εγχάραξης μέχρι και $AA=6$. Για $AA > 6$, ο ρυθμός εγχάραξης μειώνεται. Η σχετική μείωση της ροής ριζών CF_x είναι μεγαλύτερη από αυτή των ατόμων F, αφού ο φαινόμενος συντελεστής προσκόλλησης των ριζών CF_x στα πλάγια τοιχώματα του αυλακιού είναι υψηλότερος από αυτόν των ατόμων F ($S_{E,CF_x}=0.0396$, $S_{E,F}=0.0076$). Στο Σχήμα 10.1γ φαίνεται επίσης το κλάσμα κάλυψης από πολυμερές, θ_P , και η απόδοση εγχάραξης, EY , συναρτήσει του AA . Το θ_P είναι το κυρίαρχο κλάσμα κάλυψης και οι συνθήκες (σχετική μείωση της ροής ριζών CF_x μεγαλύτερη από αυτή των ατόμων F) ευνοούν τη μείωσή του με την αύξηση του AA , προκαλώντας την αύξηση της απόδοσης εγχάραξης για $AA < 6$. Για $AA > 6$, ο ρυθμός εγχάραξης μειώνεται κυρίως λόγω της

³¹ Οι τιμές των φαινομένων συντελεστών προσκόλλησης αφορούν το μέσο του πλάγιου τοιχώματος και είναι οι μέσες τιμές για το διάστημα $AA \in (0,20]$.

μείωσης της ροής ιόντων, αλλά και της μείωσης της απόδοσης εγχάραξης (για $LA > 9$, όπου η κλίση μεταβολής της ροής ριζών CF_x συναρτήσει του LA γίνεται μικρότερη από την αντίστοιχη για τη ροή ατόμων F).

Οι συλλογισμοί για τις υπόλοιπες περιοχές στο χάρτη εγχάραξης του Σχήματος 10.1α είναι αντίστοιχοι. Έχοντας κατά νου την αντιστοιχία του κλάσματος κάλυψης επιφάνειας από πολυμερές, θ_p , με το ανηγμένο πάχος του πολυμερικού στρώματος που δημιουργείται στην εγχαρασόμενη επιφάνεια (Κεφ. 3), οι παρατηρήσεις που προκύπτουν από τη μελέτη εγχάραξης αυλακιών SiO_2 συνοψίζονται στα παρακάτω [Kokkoris et al. (2002)]:

A) Σε συνθήκες όπου το κλάσμα κάλυψης από πολυμερές, θ_p , είναι κυρίαρχο, η μεταβολή του συναρτήσει του LA καθορίζει τη μεταβολή της απόδοσης εγχάραξης: αύξηση του θ_p (περιοχή C) παρεμποδίζει την εγχάραξη και μειώνει την απόδοση εγχάραξης, ενώ μείωσή του (περιοχή D) αυξάνει την απόδοση εγχάραξης. Όταν το θ_p δεν είναι κυρίαρχο (περιοχές B, E και F), το κλάσμα κάλυψης επιφάνειας από τα ουδέτερα συστατικά F, CF_x καθορίζει τη μεταβολή της απόδοσης εγχάραξης.

B) Η μεταβολή του θ_p συναρτήσει του LA καθορίζεται από τις σχετικές μειώσεις των ροών των ουδέτερων συστατικών (F, CF_x) συναρτήσει του LA , οι οποίες προκαλούνται από τις τιμές των αντίστοιχων φαινομένων συντελεστών προσκόλλησης. Αν $S_{E,F} > S_{E,CF_x}$ (περιοχή C), τότε η σχετική μείωση της ροής των ατόμων F είναι μεγαλύτερη από αυτή της ροής ριζών CF_x και το θ_p αυξάνεται. Το θ_p μειώνεται όταν η σχετική μείωση της ροής των ριζών CF_x είναι μεγαλύτερη από αυτή της ροής ατόμων F ($S_{E,F} < S_{E,CF_x}$, περιοχή B και D). Οι φαινόμενοι συντελεστές προσκόλλησης των ουδέτερων συστατικών καθορίζουν τη μεταβολή του θ_p συναρτήσει του LA . Ωστόσο, αποτελούν τις κρίσιμες παραμέτρους για την απόδοση εγχάραξης μόνο όταν το θ_p είναι το κυρίαρχο κλάσμα κάλυψης της επιφάνειας [Παρατήρηση (A)].⁹¹

Οι τιμές των φαινομένων συντελεστών προσκόλλησης των ουδέτερων συστατικών καθορίζονται από τις συνθήκες στον κύριο όγκο αντιδραστήρα πλάσματος. Ένας γενικός κανόνας που προκύπτει από τους υπολογισμούς είναι ότι αν η ροή των ριζών CF_x που φτάνουν σε ελεύθερη επιφάνεια από τον κύριο όγκο του αντιδραστήρα είναι μεγαλύτερη από αυτή των ατόμων F, τότε ο φαινόμενος συντελεστής προσκόλλησης των ατόμων F (στα πλάγια τοιχώματα) είναι μεγαλύτερος από αυτόν των ριζών CF_x .

Γ) Υπάρχει περίπτωση για $LA > 6$, η απόδοση εγχάραξης να αυξάνεται (αυτό μπορεί να συμβεί στην περιοχή F). Ωστόσο, η επίδραση της μείωσης της ροής ιόντων στο γινόμενο που δίνει το ρυθμό εγχάραξης (απόδοση εγχάραξης \times ροή ιόντων) φαίνεται να κυριαρχεί. Έτσι, ο

⁹¹ Αν οι φαινόμενοι συντελεστές προσκόλλησης των ουδέτερων συστατικών μετατεθούν αμοιβαία (η τιμή του $S_{E,F}$ αποδοθεί στον S_{E,CF_x} και αντίστροφα), συμβαίνουν αντίστροφη υστέρηση εγχάραξης αντί υστέρησης εγχάραξης και υστέρησης εγχάραξης αντί αντίστροφης υστέρησης εγχάραξης.

ρυθμός εγχάραξης μειώνεται σε κάθε περίπτωση για $LA > 6$. Η κρίσιμη τιμή $LA = 6$ οφείλεται στην τυπική απόκλιση της γωνιακής κατανομής των ιόντων που είναι $\sigma = 2^\circ$. Η κρίσιμη τιμή γίνεται 3.5 αν $\sigma = 4^\circ$.

Δ) Από την προηγούμενη παρατήρηση προκύπτει ότι σχεδόν σταθερός ρυθμός εγχάραξης συναρτήσει του LA μπορεί να επιτευχθεί στην βέλτιστη περίπτωση μέχρι περίπου την τιμή LA όπου η ροή ιόντων αρχίζει να μειώνεται. Στις περιοχές E και F όπου ο ρυθμός εγχάραξης είναι σχεδόν σταθερός μέχρι $LA = 3-7$, παρατηρείται ότι το θ_p είναι γενικά χαμηλό ($\theta_p < 0.25$).

Η μελέτη των περιοχών σε χάρτη εγχάραξης αυλακίων Si οδηγεί σε ανάλογα συμπεράσματα. Για παράδειγμα, η εξήγηση του φαινομένου υστέρησης και διακοπής εγχάραξης σε αυλάκια Si είναι αντίστοιχη με αυτή στα αυλάκια SiO₂ και αποδίδεται στην αύξηση του θ_p συναρτήσει του LA . Στις συνθήκες που εξετάστηκαν στα αυλάκια Si, οι οποίες είναι ίδιες με αυτές για τα αυλάκια SiO₂, δεν παρατηρήθηκε αντίστροφη υστέρηση εγχάραξης: ο συντελεστής προσκόλλησης των ατόμων F στα πλάγια τοιχώματα των αυλακίων είναι μεγαλύτερος από αυτόν των ριζών CF_x.

10.2.4 Σύγκριση με πειραματικές παρατηρήσεις

Για την κατασκευή των χαρτών και την ερμηνεία των φαινομένων σε κάθε περιοχή των χαρτών έγινε σύζευξη του μοντέλου εγχάραξης με το μοντέλο υπολογισμού των τοπικών ροών μέσα σε δομές. *Για την ποσοτική σύγκριση των αποτελεσμάτων της σύζευξης χρειάζονται α) πειραματικά δεδομένα ρυθμού εγχάραξης συναρτήσει του LA και β) ποσοτικά αποτελέσματα ανάλυσης της αέριας φάσης στον κύριο όγκο του αντιδραστήρα. Η σπανιότητα αυτού του συνδυασμού για το ίδιο σύστημα στη βιβλιογραφία και η δεδομένη πολυπλοκότητα του περιβάλλοντος πλάσματος που δυσκολεύει αυτές καθαυτές τις μετρήσεις [Gottscho et al. (1992)], [Cooperberg et al. (2002)] και το συνδυασμό πειραματικών δεδομένων (α) και (β) από διαφορετικά συστήματα, οδηγεί στο ότι λεπτομερής ποσοτική σύγκριση με πειραματικά αποτελέσματα είναι δύσκολο να γίνει.*³¹

Ωστόσο, με τη σύζευξη των δύο μοντέλων, και χωρίς προσαρμόσιμες παραμέτρους, επιτυγχάνεται ερμηνεία των φαινομένων υστέρησης και αντίστροφης υστέρησης εγχάραξης, η οποία συμβαδίζει με την πειραματική παρατήρηση. Τα αποτελέσματα προσομοίωσης προβλέπουν υστέρηση εγχάραξης όταν το θ_p (ή το ανηγμένο πάχος του στρώματος πολυμερούς στην επιφάνεια) αυξάνεται με την αύξηση του LA των δομών, ενώ όταν το $\theta_p = 1$, η εγχάραξη διακόπτεται. Αυτό το αποτέλεσμα είναι συμβατό με τα πειραματικά

³¹ Οι συνθήκες στον κύριο όγκο του αντιδραστήρα, και συνεπώς οι τιμές των μεταβλητών που χρησιμοποιούνται στους υπολογισμούς, θα μπορούσαν να υπολογιστούν με βάση τις λειτουργικές παραμέτρους του αντιδραστήρα οι οποίες είναι συνήθως γνωστές. Ωστόσο, η σύνδεση των συνθηκών με τις λειτουργικές παραμέτρους ενός αντιδραστήρα (π.χ. πίεση, ισχύς) δεν είναι άμεση και σαφής [Arnold et al. (1993)] και χρειάζεται η χρησιμοποίηση μοντέλου για την αέρια φάση στον κύριο όγκο ενός αντιδραστήρα.

αποτελέσματα των Joubert et al. οι οποίοι παρατηρούν ότι κατά τη διάρκεια εγχάραξης δομών SiO₂ υπάρχει ένα στρώμα πολυμερούς στην επιφάνεια της βάσης των δομών, και όταν αυτό γίνει αρκετά παχύ η εγχάραξη σταματά [Joubert et al. (1994)]. Το πάχος αυτού του στρώματος πολυμερούς αυξάνεται κατά τη διάρκεια της εγχάραξης (καθώς ο *AA* αυξάνεται) και παρεμποδίζει βαθμιαία την εγχάραξη [Joubert et al. (1994), Joubert et al. (1994c)]. Στο ίδιο συμπέρασμα καταλήγουν και οι Kato et al. [Kato et al. (1994)].

Επίσης, σύμφωνα με τους Kato et al. [Kato et al. (1994)], όταν το στρώμα πολυμερούς στην επιφάνεια της βάσης της δομής είναι λεπτό, ο ρυθμός εγχάραξης δομών SiO₂ δεν μεταβάλλεται σημαντικά κατά τη διάρκεια της εγχάραξης (όπου ο *AA* αυξάνεται). Τα αποτελέσματα προσομοίωσης προβλέπουν ότι ο ρυθμός εγχάραξης είναι σχεδόν σταθερός με την αύξηση του *AA* (για κάποιο εύρος τιμών *AA*), όταν το θ_P στη βάση της δομής είναι χαμηλό ($\theta_P < 0.25$).

Οι Joubert et al. κατόρθωσαν να μειώσουν την ένταση της υστέρησης εγχάραξης σε αυλάκια και οπές SiO₂ αυξάνοντας την τάση στο ηλεκτρόδιο του αντιδραστήρα που τοποθετείται το προς εγχάραξη δείγμα [Joubert et al. (1994b)]. Η τάση στο ηλεκτρόδιο συνδέεται άμεσα με την ενέργεια των ιόντων. Στα Σχήματα 10.3α και 10.3β τα αποτελέσματα προσομοίωσης επιβεβαιώνουν την επίδραση της ενέργειας των ιόντων στην υστέρηση εγχάραξης.³¹ Στο Σχήμα 10.3α φαίνονται πειραματικά δεδομένα υστέρησης εγχάραξης για πλάσμα CHF₃ σε δύο διαφορετικές τάσεις στο ηλεκτρόδιο που βρίσκεται το δείγμα (μαύρα σημεία: 100 V, γκρι σημεία: 150 V). Οι συνθήκες στον κύριο όγκο του αντιδραστήρα δεν είναι γνωστές.³² Έτσι, επιλέγονται συνθήκες προσομοίωσης που θεωρείται ότι προσεγγίζουν πλάσμα CHF₃. Γίνονται υπολογισμοί για τις ίδιες συνθήκες σε ενέργειες ιόντων 100 eV και 120 eV και φαίνεται ότι οι καμπύλες προσομοίωσης προβλέπουν την τάση των πειραματικών δεδομένων. Το Σχήμα 10.3β είναι αντίστοιχο του Σχήματος 10.3α μόνο που αντιστοιχεί σε πλάσμα C₂F₄. Σε αυτήν την περίπτωση οι συνθήκες προσομοίωσης αντιστοιχούν σε ένα αέριο με σύσταση στην οποία ο λόγος C/F είναι μεγαλύτερος (more depositing gas), όπως είναι το C₂F₄ σε σχέση με το CHF₃.

³¹ Η μείωση της έντασης του φαινομένου υστέρησης εγχάραξης με την αύξηση της ενέργειας των ιόντων μπορεί να μπορεί να προκύψει συγκρίνοντας το χάρτη στο Σχήμα 10.2α, όπου η ενέργεια των ιόντων είναι 140 eV, με αυτόν στο Σχήμα 10.1α, όπου η ενέργεια των ιόντων είναι 100 eV. Το σύνολο των συνθηκών που ορίζονται από την περιοχή E του χάρτη στα 100 eV βρίσκονται πιο μακριά από την περιοχή απόθεσης A στο χάρτη στα 140 eV, καθώς αυτή συρρικνώνεται ή μετατοπίζεται προς τα αριστερά: αυτό σημαίνει ότι ο ρυθμός εγχάραξης για τις συνθήκες που ορίζονται από την περιοχή E του χάρτη στο Σχήμα 10.1α διατηρείται σταθερός για μεγαλύτερο εύρος *AA* στα 140 eV. Επομένως, το φαινόμενο υστέρησης εγχάραξης σε αυτές τις συνθήκες είναι λιγότερο έντονο.

³² Το σύνολο δεδομένων που είναι γνωστά είναι οι παράμετροι λειτουργίας: αντιδραστήρας πλάσματος ECR (electron cyclotron resonance), τροφοδοσία του αντιδραστήρα με 40 sccm CHF₃, πίεση 1 mTorr, ισχύς πηγής πλάσματος 1000W, τάση που εφαρμόζεται στο ηλεκτρόδιο που τοποθετείται το δείγμα 100V και 150V. Από τις παραπάνω παραμέτρους μόνο η τάση στο ηλεκτρόδιο μπορεί να συνδεθεί άμεσα με την ενέργεια ιόντων. Οι υπόλοιπες δεν μπορούν άμεσα να δώσουν τη σύσταση της αέριας φάσης στον κύριο όγκο. Η απαραίτητη για την προσομοίωση στην παρούσα εργασία σύσταση του κύριου όγκου μπορεί να προκύψει από μοντέλα περιγραφής του κύριου όγκου του αντιδραστήρα τροφοδοτώντας σε αυτά τις γνωστές παραμέτρους λειτουργίας.

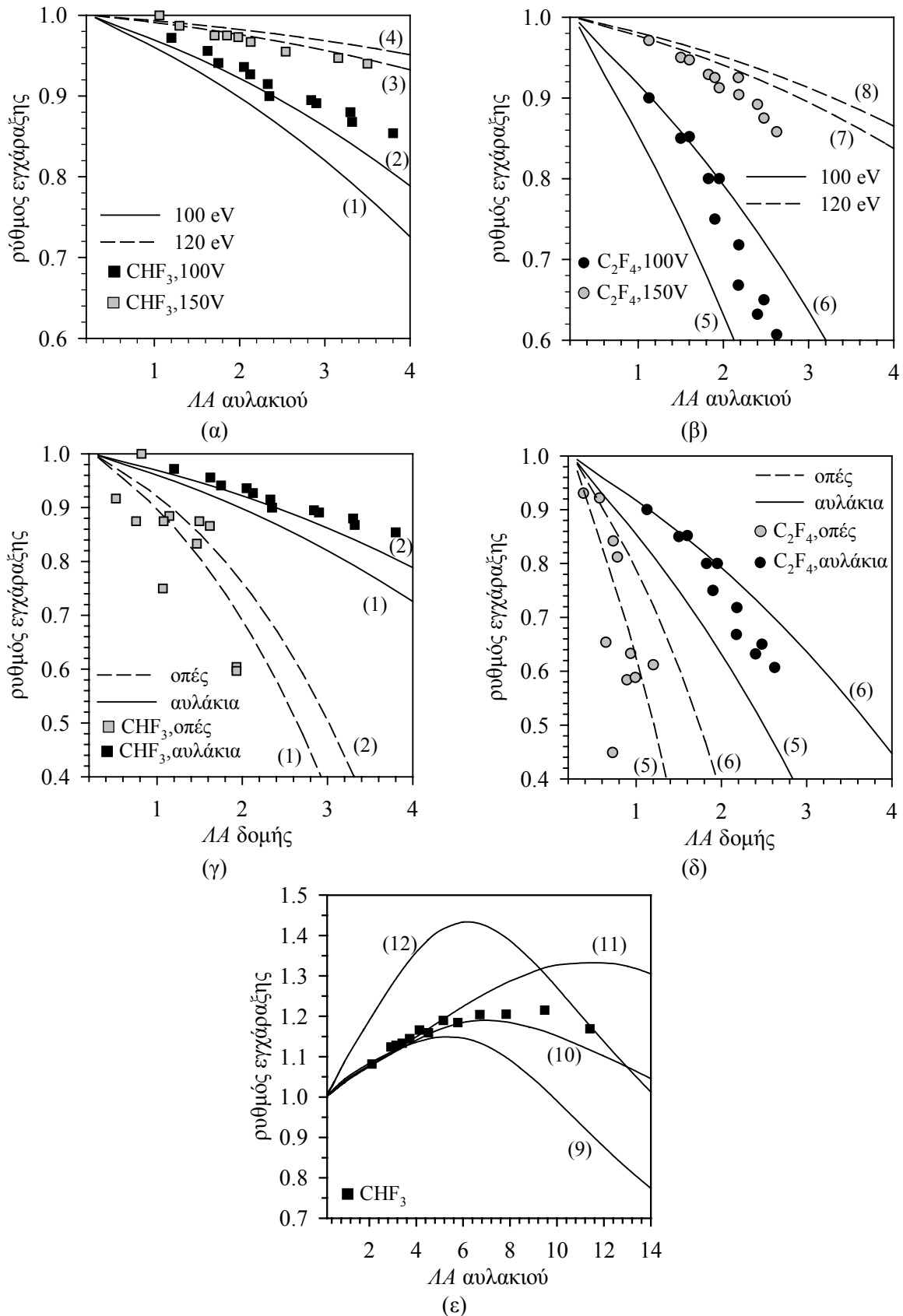
Στα Σχήματα 10.3γ και 10.3δ φαίνεται η επίδραση της δομής (αυλάκι, οπή) στο φαινόμενο υστέρησης εγχάραξης δομών SiO_2 . Οι Joubert et al. μέτρησαν το ρυθμό εγχάραξης σε αυλάκια και οπές διαφορετικού AA [Joubert et al. (1994)]. Από τις μετρήσεις τους προκύπτει ότι το φαινόμενο υστέρησης εγχάραξης είναι εντονότερο σε οπές από ότι σε αυλάκια. Αυτό επιβεβαιώνεται από τα αποτελέσματα προσομοίωσης για πλάσμα CHF_3 (Σχήμα 10.3γ) και C_2F_4 (Σχήμα 10.3δ).

Οι Doemling et al. παρατήρησαν πειραματικά το φαινόμενο υστέρησης εγχάραξης σε συνθήκες όπου το πάχος του πολυμερούς στην επιφάνεια είναι σημαντικό³¹ και σε μικρούς AA για αυλάκια και οπές SiO_2 [Doemling et al. (1996)]. Η εξήγηση που έδωσαν για το φαινόμενο είναι η μείωση του πάχους του στρώματος πολυμερούς στην επιφάνεια της βάσης της δομής κατά τη διάρκεια της εγχάραξης (όσο ο AA αυξάνεται). Οι Kato et al. επιβεβαιώνουν την εξήγηση και σημειώνουν ότι αντίστροφη υστέρηση εγχάραξης γίνεται σε συνθήκες όπου το πάχος του πολυμερούς στρώματος στην επιφάνεια της βάσης της δομής είναι υψηλό (highly polymerizing conditions) [Kato et al. (1994)]. Οι εξηγήσεις και των δύο ομάδων επιβεβαιώνονται από τα αποτελέσματα προσομοίωσης: η αντίστροφη υστέρηση εγχάραξης σε δομές SiO_2 συμβαίνει όταν το θ_P είναι υψηλό και οφείλεται στη μείωση του θ_P στην επιφάνεια της βάσης της δομής καθώς αυξάνεται ο AA .

Αν και το φαινόμενο αντίστροφης υστέρησης εγχάραξης δεν είναι σύνηθες, υπό την έννοια ότι η πειραματική παρατήρησή του είναι σπάνια, η προσομοίωση προβλέπει το φαινόμενο. Μάλιστα από τους χάρτες εγχάραξης φαίνεται να αντιστοιχεί σε μικρό εύρος συνθηκών και ίσως αυτό εξηγεί και τη μη συχνή παρατήρησή του. Στο Σχήμα 10.3ε παρουσιάζονται πειραματικά δεδομένα [Doemling et al. (1996)] και αποτελέσματα προσομοίωσης σε συνθήκες αντίστροφης υστέρησης εγχάραξης αυλακίων SiO_2 σε πλάσμα CHF_3 . Τα αποτελέσματα προσομοίωσης αφορούν διαφορετικές συνθήκες από την περιοχή D χαρτών εγχάραξης σε διαφορετικές ενέργειες και συστάσεις ιόντων.

Συμπερασματικά, η θεωρητική μελέτη και τα αποτελέσματα προσομοίωσης, με κέντρο βάρους το κλάσμα κάλυψης της επιφάνειας από πολυμερές (ή το πάχος του στρώματος πολυμερούς), ερμηνεύουν τα φαινόμενα υστέρησης και αντίστροφης υστέρησης εγχάραξης με τρόπο που επιβεβαιώνει τις πειραματικές μετρήσεις και συμφωνεί με τις ερμηνείες άλλων ερευνητικών ομάδων. Η θεωρητική μελέτη, με λίγες λογικές παραδοχές (π.χ. ισοτροπική κατανομή και μηχανισμός «διάχυτης» επανεκπομπής για τα ουδέτερα συστατικά) και χωρίς προσαρμόσιμες παραμέτρους, καταφέρνει να προβλέψει τα φαινόμενα και την επίδραση διαφόρων παραμέτρων (ενέργεια ιόντων, τύπος δομής) σε αυτά. Επιπροσθέτως επιχειρεί να προσεγγίσει την πρωτογενή αιτία για τη γέννηση των φαινομένων συνδέοντας τη μεταβολή του κλάσματος κάλυψης της επιφάνειας από πολυμερές (ή του πάχους του στρώματος πολυμερούς) με τους φαινόμενους συντελεστές προσκόλλησης και τη σύσταση της αέριας φάσης στον κύριο όγκο αντιδραστήρα πλάσματος.

³¹ στην περιοχή εγχάραξης πολυμερούς (fluorocarbon suppression regime). Οι 3 περιοχές (regimes) εγχάραξης του SiO_2 συναρτήσεις της ενέργειας των ιόντων περιγράφονται στην §3.5.



Σχήμα 10.3 Ρυθμός εγχάραξης στο μέσο της βάσης δομής SiO_2 (ανηγμένος στο ρυθμό εγχάραξης σε ελεύθερη επιφάνεια) συναρτήσεως του LA της δομής κατά την εγχάραξη με πλάσμα φθοριωμένων υδρογονανθράκων. Σε κάθε διάγραμμα φαίνονται πειραματικά δεδομένα ως σημεία (τετράγωνα και κύκλοι) και αποτελέσματα προσομοίωσης ως γραμμές (συνεχείς και διακεκομμένες). (α) Η επίδραση

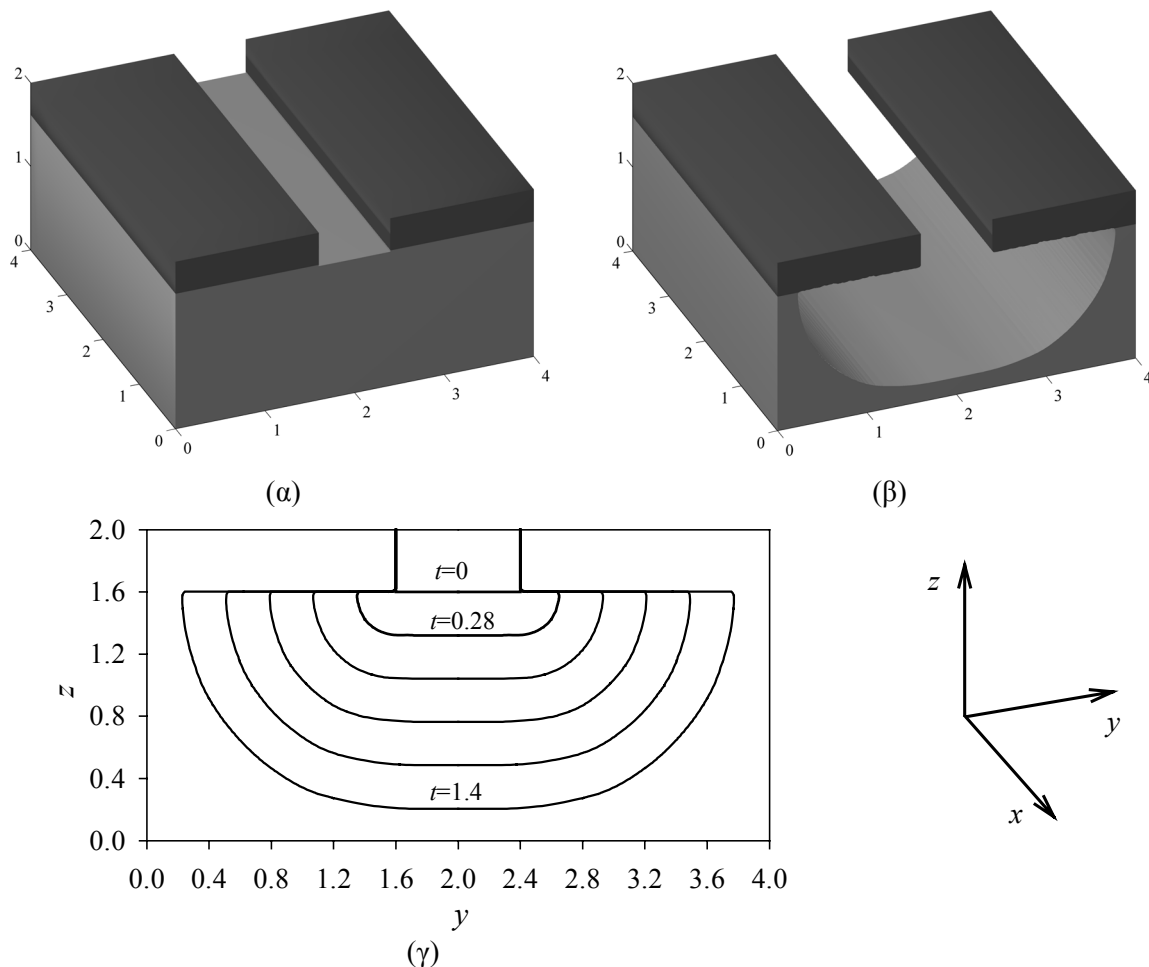
της ενέργειας ιόντων (ή της τάσης που επιβάλλεται στο ηλεκτρόδιο που βρίσκεται το δείγμα) στην υστέρηση εγχάραξης σε αυλάκια SiO₂. Τα πειραματικά δεδομένα [Joubert et al. (1994b)] αφορούν εγχάραξη αυλακίων SiO₂ με πλάσμα CHF₃ σε δύο διαφορετικές τάσεις στο ηλεκτρόδιο (μαύρα τετράγωνα: 100V, γκρι τετράγωνα: 150V). Αντίστοιχα, τα αποτελέσματα προσομοίωσης υπολογίζονται σε διαφορετικές ενέργειες ιόντων 100 eV [(1),(2)] και 120 eV [(3),(4)]. (β) Το ίδιο με (α). Τα πειραματικά δεδομένα [Joubert et al. (1994b)] αφορούν εγχάραξη αυλακίων SiO₂ με πλάσμα C₂F₄ σε δύο διαφορετικές τάσεις στο ηλεκτρόδιο (μαύροι κύκλοι: 100V, γκρι κύκλοι: 150V). Οι συνθήκες προσομοίωσης [(5),(6),(7),(8)] αντιστοιχούν σε ένα αέριο με σύσταση στην οποία ο λόγος C/F είναι μεγαλύτερος (more depositing gas), όπως είναι το C₂F₄ σε σχέση με το CHF₃. (γ) Η επίδραση της δομής (αυλάκι, οπή) στην υστέρηση εγχάραξης σε δομές SiO₂. Τα πειραματικά δεδομένα [Joubert et al. (1994)] αφορούν εγχάραξη δομών SiO₂ (μαύρα τετράγωνα: αυλάκια, γκρι τετράγωνα: οπές) με πλάσμα CHF₃. Οι συνθήκες προσομοίωσης [(1),(2)] είναι ίδιες για αυλάκια και οπές. (δ) Το ίδιο με (γ). Τα πειραματικά δεδομένα [Joubert et al. (1994)] αφορούν εγχάραξη δομών SiO₂ (μαύροι κύκλοι: αυλάκια, γκρι κύκλοι: οπές) με πλάσμα C₂F₄. Οι συνθήκες προσομοίωσης [(5),(6)] είναι ίδιες για αυλάκια και οπές και αντιστοιχούν σε ένα αέριο με σύσταση στην οποία ο λόγος C/F είναι μεγαλύτερος (more depositing gas), όπως είναι το C₂F₄ σε σχέση με το CHF₃. (ε) Αντίστροφη υστέρηση εγχάραξης σε αυλάκια SiO₂. Τα πειραματικά δεδομένα [Doemling et al. (1996)] αφορούν εγχάραξη αυλακίων SiO₂ με πλάσμα CHF₃. Οι συνθήκες προσομοίωσης [(9),(10),(11),(12)] αντιστοιχούν στις περιοχές D (αντίστροφης υστέρησης εγχάραξης) των αντίστοιχων χαρτών εγχάραξης. Συνθήκες προσομοίωσης: ισοτροπική κατανομή και μηχανισμός «διάχυτης» επανεκπομπής για τα άτομα F και τις ρίζες CF_x, κανονική γωνιακή κατανομή για τα ιόντα (μονοενεργητικά) με τυπική απόκλιση σ=2°. (1): R_{F,0}=6, R_{CF_x,0}=9, 100eV, 10% CF₃⁺, 85% CF₂⁺, 5% CF⁺. (2): R_{F,0}=20, R_{CF_x,0}=60, 100eV, 10% CF₃⁺, 85% CF₂⁺, 5% CF⁺. (3): R_{F,0}=6, R_{CF_x,0}=9, 120eV, 10% CF₃⁺, 85% CF₂⁺, 5% CF⁺. (4): R_{F,0}=20, R_{CF_x,0}=60, 120eV, 10% CF₃⁺, 85% CF₂⁺, 5% CF⁺. (5): R_{F,0}=25, R_{CF_x,0}=90, 100eV, 10% CF₃⁺, 10% CF₂⁺, 80% CF⁺. (6): R_{F,0}=12, R_{CF_x,0}=20, 100eV, 10% CF₃⁺, 10% CF₂⁺, 80% CF⁺. (7): R_{F,0}=25, R_{CF_x,0}=90, 120eV, 10% CF₃⁺, 10% CF₂⁺, 80% CF⁺. (8): R_{F,0}=12, R_{CF_x,0}=20, 120eV, 10% CF₃⁺, 10% CF₂⁺, 80% CF⁺. (9) R_{F,0}=0.5, R_{CF_x,0}=0.3, 100eV, 10% CF₃⁺, 85% CF₂⁺, 5% CF⁺. (10): R_{F,0}=2, R_{CF_x,0}=1, 100eV, 10% CF₃⁺, 85% CF₂⁺, 5% CF⁺. (11): R_{F,0}=0.8, R_{CF_x,0}=0.5, 100eV, 80% CF₃⁺, 10% CF₂⁺, 10% CF⁺. (12): R_{F,0}=0.25, R_{CF_x,0}=0.15, 100eV, 10% CF₃⁺, 85% CF₂⁺, 5% CF⁺.

10.3 Εφαρμογή του αλγόριθμου εξέλιξης συνόρου σε διεργασίες με προκαθορισμένη ταχύτητα συνόρου

Στη συνέχεια παρουσιάζονται εφαρμογές του αλγόριθμου εξέλιξης συνόρου (μέθοδος των ισοϋψών, Μέρος III) σε διαφορετικές διεργασίες κατασκευής δομών: εγχάραξη, απόθεση, εμφάνιση κατά τη λιθογραφία. Το σύνορο είναι η τοπογραφία των κατασκευαζόμενων δομών. Το χαρακτηριστικό των εφαρμογών είναι ότι η ταχύτητα μετατόπισης του συνόρου είναι προκαθορισμένη ή έχει ήδη υπολογιστεί από κάποιο μοντέλο και τροφοδοτείται στον αλγόριθμο εξέλιξης τοπογραφίας. Σε όλα τα παραδείγματα που ακολουθούν οι διαστάσεις είναι σχετικές, εκτός αν σημειώνεται η μονάδα μήκους στα αντίστοιχα σχήματα.

Αρχικά παρουσιάζονται δύο εφαρμογές εγχάραξης αυλακιού που αφορούν δύο πρότυπες περιπτώσεις εγχάραξης: την (πλήρως) ισοτροπική και (πλήρως) ανισοτροπική εγχάραξη. Η ισοτροπική εγχάραξη είναι ίδια προς κάθε κατεύθυνση και είναι αποτέλεσμα κυρίως υγρής εγχάραξης του υποστρώματος. Υπάρχει περίπτωση και ξηρή εγχάραξη να προκαλέσει ισοτροπική εγχάραξη. Κατά κανόνα, η ξηρή εγχάραξη εμφανίζει προτίμηση κατεύθυνσης (αυτής των ιόντων) και είναι ανισοτροπική. Οι πραγματικές διεργασίες ξηρής εγχάραξης δεν είναι ούτε πλήρως ισοτροπικές, ούτε πλήρως ανισοτροπικές: εμφανίζουν ανάλογα με τις συνθήκες βαθμό ισοτροπίας (ανισοτροπίας).

Στο Σχήμα 10.4 περιγράφεται ισοτροπική εγχάραξη αυλακιού. Στα Σχήματα 10.4α και 10.4β φαίνεται το αυλάκι πριν και μετά από διαδικασία ισοτροπικής εγχάραξής του. Η μάσκα εγχάραξης (έντονος χρωματισμός στα Σχήματα 10.4α και 10.4β) που προστατεύει τα υποκείμενα στρώματα θεωρείται μη εγχαραζήμη. Στο Σχήμα 10.4γ φαίνονται στιγμιότυπα της διατομής του αυλακιού στο επίπεδο yz κατά την εγχάραξη. Η εξέλιξη συνόρου που απεικονίζεται στο Σχήμα 10.4 μπορεί να προκύψει, είτε με την επίλυση της εξίσωσης ισοϋψών θεωρώντας ότι η ταχύτητα του συνόρου είναι $F_{mb} = -1$ (αλγόριθμος Σχήματος 5.9), είτε με την επίλυση της εξίσωσης Eikonal θεωρώντας $F=1$ (αλγόριθμος Σχήματος 5.10)



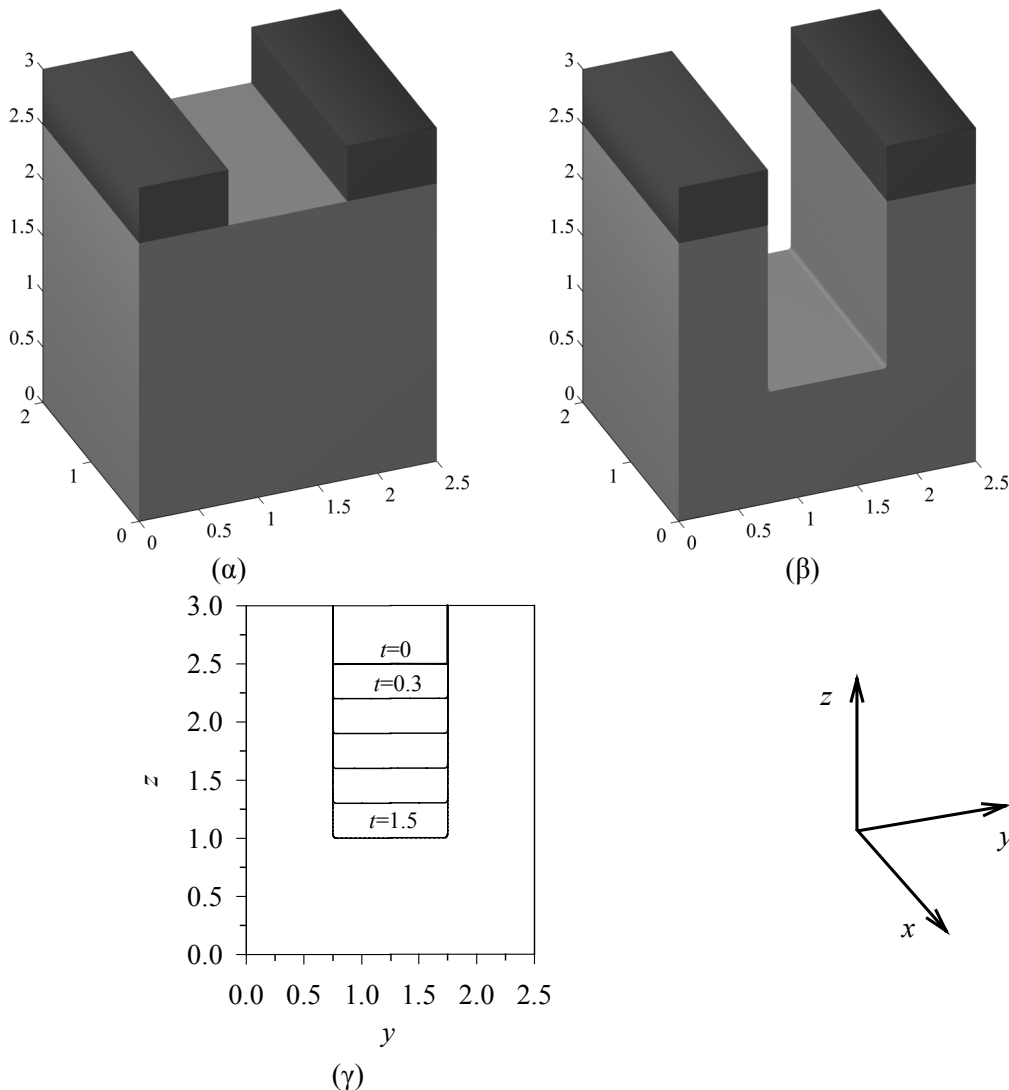
Σχήμα 10.4 (α) Αυλάκι πλάτους 0.8 και βάθους 0.4 (πάχος μάσκας εγχάραξης) πριν την εγχάραξη ($t=0$). (β) Το αυλάκι του Σχήματος 10.4α μετά από ισοτροπική εγχάραξη με ταχύτητα 1 για χρονικό

διάστημα 1.4. (γ) Διαδοχικά στιγμιότυπα τομής του εγχαρασόμενου αυλακιού (που χρονικά ισαπέχουν το ένα από το άλλο) στο επίπεδο yz.

Στον αντίποδα της ισοτροπικής εγχάραξης, στο Σχήμα 10.5 φαίνεται ανισοτροπική εγχάραξη αυλακιού. Στα Σχήματα 10.5α και 10.5β φαίνεται το αυλάκι πριν και μετά από διαδικασία ανισοτροπικής εγχάραξής του. Η μάσκα εγχάραξης (έντονος χρωματισμός στα Σχήματα 10.5α και 10.5β) είναι και σε αυτή την περίπτωση μη εγχαράξιμη. Στο Σχήμα 10.5γ φαίνονται στιγμιότυπα της διατομής του αυλακιού στο επίπεδο yz κατά την εγχάραξη. Η εξέλιξη συνόρου που απεικονίζεται στο Σχήμα 10.5 μπορεί να προκύψει με την επίλυση της εξίσωσης ισοϋψών θεωρώντας ότι η ταχύτητα του συνόρου είναι

$$F_{mb} = -\mathbf{e}_z \cdot (-\mathbf{n}), \quad (10.1)$$

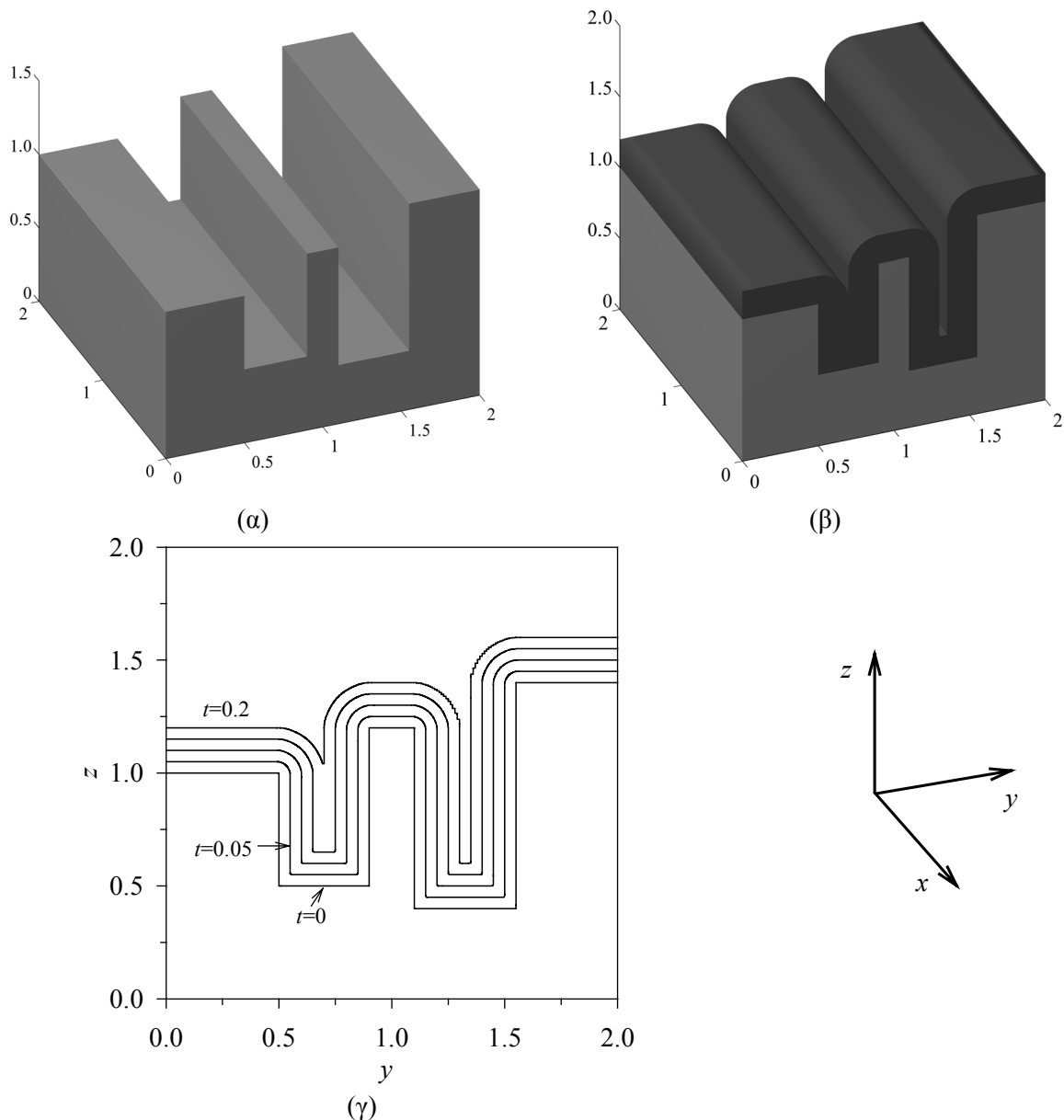
όπου \mathbf{e}_z είναι το μοναδιαίο διάνυσμα κατά τον άξονα z και \mathbf{n} το μοναδιαίο κάθετο στο σύνορο.



Σχήμα 10.5 (α) Αυλάκι πλάτους 1.0 και βάθους 0.5 (πάχος μάσκας εγχάραξης) πριν την εγχάραξη ($t=0$). (β) Το αυλάκι του Σχήματος 10.5α μετά από ανισοτροπική εγχάραξη με ταχύτητα 1 για χρονικό

διάστημα 1.5. (γ) Διαδοχικά στιγμιότυπα τομής του εγχαρασόμενου αυλακιού (που χρονικά ισαπέχουν το ένα από το άλλο) στο επίπεδο yz.

Πέρα από τις διεργασίες εγχάραξης, ο αλγόριθμος εξέλιξης τοπογραφίας εφαρμόζεται και σε δύο ακόμη διεργασίες που χρησιμοποιούνται για την κατασκευή δομών: την ισοτροπική απόθεση και την εμφάνιση κατά τη λιθογραφία.



Σχήμα 10.6 (α) Αυλάκια διαφορετικού πλάτους (0.35 και 0.45) πριν την απόθεση ($t=0$). (β) Τα αυλάκια του Σχήματος 10.6α μετά από απόθεση με ταχύτητα 1 για χρονικό διάστημα 0.2. (γ) Διαδοχικά στιγμιότυπα τομής των αυλακιών (που χρονικά ισαπέχουν το ένα από το άλλο) στο επίπεδο yz.

Στο Σχήμα 10.6 περιγράφεται ισοτροπική απόθεση σε δύο αυλάκια διαφορετικού πλάτους. Στα Σχήματα 10.6α και 10.6β φαίνονται τα αυλάκια πριν και μετά από τη διαδικασία απόθεσης. Στο Σχήμα 10.6γ φαίνεται η εξέλιξη διατομής των αυλακιών στο

επίπεδο yz . Η εξέλιξη συνόρου που απεικονίζεται στο Σχήμα 10.6 μπορεί να προκύψει είτε με την επίλυση της εξίσωσης ισοϋψών θεωρώντας ότι η ταχύτητα του συνόρου είναι $F_{mb}=1$ (αλγόριθμος Σχήματος 5.9), είτε με την επίλυση της εξίσωσης Eikonal θεωρώντας $F=1$ (αλγόριθμος Σχήματος 5.10).

Στο παράδειγμα του Σχήματος 10.6 το αυλάκι με το μικρότερο πλάτος γεμίζει: πρόκειται για ένα παράδειγμα τοπολογικής συγχώνευσης στο οποίο η μέθοδος των ισοϋψών εφαρμόζεται χωρίς εμπειρικούς κανόνες.

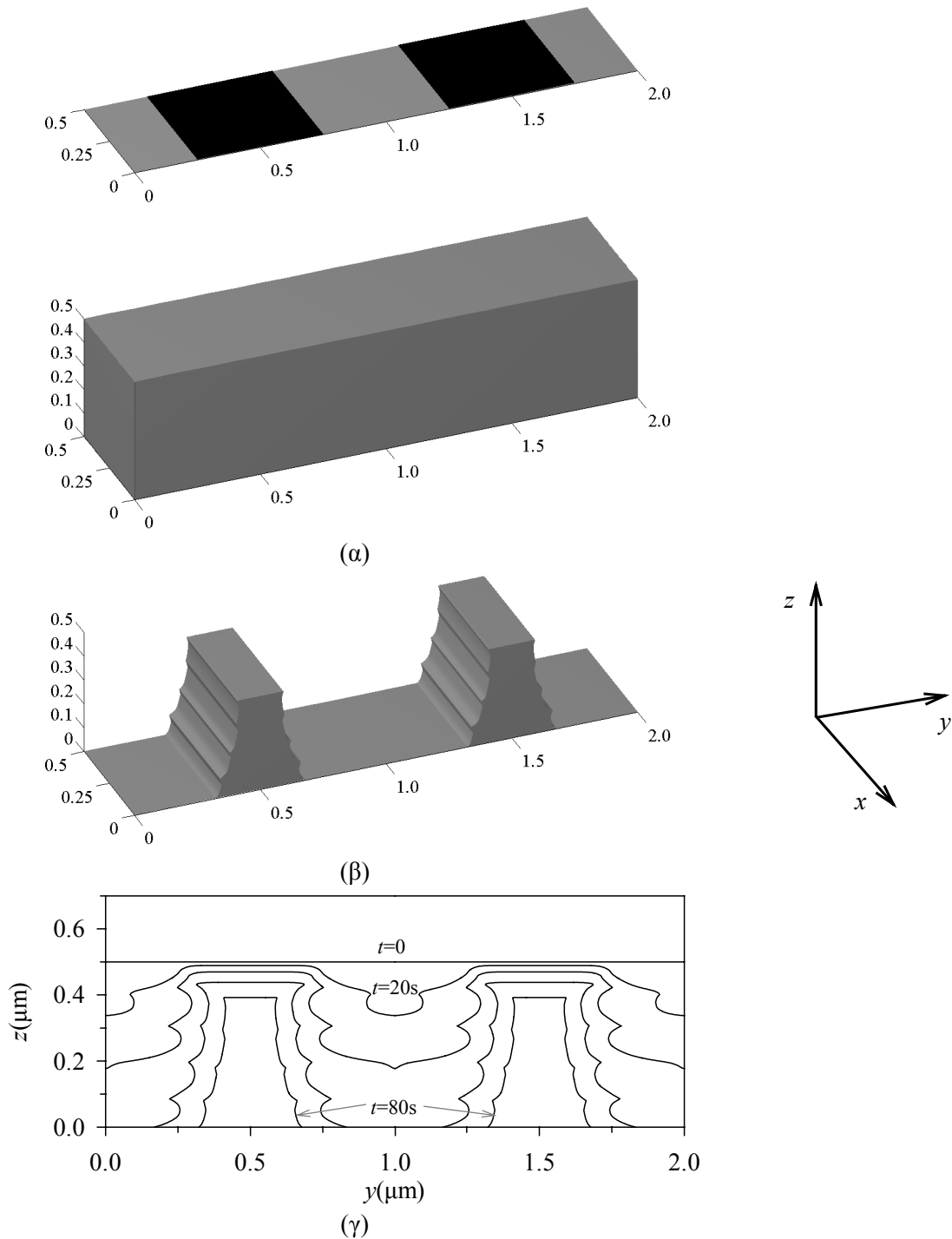
Το επόμενο παράδειγμα αφορά διεργασία εμφάνισης κατά τη λιθογραφία (Σχήμα 1.3). Σε αυτή την περίπτωση η ταχύτητα του συνόρου υπολογίζεται με το εμπορικό πακέτο PROLITH [FINLE Technologies Inc. (1999)]. Οι παράμετροι του παραδείγματος περιγράφονται στον Πίνακα 10.1. Το παράδειγμα αφορά ένα στρώμα φωτοευαίσθητου πολυμερούς πάνω σε υπόστρωμα Si. Το στρώμα πολυμερούς εκτίθεται σε ακτινοβολία μέσω μάσκας (Σχήμα 10.7α). Η σκοτεινή (μαύρη) περιοχή της μάσκας προστατεύει το πολυμερές στρώμα από την ακτινοβολία. Το τμήμα του πολυμερούς στρώματος που εκτίθεται στην ακτινοβολία υφίσταται χημικές αλλαγές που το καθιστούν διαλυτό στον διαλύτη εμφάνισης.

Στο Σχήμα 10.7 περιγράφεται η εξέλιξη επιφάνειας του φωτοευαίσθητου πολυμερούς κατά την εμφάνιση. Στα Σχήματα 10.7α και 10.7β φαίνεται η τοπογραφία του στρώματος πολυμερούς πριν και μετά από τη διαδικασία εμφάνισης.³¹ Στο Σχήμα 10.7γ φαίνονται στιγμιότυπα της διατομής του στρώματος πολυμερούς στο επίπεδο yz κατά την εμφάνιση. Η εξέλιξη συνόρου που απεικονίζεται στο Σχήμα 10.7 μπορεί να προκύψει με την επίλυση της εξίσωσης Eikonal (αλγόριθμος Σχήματος 5.10), θεωρώντας ότι η ταχύτητα του συνόρου είναι αυτή που προκύπτει από τους υπολογισμούς με το εμπορικό πακέτο PROLITH με βάση τις παραμέτρους του Πίνακα 10.1.

Πίνακας 10.1 Παράμετροι του παραδείγματος εξέλιξης συνόρου στην εμφάνιση στρώματος πολυμερούς κατά τη λιθογραφία οι οποίες εισάγονται στο εμπορικό πακέτο PROLITH για τον υπολογισμό της ταχύτητας εξέλιξης του συνόρου.

παράμετρος	τιμή
υπόστρωμα επίστρωσης του φωτοευαίσθητου πολυμερούς	Si
φωτοευαίσθητο πολυμερές	AZ5214
πάχος φωτοευαίσθητου πολυμερούς	500 nm
μήκος φωτεινών – σκοτεινών περιοχών της μάσκας	500 nm – 500 nm
μήκος κύματος ακτινοβολίας	365 nm
δόση έκθεσης	40 mJ/cm ²
χρόνος θέρμανσης μετά την ακτινοβολία (post exposure bake)	0 s
διαλύτης εμφάνισης (εμφανιστής)	AZ312
χρόνος εμφάνισης	80s

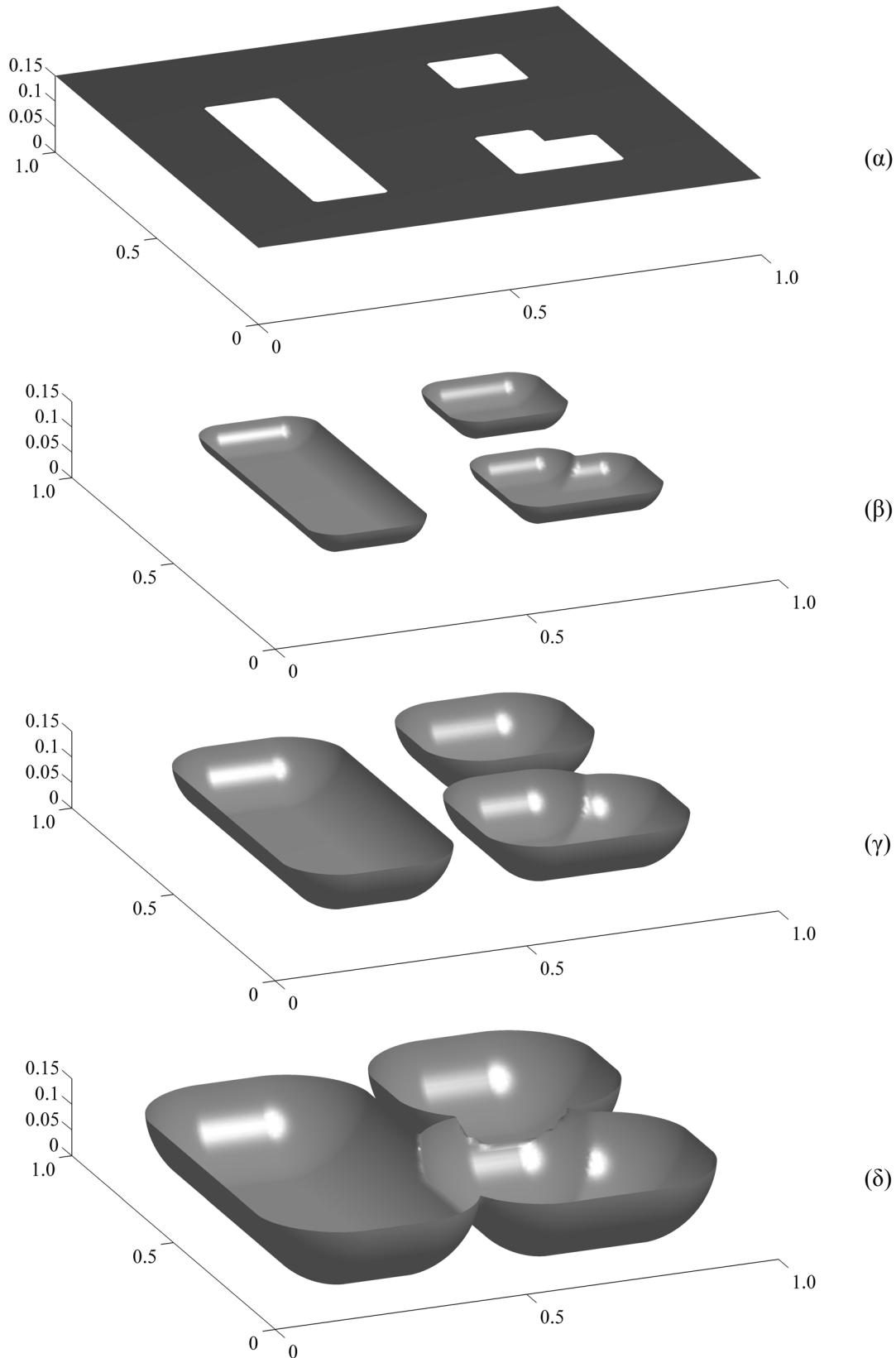
³¹ Στα Σχήματα 10.7α και 10.7β, όπως και στο Σχήμα 10.7γ δεν απεικονίζεται το στρώμα Si κάτω από το στρώμα πολυμερούς.



Σχήμα 10.7 (α) Στρώμα πολυμερούς που εκτίθεται σε ακτινοβολία μέσω μάσκας πριν την εμφάνιση του κατά τη λιθογραφία. (β) Το στρώμα πολυμερούς του Σχήματος 10.7α μετά την εμφάνιση. (γ) Διαδοχικά στιγμιότυπα τομής του στρώματος πολυμερούς (που χρονικά ισαπέχουν το ένα από το άλλο) στο επίπεδο yz . Οι παράμετροι της διεργασίας περιγράφονται στον Πίνακα 10.Ι.

Γενικά στη λιθογραφική διαδικασία, μετά την ακτινοβολία ακολουθεί βήμα θέρμανσης. Στο παράδειγμα του Σχήματος 10.7 σκοπίμως παραλείπεται αυτό το βήμα ώστε να δοκιμαστεί ο αλγόριθμος εξέλιξης συνόρου σε σύνορο με τραχύτητα και υψηλές κλίσεις. Επαναλαμβάνοντας τους υπολογισμούς με χρόνο θέρμανσης μετά την έκθεση 60 s σε θερμοκρασία 95 °C φαίνεται ότι η τραχύτητα στα πλάγια τοιχώματα εξαλείφεται [Σπετσιέρης

(2004)]. Τα αποτελέσματα του Σχήματος 10.7 συμφωνούν με αυτά του αλγορίθμου εξέλιξης τοπογραφίας του PROLITH.



Σχήμα 10.8 Διαδοχικά στιγμιότυπα τρισδιάστατης δομής κατά τη διάρκεια ιστροπικής εγχάραξης της. (α) Η μάσκα εγχάραξης (λεπτή και μη εγχαραξίμη). Η δομή μετά από χρονικό διάστημα (β) 0.5, (γ) 1 και (δ) 1.5.

Στα παραπάνω παραδείγματα – εφαρμογές εξέλιξης τοπογραφίας (Σχήματα 10.4 – 10.7) η γεωμετρία των δομών επέτρεπε την απλοποίηση των υπολογισμών σε δύο αντί τρεις διαστάσεις (όλες οι δομές διατηρούν τη διατομή τους στο επίπεδο yz κατά τον άξονα x). Η εφαρμογή που ακολουθεί αποτελεί παράδειγμα εξέλιξης τοπογραφίας σε τρεις διαστάσεις σε τυχαία δομή που δεν εμφανίζει κάποιο γεωμετρικό χαρακτηριστικό που απλοποιεί τους υπολογισμούς σε δύο διαστάσεις. Στο Σχήμα 10.8 φαίνονται διαδοχικά στιγμιότυπα τρισδιάστατης δομής κατά τη διαδικασία ισοτροπικής εγχάραξης της. Η μάσκα εγχάραξης (Σχήμα 10.8α) θεωρείται πολύ λεπτή και μη εγχαράξιμη. Η εξέλιξη συνόρου που απεικονίζεται στο Σχήμα 10.8 μπορεί να προκύψει με την επίλυση της εξίσωσης Eikonal σε 3 διαστάσεις θεωρώντας $F=1$. Στο τελευταίο στιγμιότυπο της δομής συμβαίνει τοπολογική συγχώνευση, η οποία αντιμετωπίζεται στο πλαίσιο της μεθόδου ισοϋψών χωρίς πρόσθετες τεχνικές.

10.4 Εφαρμογή συνολικού πλαισίου προσομοίωσης

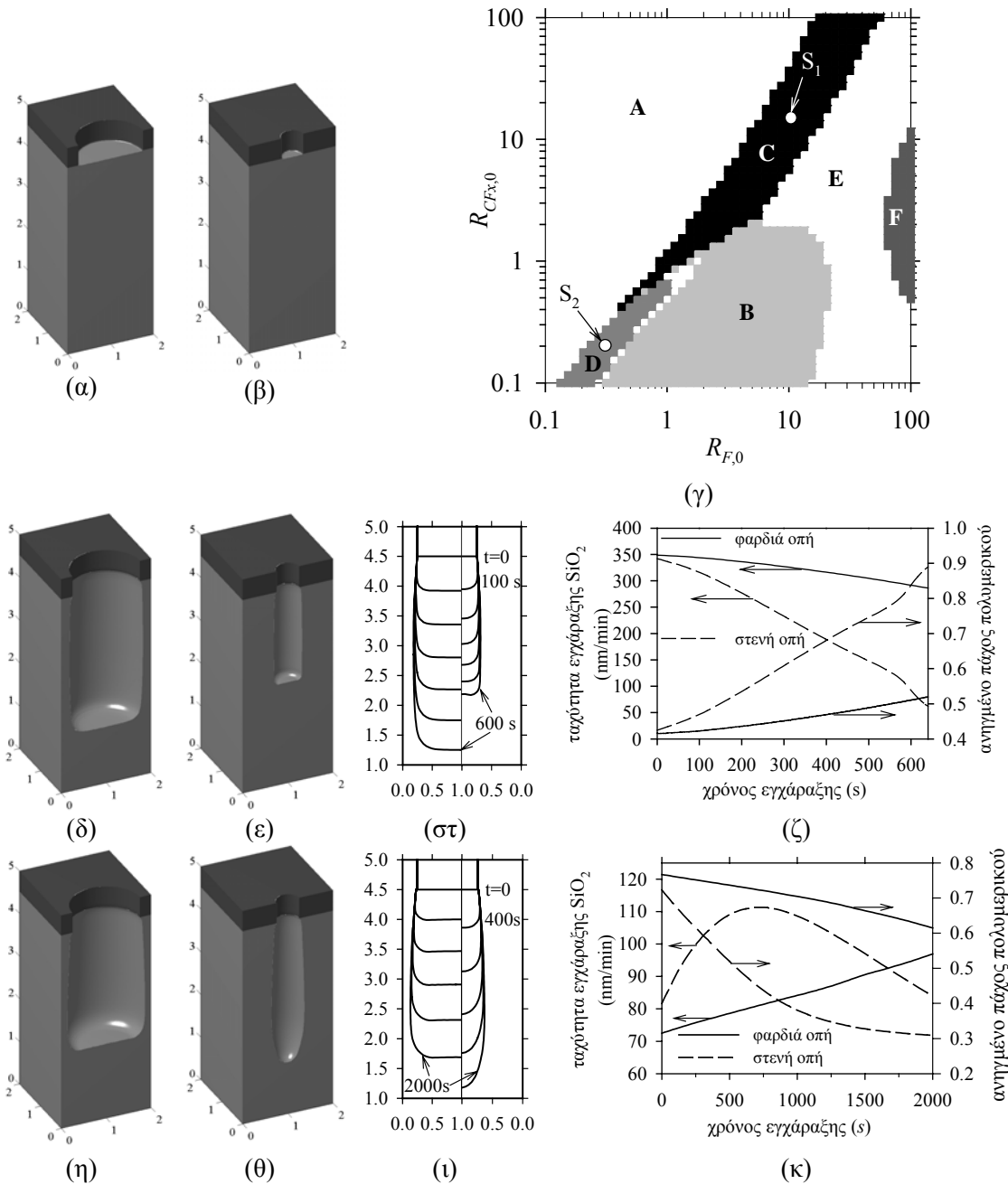
Το συνολικό πλαίσιο προσομοίωσης, στο οποίο γίνεται σύζευξη του μοντέλου υπολογισμού ταχύτητας συνόρου με τον αλγόριθμο εξέλιξης συνόρου (με τη μέθοδο των ισοϋψών) εφαρμόζεται α) στη διεργασία εγχάραξης οπών SiO_2 όπου προβλέπεται η υστέρηση και η αντίστροφη υστέρηση εγχάραξης, β) στη διεργασία πολυβηματικής εγχάραξης αυλακιών Si με εναλλαγή αερίων πλάσματος και γ) στη διεργασία εγχάραξης αυλακιών SiO_2 όπου προβλέπονται πτυχώσεις στα άκρα της βάσης των αυλακιών.

10.4.1 Υστέρηση εγχάραξης και αντίστροφη υστέρηση εγχάραξης σε οπές SiO_2

Η πρώτη εφαρμογή προβάλλει την επίδραση της αέριας φάσης στον κύριο όγκο του αντιδραστήρα πλάσματος φθοριωμένων υδρογονανθράκων στη μικροσκοπική ομοιομορφία (§1.5, §10.2) κατά την εγχάραξη οπών SiO_2 . Οι συνθήκες στην αέρια φάση καθορίζουν το φαινόμενο που θα συμβεί (π.χ. υστέρηση εγχάραξης, αντίστροφη υστέρηση εγχάραξης). Η εφαρμογή ουσιαστικά επεκτείνει αυτή της §10.2. Τα πρόσθετα στοιχεία της είναι η δυνατότητα για πρόβλεψη του σχήματος των εγχαρασόμενων δομών (αντί της θεώρησης πρότυπων δομών), και μάλιστα συναρτήσει του χρόνου εγχάραξης (στην §10.2.1 ανεξάρτητη μεταβλητή ήταν ο AA των δομών).

Ζεύγος οπών με το ίδιο αρχικό βάθος και διαφορετικό πλάτος (Σχήμα 10.9α, Σχήμα 10.9β) εγχαράσσονται σε διαφορετικές συνθήκες. Οι συνθήκες εγχάραξης για το ζεύγος οπών επιλέγονται από χάρτη εγχάραξης για οπές SiO_2 (Σχήμα 10.2γ, Σχήμα 10.9γ). Ο χάρτης κατασκευάζεται υπολογίζοντας τη μεταβολή του ρυθμού εγχάραξης στο μέσο της βάσης κυλινδρικών οπών με μεταβαλλόμενο AA σε πλήθος συνθηκών στην αέρια φάση (§10.2.2). Σε ένα τέτοιο χάρτη, η αέρια φάση εκφράζεται από τους λόγους $R_{F,0}$, $R_{CFx,0}$ των ροών

ατόμων F και ριζών CF_x προς τη ροή ιόντων σε ελεύθερη επιφάνεια. Ο χάρτης χωρίζεται σε περιοχές όπου συμβαίνει κάποιο από τα φαινόμενα που σχετίζονται με την απώλεια μικροσκοπικής ομοιομορφίας (π.χ. περιοχή C: υστέρηση εγχάραξης, περιοχή D: αντίστροφη υστέρηση εγχάραξης).



Σχήμα 10.9 Προσομοίωση εγχάραξης οπών SiO_2 σε διαφορετικές συνθήκες. (α) Οπή βάθους (πάχος μάσκας εγχάραξης) $0.5 \mu m$ και πλάτους $1.5 \mu m$ πριν την εγχάραξη. (β) Οπή βάθους $0.5 \mu m$ και πλάτους $0.5 \mu m$ πριν την εγχάραξη. (γ) Χάρτης εγχάραξης για οπές SiO_2 . Ο χάρτης είναι ίδιος με αυτόν του Σχήματος 10.2γ. Τα σημεία $S_1(R_{F,0}=10, R_{CF,0}=15)$ και $S_2(R_{F,0}=0.3, R_{CF,0}=0.2)$ ορίζουν συνθήκες προσομοιώσεων. (δ) Η οπή του Σχήματος 10.9α μετά από εγχάραξη για $600 s$ στις συνθήκες που αντιστοιχούν στο S_1 . (ε) Η οπή του Σχήματος 10.9β μετά από εγχάραξη για $600 s$ στις συνθήκες που αντιστοιχούν στο S_1 . (στ) Διαδοχικά στιγμιότυπα τομών των οπών (που χρονικά

ισαπέχουν το ένα από το άλλο) κατά την εγχάραξη σε συνθήκες που αντιστοιχούν στο S_1 . Αριστερά είναι τα στιγμιότυπα για τη φαρδιά οπή και δεξιά για τη στενή. (ζ) Ταχύτητα εγχάραξης και ανηγμένο πάχος πολυμερικού στρώματος (ή κλάσμα κάλυψης της επιφάνειας από πολυμερές) συναρτήσει του χρόνου εγχάραξης στο μέσο της βάσης των οπών σε συνθήκες που αντιστοιχούν στο S_1 . (η) – (κ) Τα ίδια αποτελέσματα με (δ) – (ζ) αντίστοιχα, για εγχάραξη που αντιστοιχεί στο σημείο S_2 για 2000 s.

Οι συνθήκες στις οποίες γίνονται οι προσομοιώσεις αντιστοιχούν στα σημεία S_1 και S_2 του χάρτη εγχάραξης. Τα αποτελέσματα εγχάραξης του ζεύγους οπών φαίνονται στα Σχήματα 10.9γ και 10.9δ για το S_1 και 10.9ζ και 10.9η για το S_2 . Στα Σχήματα 10.9στ και 10.9ι φαίνονται διαδοχικά στιγμιότυπα τομών των οπών κατά την εγχάραξη. Στις συνθήκες που αντιστοιχούν στο S_1 συμβαίνει υστέρηση εγχάραξης, δηλαδή η στενότερη δομή εγχάρασσεται με μικρότερο ταχύτητα, όπως φαίνεται και στο Σχήμα 10.9ζ. Υστέρηση εγχάραξης συμβαίνει διότι το πάχος του πολυμερικού στρώματος που δημιουργείται στην εγχαρασόμενη επιφάνεια στη βάση της στενότερης οπής είναι μεγαλύτερο (Σχήμα 10.9ζ). Αντίθετα, στις συνθήκες που αντιστοιχούν στο S_2 , η στενότερη δομή εγχάρασσεται με μεγαλύτερο ταχύτητα (Σχήμα 10.9κ), για το μεγαλύτερο διάστημα του χρόνου εγχάραξης, οπότε και συμβαίνει αντίστροφη υστέρηση εγχάραξης. Σε αυτή την περίπτωση το πάχος του πολυμερικού στρώματος είναι μικρότερο στη στενότερη οπή (Σχήμα 10.9κ). Με το πλαίσιο προσομοίωσης, χωρίς προσαρμόσιμες παραμέτρους, επιτυγχάνεται η ερμηνεία και πρόβλεψη των φαινομένων υστέρησης [Joubert et al. (1994)] και αντίστροφης υστέρησης εγχάραξης [Doemling et al. (1996)] σε οπές SiO_2 που εγχάρασσονται με πλάσμα φθοριωμένων υδρογονανθράκων.

10.4.2 Προσομοίωση διεργασίας πολυβηματικής εγχάραξης αυλακιών Si με εναλλαγή αερίων πλάσματος

Η δεύτερη εφαρμογή του συνολικού πλαισίου προσομοίωσης αφορά στη διεργασία πολυβηματικής εγχάραξης με εναλλαγή αερίων πλάσματος (PEMEAΠ) που χρησιμοποιείται για την εγχάραξη αυλακιών Si με μεγάλο λόγο ασυμμετρίας {multiple step deep Si etch process, [Rauf et al. (2002)] ή gas chopping deep reactive ion etch process, [Volland et al. (2002)]}.³¹ Η διεργασία PEMEAΠ χρησιμοποιείται ευρύτατα στην κατασκευή μικροηλεκτρο-μηχανικών συστημάτων (microelectromechanical systems, MEMS, §1.1) [Chen et al. (2002), Bertz et al. (2002)].

Στη διάρκεια ενός κύκλου της διεργασίας PEMEAΠ δύο διαφορετικά αέρια χρησιμοποιούνται διαδοχικά. Το πρώτο βήμα του κύκλου είναι συνήθως εγχάραξη του Si με πλάσμα SF_6 , ενώ στο δεύτερο βήμα συμβαίνει απόθεση ενός πολυμερικού στρώματος με

³¹ Για τη διεργασία πολυβηματικής εγχάραξης με εναλλαγή αερίων πλάσματος SF_6 και C_4F_8 για την εγχάραξη δομών Si υπάρχει πατέντα της εταιρείας Bosch και για αυτό το λόγο αναφέρεται και ως διεργασία Bosch.

πλάσμα C_4F_8 (ή άλλου αερίου C_xF_y). Εκτός από τον πρώτο κύκλο, στο βήμα εγχάραξης εκτός του Si εγχάρασσεται και το πολυμερές που αποτίθεται στο βήμα απόθεσης.

Στη συνέχεια παρουσιάζονται αποτελέσματα προσομοίωσης της διεργασίας ΠΕΜΕΑΠ σε δομές Si με εναλλαγή αερίων πλάσματος που βασίζονται σε απλά μοντέλα εγχάραξης – απόθεσης. Η ταχύτητα εγχάραξης, τόσο του Si, όσο και του πολυμερούς κατά το βήμα εγχάραξης με πλάσμα SF_6 είναι άθροισμα όρου υποβοηθούμενης από ιόντα εγχάραξης (ανάλογου της ροής ιόντων) και όρου θερμικής εγχάραξης (ανάλογου της ροής ατόμων F),

$$EV_{Si} = \beta_{Si} j_{ION} + k_{Si} j_F \quad (10.2)$$

και

$$EV_{Poly} = \beta_{Poly} j_{ION} + k_{Poly} j_F \quad (10.3)$$

Η ταχύτητα απόθεσης πολυμερούς κατά το βήμα του πλάσματος C_4F_8 είναι επίσης άθροισμα δύο όρων. Ο πρώτος αφορά απευθείας απόθεση ιόντων ή/και απόθεση υποβοηθούμενη από ιόντα (ανάλογος της ροής ιόντων) και ο δεύτερος απευθείας απόθεση των ριζών C_mF_n (ανάλογος της ροής ριζών C_mF_n),

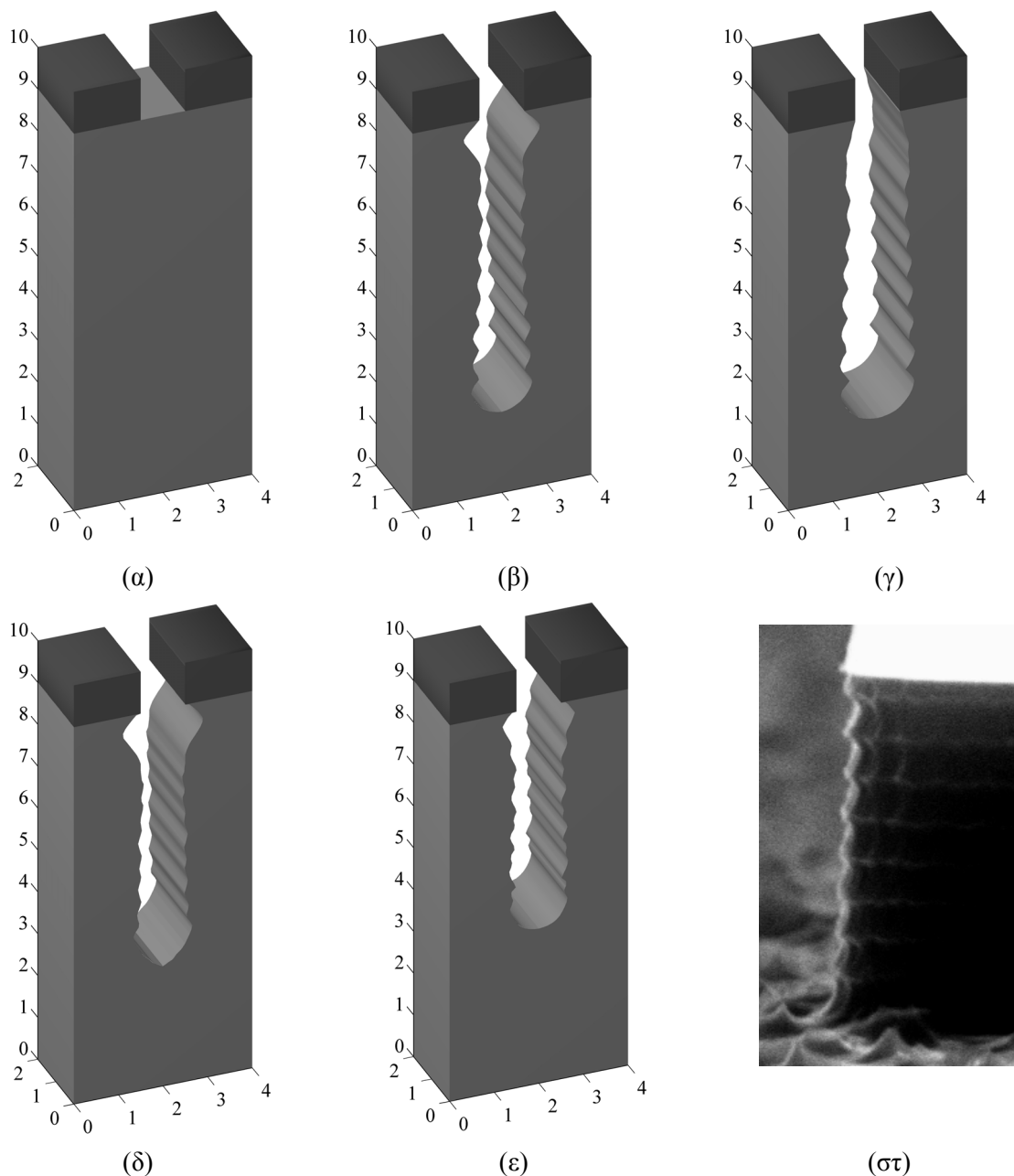
$$DV_{Poly} = y_{D,I} j_{ION} + y_{D,N} j_{CmFn} \quad (10.4)$$

Οι συντελεστές των Εξ. (10.2) – (10.4) προσεγγίζονται με προσαρμογές σε σχετικά πειράματα. Οι τιμές τους καθώς και σύντομη περιγραφή τους φαίνονται στον Πίνακα 10.II.

Πίνακας 10.II Συντελεστές των μοντέλων εγχάραξης και απόθεσης κατά τη διεργασία πολυβηματικής εγχάραξης δομών Si με εναλλαγή αερίων πλάσματος SF_6 και C_4F_8 . Οι τιμές των συντελεστών προκύπτουν ώστε να ικανοποιούν τις τυπικές τιμές ταχυτήτων εγχάραξης και απόθεσης (ταχύτητα εγχάραξης Si και πολυμερούς σε πλάσμα SF_6 : 6 $\mu\text{m}/\text{min}$ και 0.5 $\mu\text{m}/\text{min}$ αντίστοιχα, ταχύτητα απόθεσης πολυμερούς σε πλάσμα C_4F_8 0.6 $\mu\text{m}/\text{min}$). Τυπικές τιμές για τις ροές ιόντων μετρήθηκαν σε αντιδραστήρα επαγωγικής σύζευξης [Gogolides et al. (2004)]. Η ροή ατόμων F κατά τη διάρκεια πλάσματος SF_6 εκτιμήθηκε με φασματοσκοπία οπτικής εκπομπής και ακτινομετρία [ο.π]. Τυπικές τιμές για τη ροή ριζών C_mF_n σε αντιδραστήρα επαγωγικής σύζευξης κατά τη διάρκεια πλάσματος C_4F_8 προέρχονται από μετρήσεις των Rauf et al. [Rauf et al. (2002)].

σύμβολο	περιγραφή	τιμή
β_{Si}	συντελεστής υποβοηθούμενης από ιόντα εγχάραξης Si (πλάσμα SF_6)	270 A^3
k_{Si}	συντελεστής θερμικής εγχάραξης Si (πλάσμα SF_6)	0.9 A^3
β_{Poly}	συντελεστής υποβοηθούμενης από ιόντα εγχάραξης πολυμερούς (πλάσμα SF_6)	125 A^3
k_{Poly}	συντελεστής απευθείας απόθεσης ριζών C_mF_n (πλάσμα C_4F_8)	0.03 A^3
$y_{D,I}$	συντελεστής απευθείας απόθεσης ιόντων ή/και απόθεσης υποβοηθούμενης από ιόντα (πλάσμα C_4F_8)	10 A^3
$y_{D,N}$	συντελεστής απευθείας απόθεσης ριζών C_mF_n (πλάσμα C_4F_8)	0.5 A^3

Στο Σχήμα 10.10 φαίνονται αποτελέσματα προσομοίωσης της διεργασίας πολυβηματικής εγχάραξης χρησιμοποιώντας τα απλά μοντέλα που περιγράφηκαν [Kokkoris et al. (2004)]. Αυλάκι Si (Σχήμα 10.10α) εγχάρασσεται υπό διαφορετικές συνθήκες με τη διεργασία ΠΕΜΕΑΠ για τον ίδιο χρόνο. Στο Σχήμα 10.10β, φαίνεται το αυλάκι μετά από 10 κύκλους της διεργασίας (10 βήματα εγχάραξης + 10 βήματα απόθεσης). Το βήμα εγχάραξης λαμβάνει χώρα πρώτο και διαρκεί 12s, το βήμα απόθεσης ακολουθεί και διαρκεί 5s. Στα Σχήματα 10.10γ, 10.10δ και 10.10ε φαίνεται το αυλάκι μετά από διεργασία ΠΕΜΕΑΜ όταν αλλάζει, είτε η σειρά των βημάτων (Σχήμα 10.10γ), είτε η χρονική διάρκεια των βημάτων (Σχήμα 10.10δ), είτε τα φαινόμενα που λαμβάνονται υπόψη κατά την προσομοίωση (Σχήμα 10.10ε).



Σχήμα 10.10 Προσομοίωση της διεργασίας πολυβηματικής εγχάραξης αυλακιού Si με εναλλαγή αερίων. Διερεύνηση της επίδρασης διαφόρων παραμέτρων της διεργασίας στο σχήμα της

κατασκευαζόμενης δομής. (α) Το αυλάκι πριν την εγχάραξη [πλάτος 1 μm , βάθος (πάχος μάσκας εγχάραξης) 1 μm]. (β) Το αυλάκι μετά τη διεργασία, όταν το βήμα εγχάραξης (BE) λαμβάνει χώρα πρώτο και διαρκεί 12s, και το βήμα απόθεσης (BA) δεύτερο και διαρκεί 5s. (γ) Το αυλάκι μετά τη διεργασία, όταν το BA είναι πρώτο και διαρκεί 5s, ενώ το BE διαρκεί 12s. (δ) Το αυλάκι μετά τη διεργασία, όταν το BE είναι πρώτο και διαρκεί 12s, ενώ το BA διαρκεί 6s. Στα Σχήματα 10.10β, 10.10γ και 10.10δ δεν λαμβάνεται υπόψη η σκίαση και η επανεκπομπή για τα ουδέτερα συστατικά. (ε) Όμοια με (β) αλλά λαμβάνεται υπόψη σκίαση και επανεκπομπή για τα ουδέτερα συστατικά. Η ροή των ουδέτερων συστατικών είναι ισοτροπική, ενώ επανεκπέμπονται με το μηχανισμό «διάχυτης επανεκπομπής». Οι φαινόμενοι συντελεστές προσκόλλησης των ατόμων F στο Si είναι 0.2, των ατόμων F στο πολυμερές είναι 0.1, των ριζών C_mF_n στο Si και στο πολυμερές είναι 0.1. Ο συνολικός χρόνος εγχάραξης είναι 170s. Τα ιόντα κατευθύνονται κάθετα στην επιφάνεια και η ροή τους είναι $4.37 \times 10^{16} \text{ cm}^{-2} \text{ s}^{-1}$ για το πλάσμα SF_6 και $3.12 \times 10^{16} \text{ cm}^{-2} \text{ s}^{-1}$ για το πλάσμα C_4F_8 . Σε ελεύθερη επιφάνεια η ροή ατόμων F είναι $10^{19} \text{ cm}^{-2} \text{ s}^{-1}$ στο πλάσμα SF_6 και η ροή ριζών C_mF_n είναι $2 \times 10^{18} \text{ cm}^{-2} \text{ s}^{-1}$ για το πλάσμα C_4F_8 . (στ) Εικόνα της τραχύτητας που αναπτύσσεται στο πλάγιο τοίχωμα αυλακίων Si που εγχαράσσονται με τη διεργασία ΠΕΜΕΑΠ [Μπούκουρας (2003)].

Τα μοντέλα που χρησιμοποιούνται για την απόθεση και εγχάραξη στη διεργασία ΠΕΜΕΑΠ είναι λιγότερο λεπτομερή αυτών που παρουσιάστηκαν για την εγχάραξη SiO_2 και Si σε πλάσμα φθοριωμένων υδρογονανθράκων. Για αυτό το λόγο και τα αποτελέσματα προσομοίωσης είναι προκαταρκτικά. Ωστόσο, αυτό που προκύπτει είναι ότι το πλαίσιο προσομοίωσης μπορεί να εφαρμοστεί σε μια πολύπλοκη διεργασία όπου συμβαίνουν εγχάραξη και απόθεση, όπως η ΠΕΜΕΑΠ. Μάλιστα, η μέθοδος των ισοϋψών (ο αλγόριθμος εξέλιξης τοπογραφίας του πλαισίου προσομοίωσης) εφαρμόζεται για πρώτη φορά στην προσομοίωση της διεργασίας ΠΕΜΕΑΠ. Η επιφάνεια του αυλακιού κατά τη διάρκεια της διεργασίας ΠΕΜΕΑΠ είναι επιφάνεια Si ή επιφάνεια πολυμερούς. Έτσι, κατά την προσομοίωση χρειάζεται να παρακολουθείται η εξέλιξη μικτής επιφάνειας (επιφάνεια Si + επιφάνεια πολυμερούς). Για το λόγο αυτό χρησιμοποιούνται τρεις συναρτήσεις ισοϋψών: μία που αντιστοιχεί στην επιφάνεια Si και μία στην επιφάνεια του αποτιθέμενου πολυμερούς. Η μικτή επιφάνεια εγχάραξης περιγράφεται από μια τρίτη συνάρτηση ισοϋψών που είναι η ένωση (§5.2) αυτών που περιγράφουν την επιφάνεια Si και πολυμερούς. Αυτή είναι και η επιφάνεια που φαίνεται στα αποτελέσματα του Σχήματος 10.10. Το επόμενο βήμα για λεπτομερέστερη θεωρητική μελέτη της διεργασίας απαιτεί ανάπτυξη ακριβέστερων μοντέλων (για την εγχάραξη Si, και την απόθεση και εγχάραξη του πολυμερούς). Ο στόχος είναι η εύρεση των κρίσιμων παραμέτρων της διεργασίας ΠΕΜΕΑΠ και του ρόλου τους στα χαρακτηριστικά της κατασκευαζόμενης δομής όπως το βάθος εγχάραξης, η κλίση και η τραχύτητα των πλάγιων τοιχωμάτων.

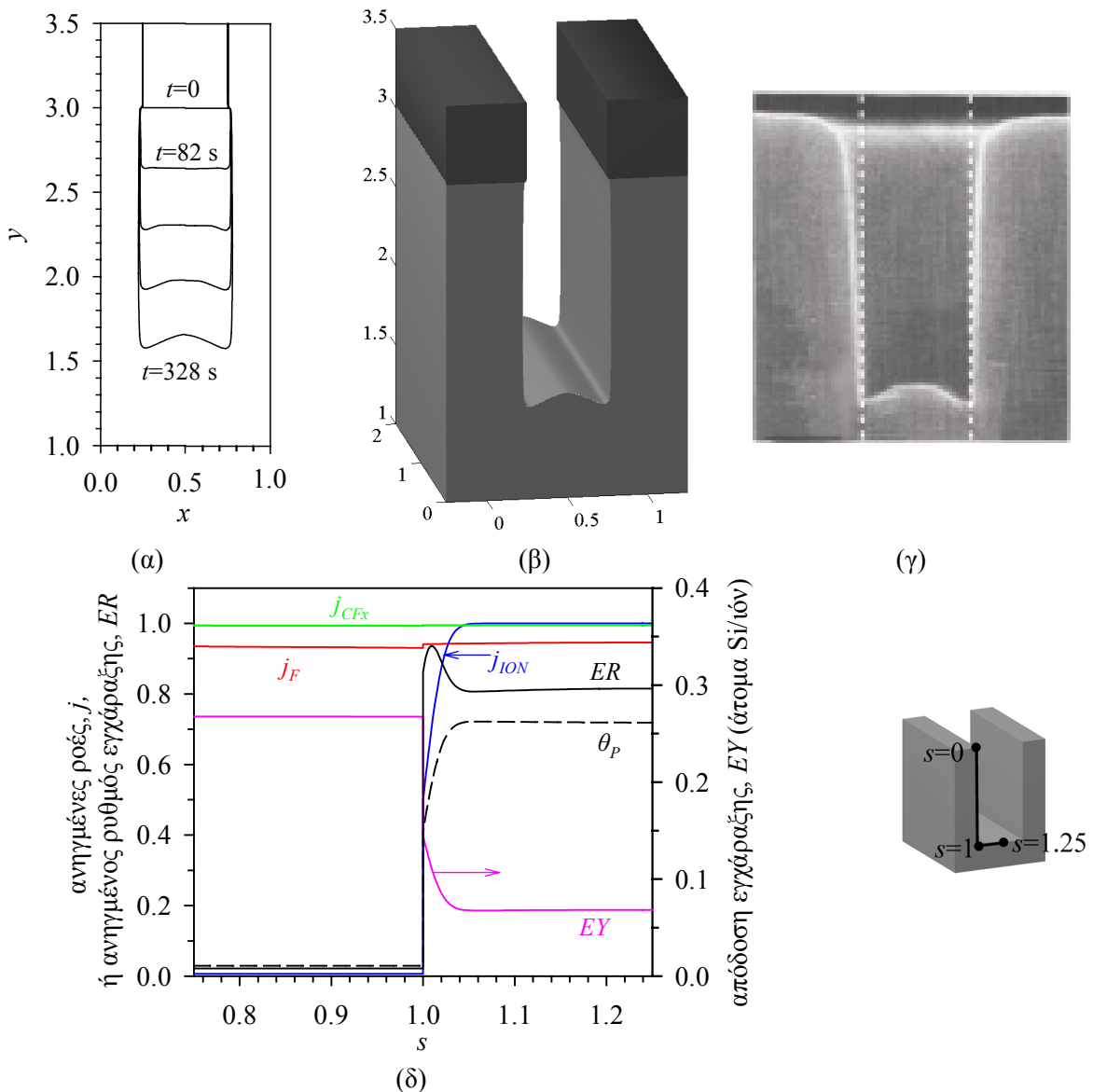
10.4.3 Πρόβλεψη πτυχώσεων στη βάση εγχαρασσόμενων δομών

Πτυχώσεις, δηλαδή σχηματισμός πτυχών (αυλακιών), στα άκρα της βάσης των εγχαρασσόμενων δομών [trenching, Nguyen et al. (1991), ή microtrenching,³¹ Dalton et al. (1993)] έχουν παρατηρηθεί τόσο κατά την εγχάραξη δομών SiO₂ (Σχήμα 10.11γ), όσο και κατά την εγχάραξη δομών Si (Σχήμα 1.9στ), και έχουν αποδοθεί κυρίως στην ανάκλαση των ιόντων από τα πλευρικά τοιχώματα των δομών [Dalton et al. (1993), Hoekstra et al. (1998), Jin & Sawin (2003)]. Η ερμηνεία βασίζεται στην αυξημένη ροή ιόντων στα άκρα της βάσης των δομών. Από το πλάγιο τοίχωμα δομής ανακλώνται μόνο τα ιόντα με κατεύθυνση πρόσπτωσης κοντά στην εφαπτομενική της επιφάνειας στο πλάγιο τοίχωμα. Επειδή κατά την ανάκλαση η γωνία πρόσπτωσης είναι ίση με τη γωνία ανάκλασης, τα ανακλώμενα από το πλάγιο τοίχωμα ιόντα φτάνουν μόνο στα άκρα της βάσης της δομής. Οι πτυχώσεις έχουν επίσης αποδοθεί στο φαινόμενο φόρτισης [Arnold & Sawin (1991)].

Οι Gerodolle και Pelletier προβλέπουν πτυχώσεις στη βάση εγχαρασσόμενων δομών Si (με πλάσμα SF₆) και το αποδίδουν στην επιφανειακή διάχυση αντιδρώντων συστατικών από το πλάγιο τοίχωμα προς στη βάση της δομής [Gerodolle & Pelletier (1991)]. Οι Doemling et al. αναφέρουν ότι οι πτυχώσεις στη βάση εγχαρασσόμενων δομών SiO₂ με πλάσμα CHF₃, είναι πιθανό να οφείλονται, εκτός από την ανάκλαση των ιόντων, στη διαφοροποίηση της ροής ουδέτερων συστατικών κατά μήκος της βάσης των δομών [Doemling et al. (1996)]. Αναφέρουν ότι πτυχώσεις συμβαίνουν στην περίπτωση όπου η ροή των ουδέτερων συστατικών α) εμφανίζει μέγιστο στο κέντρο της βάσης και ελάχιστα στα άκρα και β) ευνοεί τη δημιουργία πολυμερικού στρώματος. Τότε, στα άκρα της βάσης της δομής, το πάχος του πολυμερικού στρώματος, που παρεμποδίζει την εγχάραξη, είναι μικρότερο από ότι στο κέντρο της βάσης. Αντίστοιχο μηχανισμό προτείνει η Abraham για την εγχάραξη αυλακιών SiO₂ σε πλάσμα CHF₃/CF₄/Ar [Abraham (2001)]. Στις δομές που εξέτασε, η Abraham διαπιστώνει ότι δεν χρειάζεται η ανάκλαση ιόντων για να προβλέψει τις πτυχώσεις στη βάση τους.

Με τη χρήση του πλαισίου προσομοίωσης είναι δυνατό να προβλεφθούν οι πτυχώσεις στη βάση των εγχαρασσόμενων δομών. Στο Σχήμα 10.11α φαίνονται διαδοχικά στιγμιότυπα τομής εγχαρασσόμενου αυλακιού SiO₂ σε πλάσμα φθοριωμένων υδρογονανθράκων, όπως προκύπτουν από το πλαίσιο προσομοίωσης. Στο Σχήμα 10.11β φαίνεται η δομή μετά το τέλος της εγχάραξης. Το πάχος της μάσκας και το αρχικό πλάτος του αυλακιού είναι 0.5 μm. Το βάθος των αυλακιών που σχηματίζονται στα άκρα της βάσης του αυλακιού στο τέλος της εγχάραξης είναι περίπου 80 nm. Στο Σχήμα 10.11γ φαίνονται οι πτυχές στα άκρα της βάσης αυλακιού SiO₂ πλάτους 1 μm που έχει εγχαραχθεί σε πλάσμα CHF₃ [Schaepkens et al. (2000)]. Το βάθος των πτυχών που μετρούν οι Schaepkens et al. σε αυλάκια με πλάτος από 1 μέχρι 0.2 μm είναι από 200 έως 30 nm [ο.π].

³¹ Αν και οι διαστάσεις των πτυχών (αυλακιών) μπορεί να είναι μικρότερες από 50 nm, εντούτοις ο όρος microtrenching έχει επικρατήσει. Ίσως, το πρώτο συνθετικό (micro) δεν δηλώνει την απόλυτη διάσταση των πτυχών, αλλά εκφράζει ότι οι πτυχές είναι μικροσκοπικές (πολύ μικρές).



Σχήμα 10.11 Πτυχώσεις στα άκρα της βάσης αυλακιού SiO_2 κατά την εγχάραξή του σε πλάσμα φθοριωμένων υδρογονανθράκων. Οι μονάδες μήκους στα σχήματα είναι μm . (α) Διαδοχικά στιγμιότυπα τομών του εγχαρασσόμενου αυλακιού (που χρονικά ισαπέχουν το ένα από το άλλο), όπως προκύπτουν από το πλαίσιο προσομοίωσης. (β) Το αυλάκι στο τελευταίο στιγμιότυπο του (α). (γ) Πτυχώσεις κατά την εγχάραξη αυλακίων SiO_2 με πλάσμα CHF_3 [αυλάκι πλάτους $1\mu\text{m}$, Schaepkens et al. (2000)]. (δ) Η τοπική ροή ατόμων F , j_{F} , ριζών CF_x , j_{CF_x} , και ιόντων, j_{ION} , κατά μήκος διατομής πρότυπου αυλακιού (αυλάκι με κάθετα πλάγια τοιχώματα και πλήρως επίπεδη βάση) SiO_2 με $LA=2$ (πλάτος 0.5 , βάθος 1). Στο ίδιο σχήμα φαίνονται ο τοπικός ρυθμός και η τοπική απόδοση εγχάραξης καθώς και το τοπικό κλάσμα κάλυψης της επιφάνειας από πολυμερές. Όλες οι ροές είναι ανηγμένες στις αντίστοιχες ροές που φτάνουν σε ελεύθερη επιφάνεια από τον κύριο όγκο του πλάσματος, ενώ ο ρυθμός εγχάραξης είναι ανηγμένος σε αυτόν ελεύθερης επιφάνειας. Συνθήκες προσομοίωσης: Οι ροές από τον κύριο όγκο σε ελεύθερη επιφάνεια είναι $j_{\text{ION},0}=1.256 \times 10^{17} \text{ cm}^{-2} \text{ s}^{-1}$, $j_{\text{F},0}=20j_{\text{ION},0}$, $j_{\text{CF}_x,0}=90j_{\text{ION},0}$, η ενέργεια των ιόντων είναι $E=100 \text{ eV}$ και η σύσταση είναι 10% CF_3^+ , 85% CF_2^+ και 5% CF^+ . Ισοτροπική κατανομή και μηχανισμός «διάχυτης» επανεκπομπής για τα ουδέτερα συστατικά και κανονική κατανομή με τυπική απόκλιση $\sigma=1^\circ$ για τα ιόντα. Χρόνος εγχάραξης 328 s.

Στο Σχήμα 10.11δ εξηγείται ο μηχανισμός για τις πτυχώσεις. Φαίνονται οι ροές των ιόντων και των ουδέτερων συστατικών (άτομα F, ρίζες CF_x), ο ρυθμός, ER , και η απόδοση εγχάραξης, EY , και το κλάσμα κάλυψης της επιφάνειας από πολυμερές, θ_p , κατά μήκος διατομής πρότυπου αυλακιού (αυλάκι με κάθετα πλάγια τοιχώματα και πλήρως επίπεδη βάση) με $LA=2$. Φαίνεται ότι οι ροές των ουδέτερων συστατικών είναι περίπου σταθερές σε όλη τη βάση του αυλακιού και η ροή ιόντων είναι ελαφρά μικρότερη στα άκρα της βάσης του αυλακιού. Ο ρυθμός εγχάραξης είναι γινόμενο της απόδοσης εγχάραξης με τη ροή ιόντων [Εξ. (3.9)]. Αν και η ροή ιόντων μειώνεται στα άκρα του αυλακιού, οπότε θα αναμενόταν να μειωθεί και ο ρυθμός εγχάραξης, ο ρυθμός εγχάραξης αυξάνεται λόγω της αύξησης της απόδοσης εγχάραξης. Η αύξηση της απόδοσης εγχάραξης οφείλεται στη μεταβολή των λόγων R_F, R_{CF_x} (λόγοι ροής ατόμων F, ριζών CF_x προς τη ροή ιόντων), η οποία σε αυτές τις συνθήκες προκαλεί μείωση του κλάσματος κάλυψης της επιφάνειας από πολυμερές (ή του πάχους του πολυμερικού στρώματος), και συνεπώς μείωση της παρεμπόδισης εγχάραξης. Αυτό συνήθως συμβαίνει σε συνθήκες όπου η απόδοση εγχάραξης είναι μικρή (ή το πάχος του πολυμερικού στρώματος στην επιφάνεια εγχαρασόμενη επιφάνεια είναι υψηλό).

Ο μηχανισμός για τις πτυχώσεις που προκύπτει από την εφαρμογή του πλαισίου προσομοίωσης διαφέρει από αυτούς των Doemling et al. και Abraham, αφού αποδίδει τις πτυχώσεις στη διαφοροποίηση της ροής των ιόντων, και όχι στη διαφοροποίηση της ροής των ουδέτερων συστατικών, κατά μήκος της βάσης της δομής. Το κοινό σημείο των προτεινόμενων μηχανισμών είναι ότι όλοι κατά κάποιο τρόπο προβλέπουν τη μείωση του πάχους του πολυμερικού στρώματος στα άκρα της βάσης της δομής. Ο μηχανισμός που προκύπτει από την εφαρμογή του πλαισίου προσομοίωσης μπορεί να συμβάλει στις πτυχώσεις χωρίς να είναι απαραίτητα ο κύριος μηχανισμός. Κύριος μηχανισμός γενικά θεωρείται η ανάκλαση ιόντων από το πλάγιο τοίχωμα.

Οι πτυχώσεις είναι ένα πρόβλημα εγχάραξης στη νανοκλίμακα που με το πλαίσιο προσομοίωσης, αλλά και γενικότερα, εξηγείται ντετερμινιστικά. Υπάρχουν ωστόσο και προβλήματα στις ίδιες ή και μικρότερες διαστάσεις που είναι πιθανό να μην μπορούν να μελετηθούν με τον ίδιο τρόπο. Ένα τέτοιο παράδειγμα είναι η τραχύτητα εγχαρασόμενης επιφάνειας.

10.5 Προσεχώς: Τραχύτητα

Η τάση προς ολοένα μικρότερες διαστάσεις των κατασκευαζόμενων δομών καθιστά τον έλεγχο της τραχύτητας³¹ κρίσιμο στο μέλλον, αφού όσο μικραίνουν οι διαστάσεις, η τραχύτητα θα αποτελεί σημαντικό στοιχείο της κατασκευαζόμενης δομής. Για παράδειγμα,

³¹ Με τον όρο τραχύτητα εννοείται η τοπογραφία σε πολύ μικρή κλίμακα (νανο- και ατομική κλίμακα). Γενικά, η τραχύτητα επιφάνειας (γραμμής) αφορά την rms (root mean square) τραχύτητα, δηλαδή την τυπική απόκλιση του ύψους μιας επιφάνειας (γραμμής) από το μέσο ύψος της επιφάνειας (γραμμής).

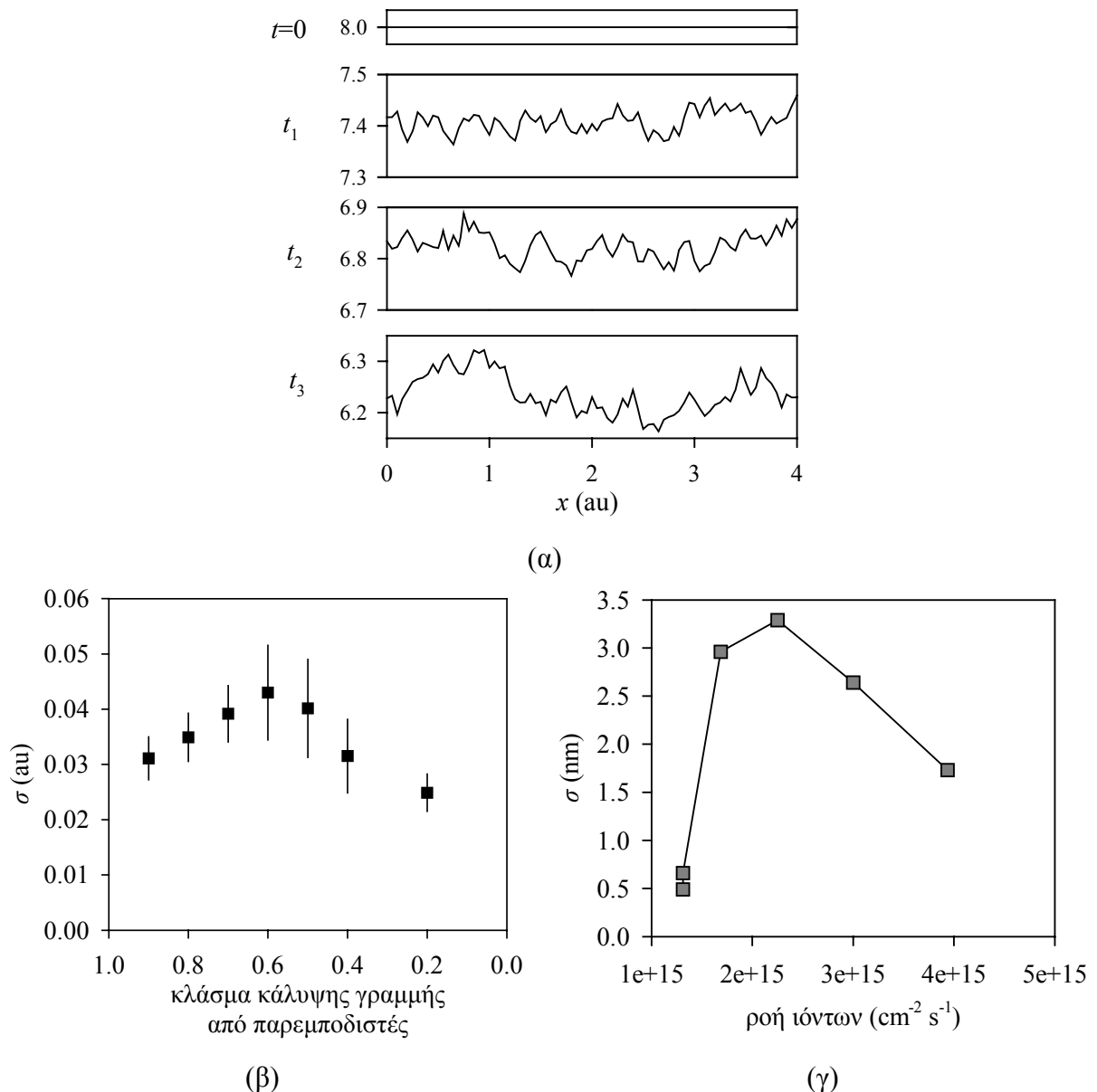
σε μία δομή με χαρακτηριστική διάσταση 250 nm (π.χ. ένα αυλάκι με πλάτος 250 nm), πλευρική τραχύτητα 10 nm δεν είναι το ίδιο σημαντική όσο σε δομή με χαρακτηριστική διάσταση 50 nm.

Η προσομοίωση εξέλιξης τραχύτητας εγχαρασσόμενης επιφάνειας γίνεται με διακριτά [Drotar et al. (2000b)], και συνεχή μοντέλα [Zhao et al. (1999), Drotar et al. (2000b)]. Οι Drotar et al. χρησιμοποιούν μοντέλο επανεκπομπής της ροής για να εξηγήσουν, την επιβεβαιωμένη πειραματικά [Brault et al. (1998)], αύξηση της τραχύτητας εγχαρασσόμενης επιφάνειας Si (με πλάσμα SF₆) με το χρόνο εγχάραξης [Drotar et al. (2000b)].⁹¹ Οι Oehrlein et al. διαπίστωσαν με βάση πειραματικές μετρήσεις ότι η τραχύτητα εγχαρασσόμενης επιφάνειας Si οφείλεται σε μη πτητικά υπολείμματα που αποτίθενται στην επιφάνεια κατά τη διάρκεια της εγχάραξης και παίζουν το ρόλο πολύ μικρών μασκών εγχάραξης [Oehrlein et al. (1986)]. Έτσι, η επιφάνεια δεν εγχαράσσεται ομοιόμορφα και δημιουργείται τραχύτητα σε αυτή. Τα μη πτητικά υπολείμματα των πειραμάτων του Oehrlein et al. που προκαλούσαν την τραχύτητα στην εγχαρασσόμενη επιφάνεια ήταν κομμάτια Al που απομακρύνθηκαν με ιονοβολή από το ηλεκτρόδιο Al στο οποίο βρισκόταν το δισκίο Si. Στο ίδιο συμπέρασμα καταλήγουν και πειραματικές μετρήσεις της τραχύτητας εγχαρασσόμενης επιφάνειας Si στον αντιδραστήρα πλάσματος του Ινστιτούτου Μικροηλεκτρονικής (ΕΚΕΦΕ Δημόκριτος). Η τραχύτητα μετρήθηκε μικρότερη όταν αντί του ηλεκτροδίου Al χρησιμοποιήθηκε ηλεκτρόδιο ανοδιωμένου Al το οποίο δεν εγχαράσσεται (με ιονοβολή) το ίδιο εύκολα με το Al [Gogolides et al. (2004)].

Στο πλαίσιο μελέτης της εξέλιξης τραχύτητας σε εγχαρασσόμενη επιφάνεια Si, χρησιμοποιείται ο αλγόριθμος εξέλιξης τοπογραφίας του πλαισίου προσομοίωσης στη διερεύνηση των μηχανισμών που προκαλούν ή μεταβάλλουν την τραχύτητα σε εγχαρασσόμενες επιφάνειες. Στη συνέχεια παρουσιάζονται προκαταρκτικά αποτελέσματα αυτής της μελέτης. Θεωρείται ότι κατά την εγχάραξη επιφάνειας με πλάσμα, παρεμποδιστές εγχάραξης, δηλαδή συστατικά που παίζουν το ρόλο πολύ μικρών μασκών αποτρέπουν την ομοιόμορφη εγχάραξη. Οι παρεμποδιστές μπορεί να είναι είτε υλικό από οποιαδήποτε επιφάνεια στο εσωτερικό του αντιδραστήρα, είτε άλλα μη πτητικά συστατικά του πλάσματος (π.χ. ο C πάνω στο Si από πλάσμα φθοριωμένων υδρογονανθράκων, ή το S πάνω στο Si από πλάσμα SF₆). Η προσομοίωση γίνεται σε δύο διαστάσεις, δηλαδή το εξελισσόμενο σύνορο είναι μία γραμμή. Τυχαίες θέσεις της γραμμής, αλλά συγκεκριμένο κλάσμα της, θεωρείται ότι καλύπτονται από παρεμποδιστές εγχάραξης σε κάθε χρονικό βήμα. Στο Σχήμα 10.12α φαίνεται η εξέλιξη μιας γραμμής στο χρόνο. Ο προτεινόμενος μηχανισμός φαίνεται ότι προβλέπει την αύξηση της τραχύτητας με το χρόνο εγχάραξης (η γραμμή τη χρονική στιγμή t_n έχει μεγαλύτερη τραχύτητα από αυτή την t_{n-1}). Στο Σχήμα 10.12β φαίνεται η τραχύτητα της

⁹¹ Θεωρούν ότι τα συστατικά που προκαλούν την εγχάραξη δεν προσκολλούνται και δεν προκαλούν καμία μεταβολή στην πρώτη πρόσκρουσή τους με την επιφάνεια. Ουσιαστικά λαμβάνουν υπόψη μόνο την ροή από επανεκπομπή και όχι και την απευθείας ροή με αποτέλεσμα οι κοιλάδες της εγχαρασσόμενης τοπογραφίας να λαμβάνουν περισσότερη ροή από τις κορυφές. Το αποτέλεσμα είναι οι κοιλάδες να εγχαράσσονται ταχύτερα από τις κορυφές και η τραχύτητα της επιφάνειας να αυξάνεται.

γραμμής για σταθερό χρόνο εγχάραξης και για διαφορετικά κλάσματα κάλυψης της γραμμής από παρεμποδιστές [Gogolides et al. (2004)]. Αυτή η μορφή μεταβολής της τραχύτητας μοιάζει με την πειραματικά μετρούμενη μεταβολή της τραχύτητας εγχαρασόμενης με πλάσμα SF₆ επιφάνειας Si συναρτήσει της ροής των ιόντων που φτάνουν στην επιφάνεια {Σχήμα 10.12γ, [ο.π]}. Τα ιόντα γενικά απομακρύνουν τους παρεμποδιστές από την εγχαρασόμενη επιφάνεια. Συνεπώς, η αύξηση της ροής τους οδηγεί σε «καθαρότερη» επιφάνεια, δηλαδή στη μείωση του κλάσματος κάλυψης από παρεμποδιστές.



Σχήμα 10.12 (α) Εξέλιξη γραμμής κατά την ανισοτροπική εγχάραξη της με κατεύθυνση αυτή του αρνητικού άξονα y . Το κλάσμα κάλυψης της γραμμής από παρεμποδιστές εγχάραξης είναι 0.5. Η εγχάραξη παρεμποδίζεται σε διαφορετικές τυχαίες θέσεις της γραμμής σε κάθε χρονικό βήμα. Η τραχύτητα της γραμμής αυξάνεται με το χρόνο. (β) Τραχύτητα της γραμμής, σ , σε αυθαίρετες μονάδες (au), συναρτήσει του κλάσματος κάλυψης της γραμμής από παρεμποδιστές. (γ) Τραχύτητα, σ , επιφάνειας Si κατά την εγχάραξη της με πλάσμα SF₆ (αντιδραστήρας πλάσματος Ινστιτούτου

Μικροηλεκτρονικής, ΕΚΕΦΕ Δημόκριτος) συναρτήσει της ροής ιόντων που φτάνει στην επιφάνεια. Μπορεί να συνδεθεί με το Σχήμα 10.12β, αφού η αύξηση της ροής των ιόντων «καθαρίζει» την επιφάνεια μειώνοντας το κλάσμα κάλυψής της από παρεμποδιστές εγχάραξης.

Το μοντέλο των παρεμποδιστών εγχάραξης, που προκύπτει από την ενσωμάτωση στοχαστικού όρου σε συνεχές μοντέλο (εξισώσεις εξέλιξης τοπογραφίας), φαίνεται ότι μπορεί να δώσει μια πιθανή εξήγηση για την ανάπτυξη της τραχύτητας στις εγχαρασόμενες επιφάνειες. Για να εξαχθούν συμπεράσματα χρειάζεται περισσότερο ενδελεχής μελέτη και περαιτέρω σύγκριση με πειραματικές μετρήσεις και αποτελέσματα προσομοίωσης με διακριτά μοντέλα.

10.6 Αξιολόγηση

Παρουσιάστηκαν εφαρμογές α) του υπολογισμού τοπικής ταχύτητα εγχάραξης στο εσωτερικό δομών (Μέρος II), β) του αλγόριθμου εξέλιξης τοπογραφίας (Μέρος III) και γ) σύζευξης των (α) και (β), ή του συνολικού πλαισίου προσομοίωσης. Η κύρια εφαρμογή αφορά στην εγχάραξη δομών SiO₂ και ειδικότερα στη μελέτη, πρόβλεψη και ερμηνεία της απώλειας μικροσκοπικής ομοιομορφίας (π.χ. της υστέρησης εγχάραξης) από πρώτες αρχές και χωρίς προσαρμόσιμες παραμέτρους. Παρουσιάστηκαν αποτελέσματα προσομοίωσης της διεργασίας πολυβηματικής εγχάραξης αυλακιών Si με εναλλαγή αερίων πλάσματος, η οποία χρησιμοποιείται ευρύτατα για την κατασκευή δομών μικρο-ηλεκτρο-μηχανικών συστημάτων. Προτάθηκε μηχανισμός πτυχώσεων (σχηματισμού πτυχών, αυλακιών) στα άκρα των εγχαρασόμενων δομών και παρουσιάστηκαν προκαταρκτικά αποτελέσματα από τη χρήση του αλγόριθμου εξέλιξης τοπογραφίας του πλαισίου προσομοίωσης στην πρόβλεψη της τραχύτητας εγχαρασόμενης επιφάνειας (§10.5). Επίσης, αναδείχθηκε η ευελιξία του πλαισίου μέσα από εφαρμογές του αλγόριθμου εξέλιξης τοπογραφίας σε άλλες διεργασίες, όπως η απόθεση και η εμφάνιση κατά τη λιθογραφία.

Το πλαίσιο προσομοίωσης μπορεί να εφαρμοστεί σε διεργασίες εγχάραξης με διαφορετικά αέρια ή/και υποστρώματα και σε διεργασίες απόθεσης. Αυτό που απαιτείται είναι η ανάπτυξη κατάλληλων μοντέλων για τον υπολογισμό του ρυθμού εγχάραξης (απόθεσης) και των φαινόμενων συντελεστών προσκόλλησης των συστατικών (Κεφ. 3).

Γενικά, ο αλγόριθμος εξέλιξης τοπογραφίας του πλαισίου προσομοίωσης, δηλαδή η μέθοδος των ισοϋψών, μπορεί να εφαρμοστεί σε προβλήματα εξέλιξης συνόρου σε άλλες περιοχές [Sethian (1999), Osher & Fedkiw (2003)], όπως τα προβλήματα καύσης όπου το σύνορο είναι το μέτωπο της φλόγας και τα προβλήματα ροής ρευστών όπου το σύνορο είναι η διεπιφάνεια ρευστών.

Συμπεράσματα

Στην εργασία περιγράφεται πλαίσιο προσομοίωσης που συνδέει την αέρια φάση ενός αντιδραστήρα πλάσματος με την τοπογραφία των εγχαρασσόμενων δομών. Αυτή η σύνδεση επιτυγχάνεται α) με τη σύζευξη μοντέλου υπολογισμού των τοπικών ροών συστατικών στο εσωτερικό δομών με μοντέλο εγχάραξης επιφάνειας, οπότε και προκύπτει η τοπική ταχύτητα εγχάραξης και β) με την τροφοδότηση της τοπικής ταχύτητας εγχάραξης στον αλγόριθμο εξέλιξης τοπογραφίας. Τα κύρια σημεία της εργασίας, τα οποία αναλυτικότερα περιέχονται στην αξιολόγηση που γίνεται στην τελευταία παράγραφο της πλειοψηφίας των κεφαλαίων της εργασίας, συνοψίζονται στα παρακάτω:

A) Το πρώτο συστατικό του πλαισίου προσομοίωσης είναι μοντέλο για τον υπολογισμό της τοπικής ροής συστατικών στο εσωτερικό δομών σε συνθήκες μοριακή ροής (υψηλού αριθμού Knudsen), που λαμβάνει υπόψη τα φαινόμενα σκίασης και επανεκπομπής της ροής. Η τοπική ροή στο εσωτερικό δομής είναι το άθροισμα της απευθείας ροής και της ροής από επανεκπομπή. Το μοντέλο προσαρμόζεται σε δομές με ειδικά γεωμετρικά χαρακτηριστικά: α) σε αυλάκι το οποίο έχει σταθερή διατομή και εκτείνεται στο άπειρο κατά μία διεύθυνση και β) σε οπή με κυλινδρική συμμετρία. Η βασική εξίσωση για τον υπολογισμό της τοπικής ροής συστατικού στο εσωτερικό δομής είναι μια γραμμική ολοκληρωτική εξίσωση Fredholm 2^{ου} είδους. Υλοποιούνται δύο μέθοδοι για την επίλυση της ολοκληρωτικής εξίσωσης, με τη μέθοδο Nystrom να υπερτερεί της μεθόδου ταξιθεσίας. Αντιμετωπίζεται το αριθμητικό πρόβλημα της ιδιομορφίας του πυρήνα της ολοκληρωτικής εξίσωσης. Μέσω υπολογισμών σε πρότυπες δομές αυλακιού και οπής (αυλάκια με κάθετα πλάγια τοιχώματα και πλήρως επίπεδη βάση και κυλινδρικές οπές), σημειώνεται η σημασία της ροής από επανεκπομπή στους υπολογισμούς τοπικής ροής και η σχετική σημασία των φαινομένων σκίασης και επανεκπομπής στις δομές αυλακιού και οπής.

Οι διαφορές του μοντέλου από αντίστοιχα της βιβλιογραφίας αφορούν τις εξισώσεις του μοντέλου, τον τρόπο αριθμητικής επίλυσης και τα αποτελέσματα που παρουσιάζονται. Οι εξισώσεις του μοντέλου που δίνουν τη στερεά γωνία, η οποία είναι απαραίτητη για τον υπολογισμό της απευθείας ροής, και τον πυρήνα της ολοκληρωτικής εξίσωσης διαφέρουν από αυτές της βιβλιογραφίας για τις οπές με κυλινδρική συμμετρία. Αποτελέσματα επίλυσης της ολοκληρωτικής εξίσωσης που δείχνουν την τοπική ροή ουδέτερου συστατικού κατά μήκος διατομής οπής παρουσιάζονται για πρώτη φορά, όπως και συγκριτικά αποτελέσματα τοπικών ροών σε αυλάκι και οπή. Τέλος, δεν υπάρχει αναφορά σε κάποια από τις σχετικές εργασίες υπολογισμού τοπικής ροής για τη μέθοδο επίλυσης και την ιδιομορφία του πυρήνα της ολοκληρωτικής εξίσωσης.

B) Το δεύτερο συστατικό του πλαισίου προσομοίωσης είναι το μοντέλο εγχάραξης επιφάνειας. Πρόκειται για πρωτότυπο φαινομενολογικό μοντέλο, το οποίο βασίζεται σε ισοζύγια θέσεων ρόφησης στην επιφάνεια για την περιγραφή των διεργασιών που

συμβαίνουν σε εγχαρασόμενη επιφάνεια SiO_2 και Si σε πλάσμα φθοριωμένων υδρογονανθράκων. Η εγχάραξη SiO_2 και Si σε πλάσμα φθοριωμένων υδρογονανθράκων εξελίσσεται διαμέσου ενός λεπτού φιλμ πολυμερούς. Η εγχάραξη και η απόθεση πολυμερούς διεξάγονται ταυτόχρονα. Το μοντέλο λαμβάνει υπόψη τα ανταγωνιστικά φαινόμενα εγχάραξης και απόθεσης και, χωρίς προσαρμόσιμες παραμέτρους, συγκρίνεται ικανοποιητικά με τα πειραματικά δεδομένα. Η σημασία του αναδεικνύεται από τη χρησιμοποίησή του για την πρόβλεψη και εξήγηση των φαινομένων απώλειας μικροσκοπικής ομοιομορφίας κατά την εγχάραξη δομών SiO_2 και Si σε πλάσμα φθοριωμένων υδρογονανθράκων.

Γ) Για τον υπολογισμό της τοπικής ταχύτητας εγχάραξης στο εσωτερικό δομών απαιτείται σύζευξη των δύο μοντέλων [(A) και (B)]. Το κρίσιμο σημείο της σύζευξης είναι ο ταυτόχρονος υπολογισμός των τοπικών ροών [εξισώσεις μοντέλου (A)] και των φαινόμενων συντελεστών προσκόλλησης των συστατικών [εξισώσεις μοντέλου (B)] στο εσωτερικό των δομών (επίλυση συστήματος μη γραμμικών ολοκληρωτικών εξισώσεων Fredholm 2^{ου} είδους), για τον οποίο προτείνεται επαναληπτική διαδικασία.

Δ) Το τρίτο συστατικό του πλαισίου προσομοίωσης είναι ο αλγόριθμος εξέλιξης τοπογραφίας. Υλοποιείται η μέθοδος των ισοϋψών (level set method) που βασίζεται στην έννοια της πεπλεγμένης συνάρτησης. Το κινούμενο σύνορο, δηλαδή η εγχαρασόμενη επιφάνεια, ορίζεται έμμεσα ως η ισοϋψής μηδέν πεπλεγμένης συνάρτησης, της λεγόμενης συνάρτησης ισοϋψών. Η εξέλιξη του συνόρου παρακολουθείται έμμεσα από την εξέλιξη αυτής της συνάρτησης.

Το αριθμητικό πρόβλημα εξέλιξης συνόρου αντιμετωπίζεται γενικά και ανεξάρτητα από το πλαίσιο εγχάραξης δομών. Η υλοποίηση της μεθόδου, τόσο στο «γενικό» (§5.4, Σχήμα 5.9), όσο και στο «στατικό» (§5.5, Σχήμα 5.10) πρόβλημα εξέλιξης συνόρου περιλαμβάνει μια σειρά από υπολογιστικά προβλήματα, πέρα από την επίλυση της εξίσωσης ισοϋψών, όπως η επίλυση της εξίσωσης Eikonal και η εύρεση ισοϋψούς συνάρτησης. Κάθε πρόβλημα μελετάται αυτοτελώς, αξιολογούνται διαφορετικοί τρόποι επίλυσης και εξετάζεται η επίδραση της ακρίβειας επίλυσης κάθε προβλήματος στους υπολογισμούς εξέλιξης συνόρου.

Για την επίλυση της εξίσωσης ισοϋψών, δοκιμάζονται διαφορετικά αριθμητικά σχήματα διακριτοποίησης στο χώρο, διακριτοποίησης στο χρόνο και προσέγγισης της Χαμιλτονιανής της εξίσωσης (η εξίσωση ισοϋψών αποτελεί μια ειδική μορφή εξίσωσης Hamilton-Jacobi). Μερικά από τα σχήματα εφαρμόζονται για πρώτη φορά σε προβλήματα εξέλιξης συνόρου. Διαπιστώνεται ότι το σφάλμα που οφείλεται στη διακριτοποίηση στο χώρο είναι πολύ σημαντικότερο από το αντίστοιχο της διακριτοποίησης στο χρόνο. Συνεπώς, είναι περισσότερο κρίσιμη η χρησιμοποίηση αριθμητικών σχημάτων υψηλής τάξης στο χώρο, από ότι στο χρόνο, όπου στις περισσότερες περιπτώσεις είναι αρκετό το σχήμα Euler.

Για την επίλυση της εξίσωσης Eikonal, που είναι απαραίτητη τόσο στο «γενικό» πρόβλημα εξέλιξης συνόρου (υπολογισμός αρχικής συνθήκης εξίσωσης ισοϋψών, §5.4,

Σχήμα 5.9), όσο και στο «στατικό» (υπολογισμός χρόνου άφιξης συνόρου, §5.5, Σχήμα 5.10) περιγράφονται τρεις μέθοδοι επίλυσης. Οι δύο πρώτες μέθοδοι είναι επαναληπτικές και διαφοροποιούνται στο αριθμητικό σχήμα που χρησιμοποιείται για τη διακριτοποίηση: στην πρώτη το σχήμα είναι Galerkin-πεπερασμένων στοιχείων και στη δεύτερη το σχήμα είναι τύπου Godunov (πεπερασμένων διαφορών). Η τρίτη μέθοδος επίλυσης είναι η μέθοδος ταχυ-βηματισμού (fast marching method), η οποία επιλύει το μη γραμμικό πρόβλημα της εξίσωσης Eikonal άμεσα, χωρίς επαναληπτική διαδικασία, χρησιμοποιώντας το αριθμητικό σχήμα της δεύτερης μεθόδου. Η μέθοδος ταχυ-βηματισμού φαίνεται ότι είναι η ταχύτερη λόγω του άμεσου τρόπου επίλυσης και του φίλτρου ελαχίστου που χρησιμοποιείται για την υλοποίηση της.

Η εύρεση ισοψύσους συνάρτησης είναι το βήμα του αλγορίθμου των προβλημάτων εξέλιξης συνόρου στο οποίο από την πεπλεγμένη απεικόνιση συνόρου (συνάρτηση ισοψών ή συνάρτηση χρόνου άφιξης) προκύπτει η άμεση (§5.2). Διατυπώνεται αλγόριθμος εύρεσης ισοψύσους συνάρτησης που βασίζεται στον υπολογισμό του κάθετου διανύσματος στις ισοψείς της συνάρτησης. Το αντίστοιχο αριθμητικό πρόβλημα είναι ένα σύστημα συνήθων διαφορικών εξισώσεων, το οποίο επιλύεται με ζεύγη μεθόδων Runge-Kutta υψηλής τάξης ακρίβειας.

Το τελευταίο υπολογιστικό πρόβλημα που περιλαμβάνει η μέθοδος των ισοψών είναι η προεκβολή της ταχύτητας του συνόρου στο χωρίο επίλυσης της εξίσωσης ισοψών. Υλοποιείται μέθοδος που προτείνουν οι Adalsteinsson και Sethian, η οποία εκμεταλλεύεται την ταχύτητα της μεθόδου ταχύ-βηματισμού [Adalsteinsson & Sethian (1999)].

Μέσα από τη μελέτη των υπολογιστικών προβλημάτων που περιλαμβάνει η υλοποίηση της μεθόδου των ισοψών, εξετάζεται η σκοπιμότητα χρήσης αριθμητικών σχημάτων υψηλής τάξης ακρίβειας και η επίδραση κάθε υπολογισμού στην ακρίβεια της θέσης του συνόρου με τη μέθοδο των ισοψών.

Ε) Το πλαίσιο προσομοίωσης εφαρμόζεται στην πρόβλεψη και ερμηνεία των φαινομένων απώλειας μικροσκοπικής ομοιομορφίας (π.χ. υστέρηση εγχάραξης και αντίστροφη υστέρηση εγχάραξης) κατά την εγχάραξη δομών SiO_2 με πλάσμα φθοριωμένων υδρογονανθράκων. Προτείνονται χάρτες εγχάραξης δομών SiO_2 οι οποίοι συνδέουν την αέρια φάση στον κύριο όγκο ενός αντιδραστήρα πλάσματος με τα φαινόμενα απώλειας μικροσκοπικής ομοιομορφίας. Η θεωρητική μελέτη, από πρώτες αρχές, με λίγες λογικές παραδοχές (π.χ. ισοτροπική κατανομή και μηχανισμός «διάχυτης» επανεκπομπής για τα ουδέτερα συστατικά) και χωρίς προσαρμόσιμες παραμέτρους, καταφέρνει να προβλέψει τα φαινόμενα απώλειας μικροσκοπικής ομοιομορφίας και την επίδραση διαφόρων παραμέτρων (ενέργεια ιόντων, τύπος δομής) σε αυτά. Η ερμηνεία των μηχανισμών που προκαλούν τα φαινόμενα υστέρησης και αντίστροφης υστέρησης εγχάραξης βασίζεται στην επίδραση της αέριας φάσης στον κύριο όγκο στο ισοζύγιο δημιουργίας - καταστροφής πολυμερικού στρώματος στη βάση της εγχαρασσομένης δομής. Η ερμηνεία επιβεβαιώνει τις πειραματικές μετρήσεις και συμφωνεί με τις ερμηνείες άλλων ερευνητικών ομάδων.

Μια ακόμη εφαρμογή του πλαισίου προσομοίωσης αφορά στη διεργασία πολυβηματικής εγχάραξης δομών Si με εναλλαγή αερίων πλάσματος (PEMEAP) που χρησιμοποιείται για την εγχάραξη αυλακιών Si με μεγάλο λόγο ασυμμετρίας {multiple step deep Si etch process ή gas chopping deep reactive ion etch process}. Η διεργασία PEMEAP χρησιμοποιείται ευρύτατα στην κατασκευή μικρο-ηλεκτρο-μηχανικών συστημάτων (microelectromechanical systems, MEMS, §1.1). Σημαντικό στοιχείο στη δεύτερη αυτή εφαρμογή είναι η πρώτη χρησιμοποίηση της μεθόδου των ισοϋψών ως αλγόριθμο εξέλιξης τοπογραφίας στη διεργασία PEMEAP.

Τέλος, αναδεικνύονται οι δυνατότητες του πλαισίου για προσομοίωση κι άλλων προβλημάτων κατά την εγχάραξη δομών, όπως α) οι νανο-πτυχώσεις στη βάση των εγχαρασσόμενων δομών και β) η εξέλιξη τραχύτητας εγχαρασσόμενης επιφάνειας. Σημειώνεται επίσης η ευελιξία του πλαισίου μέσα από εφαρμογές του σε άλλες διεργασίες, όπως α) η απόθεση και β) η εμφάνιση κατά τη λιθογραφία.

ΣΤ) Στην εργασία γίνεται επαλήθευση κώδικα (code verification) για κάθε αριθμητικό υπολογισμό του πλαισίου προσομοίωσης (Παράρτημα Α). Κατά την επαλήθευση κώδικα, γενικά εξετάζεται αν ο κώδικας λύνει τις εξισώσεις, για την επίλυση των οποίων υλοποιήθηκε, σωστά. Η διαδικασία επαλήθευσης εντοπίζει τα δυναμικά λάθη του κώδικα και γίνεται, στο πλαίσιο της εργασίας, με τη μέθοδο κατασκευασμένων λύσεων. Η επαλήθευση κώδικα είναι το πρώτο βήμα στη διαδικασία ποσοτικοποίησης της αβεβαιότητας των αριθμητικών υπολογισμών. Στόχος είναι να γίνουν και τα υπόλοιπα απαραίτητα βήματα [η επαλήθευση υπολογισμών (verification of calculations) και η επαλήθευση μαθηματικού μοντέλου (validation)] με το ίδιο συστηματική μεθοδολογία. Ο σκοπός επαλήθευσης του υπολογιστικού μοντέλου (επαλήθευση κώδικα και επαλήθευση υπολογισμών) του πλαισίου προσομοίωσης είναι οι αριθμητικοί υπολογισμοί να γίνουν «φορέας» φυσικής πληροφορίας που δεν θα την «αλλοιώνει», ή ακόμη κι αν αυτό συμβαίνει να είναι γνωστή η «αλλοίωση» που προκαλεί.

Ζ) Τέλος, σημαντική συμβολή του πλαισίου προσομοίωσης είναι η υποδομή που προσφέρει στο μελλοντικό χρήστη, η οποία του επιτρέπει να εστιάσει κυρίως στην εφαρμογή και στο εξεταζόμενο πρόβλημα και να καταγίνεται λιγότερο με τον τρόπο και τις μεθόδους προσομοίωσης.

Η τρέχουσα έρευνα και οι μελλοντικές εργασίες αφορούν τόσο στην επέκταση και βελτίωση του πλαισίου προσομοίωσης, όσο και στις νέες εφαρμογές του.

Οι βασικές προτεραιότητες στο μοντέλο υπολογισμού της τοπικής ροής στο εσωτερικό δομών αφορούν στην προσαρμογή του σε τυχαίες δομές (δομές χωρίς ειδικό γεωμετρικό χαρακτηριστικό που επιτρέπει την απλοποίηση των υπολογισμών σε δύο διαστάσεις) και την ενσωμάτωση του μηχανισμού ανάκλασης για τον ακριβέστερο υπολογισμό της ροής των ιόντων.

Στο μοντέλο εγχάραξης επιφάνειας, η τρέχουσα έρευνα αφορά στην ανάπτυξη λεπτομερών μοντέλων για την περιγραφή της σύνθετης διεργασίας ΠΕΜΕΑΠ. Επίσης, ενδιαφέρον παρουσιάζει η επέκταση του μοντέλου με την προσθήκη όρου διάχυσης στην επιφάνεια, ώστε να μελετηθεί η σημασία της διάχυσης στην επιφάνεια σε δομές πολύ μικρών διαστάσεων.

Η βασική προτεραιότητα στον αλγόριθμο εξέλιξης τοπογραφίας, δηλαδή στη μέθοδο των ισοϋψών, αφορά στη χρησιμοποίηση ειδικών τεχνικών {localized level set method, [Peng et al. (1999)] και narrow band method [Sethian (1999), σ. 80-85]} για τον περιορισμό επίλυσης της εξίσωσης ισοϋψών σε υπολογιστικό χωρίο σε στενή ζώνη στη γειτονιά της ισοϋψούς μηδέν. Με αυτό τον τρόπο θα αυξηθεί σημαντικά η ταχύτητα επίλυσης της εξίσωσης ισοϋψών. Στόχος επίσης είναι η επέκταση επίλυσης των υπολογιστικών προβλημάτων της μεθόδου (εξίσωση ισοϋψών, εξίσωση Eikonal, υπολογισμός ισοϋψούς συνάρτησης, προεκβολή ταχύτητας του συνόρου στο χωρίο επίλυσης της εξίσωσης ισοϋψών) σε τρεις διαστάσεις. Ενδιαφέρον παρουσιάζει και η βελτίωση της ακρίβειας επίλυσης της εξίσωσης Eikonal με τη μέθοδο ταχυ-βηματισμού μέσω χρησιμοποίησης αριθμητικών σχημάτων υψηλότερης τάξης.

Όσον αφορά συνολικά το πλαίσιο προσομοίωσης, η συνέχιση της εργασίας αφορά την προσθήκη μοντέλου για την αέρια φάση, οπότε και θα συνδεθούν οι λειτουργικές παράμετροι του αντιδραστήρα πλάσματος με το σχήμα των εγχαρασόμενων δομών.

Τέλος, η προτεραιότητα εφαρμογής του πλαισίου προσομοίωσης αφορά στη λεπτομερή μελέτη της διεργασίας ΠΕΜΕΑΠ και ειδικότερα στην ανάπτυξη λεπτομερών μοντέλων εγχάραξης Si σε πλάσμα SF₆ και απόθεσης πολυμερούς σε πλάσμα C₄F₈. Δεδομένης της τάσης προς ολοένα μικρότερες διαστάσεις δομών και διατάξεων, η σημασία της τραχύτητας στις επιφάνειες των κατασκευαζόμενων δομών μεγαλώνει. Έτσι, η επιστράτευση του πλαισίου προσομοίωσης, με τις απαραίτητες μετατροπές και επεκτάσεις και σίγουρα με τη συνδρομή αντίστοιχων πειραματικών μετρήσεων και αποτελεσμάτων διακριτών μοντέλων, στην εξήγηση των μηχανισμών που δημιουργούν και μεταβάλλουν την τραχύτητα επιφανειών κατά την εγχάραξη, αποτελεί ελκυστικό και προσδοκώμενα πρόσφορο πεδίο έρευνας.

Παραρτήματα

Περιγράφεται η μέθοδος των κατασκευασμένων λύσεων (method of manufactured solutions) για την επαλήθευση κώδικα (Παράρτημα A) και επαληθεύονται τα τμήματα κώδικα όλων των αριθμητικών μεθόδων του πλαισίου προσομοίωσης (Παραρτήματα A και Δ). Σημειώνονται οι έννοιες αριθμητικών σχημάτων που είναι χρήσιμες στην επαλήθευση του κώδικα, όπως το σφάλμα διακριτοποίησης και η παρατηρούμενη τάξη ακρίβειας (Παράρτημα B). Αναφέρονται οι νόρμες απόκλισης (Παράρτημα Γ) που χρησιμοποιούνται στην εργασία και περιγράφονται τα ζεύγη μεθόδων Runge-Kutta υψηλής τάξης ακρίβειας που χρησιμοποιούνται στον αλγόριθμο εύρεσης ισοϋψούς συνάρτησης (Παράρτημα Δ). Στο Παράρτημα E περιγράφονται οι βασικές έννοιες δυαδικό δένδρο και φίλτρο ελαχίστου που χρησιμοποιούνται στην επίλυση της εξίσωσης Eikonal. Στο Παράρτημα ΣΤ περιγράφεται η έννοια και σημειώνονται οι εξισώσεις υπολογισμού της στερεάς γωνίας που είναι χρήσιμη στον υπολογισμό της απευθείας ροής στο μοντέλο υπολογισμού τοπικής ροής.

Παράρτημα Α

Επαλήθευση κώδικα.

Η μέθοδος των κατασκευασμένων λύσεων

Η ποσοτικοποίηση της αβεβαιότητας στα αποτελέσματα αριθμητικών υπολογισμών κατά την προσομοίωση προκύπτει από την επαλήθευση του υπολογιστικού μοντέλου (verification), που περιλαμβάνει την επαλήθευση του κώδικα και την επαλήθευση των υπολογισμών, και από την επαλήθευση μαθηματικού μοντέλου (validation). Σε γενικές γραμμές, η επαλήθευση υπολογιστικού μοντέλου ελέγχει αν ο κώδικας που έχει αναπτυχθεί «δουλεύει» σωστά, ενώ η επαλήθευση μαθηματικού μοντέλου ελέγχει αν το μαθηματικό μοντέλο περιγράφει σωστά το φυσικό κόσμο. Η προσοχή εστιάζεται στη διαδικασία επαλήθευσης του κώδικα που είναι προϋπόθεση για την επαλήθευση των υπολογισμών και του μαθηματικού μοντέλου. Αναφέρονται τα πιθανά λάθη σε ένα κώδικα και περιγράφεται συστηματική διαδικασία επαλήθευσης, η μέθοδος των κατασκευασμένων λύσεων (method of manufactured solutions). Τέλος, επαληθεύεται ο κώδικας κάθε αριθμητικού υπολογισμού της εργασίας.

A.1 Εισαγωγή

Κατά την προσομοίωση μιας διεργασίας, αρχικά καταστρώνεται το μαθηματικό μοντέλο (π.χ. διαφορικές εξισώσεις μερικών παραγώγων, συνήθεις διαφορικές, ολοκληρωτικές, αλγεβρικές εξισώσεις). Ακολουθεί η επιλογή της αριθμητικής μεθόδου επίλυσης (π.χ. μέθοδος πεπερασμένων διαφορών, στοιχείων, όγκων) και των αντίστοιχων αριθμητικών σχημάτων (π.χ. προσεγγίσεις μερικών παραγώγων). Στη συνέχεια οι εξισώσεις, η μέθοδος και τα αριθμητικά σχήματα κωδικοποιούνται σε γλώσσα προγραμματισμού. Τελικά, τα αποτελέσματα της εκτέλεσης του κώδικα συγκρίνονται με πειραματικές μετρήσεις. Αν τα αποτελέσματα συμφωνούν με τα πειραματικά, τότε υπάρχει ένδειξη ότι η παραπάνω διαδικασία έγινε σωστά. Αν δεν υπάρχει συμφωνία, τότε υπάρχουν πολλά ενδεχόμενα αίτια. *Η ασυμφωνία μπορεί να οφείλεται στο ότι το μαθηματικό μοντέλο που επιλέχθηκε δεν περιγράφει την προς προσομοίωση διεργασία, ή σε λάθη κατά την κωδικοποίηση, ή σε ανεπαρκή πυκνότητα διακριτοποίησης, ή ακόμη και σε λάθος στην πειραματική μέτρηση.* Ο εντοπισμός δεν είναι πάντα εύκολη διαδικασία, ειδικά όταν η διεργασία είναι σύνθετη και τα μαθηματικά μοντέλα, οι αριθμητικές μέθοδοι, τα αριθμητικά σχήματα και οι κώδικες είναι περισσότερα και αλληλεπιδρούν.

Πριν αμφιβάλει κάποιος για την επάρκεια του πειραματιστή και τις δυνατότητες του οργάνου ή της μεθόδου μέτρησης, ή αρχίσει να αμφισβητεί αυθεντίες του παρελθόντος για την ισχύ των μοντέλων που έχουν προτείνει, οφείλει να αναρωτηθεί αν ο κώδικάς του «δουλεύει» σωστά. Το ίδιο οφείλει να αναρωτηθεί ακόμη κι αν η πειραματική μέτρηση συμφωνεί με το αποτέλεσμα του κώδικα, διότι δεν αποκλείεται λάθη στην κατάστροψη του μαθηματικού μοντέλου, λάθη στον κώδικα, ανεπαρκής πυκνότητα διακριτοποίησης και λάθη στην πειραματική μέτρηση να οδηγήσουν σε συμφωνία την πειραματική μέτρηση με το αποτέλεσμα του κώδικα.

Πέρα από τον έλεγχο για την ορθή λειτουργία του κώδικα, ερωτήματα με μεγάλη σημασία στους αριθμητικούς υπολογισμούς είναι «μπορεί ο κώδικας να προβλέψει», ή «πόση είναι η αβεβαιότητα στα αποτελέσματα που προκύπτουν». Οι όροι που είναι γενικά αποδεκτοί για τη μελέτη των παραπάνω θεμάτων (έλεγχος κώδικα, δυνατότητα πρόβλεψης, ποσοτικοποίηση της αβεβαιότητας των αριθμητικών υπολογισμών) είναι οι αγγλικοί όροι verification και validation.

A.2 Επαλήθευση υπολογιστικού και μαθηματικού μοντέλου

Οι όροι verification και validation (και confirmation) χρησιμοποιούνται στην Αγγλική γλώσσα συχνά ως συνώνυμοι. Κατά τον Roache, η επιλογή τους στο πλαίσιο ελέγχου του κώδικα και ποσοτικοποίησης της αβεβαιότητας των αριθμητικών υπολογισμών, ήταν αυθαίρετη [Roache (1998), σ. 20], ωστόσο έχουν επικρατήσει.

Υπάρχουν αρκετοί ορισμοί των όρων verification και validation. Ο Roache αναφέρει τους ορισμούς αρκετών ερευνητών [Roache (1998), σ. 19-52], ενώ οι Oberkampf και Trucano [Oberkampf & Trucano (2002)] αναφέρουν τους ορισμούς κατά SCS (Society for Computer Simulation), IEEE (Institute of Electrical and Electronics Engineers) και AIAA (American Institute of Aeronautics and Astronautics). Παρακάτω παρατίθενται οι ορισμοί των όρων στα αγγλικά σύμφωνα με τον οργανισμό AIAA, καθώς και μια απόπειρα απόδοσής τους στα ελληνικά.

Verification: the process of determining that a model implementation accurately represents the developer's conceptual description of the model and the solution of the model.

(η διαδικασία προσδιορισμού του αν η υλοποίηση ενός μοντέλου α) αναπαριστά με ακρίβεια την ιδεατή περιγραφή του μοντέλου, δηλαδή το μαθηματικό μοντέλο και β) δίδει τη λύση του μοντέλου με ακρίβεια)

Validation: the process of determining the degree to which a model is an accurate representation of the real world from the perspective of the intended uses of the model.

(η διαδικασία προσδιορισμού του βαθμού στον οποίο ένα μοντέλο είναι ακριβής αναπαράσταση του φυσικού κόσμου στο πλαίσιο των σκόπιμων χρήσεων του μοντέλου)

Ο όρος verification στο πλαίσιο που χρησιμοποιείται θα μπορούσε να περιγραφεί από τον ελληνικό περιφραστικό όρο επαλήθευση υπολογιστικού μοντέλου (EYM). Στον όρο υπολογιστικό μοντέλο περικλείονται οι αριθμητικές μέθοδοι και τα αντίστοιχα σχήματα που χρησιμοποιούνται για την επίλυση του μαθηματικού μοντέλου. Ο όρος επαλήθευση σημαίνει [Μείζον ελληνικό λεξικό (1997)] «ακριβής προσδιορισμός της αλήθειας ή της ορθότητας με έλεγχο». Ο όρος validation μπορεί να περιγραφεί από τον περιφραστικό όρο επαλήθευση μαθηματικού μοντέλου (EMM).

Υπάρχουν ορισμένα λεπτά σημεία στους παραπάνω ορισμούς του AIAA. Το πρώτο είναι ότι και οι δύο είναι διαδικασίες προοδευτικές, συνεχιζόμενες, χωρίς να έχουν ένα συγκεκριμένο σημείο ολοκλήρωσης. Είναι σαν να συγκεντρώνονται αποδείξεις για μια νομική υπόθεση [Oberkampf & Trucano (2002)]. Δεν μπορεί κανείς να αποδείξει ότι ένας σύνθετος κώδικας δεν έχει λάθη. Είναι δυνατό να δείξει μόνο ότι έχει λάθη.

Ένα ακόμη σημείο των παραπάνω ορισμών είναι η έμφαση στον όρο ακρίβεια που υποδηλώνει ποσοτικοποίηση της αβεβαιότητας. Κατά την EYM (verification), υπολογίζεται η απόκλιση από πρότυπες ακριβείς λύσεις (π.χ. αναλυτικές), ενώ κατά την EMM (validation) υπολογίζεται η απόκλιση από πειραματικές μετρήσεις.

Ουσιαστικά, η EYM επαληθεύει ότι το μαθηματικό μοντέλο λύνεται σωστά από τον κώδικα, ενώ δεν ελέγχει αν το μαθηματικό μοντέλο περιγράφει ορθά το φυσικό κόσμο. Η

EMM επιχειρεί να προσδιορίσει την ακρίβεια με την οποία το μαθηματικό μοντέλο περιγράφει το φυσικό κόσμο. Η EMM εμπεριέχει και προϋποθέτει την EYM, ή η EYM είναι το πρώτο βήμα της EMM. Με άλλα λόγια, η σύγκριση του μαθηματικού μοντέλου με το φυσικό κόσμο πρέπει να γίνει αφού επαληθευθεί ότι ο κώδικας που το υλοποιεί «δουλεύει» σωστά.

Στην πράξη, η EYM εμπεριέχει δύο διαδοχικές διαδικασίες: η πρώτη είναι η επαλήθευση του κώδικα (verification of code) και η δεύτερη η επαλήθευση των υπολογισμών (verification of calculations). Στην επαλήθευση του κώδικα, γενικά εξετάζεται αν ο κώδικας λύνει τις εξισώσεις σωστά. Η δεύτερη διαδικασία αφορά στην εκτίμηση του σφάλματος της αριθμητικής λύσης στην περίπτωση όπου η πραγματική λύση δεν είναι γνωστή, έπεται της επαλήθευσης του κώδικα και προηγείται της EMM. Είναι απαραίτητο στη σύγκριση της αριθμητικής λύσης με την πειραματική μέτρηση κατά την EMM, να λαμβάνεται υπόψη το εκτιμώμενο σφάλμα (π.χ. λόγω ανεπαρκούς πυκνότητας διακριτοποίησης) της αριθμητικής λύσης.

Η EYM και η EMM είναι προϋποθέσεις για να απαντηθούν τα ερωτήματα για την ποσοτικοποίηση της αβεβαιότητας και της δυνατότητας πρόβλεψης κατά την προσομοίωση. Αν και η σημασία της EYM και EMM στους κώδικες υπολογιστικής φυσικής είναι έκδηλη, δεν υπάρχει ευρεία εφαρμογή τους. Η έλλειψη συστηματικής αντιμετώπισης, κατά τους Oberkampf et al. οφείλεται στο ότι αυτοί που ασχολούνται με τους κώδικες υπολογιστικής φυσικής δεν θεωρούν εαυτούς μηχανικούς λογισμικού [Oberkampf et al. (2002)]. Επίσης, το ρίσκο από τη μη ορθή λειτουργία των κωδίκων υπολογιστικής φυσικής, των οποίων τα αποτελέσματα δημοσιεύονται σε κάποιο επιστημονικό περιοδικό, δεν είναι το ίδιο με το ρίσκο από τη μη ορθή λειτουργία λογισμικού που αφορά κρίσιμα για την ασφάλεια συστήματα (π.χ. λογισμικό λειτουργίας εγκαταστάσεων πυρηνικής ενέργειας, λογισμικό αεροπορικών ηλεκτρονικών).

A.3 Μεθοδολογία επαλήθευσης κώδικα

Η πρώτη σκέψη για πώς επαληθεύεται ένας κώδικας μάλλον είναι η σύγκριση των αποτελεσμάτων του με μια γνωστή λύση (και όχι με πειραματικές μετρήσεις, αυτό είναι θέμα της EMM). Εκτός από τον παραπάνω τρόπο, υπάρχουν και άλλοι λιγότερο ή περισσότερο αυστηροί. Η ερώτηση που απαντά η επαλήθευση του κώδικα είναι «αν λύνει ο κώδικας σωστά τις εξισώσεις του μαθηματικού μοντέλου». Επομένως, η επαλήθευση σημαίνει έλεγχος, εντοπισμός και εξάλειψη πιθανών λαθών στον κώδικα. Σε αυτό το πλαίσιο, η επαλήθευση κώδικα μπορεί να θεωρηθεί σαν μια διαδικασία της εξασφάλισης ποιότητας λογισμικού (software quality assurance, SQA⁹¹). Στη συνέχεια, αναφέρονται τα πιθανά είδη

⁹¹ Η εξασφάλιση ποιότητας λογισμικού (SQA) αποτελεί μια τυπική διαδικασία που αναπτύχθηκε για τη διασφάλιση της αξιοπιστίας λογισμικού.

λαθών σε ένα κώδικα, τονίζονται αυτά που αφορούν στην επαλήθευση του κώδικα και περιγράφονται μέθοδοι για την ανίχνευσή τους.

Αρχικά σημειώνεται ότι ο όρος λάθος (mistake) εκφράζει λάθος στον κώδικα, σε αντιδιαστολή με τον όρο σφάλμα (error), ο οποίος χρησιμοποιείται για τα αριθμητικά σφάλματα (§B.3), όπως το σφάλμα αποκοπής. Ο έλεγχος του κώδικα για τον εντοπισμό λαθών, σύμφωνα με την SQA, διακρίνεται στο στατικό (static), το δυναμικό (dynamic) και τον τυπικό (formal) έλεγχο.

Ο στατικός έλεγχος γίνεται πριν την εκτέλεση του κώδικα και αφορά αρχικά στον εντοπισμό των λαθών μεταγλώττισης και στη συνέχεια άλλων λαθών που μπορεί να μην εντοπίζονται από το μεταγλωττιστή, όπως μεταβλητές που χρησιμοποιούνται χωρίς να αποδοθεί τιμή σε αυτές, ή ασυμφωνία στη λίστα των πραγματικών και εικονικών ορισμάτων μιας συνάρτησης. Ο στατικός έλεγχος αποτελεί προϋπόθεση για την επαλήθευση του κώδικα.

Ο δυναμικός έλεγχος ακολουθεί το στατικό και αφορά στον εντοπισμό των λαθών που επηρεάζουν την εκτέλεση του κώδικα, όπως δείκτης εκτός ορίων σε πίνακες, διαρροή μνήμης (memory leakage) και οποιοδήποτε λογικό λάθος. *Η επαλήθευση κώδικα, όπως ορίστηκε στην προηγούμενη παράγραφο, περικλείεται στο δυναμικό έλεγχο.*

Μετά το στατικό και το δυναμικό έλεγχο, ακολουθεί ο τυπικός. Ο τυπικός έλεγχος αφορά στην εύρεση λαθών που δεν εντοπίζονται από το στατικό και το δυναμικό έλεγχο, όπως μια γραμμή κώδικα όπου υπολογίζεται μια ποσότητα που δεν χρησιμοποιείται.

Συνεπώς, τα λάθη στον κώδικα είναι στατικά, δυναμικά και τυπικά. Τα δυναμικά λάθη διακρίνονται σε:

A) Λάθη που παρεμποδίζουν τη σύγκλιση (divergence mistakes).

B) Λάθη που επιδρούν στην απόδοση του κώδικα (efficiency mistakes).

Γ) Λάθη που επιδρούν στην τάξη ακρίβειας του κώδικα (order of accuracy mistakes), δηλαδή λάθη που προκαλούν την απόκλιση της παρατηρούμενης από τη θεωρητική τάξη ακρίβειας της αριθμητικής λύσης (§B.4).

Δ) Λάθη που αφορούν στην παρανόηση των χαρακτηριστικών του αλγορίθμου τον οποίο ο κώδικας υλοποιεί (conceptual mistakes). Για παράδειγμα, έστω ότι ερευνητής καταστρώνει μέθοδο για την επίλυση μιας μη γραμμικής διαφορικής εξίσωσης μερικών παραγώγων και πιστεύει ότι η τάξη ακρίβειας της μεθόδου είναι 2. Ο δυναμικός έλεγχος μπορεί να αποκαλύψει ότι η προτεινόμενη μέθοδος είναι 1^{15} τάξης ακρίβειας και να εντοπίσει την παρανόηση του ερευνητή για τα ακριβή χαρακτηριστικά της μεθόδου.

Με βάση την παραπάνω ταξινόμηση των λαθών, με την επαλήθευση του κώδικα εντοπίζονται και εξαλείφονται δυναμικά λάθη. Οι μέθοδοι δυναμικού ελέγχου που σχετίζονται με την επαλήθευση του κώδικα είναι [Salari & Knupp (2000), σ. 16] με σειρά

αυξανόμενης δυσκολίας είναι α) η μέθοδος ελέγχου τάσης (trend test), β) η μέθοδος ελέγχου συμμετρίας (symmetry test), γ) η μέθοδος σύγκρισης (comparison test), δ) η μέθοδος πραγματικών λύσεων (method of exact solutions, MES) και ε) η μέθοδος των κατασκευασμένων λύσεων (method of manufactured solutions, MMS).

Τα μέτρα ελέγχου που χρησιμοποιούνται στις παραπάνω μεθόδους με αυξανόμενη αυστηρότητα είναι α) η κρίση ειδικού (expert judgement), β) η απόκλιση μεταξύ λύσεων ή σφάλμα, γ) η συνέπεια (§B.1) του υπολογιστικού μοντέλου, και δ) η απόκλιση παρατηρούμενης από θεωρητική τάξη ακρίβειας της αριθμητικής λύσης. Η εφαρμογή τους περιγράφεται στη συνέχεια, ενώ σημειώνεται ότι δεν είναι εφικτό να εφαρμοστεί κάθε μέτρο σε όλες τις μεθόδους.

Στη μέθοδο ελέγχου τάσης, η τάση της άγνωστης λύσης, ως αποτέλεσμα σειράς εκτελέσεων του κώδικα μεταβάλλοντας τις παραμέτρους εισόδου, ελέγχεται, και το αν ο κώδικας περνά ή όχι τον έλεγχο εξαρτάται από την κρίση του ειδικού. Για παράδειγμα, αν είναι γνωστή η μονότονη μεταβολή της λύσης με την αύξηση μιας παραμέτρου εισόδου, τότε αν αυτή επιβεβαιωθεί ο κώδικας περνά τον έλεγχο. Η μέθοδος τάσης θέτει την ελάχιστη προϋπόθεση για την επαλήθευση ενός κώδικα. Ακόμη και κώδικες που περιέχουν λάθη, συνήθως «περνούν» σε αυτό τον έλεγχο.

Με μέθοδο ελέγχου συμμετρίας, ελέγχεται αν η άγνωστη λύση εμφανίζει την προβλεπόμενη από τη διατύπωση του προβλήματος συμμετρία.

Με τη μέθοδο σύγκρισης, συγκρίνονται τα αποτελέσματα του υπό ελέγχου κώδικα με ένα γενικά αποδεκτό κώδικα ή με μια σειρά από κώδικες που λύνουν όμοια προβλήματα. Ένα ρεαλιστικό πρόβλημα κατασκευάζεται και επιλύεται από κάθε κώδικα. Αν η απόκλιση μεταξύ των λύσεων δεν ξεπερνά κάποιο προκαθορισμένο όριο ανοχής, τότε ο κώδικας περνά τον έλεγχο. Το κύριο πλεονέκτημα αυτής της μεθόδου είναι ότι δεν χρειάζεται να είναι γνωστή η πραγματική λύση του προβλήματος. Από την άλλη πλευρά, δεν μπορεί να εφαρμοστεί όταν δεν υπάρχει γενικά αποδεκτός κώδικας για τη σύγκριση. Η αξιοπιστία του ελέγχου βασίζεται στην αξιοπιστία του κώδικα που χρησιμοποιείται για τη σύγκριση.

Με τη μέθοδο των πραγματικών λύσεων, το πρόβλημα που επιλέγεται να λυθεί από τον υπό έλεγχο κώδικα συνήθως προκύπτει από απλοποιητικές παραδοχές ή τροποποίηση του αρχικού, ώστε να είναι δυνατή η αναλυτική επίλυσή του. Ο κώδικας παράγει μια αριθμητική λύση για το τροποποιημένο πρόβλημα η οποία συγκρίνεται με την πραγματική. Ως μέτρα ελέγχου, εκτός από το σφάλμα, μπορούν χρησιμοποιηθούν και η συνέπεια και η απόκλιση της παρατηρούμενης από την θεωρητική τάξη ακρίβειας. Η μέθοδος είναι ευρέως διαδεδομένη και έχει μεγαλύτερη βαρύτητα από τις προηγούμενες, κυρίως διότι υπάρχει αξιόπιστο και αντικειμενικό σημείο αναφοράς, η πραγματική λύση προβλήματος. Μια από τις δυσκολίες της μεθόδου είναι ότι με την επίλυση τροποποιημένων προβλημάτων σπάνια εξετάζονται όλοι οι όροι της εξίσωσης (ή των εξισώσεων) του αρχικού προβλήματος [Salari & Knupp (2000), σ. 19]. Επίσης, είναι πιθανό η λύση να εμφανίζει ιδιόμορφα σημεία, όπου δεν είναι παραγωγίσιμη ή δεν ορίζεται. Σε αυτές τις περιπτώσεις δεν μπορεί να χρησιμοποιηθεί το μέτρο που αφορά την τάξη ακρίβειας για τον έλεγχο.

Οι δύο παραπάνω δυσκολίες μπορούν να αντιμετωπιστούν με τη μέθοδο των κατασκευασμένων λύσεων. Η μέθοδος κατασκευασμένων λύσεων είναι ευρέως διαδεδομένη, χρησιμοποιείται στην παρούσα εργασία για την επαλήθευση του κώδικα, και για αυτό το λόγο περιγράφεται με περισσότερη λεπτομέρεια στην §Α.4.

Ομοφωνία για το πώς μπορεί κάποιος να δείξει συστηματικά ότι ο κώδικας είναι σωστός δεν υπάρχει. Η επαλήθευση κώδικα μπορεί να γίνει με κάποια από τις παραπάνω μεθόδους, ωστόσο τον υψηλότερο βαθμό αυστηρότητας φέρουν οι μέθοδοι των πραγματικών λύσεων και κατασκευασμένων λύσεων όταν χρησιμοποιείται η απόκλιση παρατηρούμενης από θεωρητική τάξη ακρίβειας ως μέτρο ελέγχου.

A.4 Η μέθοδος των κατασκευασμένων λύσεων

A.4.1 Γενικές αρχές

Η μέθοδος των κατασκευασμένων λύσεων (ΜΚΛ) είναι μια γενική διαδικασία για την «κατασκευή» αναλυτικής λύσης που χρησιμοποιείται για την επαλήθευση του κώδικα. Κατασκευασμένη λύση είναι η πραγματική λύση μιας διαφορικής εξίσωσης (συνήθους, μερικών παραγώγων, μέλους συστήματος διαφορικών εξισώσεων), η οποία εξίσωση έχει προκύψει εφαρμόζοντας στην κατασκευασμένη λύση το διαφορικό τελεστή της εξίσωσης.

Έστω ότι η προς επίλυση διαφορική εξίσωση είναι η

$$Lu = f \tag{A.1}$$

Με την ΜΚΛ, θεωρείται μια κατασκευασμένη αναλυτική λύση U στην οποία εφαρμόζεται ο διαφορικός τελεστής L της Εξ. (A.1), οπότε και προκύπτει

$$LU = g. \tag{A.2}$$

Η επαλήθευση του κώδικα είναι αποτέλεσμα σύγκρισης της αριθμητικής λύσης, \hat{U} , με την πραγματική λύση, U , της Εξ. (A.2). Περισσότερα για την σύγκριση υπάρχουν στην §Α.4.2.

Σε κάποιες περιπτώσεις η εφαρμογή του διαφορικού τελεστή στην κατασκευασμένη λύση είναι επίπονη διαδικασία. Για την εύκολη παραγωγή του όρου g της Εξ. (A.2) μπορούν να χρησιμοποιηθούν εμπορικά πακέτα συμβολικής άλγεβρας (DERIVE, MATHEMATICA) τα οποία μπορούν να μετατρέψουν το αποτέλεσμα σε κώδικα FORTRAN ή C.

Με την ΜΚΛ, λύνεται εξίσωση με διαφορετικό δεξιό μέλος με τον ίδιο όμως διαφορικό τελεστή [Εξ. (A.2)]. Δυσκολία στην εφαρμογή της μεθόδου προκύπτει όταν δεν είναι δυνατή η εισαγωγή όρου στον κώδικα που μετατρέπει την εξίσωση από ομογενή σε μη ομογενή (π.χ. διότι δεν μπορεί ο χρήστης να επέμβει στον κώδικα). Δυσκολία υπάρχει επίσης

όταν τα αριθμητικά σχήματα που υλοποιούνται στον κώδικα αφορούν μόνο την ομογενή μορφή της προς επίλυση εξίσωσης.

Με την εφαρμογή της ΜΚΛ ελέγχονται α) η κωδικοποίηση των διακριτοποιημένων εξισώσεων, β) ο συνολικός αλγόριθμος επίλυσης (που πιθανά περιέχει επαναληπτική διαδικασία), και γ) η εισαγωγή και εξαγωγή δεδομένων από το χρήστη. Από την άλλη πλευρά, η μέθοδος δεν εντοπίζει λάθη που επιδρούν στην απόδοση του κώδικα.

Οι Salari και Knupp χρησιμοποίησαν την ΜΚΛ για την επαλήθευση κώδικα που υλοποιεί την επίλυση εξισώσεων Navier-Stokes [Salari & Knupp (2000)]. Εξέτασαν 21 εκδόσεις του κώδικα με ένα σκόπιμο λάθος ο καθένας. Ένας από τους κώδικες ήταν σωστός, δέκα περιείχαν λάθη που επιδρούσαν στην τάξη ακρίβειας, ένας είχε στατικό λάθος, ένας λάθος που παρεμποδίζει τη σύγκλιση και εφτά είχαν τυπικά λάθη. Με την ΜΚΛ ανίχνευσαν όλα τα λάθη που επιδρούσαν στην τάξη ακρίβειας, το λάθος που παρεμπόδιζε τη σύγκλιση και το στατικό. Δεν εντόπισαν τα εφτά τυπικά σφάλματα. Επίσης, αναφέρουν ότι όταν χρησιμοποίησαν τη συνέπεια ως μέτρο για την αποδοχή μόνο έξι από τα δέκα λάθη που επιδρούν στην τάξη ακρίβειας εντοπίστηκαν. *Το συμπέρασμά τους ήταν το κύριο πλεονέκτημα της ΜΚΛ έναντι των άλλων μεθόδων είναι ότι είναι δυνατό να ελεγχθούν όλες οι πιθανές πηγές λάθους. Οι Oberkampf και Trucano αναφέρουν ότι όποιος χρησιμοποίησε την ΜΚΛ έγινε πιστός υποστηρικτής της [Oberkampf & Trucano (2002)]. Εντούτοις, σημειώνουν ότι πρέπει να εφαρμοστεί σε περισσότερα προβλήματα για να βγουν ασφαλή συμπεράσματα. Ο Roache, που πρότεινε την ΜΚΛ, αναφέρει ότι η επαλήθευση του κώδικα με τη ΜΚΛ (όχι συνολικά η EYM και η EMM) έχει σημείο ολοκλήρωσης, επέχει θέση θεωρήματος, αποτελεί απόδειξη για το ότι ο κώδικας «δουλεύει» σωστά [Roache (2002)].*

A.4.2 Το μέτρο ελέγχου

Από τα μέτρα ελέγχου που μπορούν να χρησιμοποιηθούν στη μέθοδο ΜΚΛ χρησιμοποιείται το αυστηρότερο, δηλαδή εξετάζεται η συμφωνία παρατηρούμενης και θεωρητικής τάξης ακρίβειας της αριθμητικής λύσης. Οι έννοιες και ο τρόπος υπολογισμού της παρατηρούμενης και θεωρητικής τάξης της αριθμητικής λύσης περιγράφονται στην §B.4. Στη συνέχεια περιγράφεται τι ακριβώς σημαίνει ο όρος συμφωνία.

Με τη συστηματική μείωση του μέτρου διακριτοποίησης με σταθερό λόγο μείωσης προκύπτει μια σειρά υπολογισμών της παρατηρούμενης τάξης (§B.4). *Αν η σειρά αυτών των υπολογισμών παρατηρούμενης τάξης προσεγγίζει ασυμπτωτικά {is close enough to, [Murali (2002), σ. 39]} τη θεωρητική τάξη, κυρίως για μικρές τιμές του μέτρου διακριτοποίησης, τότε θεωρείται ότι υπάρχει συμφωνία με τη θεωρητική τάξη. Για παράδειγμα, αν η σειρά υπολογισμών της παρατηρούμενης τάξης είναι 4.1, 4.5, 4.7, 4.8, 4.7, ενώ η θεωρητική είναι 5, τότε θεωρείται ότι παρατηρούμενη και θεωρητική τάξη συμφωνούν. Σε κάποιες περιπτώσεις υπολογίζεται μια μέση τιμή για την παρατηρούμενη τάξη, p , η οποία προκύπτει με προσαρμογή της μεταβολής του σφάλματος συναρτήσει του μέτρου διακριτοποίησης, δ , σε*

καμπύλη μορφής $c\delta^p$. Πολλές φορές χρειάζεται να μειωθεί σε πολύ χαμηλές τιμές το μέτρο διακριτοποίησης ώστε η παρατηρούμενη να προσεγγίσει τη θεωρητική τάξη.

Προσοχή θα πρέπει να δοθεί στις περιπτώσεις όπου η παρατηρούμενη τάξη ακρίβειας διαφέρει από την θεωρητική εξαιτίας κάποιου ιδιόμορφου σημείου στη λύση (π.χ. ασυνέχεια της παραγώγου της λύσης). Είναι πιθανό ο υπολογισμός της θεωρητικής τάξης να έχει γίνει χωρίς να λαμβάνει υπόψη το ιδιόμορφο σημείο στη λύση. Τότε η ασυμφωνία θεωρητικής και παρατηρούμενης τάξης δεν οφείλεται σε λάθος που επιδρά στην τάξη ακρίβειας, αλλά αναδεικνύει ένα λάθος παρανόησης των χαρακτηριστικών του αλγορίθμου τον οποίο ο κώδικας υλοποιεί (η θεωρητική τάξη δεν είναι αυτή που νομίζει ο ερευνητής).

A.4.3 Οδηγίες για την κατασκευή της λύσης

Οι οδηγίες για την κατασκευή λύσης έχουν στόχο την εύκολη αριθμητική επίλυση του προκύπτοντος προβλήματος και κυρίως την εξέταση κάθε όρου της εξεταζόμενης εξίσωσης ώστε να εξασφαλιστεί ότι ελέγχονται όλες τις πιθανές πηγές λάθους.

Αρχικά πρέπει να ξεκαθαριστεί ότι δεν υπάρχει καμία απαίτηση για την κατασκευή ρεαλιστικής λύσης, δηλαδή μιας λύσης που ταιριάζει στο πρόβλημα που αντιμετωπίζεται. Ο κώδικας δεν διακρίνει αν το πρόβλημα που επιλύει είναι ρεαλιστικό ή μη, λύνει σε κάθε περίπτωση ένα σύνολο εξισώσεων. Στη συνέχεια περιγράφονται κύριες οδηγίες για την κατασκευή λύσης στη MKL [Salari & Knupp (2000)].

A) Η κατασκευασμένη λύση πρέπει να είναι συνεχής συνάρτηση, σύνθεση λείων αναλυτικών (smooth, analytic) συναρτήσεων όπως πολυώνυμα, τριγωνομετρικές ή εκθετικές συναρτήσεις, ώστε εύκολα να εφαρμόζεται σε αυτή ο διαφορικός τελεστής. Η απαίτηση για λεία κατασκευασμένη λύση είναι αναγκαία, ώστε η θεωρητική τάξη ακρίβειας να μπορεί να επιβεβαιωθεί αριθμητικά.

B) Η κατασκευασμένη λύση πρέπει να είναι συνάρτηση όλων των ανεξάρτητων μεταβλητών της εξίσωσης και να εξετάζει όλους τους όρους της εξίσωσης. Για παράδειγμα, δεν μπορεί η κατασκευασμένη λύση για την εξίσωση $u_t + F|\nabla u| = 0$ να μην εξαρτάται από το χρόνο. Επίσης, δεν μπορεί η κατασκευασμένη λύση για την εξίσωση $u_{tt} + u_{xx} = 0$ να έχει μηδενική δεύτερη παράγωγο ως προς t ή/και x .

Γ) Η λύση οφείλει να έχει πλήθος μη μηδενικών παραγώγων ως προς ανεξάρτητη μεταβλητή τουλάχιστο ίσο με τη θεωρητική τάξη ακρίβειας του αριθμητικού σχήματος ως προς αυτή τη μεταβλητή. Για παράδειγμα, αν η θεωρητική τάξη ακρίβειας του αριθμητικού σχήματος ως προς μία ανεξάρτητη μεταβλητή είναι 2, τότε θα πρέπει η κατασκευασμένη λύση να είναι τουλάχιστο 2 φορές παραγωγίσιμη ως προς αυτή τη μεταβλητή. Αν επιλεγεί κατασκευασμένη λύση με γραμμική εξάρτηση από την ανεξάρτητη μεταβλητή, τότε η

μείωση του σφάλματος θα είναι αναπόφευκτα 2^{ns} τάξης, όπως προκύπτει από την ανάπτυξη σε σειρά Taylor της πραγματικής λύσης, και το πολυώνυμο Taylor 1^{ou} βαθμού που αναπαριστά την αριθμητική λύση.

Δ) Οι παράγωγοι της λύσης είναι επιθυμητό να είναι φραγμένες με μια μικρή σταθερά. Αυτό εξασφαλίζει ότι η λύση δεν εμφανίζει ισχυρή εξάρτηση από τις χωρικές μεταβλητές και το χρόνο. Αν δεν ακολουθηθεί αυτή η οδηγία, είναι πολύ πιθανό να μην προκύπτει η αναμενόμενη από την τάξη ακρίβειας ασυμπτωτική συμπεριφορά του σφάλματος διακριτοποίησης χρησιμοποιώντας πρακτικά πλέγματα, αλλά να χρειαστεί πολύ μεγάλη μείωση των πλεγματοσφαιρών ($\Delta x, \Delta t$). Αυτή η οδηγία περικλείει την απαίτηση να μην υπάρχουν ιδιόμορφα σημεία στην κατασκευασμένη λύση (π.χ. σημεία όπου η λύση είναι μη παραγωγίσιμη ή δεν ορίζεται).

Ε) Η κατασκευασμένη λύση δεν πρέπει να εμποδίζει την επιτυχή εκτέλεση του κώδικα. Για παράδειγμα, αν ο κώδικας περιέχει μια επαναληπτική διαδικασία, η κατασκευασμένη λύση δεν πρέπει να εμποδίζει τη σύγκλιση, ενώ δεν εξετάζεται κατά πόσο την επιταχύνει ή επιβραδύνει.

ΣΤ) Η συμμετρία στην κατασκευασμένη λύση μπορεί να κρύβει λάθη στον κώδικα και πρέπει να αποφεύγεται.

A.5 Εφαρμογές της μεθόδου των κατασκευασμένων λύσεων

A.5.1 Επαλήθευση κώδικα επίλυσης της εξίσωσης ισοϋψών

Η МКЛ εφαρμόζεται για την επαλήθευση κώδικα στο πρόβλημα αρχικών τιμών

$$u_t + F|\nabla u| = 0, u(x, y, t=0) = q(x, y). \quad (A.3)$$

με μέτρο ελέγχου την απόκλιση θεωρητικής – παρατηρούμενης τάξης ακρίβειας.

Ο κώδικας είναι σε γλώσσα προγραμματισμού C++. Στη συνέχεια κατασκευάζεται η λύση, υπολογίζεται η παρατηρούμενη τάξη ακρίβειας και συγκρίνεται με τη θεωρητική.

Η αριθμητική επίλυση γίνεται σε δύο διαστάσεις, άρα τα μέτρα διακριτοποίησης είναι τα $\Delta x, \Delta y$ και Δt . Ο κώδικας που ελέγχεται αναφέρεται στην υλοποίηση των αριθμητικών σχημάτων της §6.2. Χρησιμοποιούνται τα ίδια σχήματα και στις δύο διευθύνσεις (x και y) και θεωρείται ότι $\Delta x = \Delta y$. Το σφάλμα στην αριθμητική λύση είναι

$$E(\Delta t, \Delta x) = O(\Delta t^m) + O(\Delta x^n), \quad (A.4)$$

ή

$$E(\Delta t, \Delta x) = c_1 \Delta t^m + c_2 \Delta x^n, \quad (\text{A.5})$$

όπου m είναι η τάξη προσέγγισης της μερικής παραγώγου ως προς t και n η τάξη προσέγγισης της μερικής παραγώγου ως προς x (η απόδειξη είναι στην §B.5). Για παράδειγμα, για το αριθμητικό σχήμα SSPRK3/x/WENO5 είναι $m=3$, $n=5$ ($x = \text{OS}$ ή LLLF).

Η κατασκευασμένη λύση που προτείνεται είναι η

$$U(x, y, t) = e^{ax} \sin(y + bt) + e^{ay} \cos(x + bt), \quad a, b \in R, \quad (\text{A.6})$$

η οποία ακολουθεί τις οδηγίες της §A.4.3 και αποτελεί τη λύση του προβλήματος της Εξ. (A.3) όταν

$$F = \frac{b \left[e^{ay} \sin(x + bt) - e^{ax} \cos(y + bt) \right]}{\text{den}(x, y, t)}, \quad (\text{A.7})$$

όπου

$$\text{den}(x, y, t) = \sqrt{e^{2ax} \left[a^2 - (a^2 - 1) \cos^2(y + bt) \right] + 2ae^{ax+ay} \left[\cos(x + bt) \cos(y + bt) - \sin(x + bt) \sin(y + bt) \right] + e^{2ay} \left[(a^2 - 1) \cos^2(x + bt) + 1 \right]} \quad (\text{A.8})$$

Επιβάλλονται συνοριακές συνθήκες Dirichlet, οι οποίες υπολογίζονται από την Εξ. (A.6). Από την ίδια εξίσωση προκύπτει και η αρχική συνθήκη:

$$q(x, y) = U(x, y, t = 0) = e^{ax} \sin y + e^{ay} \cos x \quad (\text{A.9})$$

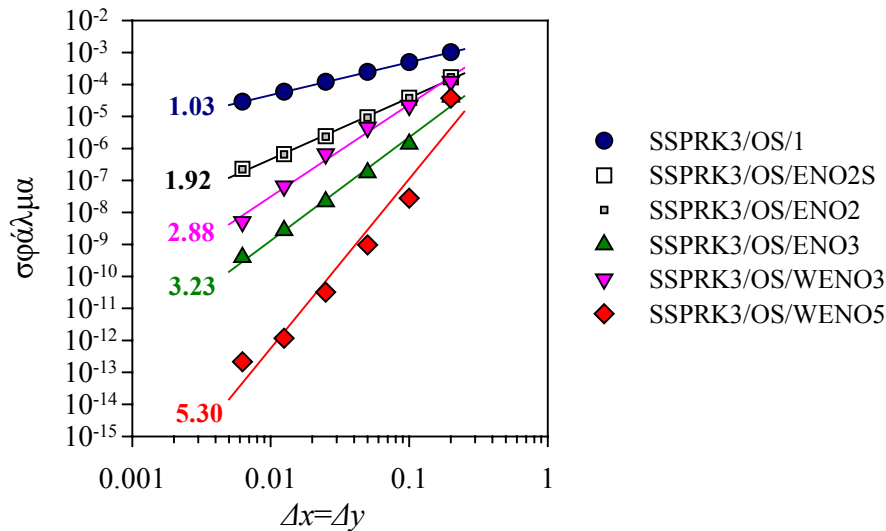
Ο κώδικας επαληθεύεται για κάθε χαρακτηριστικό των σχημάτων της §6.2: α) το σχήμα ολοκλήρωσης στο χρόνο, β) τη συνάρτηση προσέγγισης της Χαμιλτονιανής, $H = F|\nabla u|$ και γ) την προσέγγιση των χωρικών παραγώγων (u_x, u_y). Τα σχήματα που μπορούν να σχηματιστούν συνδυάζοντας τα βασικά τους χαρακτηριστικά είναι 3 (σχήματα ολοκλήρωσης στο χρόνο) x 2 (συναρτήσεις προσέγγισης της Χαμιλτονιανής, $H = F|\nabla u|$) x 6 (σχήματα προσέγγισης των μερικών παραγώγων). Εντούτοις δεν είναι αναγκαίο να ελεγχθούν όλα τα δυνατά σχήματα. Εξετάζονται τα συστατικά χαρακτηριστικά τους.

Για τον έλεγχο των χαρακτηριστικών (β) και (γ) διατηρείται σταθερά μικρό το Δt και χρησιμοποιείται σχήμα 3^{ης} τάξης ακρίβειας για την ολοκλήρωση στο χρόνο (SSPRK3) ώστε ο όρος $c_1 \Delta t^m$ του σφάλματος [Εξ. (A.5)] σχεδόν να εξαλειφθεί, και μειώνεται σταδιακά με λόγο 2 το Δx ($=\Delta y$). Στον Πίνακα A.I φαίνονται τα αποτελέσματα για όλα τα σχήματα της §6.2 που χρησιμοποιούν για την ολοκλήρωση στο χρόνο το σχήμα SSPRK3. Στο Σχήμα A.1

παριστάνονται γραφικά τα αποτελέσματα του Πίνακα Α.Ι για τα σχήματα που χρησιμοποιούν το σχήμα OS για την προσέγγιση της Χαμιλτονιανής. Σε κάθε ομάδα δεδομένων προσαρμόζεται καμπύλη με μορφή $c_2\Delta x^p$. Σε λογαριθμικό διάγραμμα οι καμπύλες για κάθε ομάδα δεδομένων είναι ευθείες γραμμές με κλίση την παρατηρούμενη τάξη ακρίβειας ως προς Δx . Στο Σχήμα Α.1 φαίνονται οι κλίσεις για κάθε αριθμητικό σχήμα. Το συμπέρασμα που προκύπτει είναι ότι η θεωρητική τάξη ακρίβειας της αριθμητικής λύσης ως προς Δx (Δy) συμπίπτει με την παρατηρούμενη για κάθε σχήμα προσέγγισης των χωρικών παραγώγων.

Πίνακας Α.Ι Το σφάλμα ($\|u - u_{real}\|_2/\|u_{real}\|_2$) και η παρατηρούμενη τάξη ακρίβειας της αριθμητικής λύσης του προβλήματος που περιγράφουν οι Εξ. (Α.3), (Α.7) και (Α.9) καθώς μειώνεται το $\Delta x=\Delta y$, χρησιμοποιώντας 6 διαφορετικά σχήματα για την προσέγγιση των χωρικών παραγώγων (1, ENO2, ENO2S, ENO3, WENO3, WENO5). n είναι η θεωρητική τάξη ακρίβειας ως προς $\Delta x=\Delta y$. Παράμετροι επίλυσης: υπολογιστικό χωρίο $[0,1]\times[0,1,1,1]$, $a=0.5$, $b=0.4$, $\Delta t=0.0001$, $t=0.25$.

$\Delta x=\Delta y$	SSPRK3/ OS/1 ($n=1$)		SSPRK3/ LLLF/1 ($n=1$)		SSPRK3/ OS/ENO2 ($n=2$)		SSPRK3/ LLLF/ENO2 ($n=2$)	
	Σφάλμα	Τάξη	Σφάλμα	Τάξη	Σφάλμα	Τάξη	Σφάλμα	Τάξη
0.2	1.01E-03		1.13E-03		1.67E-04		1.67E-04	
0.1	4.97E-04	1.03	5.25E-04	1.11	3.77E-05	2.14	3.78E-05	2.15
0.05	2.45E-04	1.02	2.52E-04	1.06	9.27E-06	2.02	9.28E-06	2.03
0.025	1.20E-04	1.03	1.21E-04	1.05	2.34E-06	1.99	2.34E-06	1.99
0.0125	5.84E-05	1.03	5.88E-05	1.04	6.46E-07	1.86	6.46E-07	1.86
0.00625	2.87E-05	1.02	2.88E-05	1.03	2.24E-07	1.53	2.24E-07	1.53
$\Delta x=\Delta y$	SSPRK3/ OS/ENO2S ($n=2$)		SSPRK3/ LLLF/ENO2S ($n=2$)		SSPRK3/ OS/ENO3 ($n=3$)		SSPRK3/ LLLF/ENO3 ($n=3$)	
	Σφάλμα	Τάξη	Σφάλμα	Τάξη	Σφάλμα	Τάξη	Σφάλμα	Τάξη
0.2	1.68E-04		1.69E-04		4.10E-05		4.10E-05	
0.1	3.82E-05	2.14	3.83E-05	2.15	1.39E-06	4.88	1.39E-06	4.88
0.05	9.46E-06	2.01	9.47E-06	2.02	1.77E-07	2.97	1.77E-07	2.97
0.025	2.41E-06	1.98	2.41E-06	1.98	2.20E-08	3.01	2.20E-08	3.01
0.0125	6.66E-07	1.85	6.66E-07	1.85	2.76E-09	2.99	2.76E-09	2.99
0.00625	2.31E-07	1.52	2.31E-07	1.52	4.00E-10	2.79	4.00E-10	2.79
$\Delta x=\Delta y$	SSPRK3/ OS/WENO3 ($n=3$)		SSPRK3/LLLF/ WENO3 ($n=3$)		SSPRK3/ OS/WENO5 ($n=5$)		SSPRK3/ LLLF/WENO5 ($n=5$)	
	Σφάλμα	Τάξη	Σφάλμα	Τάξη	Σφάλμα	Τάξη	Σφάλμα	Τάξη
0.2	1.24E-04		1.24E-04		3.72E-05		3.72E-05	
0.1	2.19E-05	2.49	2.20E-05	2.50	2.77E-08	10.39	2.77E-08	10.39
0.05	4.54E-06	2.27	4.54E-06	2.27	9.62E-10	4.85	9.62E-10	4.85
0.025	6.67E-07	2.77	6.67E-07	2.77	3.22E-11	4.90	3.22E-11	4.90
0.0125	6.58E-08	3.34	6.58E-08	3.34	1.16E-12	4.79	1.16E-12	4.79
0.00625	5.05E-09	3.70	5.05E-09	3.70	2.15E-13	2.43	2.15E-13	2.43



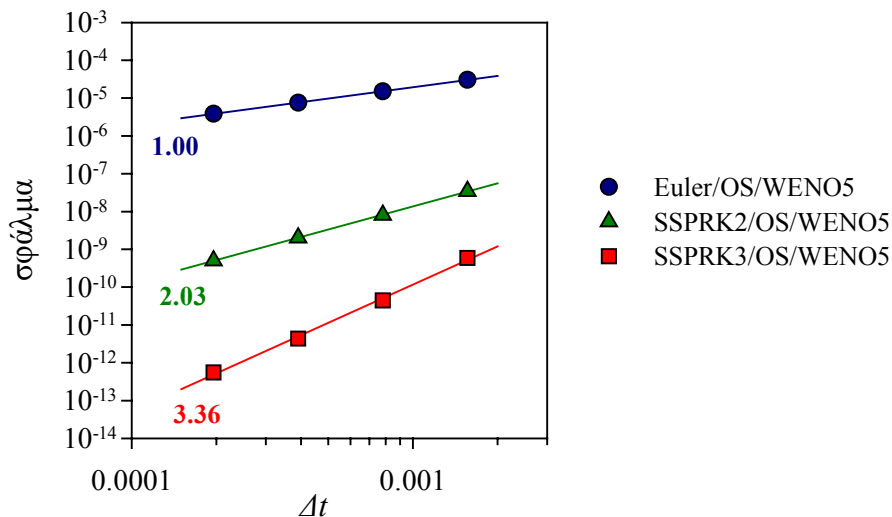
Σχήμα A.1 Το σφάλμα ($\|\mathbf{u} - \mathbf{u}_{real}\|_2 / \|\mathbf{u}_{real}\|_2$) και η παρατηρούμενη τάξη ακρίβειας της αριθμητικής λύσης του προβλήματος που περιγράφουν οι Εξ. (A.3), (A.7) και (A.9) καθώς μειώνεται το $\Delta x = \Delta y$, χρησιμοποιώντας 6 αριθμητικά σχήματα για την προσέγγιση των χωρικών παραγώγων (1, ENO2, ENO2S, ENO3, WENO3, WENO5). Για κάθε αριθμητικό σχήμα φαίνεται η μέση παρατηρούμενη τάξη ακρίβειας ως προς $\Delta x = \Delta y$, p , η οποία προκύπτει από προσαρμογή της αντίστοιχης ομάδας δεδομένων σε καμπύλη με μορφή $c_2 \Delta x^p$. Παράμετροι επίλυσης: υπολογιστικό χωρίο $[0,1] \times [0.1,1.1]$, $a=0.5$, $b=0.4$, $\Delta t=0.0001$, $t=0.25$.

Για τον έλεγχο του χαρακτηριστικού (α) των αριθμητικών σχημάτων διατηρείται σταθερά μικρό το $\Delta x = \Delta y$ και χρησιμοποιείται σχήμα 5^{ης} τάξης ακρίβειας για την προσέγγιση των χωρικών παραγώγων (WENO5) ώστε ο όρος $c_2 \Delta x^n$ του σφάλματος [Εξ. (A.5)] σχεδόν να εξαλειφθεί, και μειώνεται σταδιακά με λόγο 2 το Δt . Στον Πίνακα A.II φαίνονται τα αποτελέσματα για όλα τα σχήματα της §6.2 που χρησιμοποιούν για την προσέγγιση των χωρικών παραγώγων το σχήμα WENO5. Στο Σχήμα A.2 φαίνονται τα αποτελέσματα του Πίνακα A.II για τα σχήματα που χρησιμοποιούν το σχήμα OS για την προσέγγιση της Χαμιλτονιανής. Σε κάθε ομάδα δεδομένων προσαρμόζεται καμπύλη με μορφή $c_1 \Delta t^p$. Το συμπέρασμα που προκύπτει είναι ότι η θεωρητική τάξη ακρίβειας της αριθμητικής λύσης ως προς Δt συμπίπτει με την παρατηρούμενη για κάθε σχήμα ολοκλήρωσης ως προς χρόνο.

Από τους Πίνακες A.I και A.II φαίνεται ότι για το παράδειγμα που επιλύθηκε τα αποτελέσματα είναι ίδια, είτε χρησιμοποιηθεί σχήμα OS, είτε σχήμα LLLF για την προσέγγιση της Χαμιλτονιανής της Εξ. (A.3).

Πίνακας A.II Το σφάλμα ($\|u - u_{real}\|_2 / \|u_{real}\|_2$) και η παρατηρούμενη τάξη ακρίβειας της αριθμητικής λύσης του προβλήματος που περιγράφουν οι Εξ. (A.3), (A.7) και (A.9) καθώς μειώνεται το Δt , χρησιμοποιώντας 3 σχήματα για την ολοκλήρωση στο χρόνο (Euler, SSPRK2, SSPRK3). m είναι η θεωρητική τάξη ακρίβειας ως προς Δt . Παράμετροι επίλυσης: υπολογιστικό χωρίο $[0,1] \times [0.1,1.1]$, $a=0.5$, $b=0.4$, $\Delta x=\Delta y=0.00625$, $t=0.25$.

Δt	Euler/OS/WENO5 ($m=1$)		Euler/LLLF/WENO5 ($m=1$)	
	Σφάλμα	Τάξη	Σφάλμα	Τάξη
0.0015625	3.03E-05		3.02E-05	
0.00078125	1.51E-05	1.00	1.51E-05	1.00
0.000390625	7.57E-06	1.00	7.57E-06	1.00
0.0001953125	3.82E-06	0.99	3.82E-06	0.99
Δt	SSPRK2/OS/WENO5 ($m=2$)		SSPRK2/LLLF/WENO5 ($m=2$)	
	Σφάλμα	Τάξη	Σφάλμα	Τάξη
0.0015625	3.43E-08		3.43E-08	
0.00078125	8.07E-09	2.09	8.07E-09	2.09
0.000390625	2.02E-09	2.00	2.02E-09	2.00
0.0001953125	5.04E-10	2.00	5.04E-10	2.00
Δt	SSPRK3/OS/WENO5 ($m=3$)		SSPRK3/LLLF/WENO5 ($m=3$)	
	Σφάλμα	Τάξη	Σφάλμα	Τάξη
0.0015625	5.92E-10		5.92E-10	
0.00078125	4.49E-11	3.72	4.49E-11	3.72
0.000390625	4.35E-12	3.37	4.35E-12	3.37
0.0001953125	5.54E-13	2.97	5.54E-13	2.97



Σχήμα A.2 Το σφάλμα ($\|u - u_{real}\|_2 / \|u_{real}\|_2$) και η παρατηρούμενη τάξη ακρίβειας της αριθμητικής λύσης του προβλήματος που περιγράφουν οι Εξ. (A.3), (A.7) και (A.9) καθώς μειώνεται το Δt , χρησιμοποιώντας 3 αριθμητικά σχήματα για τη χρονική ολοκλήρωση (Euler, SSPRK2, SSPRK3). Για κάθε σχήμα φαίνεται η μέση παρατηρούμενη τάξη ακρίβειας ως προς Δt , p , η οποία προκύπτει από προσαρμογή της αντίστοιχης ομάδας δεδομένων σε καμπύλη με μορφή $c_1 \Delta t^p$. Παράμετροι επίλυσης: υπολογιστικό χωρίο $[0,1] \times [0.1,1.1]$, $a=0.5$, $b=0.4$, $\Delta x=\Delta y=0.00625$, $t=0.25$.

A.5.2 Επαλήθευση κώδικα επίλυσης της εξίσωσης Eikonal

Οι μέθοδοι επίλυσης της εξίσωσης Eikonal περιγράφονται στο Κεφ. 7 και είναι τρεις: α) EIO/Galerkin-ΠΣ/NR (§7.2), β) Godunov/NR (§7.3) και γ) Godunov/TB (§7.4).

A.5.2.1 Επαλήθευση κώδικα της μεθόδου EIO/Galerkin-ΠΣ/NR

Η διαφορική εξίσωση μερικών παραγώγων που επιλύεται με τη μέθοδο EIO/Galerkin-ΠΣ/NR είναι η

$$\left\{ \begin{array}{l} |\nabla u(\mathbf{x})| - \varepsilon \nabla^2 u(\mathbf{x}) = f(\mathbf{x}), f(\mathbf{x}) > 0, \mathbf{x} \in \Omega \\ u(\mathbf{x}) = g(\mathbf{x}), \mathbf{x} \in \Gamma, \Gamma \subset \Omega \end{array} \right\}. \quad (\text{A.10})$$

Ο κώδικας επίλυσης είναι σε γλώσσα προγραμματισμού FORTRAN. Η αριθμητική επίλυση γίνεται σε δύο διαστάσεις, συνεπώς τα μέτρα διακριτοποίησης είναι τα Δx και Δy . Το a priori σφάλμα στην αριθμητική λύση, όταν $\Delta x = \Delta y$ είναι

$$E(\Delta x) = O(\Delta x^n), \quad (\text{A.11})$$

όπου n η θεωρητική τάξη ακρίβειας της αριθμητικής λύσης της Εξ. (A.10), η οποία είναι ίση με $k+1$, όπου k ο βαθμός των πολυωνύμων των συναρτήσεων βάσης [Reddy (1993), σ. 203, Zienkiewicz & Taylor (1994), σ. 37]. Έτσι, είναι $n=2$, όταν χρησιμοποιούνται γραμμικές συναρτήσεις βάσης, και $n=3$, όταν χρησιμοποιούνται διωνυμικές συναρτήσεις βάσης.

Η κατασκευασμένη λύση που προτείνεται είναι η

$$U(x, y) = \sqrt{x} \sin y, \quad (\text{A.12})$$

η οποία ακολουθεί τις οδηγίες της §A.4.3 και αποτελεί τη λύση του προβλήματος της Εξ. (A.10) όταν

$$f(x, y) = \frac{\sqrt{(4x^2 - 1)(\cos y)^2 + 1}}{2\sqrt{x}} + \varepsilon \frac{(4x^2 - 1)\sin y}{4x^{3/2}}, \quad (\text{A.13})$$

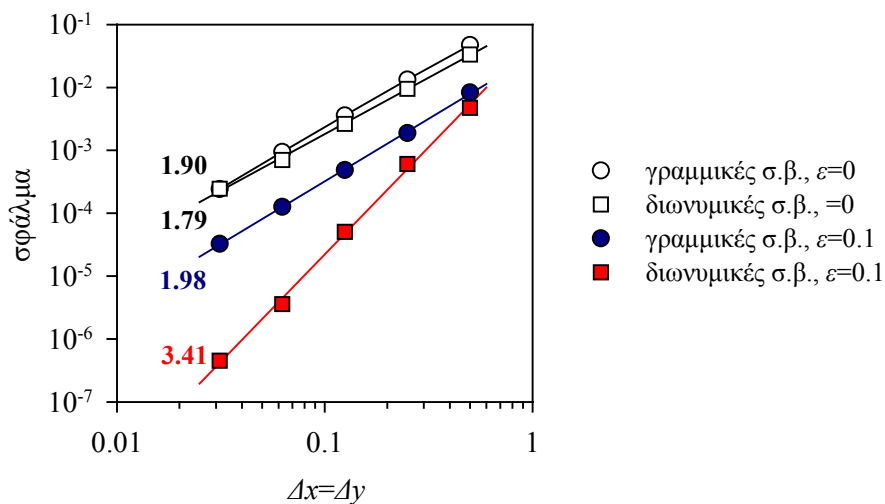
Το χωρίο επίλυσης είναι το $\Omega = [1, 2] \times [2, 3]$ και επιβάλλονται συνοριακές συνθήκες Dirichlet στο $\Gamma = \partial\Omega$, οι οποίες υπολογίζονται από την Εξ. (A.12). Επιλύονται δύο προβλήματα με διαφορετική τιμή της παραμέτρου ε της Εξ. (A.10). Στον Πίνακα A.III φαίνεται η απόκλιση της αριθμητικής λύσης, u , από την πραγματική, u_{real} , [η οποία προκύπτει από την Εξ. (A.12)], καθώς μειώνεται το $\Delta x = \Delta y$. Στον ίδιο πίνακα φαίνεται και η

παρατηρούμενη τάξη ακρίβειας. Στο Σχήμα Α.3 παριστάνονται γραφικά τα αποτελέσματα του Πίνακα Α.ΙΙΙ.

Πίνακας Α.ΙΙΙ Το σφάλμα ($\|\mathbf{u} - \mathbf{u}_{real}\|_2 / \|\mathbf{u}_{real}\|_2$) και η παρατηρούμενη τάξη ακρίβειας της αριθμητικής λύσης του προβλήματος που περιγράφουν οι Εξ. (Α.10) και (Α.13) καθώς μειώνεται το $\Delta x = \Delta y$, χρησιμοποιώντας γραμμικές και διωνυμικές συναρτήσεις βάσης για δύο τιμές της παραμέτρου ε (0 και 0.1). Παράμετροι επίλυσης: υπολογιστικό χωρίο $\Omega = [1,2] \times [2,3]$ και συνοριακές συνθήκες Dirichlet στο $\partial\Omega$ από την Εξ. (Α.12).

$\Delta x = \Delta y$	Γραμμικές συναρτήσεις βάσης ($\varepsilon=0$)		Διωνυμικές συναρτήσεις βάσης ($\varepsilon=0$)	
	Σφάλμα	Τάξη	Σφάλμα	Τάξη
0.5	4.69E-02		3.33E-02	
0.25	1.33E-02	1.82	9.52E-03	1.81
0.125	3.58E-03	1.89	2.64E-03	1.85
0.0625	9.42E-04	1.93	7.02E-04	1.91
0.03125	2.42E-04	1.96	2.45E-04	1.52

$\Delta x = \Delta y$	Γραμμικές συναρτήσεις βάσης ($\varepsilon=0.1$)		Διωνυμικές συναρτήσεις βάσης ($\varepsilon=0.1$)	
	Σφάλμα	Τάξη	Σφάλμα	Τάξη
0.5	8.32E-03		4.76E-03	
0.25	1.87E-03	2.15	6.06E-04	2.97
0.125	4.86E-04	1.95	5.05E-05	3.59
0.0625	1.26E-04	1.94	3.60E-06	3.81
0.03125	3.26E-05	1.96	4.52E-07	2.99



Σχήμα Α.3 Το σφάλμα ($\|\mathbf{u} - \mathbf{u}_{real}\|_2 / \|\mathbf{u}_{real}\|_2$) και η παρατηρούμενη τάξη ακρίβειας της αριθμητικής λύσης του προβλήματος που περιγράφουν οι Εξ. (Α.10) και (Α.13) καθώς μειώνεται το $\Delta x = \Delta y$, για δύο τιμές του συντελεστή ε (0 και 0.1). Χρησιμοποιείται η μέθοδος EIO/Galerkin-ΠΣ/NR, με γραμμικές και διωνυμικές συναρτήσεις βάσης (σ.β). Για κάθε σχήμα φαίνεται η μέση παρατηρούμενη τάξη ακρίβειας ως προς $\Delta x = \Delta y$, p , η οποία προκύπτει από προσαρμογή της αντίστοιχης ομάδας

δεδομένων σε καμπύλη με μορφή $c_1 \Delta x^p$. Παράμετροι επίλυσης: υπολογιστικό χωρίο $\Omega=[1,2] \times [2,3]$ και συνοριακές συνθήκες Dirichlet στο $\partial\Omega$ από την Εξ. (A.12).

Η θεωρητική τάξη ακρίβειας τόσο για τις γραμμικές, όσο και για τις διωνυμικές συναρτήσεις βάσης, επιβεβαιώνεται μόνο για το πρόβλημα όπου $\varepsilon=0.1$. Όταν $\varepsilon=0$, τόσο η προσέγγιση με γραμμικές, όσο και αυτή με διωνυμικές εμφανίζουν την ίδια παρατηρούμενη τάξη ακρίβειας. Για το πρόβλημα με $\varepsilon=0$, η παρατηρούμενη τάξη ακρίβειας συμφωνεί με τη θεωρητική για τις γραμμικές συναρτήσεις βάσης και είναι μικρότερη από τη θεωρητική για τις διωνυμικές συναρτήσεις βάσης.

Λόγω αυτής της ασυμφωνίας θεωρητικής και παρατηρούμενης τάξης ακρίβειας για τις διωνυμικές συναρτήσεις βάσης (για $\varepsilon=0$), δοκιμάζεται μια ακόμη κατασκευασμένη λύση:

$$U(x, y) = e^x \sin y. \quad (\text{A.14})$$

Η παρατηρούμενη τάξης ακρίβειας είναι ίδια είναι αυτή που περιγράφεται στον Πίνακα A.III και στο Σχήμα A.3 και για την κατασκευασμένη λύση της Εξ. (A.14).

Όταν $\varepsilon=0$, το πρόβλημα που περιγράφει η Εξ. (A.10) είναι υπερβολικό (§5.6) με πρώτης τάξης μερικές παραγώγους. Οι Strang και Fix εξηγούν τη μείωση της θεωρητικής τάξης ακρίβειας για υπερβολικά προβλήματα πρώτης τάξης [Strang & Fix (1973), σ. 255]. Αναφέρουν ότι η θεωρητική τάξη ακρίβειας είναι $n=k$ (k ο βαθμός των πολυωνύμων των συναρτήσεων βάσης) και ότι οι γραμμικές συναρτήσεις βάσης αποτελούν εξαίρεση, υπό την έννοια ότι για αυτές εξακολουθεί να ισχύει ότι η θεωρητική τάξη είναι $n=k+1$. Συνεπώς, τα αποτελέσματα του Πίνακα A.III επαληθεύουν τον κώδικα επίλυσης της Εξ. (A.10) με τη μέθοδο EIO/Galerkin-ΠΣ/NR.

Στα προβλήματα που αντιμετωπίζονται στην §7.2 με τη μέθοδο EIO/Galerkin-ΠΣ/NR, αναζητείται λύση της Εξ. (A.10) καθώς $\varepsilon \rightarrow 0$. Συνεπώς πρακτικά, η θεωρητική τάξη ακρίβειας για αυτά τα προβλήματα είναι $n=2$, είτε χρησιμοποιούνται γραμμικές, είτε χρησιμοποιούνται διωνυμικές συναρτήσεις βάσης.

A.5.2.2 Επαλήθευση κώδικα της μεθόδου Godunov/NR

Η διαφορική εξίσωση μερικών παραγώγων που επιλύεται με τη μέθοδο Godunov/NR είναι η

$$\left\{ \begin{array}{l} |\nabla u(\mathbf{x})| = f(\mathbf{x}), f(\mathbf{x}) > 0, \mathbf{x} \in \Omega \\ u(\mathbf{x}) = g(\mathbf{x}), \mathbf{x} \in \Gamma, \Gamma \subset \Omega \end{array} \right\}. \quad (\text{A.15})$$

Ο κώδικας επίλυσης είναι σε γλώσσα προγραμματισμού C++. Η αριθμητική επίλυση γίνεται σε δύο διαστάσεις, συνεπώς τα μέτρα διακριτοποίησης είναι τα Δx και Δy . Το a priori σφάλμα στην αριθμητική λύση, όταν $\Delta x = \Delta y$ είναι

$$E(\Delta x) = O(\Delta x^n), \quad (\text{A.16})$$

όπου n η θεωρητική τάξη ακρίβειας της αριθμητικής λύσης της Εξ. (A.15), η οποία είναι ίση με την τάξη προσέγγισης της μερικής παραγώγου ως προς x (y). Για το αριθμητικό σχήμα που χρησιμοποιείται [Εξ. (6.17) και Εξ. (6.13) – (6.16)] είναι $n=1$.

Η κατασκευασμένη λύση που προτείνεται είναι η ίδια με αυτή που χρησιμοποιείται για την επαλήθευση του κώδικα της μεθόδου EIO/Galerkin-ΠΣ/NR,

$$U(x, y) = \sqrt{x} \sin(y), \quad (\text{A.17})$$

η οποία ακολουθεί τις οδηγίες της §A.4.3 και αποτελεί τη λύση του προβλήματος της Εξ. (A.15) όταν

$$f(x, y) = \frac{\sqrt{(4x^2 - 1)(\cos y)^2 + 1}}{2\sqrt{x}}, \quad (\text{A.18})$$

Το χωρίο επίλυσης είναι το $\Omega = [1,2] \times [2,3]$ και επιβάλλονται συνοριακές συνθήκες Dirichlet στο $\Gamma = \partial\Omega$, οι οποίες υπολογίζονται από την Εξ. (A.17). Στον Πίνακα A.IV φαίνεται η απόκλιση της αριθμητικής λύσης, u , από την πραγματική, u_{real} , της Εξ. (A.15), καθώς μειώνεται το $\Delta x = \Delta y$. Στον ίδιο πίνακα φαίνεται και η παρατηρούμενη τάξη ακρίβειας, η οποία τείνει προς την θεωρητική καθώς μειώνεται το $\Delta x = \Delta y$.

Πίνακας A.IV Το σφάλμα ($\|u - u_{real}\|_2 / \|u_{real}\|_2$) και η παρατηρούμενη τάξη ακρίβειας της αριθμητικής λύσης του προβλήματος που περιγράφουν οι Εξ. (A.15) και (A.18) καθώς μειώνεται το $\Delta x = \Delta y$. Χρησιμοποιείται η μέθοδος Godunov/NR με αριθμητικό σχήμα που περιγράφουν [Εξ. (7.18) και Εξ. (7.14) – (7.17)]. Παράμετροι επίλυσης: υπολογιστικό χωρίο $\Omega = [1,2] \times [2,3]$ και συνοριακές συνθήκες Dirichlet στο $\partial\Omega$ από την Εξ. (A.17).

$\Delta x = \Delta y$	Σφάλμα	Τάξη
0.5	2.58E-02	
0.25	2.74E-02	-0.09
0.125	1.91E-02	0.52
0.0625	1.12E-02	0.77
0.03125	6.09E-03	0.88
0.015625	3.17E-03	0.94
0.0078125	1.62E-03	0.97
0.00390625	8.17E-04	0.99

A.5.2.3 Επαλήθευση κώδικα της μεθόδου Godunov/TB

Η διαφορική εξίσωση μερικών παραγώγων που επιλύεται με τη μέθοδο Godunov/TB είναι η Εξ. (A.15) με δεύτερο μέλος όπως δίδεται από την Εξ. (A.18). Η κατασκευασμένη λύση είναι αυτή που χρησιμοποιείται και στις δύο άλλες προσεγγίσεις επίλυσης της εξίσωσης Eikonal (EIO/Galerkin-ΠΣ/NR και Godunov/NR). Ο κώδικας επίλυσης είναι σε γλώσσα προγραμματισμού C++.

Το σχήμα Godunov που χρησιμοποιείται στη μέθοδο Godunov/TB είναι 1^{ης} τάξης και περιγράφεται από τις Εξ. (7.18) και (7.14) – (7.17). Στον Πίνακα A.V φαίνεται η απόκλιση της αριθμητικής λύσης, u , από την πραγματική, u_{real} , της Εξ. (A.15), καθώς μειώνεται το $\Delta x = \Delta y$. Στον ίδιο πίνακα φαίνεται και η παρατηρούμενη τάξη ακρίβειας, η οποία τείνει προς την θεωρητική καθώς μειώνεται το $\Delta x = \Delta y$. Τα αποτελέσματα είναι ακριβώς ίδια με τον Πίνακα A.IV, αφού χρησιμοποιείται το ίδιο αριθμητικό σχήμα. Αυτό που αλλάζει στις δύο μεθόδους είναι ο τρόπος επίλυσης: με τη μέθοδο Godunov/NR (§7.3), η εξίσωση Eikonal επιλύεται επαναληπτικά, ενώ με τη μέθοδο Godunov/TB (§7.4), επιλύεται χωρίς επαναληπτική διαδικασία. Ο μόνος πιθανός λόγος για να υπάρχει διαφορά στα αποτελέσματα των δύο μεθόδων είναι να είναι σημαντικά τα σφάλματα στρογγυλοποίησης με τη μέθοδο Godunov/NR. Από τον Πίνακα A.V, φαίνεται ότι τα σφάλματα στρογγυλοποίησης όταν η μέθοδος Godunov/NR χρησιμοποιείται δεν είναι σημαντικά.

Πίνακας A.V Το σφάλμα ($\|u - u_{real}\|_2 / \|u_{real}\|_2$) και η παρατηρούμενη τάξη ακρίβειας της αριθμητικής λύσης του προβλήματος που περιγράφουν οι Εξ. (A.15) και (A.18) καθώς μειώνεται το $\Delta x = \Delta y$. Χρησιμοποιείται η μέθοδος Godunov/TB και πιο συγκεκριμένα το αριθμητικό σχήμα που περιγράφουν οι Εξ. (7.18) και (7.14) – (7.17) που είναι 1^{ης} τάξης. Παράμετροι επίλυσης: υπολογιστικό χωρίο $\Omega = [1,2] \times [2,3]$ και συνοριακές συνθήκες Dirichlet στο $\partial\Omega$ από την Εξ. (A.17).

$\Delta x = \Delta y$	Σφάλμα	Τάξη
0.5	2.58E-02	
0.25	2.74E-02	-0.09
0.125	1.91E-02	0.52
0.0625	1.12E-02	0.77
0.03125	6.09E-03	0.88
0.015625	3.17E-03	0.94
0.0078125	1.62E-03	0.97
0.00390625	8.17E-04	0.99

A.5.3 Επαλήθευση κώδικα επίλυσης της εξίσωσης προεκβολής της ταχύτητας του συνόρου

Η διαφορική εξίσωση μερικών παραγώγων που επιλύεται είναι η

$$\left\{ \begin{array}{l} \nabla u(\mathbf{x}) \cdot \nabla F(\mathbf{x}) = 0, \mathbf{x} \in \Omega \\ F(\mathbf{x}) = F_{mb}(\mathbf{x}), \mathbf{x} \in \Gamma, \Gamma \subset \Omega \end{array} \right\}, \quad (\text{A.19})$$

όπου u είναι η συνάρτηση ισοϋψών, F_{mb} είναι η ταχύτητα του συνόρου Γ και F είναι η προεκβολή της ταχύτητας του συνόρου Γ στο υπολογιστικό χωρίο Ω .

Ο κώδικας επίλυσης είναι σε γλώσσα προγραμματισμού C++. Η αριθμητική επίλυση γίνεται σε δύο διαστάσεις, συνεπώς τα μέτρα διακριτοποίησης είναι τα Δx και Δy . Το a priori σφάλμα στην αριθμητική λύση, όταν $\Delta x = \Delta y$ είναι

$$E(\Delta x) = O(\Delta x^n), \quad (\text{A.20})$$

όπου n η θεωρητική τάξη ακρίβειας της αριθμητικής λύσης της Εξ. (A.19), η οποία είναι ίση με την τάξη προσέγγισης των μερικών παραγώγων ως προς x (y). Για την επίλυση χρησιμοποιείται η μέθοδος ταχυ-βηματισμού (§8.3) με αριθμητικό σχήμα διακριτοποίησης αυτό των Εξ. (7.18) και Εξ. (7.14) – (7.17). Επομένως είναι $n=1$.

Πίνακας A.VI Το σφάλμα ($\|F - F_{real}\|_2 / \|F_{real}\|_2$) και η παρατηρούμενη τάξη ακρίβειας της αριθμητικής λύσης του προβλήματος που περιγράφουν οι Εξ. (A.19) και (A.22) καθώς μειώνεται το $\Delta x = \Delta y$. Χρησιμοποιείται η μέθοδος Godunov/NR με αριθμητικό σχήμα που περιγράφουν [Εξ. (7.18) και Εξ. (7.14) – (7.17)]. Παράμετροι επίλυσης: υπολογιστικό χωρίο $\Omega = [1,2] \times [0,1]$ και συνοριακές συνθήκες Dirichlet στο $\partial\Omega$ από την Εξ. (A.21).

$\Delta x = \Delta y$	Σφάλμα	Τάξη
0.0625	3.89E-03	
0.03125	2.80E-03	0.48
0.015625	1.67E-03	0.75
0.0078125	9.13E-04	0.87
0.00390625	4.79E-04	0.93
0.001953125	2.46E-04	0.96

Η κατασκευασμένη λύση που προτείνεται είναι η,

$$F(x, y) = e^x \cos y, \quad (\text{A.21})$$

η οποία ακολουθεί τις οδηγίες της §A.4.3 και αποτελεί τη λύση του προβλήματος της Εξ. (A.19) όταν η συνάρτηση ισοϋψών είναι

$$u(x, y) = e^x \sin y. \quad (\text{A.22})$$

Το χωρίο επίλυσης είναι το $\Omega = [1,2] \times [0,1]$ και επιβάλλονται συνοριακές συνθήκες Dirichlet στο $\Gamma = \partial\Omega$, οι οποίες υπολογίζονται από την Εξ. (A.21). Στον Πίνακα A.VI φαίνεται

η απόκλιση της αριθμητικής λύσης, F , από την πραγματική, F_{real} , της Εξ. (A.19), καθώς μειώνεται το $\Delta x = \Delta y$. Στον ίδιο πίνακα φαίνεται και η παρατηρούμενη τάξη ακρίβειας, η οποία τείνει προς την θεωρητική καθώς μειώνεται το $\Delta x = \Delta y$.

A.5.4 Επαλήθευση κώδικα επίλυσης της ολοκληρωτικής εξίσωσης Fredholm 2^{ου} είδους

Η ολοκληρωτική εξίσωση που επιλύεται με τις μεθόδους Nystrom και ταξιθεσίας είναι η

$$u(s) = h(s) + \lambda \int_a^b K(s', s)u(s')ds' \quad (\text{A.23})$$

και χρησιμοποιείται για τον υπολογισμό της τοπικής ροής στο εσωτερικό δομών (Κεφ. 2). Ο κώδικας επίλυσης είναι σε γλώσσα προγραμματισμού C++.

Στη μέθοδο ταξιθεσίας χρησιμοποιούνται γραμμικές συναρτήσεις βάσης και η θεωρητική τάξη ακρίβειας είναι $n=2$ [Kress (1989), σ. 191].

Ο κανόνας ολοκλήρωσης που χρησιμοποιείται στη μέθοδο Nystrom είναι η μέθοδος Gauss και για αυτό δεν υπάρχει απλός τρόπος για την εκτίμηση του σφάλματος [Press et al. (1997), σ. 793] και συνεπώς για τον υπολογισμό της θεωρητικής τάξης ακρίβειας. Επομένως, για την επαλήθευση του σχετικού κώδικα, δεν μπορεί να χρησιμοποιηθεί το μέτρο ελέγχου συμφωνίας παρατηρούμενης και θεωρητικής τάξης ακρίβειας της αριθμητικής λύσης.

Ωστόσο, η μέθοδος ολοκλήρωσης Gauss είναι απόλυτα ακριβής όταν η προς ολοκλήρωση συνάρτηση είναι πολυώνυμο βαθμού $2N - 1$, όπου N είναι το πλήθος των σημείων Gauss. Έτσι, αν το γινόμενο $K(s', s)u(s')$ είναι πολυώνυμο k βαθμού, τότε αρκούν $(k+1)/2$ σημεία Gauss για να είναι απόλυτα η μέθοδος ολοκλήρωσης Gauss και συνεπώς η μέθοδος Nystrom. Στη συνέχεια εξετάζεται, σε τρία παραδείγματα, αν στην πράξη αρκούν $(k+1)/2$ σημεία Gauss για να είναι η μέθοδος Nystrom απόλυτα ακριβής και υπολογίζεται η παρατηρούμενη τάξη ακρίβειας για τη μέθοδο ταξιθεσίας (με γραμμικές συναρτήσεις βάσης).

A) Έστω $K(s', s) = s + s'$, $u(s') = (s' - 2)^2 + 1$, $a=0$ και $b=4$. Είναι

$$K(s', s)u(s') = s'^3 + s'^2(s - 4) + s'(5 - 4s) + 5s, \quad (\text{A.24})$$

δηλαδή πολυώνυμο 3^{ου} βαθμού. Η $u(s)$ είναι λύση της Εξ (A.23) όταν

$$h(s) = \frac{3s^2 + 4s(7\lambda + 3) - 56\lambda + 15}{3}. \quad (\text{A.25})$$

Το γινόμενο $K(s',s)u(s')$ είναι πολυώνυμο 3^{00} βαθμού, επομένως για $\geq 2=(3+1)/2$ σημεία Gauss, η μέθοδος Nystrom θα πρέπει να είναι απόλυτα ακριβής.

Β) Έστω $K(s',s) = s + s'^3$, $u(s') = (s' - 2)^2 + 1$, $a=0$ και $b=4$. Είναι

$$K(s',s)u(s') = s'^5 - 4s'^4 + 5s'^3 + ss'^2 - 4ss'^2 + 5s, \quad (\text{A.26})$$

δηλαδή πολυώνυμο 5^{00} βαθμού. Η $u(s)$ είναι λύση της Εξ (A.23) όταν

$$h(s) = \frac{15s^2 - 20s(7\lambda + 3) - 2752\lambda + 75}{15}. \quad (\text{A.27})$$

Το γινόμενο $K(s',s)u(s')$ είναι πολυώνυμο 5^{00} βαθμού, επομένως για $\geq 3=(5+1)/2$ σημεία Gauss, η μέθοδος Nystrom θα πρέπει να είναι απόλυτα ακριβής.

Γ) Έστω $K(s',s) = s + s'^3$, $u(s') = \begin{cases} (s' - 2)^2 + 1, & 0 \leq s < \frac{3}{2} \\ 2, & \frac{3}{2} < s < \frac{5}{2} \\ (s' - 2)^2 + 1, & \frac{5}{2} < s \leq 4 \end{cases}$, $a=0$ και $b=4$. Είναι

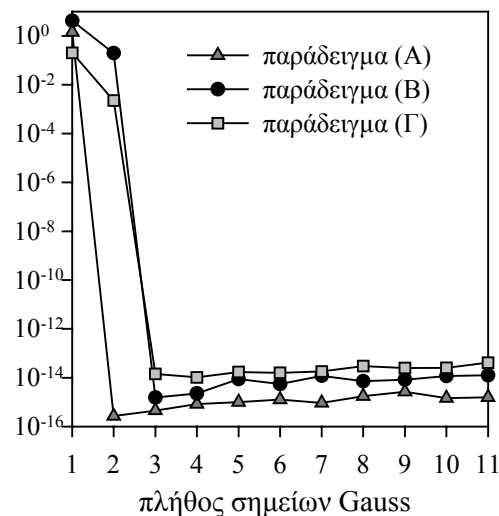
$$K(s,s')u(s') = \begin{cases} s'^5 - 4s'^4 + 5s'^3 + ss'^2 - 4ss'^2 + 5s, & 0 \leq s \leq \frac{3}{2} \\ 2s'^3 + 2s, & \frac{3}{2} < s < \frac{5}{2} \\ s'^5 - 4s'^4 + 5s'^3 + ss'^2 - 4ss'^2 + 5s, & \frac{5}{2} \leq s \leq 4 \end{cases}, \quad (\text{A.28})$$

δηλαδή πολυώνυμο 3^{00} βαθμού σε ένα διάστημα και 5^{00} στο υπόλοιπο. Η $u(s)$ είναι λύση της Εξ (A.23) όταν

$$h(s) = \begin{cases} \frac{40s^2 - 10s(41\lambda + 16) - 7649\lambda + 200}{40}, & 0 \leq s \leq \frac{3}{2} \\ -\frac{410\lambda s + 7649\lambda - 80}{40}, & \frac{3}{2} < s < \frac{5}{2} \\ \frac{40s^2 - 10s(41\lambda + 16) - 7649\lambda + 200}{40}, & \frac{5}{2} \leq s \leq 4 \end{cases} \quad (\text{A.29})$$

Το γινόμενο $K(s',s)u(s')$ είναι πολώνυμο $3^{ου}$ βαθμού σε ένα διάστημα και $5^{ου}$ στο υπόλοιπο, επομένως για $\geq 3=(5+1)/2$ σημεία Gauss, η μέθοδος Nystrom θα πρέπει να είναι απόλυτα ακριβής. Σημειώνεται ότι αυτή την περίπτωση η λύση δεν είναι συνεχής.

Στο Σχήμα A.4 φαίνεται το σφάλμα της αριθμητικής λύσης χρησιμοποιώντας τη μέθοδο Nystrom, όταν $\lambda=1$ για κάθε ένα από τα παραδείγματα συναρτήσεως του πλήθους σημείων Gauss. Για ≥ 2 [παράδειγμα (A)], για ≥ 3 [παράδειγμα (B)] και ≥ 3 σημεία Gauss [παράδειγμα (Γ)], η μέθοδος Nystrom είναι πράγματι απόλυτα ακριβής.



Σχήμα A.4 Το σφάλμα ($\|u - u_{real}\|_2 / \|u_{real}\|_2$) της αριθμητικής λύσης του προβλήματος που περιγράφει η Εξ. (A.23) καθώς αυξάνεται το πλήθος των σημείων Gauss, όταν χρησιμοποιείται η μέθοδος Nystrom (με κανόνα ολοκλήρωσης Gauss) για τα τρία παραδείγματα που περιγράφονται παραπάνω.

Πίνακας A.VII Το σφάλμα ($\|u - u_{real}\|_2 / \|u_{real}\|_2$) και η παρατηρούμενη τάξη ακρίβειας της αριθμητικής λύσης του προβλήματος που περιγράφει η Εξ. (A.23) καθώς μειώνεται το Δs , όταν χρησιμοποιείται η μέθοδος ταξιθεσίας (με γραμμικές συναρτήσεις βάσης) για τα τρία παραδείγματα που περιγράφονται παραπάνω.

Δs	παράδειγμα (A)		παράδειγμα (B)		παράδειγμα (Γ)	
	Σφάλμα	Τάξη	Σφάλμα	Τάξη	Σφάλμα	Τάξη
0.5	1.42E-02		1.37E-02		2.20E-02	
0.25	3.81E-03	1.90	3.69E-03	1.90	1.35E-02	0.70
0.125	9.89E-04	1.95	9.57E-04	1.94	7.52E-03	0.85
0.0625	2.52E-04	1.97	2.44E-04	1.97	3.97E-03	0.92
0.03125	6.37E-05	1.99	6.16E-05	1.99	2.04E-03	0.96
0.015625	1.60E-05	1.99	1.55E-05	1.99	1.03E-03	0.98
0.0078125	4.01E-06	2.00	3.88E-06	2.00	5.20E-04	0.99
0.00390625	1.00E-06	2.00	9.72E-07	2.00	2.61E-04	1.00

Στον Πίνακα A.VII φαίνεται το σφάλμα και η παρατηρούμενη τάξη ακρίβειας της αριθμητικής λύσης της Εξ. (A.23) καθώς μειώνεται το Δs , όταν $\lambda=1$ χρησιμοποιώντας τη μέθοδο ταξιθεσίας (με γραμμικές συναρτήσεις βάσης). Στα δύο παραδείγματα [(A) και (B)] η παρατηρούμενη τάξη ακρίβειας συμφωνεί με τη θεωρητική. Στο παράδειγμα (Γ) η παρατηρούμενη τάξη ακρίβειας είναι μικρότερη από τη θεωρητική διότι η λύση δεν είναι συνεχής.

A.6 Αξιολόγηση

Η επαλήθευση κώδικα είναι αναγκαία ειδικά σε σύνθετα προβλήματα και αρχικά απαιτεί την ανάλυση του προβλήματος σε επιμέρους. Για παράδειγμα, κατά την προσομοίωση εξέλιξης τοπογραφίας δομών με εγχάραξη σε αντιδραστήρα πλάσματος, το πρόβλημα μπορεί να αναλυθεί καταρχήν σε τρία υπο-προβλήματα, τη μεταφορά μάζας μέσα σε δομές, τις επιφανειακές διεργασίες και τη μετακίνηση της εγχαρασσομένης επιφάνειας. Ακολουθεί ανάλυση του μαθηματικού μοντέλου κάθε υπο-προβλήματος. Για παράδειγμα, η μετακίνηση συνόρου με τη μέθοδο των ισοϋψών περικλείει 4 διαφορετικά αριθμητικά προβλήματα [εξίσωση ισοϋψών (Κεφ. 6), εξίσωση Eikonal (Κεφ. 7), εύρεση ισοϋψούς (Κεφ. 8), προεκβολή ταχύτητας συνόρου (Κεφ. 9)]. Η επαλήθευση κώδικα πρέπει να γίνει για κάθε αριθμητικό πρόβλημα χωριστά.

Στην εργασία γίνεται επαλήθευση του κώδικα για κάθε αριθμητικό πρόβλημα (υπολογιστικά προβλήματα μεθόδου ισοϋψών, πρόβλημα υπολογισμού τοπικής ροής στο εσωτερικό δομής). Η επαλήθευση για όλα τα προβλήματα εκτός από αυτό της εύρεσης ισοϋψούς συνάρτησης περιέχεται στην §A.5. Η επαλήθευση για το πρόβλημα υπολογισμού της ισοϋψούς βρίσκεται στο Παράρτημα Δ, όπου και περιγράφονται τα ζεύγη μεθόδων Runge-Kutta που χρησιμοποιούνται.

Η επαλήθευση κώδικα είναι το πρώτο βήμα στη διαδικασία ποσοτικοποίησης της αβεβαιότητας των υπολογισμών. Ακολουθούν και οφείλουν να γίνουν η επαλήθευση υπολογισμών και η EMM με το ίδιο συστηματική μεθοδολογία. Στην παρούσα φάση, η επαλήθευση υπολογισμών γίνεται διαπιστώνοντας ότι περαιτέρω μείωση των μέτρων διακριτοποίησης δεν διαφοροποιεί την αριθμητική λύση. Η EMM γίνεται με σύγκριση των αποτελεσμάτων του κώδικα με πειραματικές μετρήσεις.

Τέλος, ο στόχος για την EYM είναι οι αριθμητικοί υπολογισμοί να γίνουν «φορέας» φυσικής πληροφορίας που δεν θα την «αλλοιώνει», ή ακόμη κι αν αυτό συμβαίνει να είναι γνωστή η «αλλοίωση» που προκαλεί. Αφού ολοκληρωθεί η EYM, με την EMM είναι δυνατό να γίνει συστηματική αξιολόγηση των επιλεγμένων μαθηματικών μοντέλων.

Παράρτημα Β

Βασικές έννοιες αριθμητικών σχημάτων

Η έννοια του σφάλματος είναι αναπόσπαστη κάθε αριθμητικού υπολογισμού. Στις επόμενες παραγράφους περιγράφονται βασικές έννοιες της αριθμητικής ανάλυσης που σχετίζονται με το σφάλμα, όπως η συνέπεια, η ευστάθεια και η σύγκλιση αριθμητικού σχήματος. Διαχωρίζεται η έννοια του σφάλματος αποκοπής από το σφάλμα της αριθμητικής λύσης (σφάλμα διακριτοποίησης) και σημειώνεται η σιωπηρή συσχέτιση των δύο αυτών σφαλμάτων. Η θεωρητική και παρατηρούμενη τάξη ακρίβειας της αριθμητικής λύσης αποτελούν έννοιες χρήσιμες στην επαλήθευση κώδικα (Παράρτημα Α). Μέσα από παραδείγματα περιγράφεται ο τρόπος υπολογισμού της θεωρητικής τάξης ακρίβειας αριθμητικής λύσης.

B.1 Βασικές ιδιότητες αριθμητικών σχημάτων

Για την αριθμητική επίλυση μιας διαφορικής εξίσωσης μερικών παραγώγων (ΔΕΜΠ) με τη μέθοδο των πεπερασμένων διαφορών, απαιτείται η ανάπτυξη κατάλληλου αριθμητικού σχήματος που μετατρέπει τη ΔΕΜΠ σε εξίσωση πεπερασμένων διαφορών (ΕΠΔ). Οι τρεις βασικές ιδιότητες των σχημάτων πεπερασμένων διαφορών⁹¹ είναι [Μαρκάτος & Ασημακόπουλος (1995), σ. 45-49]:

α) Συνέπεια (consistency): Ένα σχήμα πεπερασμένων διαφορών είναι συνεπές με τη ΔΕΜΠ όταν

$$\lim_{h_i \rightarrow 0} (\Delta EΜΠ - EΠΔ) = 0, \quad (B.1)$$

όπου h_i τα μέτρα διακριτοποίησης (π.χ. Δx , Δt).

β) Ευστάθεια (stability): Ένα σχήμα πεπερασμένων διαφορών είναι ευσταθές όταν τα σφάλματα οποιασδήποτε προέλευσης δεν αυξάνουν κατά τη διάρκεια μιας ακολουθίας αριθμητικών υπολογισμών. Σε ένα ασταθές σχήμα τα σφάλματα που προκύπτουν σε κάποιο στάδιο της μεθόδου αυξάνονται ανεξέλεγκτα και οδηγούν είτε σε μη ρεαλιστικά αποτελέσματα, είτε στη δημιουργία αριθμών έξω από τα όρια του υπολογιστή (overflow errors). Ένα σχήμα που παρουσιάζει ευστάθεια για κάθε τιμή των μέτρων διακριτοποίησης (π.χ. Δx , Δt) ονομάζεται ευσταθές άνευ όρων. Αν το σχήμα δεν είναι ευσταθές άνευ όρων, τότε ενδιαφέρει η ανεύρεση των συνθηκών εκείνων που πρέπει να πληρούν τα μέτρα διακριτοποίησης (π.χ. Δx , Δt) ώστε το σχήμα να είναι ευσταθές.

γ) Σύγκλιση: Ένα σχήμα πεπερασμένων διαφορών συγκλίνει όταν η ακολουθία των αριθμητικών λύσεων που προκύπτουν για συνεχώς μειούμενα μέτρα διακριτοποίησης (π.χ. Δx , Δt) τείνει στην πραγματική λύση της εξίσωσης μερικών παραγώγων.

Δεν πρέπει να συγχέεται η συνέπεια με τη σύγκλιση, καθώς η πρώτη εξετάζει τη σχέση μεταξύ εξισώσεων (ΔΕΜΠ και ΕΠΔ), ενώ η δεύτερη εξετάζει τη σχέση μεταξύ των λύσεων.

Η σχέση μεταξύ συνέπειας, ευστάθειας και σύγκλισης εκφράζεται με το *θεώρημα του Lax*: «*Η ευστάθεια αποτελεί την ικανή και αναγκαία συνθήκη για τη σύγκλιση ενός συνεπούς αριθμητικού σχήματος*».

Αν και το θεώρημα του Lax αποδεικνύεται για καλώς τοποθετημένα γραμμικά προβλήματα ΔΕΜΠ, μπορεί να θεωρηθεί σαν ένας εμπειρικός κανόνας ακόμη και για μη γραμμικά προβλήματα [Oberkampf & Trucano (2002)].

⁹¹ και κατ' αντιστοιχία κάθε είδους αριθμητικού σχήματος (π.χ. πεπερασμένων στοιχείων).

B.2 Τάξη ακρίβειας προσέγγισης συνάρτησης

Έστω συνάρτηση $f(h)$ που προσεγγίζεται από τη συνάρτηση $p(h)$ και ότι υπάρχει μια πραγματική σταθερά $M > 0$ και ένας θετικός ακέραιος n τέτοιος ώστε

$$\frac{|f(h) - p(h)|}{|h^n|} \leq M \quad (\text{B.2})$$

για αρκετά μικρό h . Τότε γράφουμε [Παπαγεωργίου & Τσίτουρας (2000), σ. 83-84]

$$f(h) = p(h) + O(h^n) \quad (\text{B.3})$$

και λέμε ότι η $p(h)$ προσεγγίζει την $f(h)$ με τάξη προσέγγισης $O(h^n)$, ή με τάξη ακρίβειας n . Η ποσότητα $M|h^n|$ αποτελεί φράγμα του σφάλματος.

Για την τάξη προσέγγισης ισχύουν οι παρακάτω ιδιότητες:

$$O(h^m) + O(h^n) = O(h^r), \quad r = \min\{m, n\} \quad \text{και} \quad (\text{B.4})$$

$$O(h^m) O(h^n) = O(h^s), \quad s = m + n. \quad (\text{B.5})$$

B.3 Είδη σφαλμάτων

Ο όρος σφάλμα (error) χρησιμοποιείται στο πλαίσιο αριθμητικών υπολογισμών για να δηλώσει απόκλιση ή διαφορά τιμών. Διαχωρίζεται από τον όρο λάθος (mistake) ο οποίος δηλώνει λάθη κωδικοποίησης (Παράρτημα Α). Το σφάλμα μπορεί να είναι αποκοπής, στρογγυλοποίησης ή διακριτοποίησης.

B.3.1 Σφάλμα αποκοπής

Γενικά, το σφάλμα αποκοπής (truncation error) μπορεί να προσδιοριστεί με τη βοήθεια της σειράς και του πολυωνύμου Taylor. Έστω συνάρτηση $f(x) \in C^\infty$ στο $[a, b]$ αναλυτική στο σημείο $x_0 \in [a, b]$,³¹ δηλαδή

$$f(x_0 + h) = f(x_0) + hf'(x_0) + \frac{h^2}{2!} f''(x_0) + \dots + \frac{h^p}{p!} f^{(p)}(x_0) + \dots \quad (\text{B.6})$$

³¹ μια συνάρτηση $f(x)$ λέγεται αναλυτική στο x_0 , όταν η αντίστοιχη σειρά Taylor συγκλίνει στην f στη γειτονιά του x_0 .

Το πολυώνυμο Taylor βαθμού $n - 1$ που προσεγγίζει την f γύρω από το σημείο x_0 είναι

$$T_{n-1}(x_0 + h) = f(x_0) + hf'(x_0) + \frac{h^2}{2!} f''(x_0) + \dots + \frac{h^{n-1}}{(n-1)!} f^{(n-1)}(x_0). \quad (\text{B.7})$$

Η Εξ. (B.6) είναι το μαθηματικό, ενώ η Εξ. (B.7) το προσεγγιστικό μοντέλο. Το σφάλμα αποκοπής είναι

$$\tau(h) = T_{n-1}(x_0 + h) - f(x_0 + h) = - \sum_{i=n}^{\infty} \frac{h^i}{i!} f^{(i)}(x_0), \quad (\text{B.8})$$

ή

$$\tau(h) = Ch^n + OAT, \quad (\text{B.9})$$

όπου OAT οι όροι ανώτερης τάξης.

Αν το h είναι αρκετά μικρό, στην Εξ. (B.9) κυριαρχεί ο όρος Ch^n , δηλαδή το σφάλμα αποκοπής μπορεί να προσεγγιστεί ως

$$\tau(h) \approx Ch^n, \quad (\text{B.10})$$

δηλαδή

$$\tau(h) = O(h^n). \quad (\text{B.11})$$

Στα αριθμητικά σχήματα πεπερασμένων διαφορών, η μεταβλητή h είναι το μέτρο της διακριτοποίησης (π.χ. Δt , Δx), και το σφάλμα αποκοπής αφορά είτε την προσέγγιση μερικών παραγώγων, είτε τη διαφορά της ΔΕΜΠ με την ΕΠΔ.

Για την προσέγγιση μερικών παραγώγων με πεπερασμένες διαφορές χρησιμοποιούνται δύο ισοδύναμες μέθοδοι: πολυώνυμο παρεμβολής ή ανάπτυξη σε σειρά Taylor. Χρησιμοποιώντας ανάπτυξη σε σειρά Taylor μπορούν να προκύψουν προσεγγιστικές εκφράσεις για οποιαδήποτε παράγωγο οποιαδήποτε τάξης ακρίβειας. Για παράδειγμα, η προσέγγιση πρώτης παραγώγου συνάρτησης $u(x,t)$ ως προς x με ανάντη (προς τα πίσω) διαφορές και τάξη προσέγγισης $O(\Delta x^2)$ στο σημείο $(i\Delta x, n\Delta t)$ ³¹ υπολογίζεται παρακάτω.

Είναι:

³¹ Οι μεταβλητές i και n στη συνέχεια της παραγράφου εκφράζουν τη θέση και τη χρονική στιγμή αντίστοιχα και δεν είναι ίδιες με τις μεταβλητές των Εξ. (B.7) – (B.11).

$$u_{i-1}^n = u_i^n - \left(\frac{\partial u}{\partial x}\right)_i^n \Delta x + \left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}\right)_i^n \frac{\Delta x^2}{2!} - \left(\frac{\partial^3 u}{\partial x^3}\right)_i^n \frac{\Delta x^3}{3!} + OAT \quad (B.12)$$

και

$$u_{i-2}^n = u_i^n - \left(\frac{\partial u}{\partial x}\right)_i^n 2\Delta x + \left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}\right)_i^n \frac{(2\Delta x)^2}{2!} - \left(\frac{\partial^3 u}{\partial x^3}\right)_i^n \frac{(2\Delta x)^3}{3!} + OAT. \quad (B.13)$$

Από τις Εξ. (B.12) και (B.13) προκύπτει ότι

$$\begin{aligned} 4u_{i-1}^n - u_{i-2}^n &= (4u_i^n - u_i^n) - \left[4\left(\frac{\partial u}{\partial x}\right)_i^n \Delta x - \left(\frac{\partial u}{\partial x}\right)_i^n 2\Delta x \right] + \\ &+ \left[4\left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}\right)_i^n \frac{\Delta x^2}{2!} - \left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}\right)_i^n \frac{(2\Delta x)^2}{2!} \right] - \\ &- \left[4\left(\frac{\partial^3 u}{\partial x^3}\right)_i^n \frac{\Delta x^3}{3!} - \left(\frac{\partial^3 u}{\partial x^3}\right)_i^n \frac{(2\Delta x)^3}{3!} \right] + OAT \quad (B.14) \end{aligned}$$

ή

$$\begin{aligned} 4u_{i-1}^n - u_{i-2}^n &= 3u_i^n - 2\left(\frac{\partial u}{\partial x}\right)_i^n \Delta x + 4\left(\frac{\partial^3 u}{\partial x^3}\right)_i^n \frac{\Delta x^3}{3!} + OAT \Rightarrow \\ 2\left(\frac{\partial u}{\partial x}\right)_i^n \Delta x &= -4u_{i-1}^n + u_{i-2}^n + 3u_i^n - 4\left(\frac{\partial^3 u}{\partial x^3}\right)_i^n \frac{\Delta x^3}{3!} + OAT \Rightarrow \\ \left(\frac{\partial u}{\partial x}\right)_i^n &= \frac{3u_i^n - 4u_{i-1}^n + u_{i-2}^n}{2\Delta x} - 2\left(\frac{\partial^3 u}{\partial x^3}\right)_i^n \frac{\Delta x^2}{3!} + OAT. \quad (B.15) \end{aligned}$$

Το σφάλμα αποκοπής στην προσέγγιση της μερικής παραγώγου $\left(\frac{\partial u}{\partial x}\right)_i^n$ είναι

$$\tau(\Delta x) = -2 \left(\frac{\partial^3 u}{\partial x^3} \right)_i^n \frac{\Delta x^2}{3!} + OAT. \quad (\text{B.16})$$

Γράφουμε

$$\tau(\Delta x) = O(\Delta x^2), \quad (\text{B.17})$$

και

$$\left(\frac{\partial u}{\partial x} \right)_i^n = \frac{3u_i^n - 4u_{i-1}^n + u_{i-2}^n}{2\Delta x} + O(\Delta x^2). \quad (\text{B.18})$$

Η Εξ. (B.16) δεν δίνει καμιά πληροφορία για την τιμή του σφάλματος αποκοπής της προσέγγισης της μερικής παραγώγου. Απλά καθορίζει το νόμο με τον οποίο μεταβάλλεται το σφάλμα όσο το Δx τείνει στο 0, πρακτικά όσο πυκνώνει το πλέγμα που χρησιμοποιούμε. Το σφάλμα αποκοπής μηδενίζεται καθώς το Δx τείνει στο 0 όταν η παράγωγος $\left(\frac{\partial^3 u}{\partial x^3} \right)_i^n$ δεν αυξάνεται με ρυθμό ταχύτερο από το ρυθμό μείωσης του Δx . Σε περιοχές ασυνέχειας εμφανίζεται πάντα ανεξέλεγκτη αύξηση της τιμής των παραγώγων και κατά συνέπεια το σφάλμα αποκοπής μηδενίζεται μόνο όταν η λύση παραμένει αρκετά ομαλή [Μαρκάτος & Ασημακόπουλος (1995), σ. 42].

Το σφάλμα αποκοπής που αφορά τη διαφορά της ΔΕΜΠ με την ΕΠΔ εξαρτάται από τα σφάλματα αποκοπής των προσεγγίσεων όλων των μερικών παραγώγων της ΔΕΜΠ. Έστω ότι για την εξίσωση καθαρής συναγωγής,

$$\frac{\partial u}{\partial t} + v \frac{\partial u}{\partial x} = 0, \quad (\text{B.19})$$

επιλέγονται ανάντη διαφορές πρώτης τάξης για τη χωρική παράγωγο και κατόντη (προς τα εμπρός) διαφορές πρώτης τάξης για τη χρονική. Τότε, για τη χρονική στιγμή $n\Delta t$ στο σημείο $i\Delta x$, οι μερικές παράγωγοι είναι

$$\left(\frac{\partial u}{\partial x} \right)_i^n = \frac{u_i^n - u_{i-1}^n}{\Delta x} + \left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \right)_i^n \frac{\Delta x}{2} + OAT, \quad (\text{B.20})$$

$$\left(\frac{\partial u}{\partial t} \right)_i^n = \frac{u_i^{n+1} - u_i^n}{\Delta t} + \left(\frac{\partial^2 u}{\partial t^2} \right)_i^n \frac{\Delta t}{2} + OAT. \quad (\text{B.21})$$

Αντικαθιστώντας στην εξίσωση καθαρής συναγωγής τις προσεγγίσεις των μερικών παραγώγων προκύπτει:

$$\frac{u_i^{n+1} - u_i^n}{\Delta t} + \nu \frac{u_i^n - u_{i-1}^n}{\Delta x} = \left(\frac{\partial^2 u}{\partial t^2} \right)_i \frac{\Delta t}{2} - \nu \left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \right)_i \frac{\Delta x}{2} + OAT. \quad (\text{B.22})$$

Το αριστερό σκέλος της Εξ. (B.22) αποτελεί την ΕΠΔ και το δεξιό είναι το σφάλμα αποκοπής της ΕΠΔ. Είναι

$$\tau(\Delta t, \Delta x) = \left(\frac{\partial^2 u}{\partial t^2} \right)_i \frac{\Delta t}{2} - \nu \left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \right)_i \frac{\Delta x}{2} + OAT \quad \text{ή} \quad (\text{B.23})$$

$$\tau(\Delta t, \Delta x) = O(\Delta t) + O(\Delta x). \quad (\text{B.24})$$

Το σφάλμα αποκοπής ως διαφορά της ΔΕΜΠ με την ΕΠΔ συνδέεται με τη συνέπεια του αριθμητικού σχήματος [Εξ. (B.1)].

B.3.2 Σφάλμα διακριτοποίησης και η σχέση του με το σφάλμα αποκοπής

Το σφάλμα της αριθμητικής λύσης ΔΕΜΠ δεν ταυτίζεται με το σφάλμα αποκοπής της αντίστοιχης ΕΠΔ, και καλείται σφάλμα διακριτοποίησης {discretization error, [Ferziger & Peric (1996), σ. 59], [Oberkampf & Trucano (2002)]}. Στη συνέχεια αναφέρεται η εγγενής διαφορά μεταξύ των σφαλμάτων και επιχειρείται ο προσδιορισμός της σχέσης μεταξύ τους.

Έστω ΔΕΜΠ:

$$L(u) = f, \quad (\text{B.25})$$

όπου L ο συνεχής διαφορικός τελεστής, u η πραγματική λύση, f συνεχής γνωστή συνάρτηση.

Με την διακριτοποίηση προκύπτει το διακριτό ανάλογο της Εξ. (B.25),

$$\hat{L}(\hat{u}) = \bar{f}, \quad (\text{B.26})$$

όπου \hat{L} η αριθμητική προσέγγιση του διαφορικού τελεστή L , \hat{u} η αριθμητική λύση και \bar{f} οι τιμές της γνωστής συνεχούς συνάρτησης f σε διακριτά σημεία του πλέγματος διακριτοποίησης.

Αν η πραγματική λύση, u , είναι γνωστή, το σφάλμα αποκοπής είναι

$$\tau = \hat{L}(\bar{u}) - \bar{f}, \quad (\text{B.27})$$

όπου \bar{u} οι τιμές της u σε διακριτά σημεία του πλέγματος διακριτοποίησης.

Από τις Εξ. (B.27) και (B.28) προκύπτει ότι το σφάλμα αποκοπής είναι

$$\tau = \hat{L}(\bar{u}) - \hat{L}(\hat{u}). \quad (\text{B.28})$$

Το σφάλμα αποκοπής, τ , δεν ταυτίζεται με το σφάλμα της αριθμητικής λύσης της ΔΕΜΠ (σφάλμα διακριτοποίησης),

$$e = \bar{u} - \hat{u}. \quad (\text{B.29})$$

Αν ο διαφορικός τελεστής \hat{L} είναι γραμμικός, η Εξ. (B.29) γίνεται

$$\tau = \hat{L}(\bar{u} - \hat{u}) = \hat{L}(e). \quad (\text{B.30})$$

Συνεπώς, το σφάλμα στην αριθμητική λύση είναι

$$e = \hat{L}^{-1}(\tau), \quad (\text{B.31})$$

όπου \hat{L}^{-1} ο αντίστροφος του τελεστή \hat{L} .

Θεωρώντας ότι το αριθμητικό σχήμα διακριτοποίησης είναι σταθερό, ο τελεστής αντιστρέφεται και

$$\|\hat{L}^{-1}\| \leq c, \quad (\text{B.32})$$

όπου c σταθερά και $\|\cdot\|$ νόρμα.

Εφαρμόζοντας νόρμα στην Εξ. (B.31) προκύπτει

$$\|e\| = \|\bar{u} - \hat{u}\| = \|\hat{L}^{-1}(\tau)\| \leq \|\hat{L}^{-1}\| \|\tau\|. \quad (\text{B.33})$$

Από τις Εξ. (B.32) και (B.33) προκύπτει για το σφάλμα της αριθμητικής λύσης:

$$\|e\| \leq c \|\tau\|. \quad (\text{B.34})$$

Η Εξ. (B.34) λέει ότι το σφάλμα αποκοπής, τ , παρέχει ένα άνω όριο για το σφάλμα της αριθμητικής λύσης, e . Επίσης, η τάξη προσέγγισης του σφάλματος της αριθμητικής λύσης είναι αυτή του σφάλματος αποκοπής χωρίς να αποκλείεται να είναι ακόμη υψηλότερη.

Η σχέση μεταξύ σφάλματος αποκοπής και σφάλματος στην αριθμητική λύση ΔΕΜΠ, που παραπάνω αποδείχθηκε για γραμμικό διαφορικό τελεστή, συνήθως υπονοείται σιωπηρά [Chorpuick (1999), σ. 4-5] ακόμη και για μη γραμμικό διαφορικό τελεστή (και ευσταθές αριθμητικό σχήμα), δηλαδή

$$\tau = O(h^n) \Rightarrow e = O(h^n). \quad (\text{B.35})$$

Η παραπάνω συνεπαγωγή είναι συμβατή με το θεώρημα του Lax, αφού το σφάλμα αποκοπής συνδέεται με τη συνέπεια και το σφάλμα της αριθμητικής λύσης με τη σύγκλιση. Η συνεπαγωγή (B.35), αν και δεν αποδεικνύεται γενικά για μη γραμμικούς διαφορικούς τελεστές, αποτελεί εμπειρικό κανόνα επιβεβαιωμένο από αριθμητικούς υπολογισμούς [Blottner & Lopez (1998)]. Οι Oberkampf και Trucano επιβεβαιώνουν την συνεπαγωγή (B.35) ως εμπειρικό κανόνα και αναφέρουν ότι το σφάλμα διακριτοποίησης είναι μάλλον μικρότερο από αυτό της αποκοπής [Oberkampf & Trucano (2002)].

Για παράδειγμα, το σφάλμα διακριτοποίησης που αφορά την αριθμητική λύση της Εξ. (B.19), όταν οι μερικές παράγωγοι προσεγγίζονται όπως στις Εξ (B.20) και (B.21), είναι, όπως υπαγορεύει η Εξ. (B.24) και η συνεπαγωγή (B.35),

$$e(\Delta t, \Delta x) = O(\Delta t) + O(\Delta x). \quad (\text{B.36})$$

B.3.3 Σφάλμα στρογγυλοποίησης

Το σφάλμα στρογγυλοποίησης (round off error) οφείλεται στις στρογγυλοποιήσεις πραγματικών αριθμών σύμφωνα με την ακρίβεια του υπολογιστή. Σε μερικούς υπολογισμούς η τιμή του σφάλματος στρογγυλοποίησης είναι ανάλογη του πλήθους των κόμβων του πλέγματος και σ' αυτές τις περιπτώσεις, κάνοντας το πλέγμα πυκνότερο, ενώ μειώνεται το σφάλμα αποκοπής, αυξάνεται το σφάλμα στρογγυλοποίησης [Γιαννάκογλου (1999), σ. 6].

B.4 Θεωρητική και παρατηρούμενη τάξη ακρίβειας σφάλματος

Οποιοσδήποτε υπολογισμός (εκτίμηση) του σφάλματος γίνεται πριν τους αριθμητικούς υπολογισμούς (*a priori*) καλείται θεωρητικός. Για παράδειγμα, από την Εξ. (B.36) προκύπτει το θεωρητικό σφάλμα διακριτοποίησης: η τάξη ακρίβειας της αριθμητικής λύσης είναι 1 ως προς t και x . Όταν ο υπολογισμός του σφάλματος και της τάξης ακρίβειας γίνεται μετά τους αριθμητικούς υπολογισμούς και χρησιμοποιώντας τα αποτελέσματά τους

(*a posteriori*), τότε αναφερόμαστε σε παρατηρούμενες {observed, [Roache (1998), σ. 158]} ποσότητες.

Η παρατηρούμενη τάξη ακρίβειας είναι σημαντική στην επαλήθευση κώδικα (Παράρτημα Α). Ο υπολογισμός της παρατηρούμενης τάξης ακρίβειας προϋποθέτει τον *a posteriori* υπολογισμό του σφάλματος διακριτοποίησης. Στην πράξη, το σφάλμα διακριτοποίησης, E , εξαρτάται από το μέτρο διακριτοποίησης, h , και υπολογίζεται από τη νόρμα

$$E(h) = \|e(h)\| = \|\bar{u} - \hat{u}(h)\|, \quad (\text{B.37})$$

ή τη σχετική νόρμα

$$E(h) = \|e(h)\| = \frac{\|\bar{u} - \hat{u}(h)\|}{\|\bar{u}\|}. \quad (\text{B.38})$$

Οι νόρμες που χρησιμοποιούνται είναι η ευκλείδεια νόρμα και η άπειρη νόρμα (Παράρτημα Γ).

Αν η τάξη ακρίβειας της αριθμητικής λύσης είναι p , το σφάλμα διακριτοποίησης είναι

$$E(h) = Ch^p + OAT. \quad (\text{B.39})$$

Αν το h είναι αρκετά μικρό, τότε το σφάλμα διακριτοποίησης μπορεί να προσεγγιστεί ως

$$E(h) \approx Ch^p. \quad (\text{B.40})$$

Για δύο διαφορετικές διακριτοποιήσεις, h_1, h_2 , ο λόγος των σφαλμάτων είναι

$$\frac{E(h_1)}{E(h_2)} = \frac{Ch_1^p}{Ch_2^p} = \left(\frac{h_1}{h_2}\right)^p. \quad (\text{B.41})$$

Συνεπώς,

$$p = \frac{\log\left[\frac{E(h_1)}{E(h_2)}\right]}{\log\left(\frac{h_1}{h_2}\right)}. \quad (\text{B.42})$$

Τα σφάλματα $E(h_1)$, $E(h_2)$ υπολογίζονται από την Εξ. (B.37) [ή την Εξ. (B.38)], τα h_1 , h_2 είναι γνωστά, επομένως από την Εξ. (B.42) μπορεί να προκύψει η παρατηρούμενη τάξη ακρίβειας της αριθμητικής λύσης, p .

Ένα ερώτημα που προκύπτει είναι πώς υπολογίζεται η παρατηρούμενη τάξη ακρίβειας, όταν η λύση είναι συνάρτηση δύο μεταβλητών και επομένως το σφάλμα είναι συνάρτηση δύο μέτρων διακριτοποίησης, π.χ. των Δx και Δt ,

$$E(\Delta t, \Delta x) = O(\Delta t^m) + O(\Delta x^n). \quad (\text{B.43})$$

Γενικά είναι δύσκολος υπολογισμός. Ένας τρόπος είναι να διατηρηθεί το πρώτο από τα δύο μέτρα διακριτοποίησης πολύ μικρό αναμένοντας ο αντίστοιχος όρος στο σφάλμα σχεδόν να εξαλειφθεί {να φτάσει στα όρια ακρίβειας του υπολογιστή, [Salari & Knupp (2000), σ. 72]}, και να χρησιμοποιηθεί η Εξ. (B.42) για το δεύτερο μέτρο διακριτοποίησης. Η διαδικασία επαναλαμβάνεται κρατώντας σταθερά μικρό το δεύτερο μέτρο διακριτοποίησης και εφαρμόζοντας την Εξ. (B.42) για το πρώτο. Ένας δεύτερος τρόπος είναι να επαναληφθεί η παραπάνω διαδικασία κρατώντας σταθερά μικρό εκείνο το μέτρο που αφορά στη μικρότερη τάξη ακρίβειας. Έτσι επιβεβαιώνεται η τάξη ακρίβειας για το μέτρο που αφορά την υψηλή τάξη. Έπειτα μειώνονται και τα δύο μέτρα με τον ίδιο λόγο. Η Εξ. (B.42) αναμένεται να φανερώσει την τάξη ακρίβειας για το μέτρο που αφορά στη μικρότερη τάξη, αφού είναι ο όρος με τη μικρότερη τάξη αυτός που κυριαρχεί στην Εξ. (B.43).

B.5 Εφαρμογή: Υπολογισμός της θεωρητικής τάξης ακρίβειας της αριθμητικής λύσης της εξίσωσης ισοϋψών

Για τη διακριτοποίηση της ΔΕΜΠ

$$u_t + F|\nabla u| = 0 \quad (\text{B.44})$$

χρησιμοποιούνται τα σχήματα της §6.2.

Το σφάλμα αποκοπής της προσέγγισης της χρονικής παραγώγου u_t είναι $O(\Delta t^m)$, όπου m η τάξη της προσέγγισης ($m = 1, 2$ ή 3 για τα σχήματα Euler, SSPRK2, SSPRK3 αντίστοιχα). Αντίστοιχα, το σφάλμα αποκοπής των χωρικών παραγώγων u_x, u_y είναι $O(\Delta x^n)$ και $O(\Delta y^n)$, όπου n η τάξη της προσέγγισης ($n = 1, 2, 3$ ή 5 , για τα σχήματα 1^{ης} τάξης, ENO2 και ENO2S, ENO3 και WENO3, WENO5). Η τάξη προσέγγισης είναι κοινή ως προς $\Delta x, \Delta y$ διότι χρησιμοποιούνται τα ίδια σχήματα και στις δύο διευθύνσεις. Αν θεωρηθεί ότι $\Delta x = \Delta y$, τότε το σφάλμα αποκοπής κατά τη διακριτοποίηση της Εξ. (B.44) είναι

$$\tau = \text{ΕΠΔ} - \text{ΔΕΜΠ} \text{ ή}$$

$$\begin{aligned}
\tau &= \left\{ u_t + O(\Delta t^m) + F \sqrt{[u_x + O(\Delta x^n)]^2 + [u_y + O(\Delta x^n)]^2} \right\} - \left[u_t + F \sqrt{u_x^2 + u_y^2} \right] \Rightarrow \\
\tau &= O(\Delta t^m) + F \sqrt{u_x^2 + O(\Delta x^n) + u_y^2 + O(\Delta x^n)} - F \sqrt{u_x^2 + u_y^2} \Rightarrow \\
\tau &= O(\Delta t^m) + F \left[\sqrt{u_x^2 + u_y^2 + O(\Delta x^n)} - \sqrt{u_x^2 + u_y^2} \right] \Rightarrow \\
\tau &= O(\Delta t^m) + F \left[\frac{u_x^2 + u_y^2 + O(\Delta x^n) - (u_x^2 + u_y^2)}{\sqrt{u_x^2 + u_y^2 + O(\Delta x^n)} + \sqrt{u_x^2 + u_y^2}} \right] \Rightarrow \\
\tau &= O(\Delta t^m) + F \left[\frac{O(\Delta x^n)}{\sqrt{u_x^2 + u_y^2 + O(\Delta x^n)} + \sqrt{u_x^2 + u_y^2}} \right]. \tag{B.45}
\end{aligned}$$

Για μικρές τιμές του Δx , μπορεί να θεωρηθεί ότι

$$\sqrt{u_x^2 + u_y^2 + O(\Delta x^n)} + \sqrt{u_x^2 + u_y^2} \approx 2\sqrt{u_x^2 + u_y^2}, \tag{B.46}$$

όποτε η Εξ. (B.40) γίνεται

$$\tau = O(\Delta t^m) + \frac{F}{2\sqrt{u_x^2 + u_y^2}} O(\Delta x^n) = O(\Delta t^m) + O(\Delta x^n). \tag{B.47}$$

Από τη συνεπαγωγή (B.35) και την Εξ. (B.47) προκύπτει ότι το σφάλμα της αριθμητικής λύσης της Εξ. (B.44) είναι

$$e = O(\Delta t^m) + O(\Delta x^n). \tag{B.48}$$

Παράρτημα Γ

Νόρμες απόκλισης μεταξύ λύσεων

Ορίζονται οι νόρμες απόκλισης μεταξύ λύσεων που χρησιμοποιούνται στην εργασία.

Γ.1 Νόρμες απόκλισης για βαθμωτές συναρτήσεις

Για τη σύγκριση δύο λύσεων είναι απαραίτητο να οριστεί μέτρο της απόκλισης μεταξύ τους. Για το σκοπό αυτό χρησιμοποιούνται νόρμες διανυσμάτων όταν οι λύσεις είναι βαθμωτές και πινάκων όταν οι λύσεις είναι διανυσματικές.

Έστω ότι το ζητούμενο είναι η σύγκριση της αριθμητικής λύσης με λύση αναφοράς. Αν η αριθμητική λύση u είναι βαθμωτή συνάρτηση, τότε ορίζονται τα διανύσματα $\mathbf{u}=(u_1, u_2, \dots, u_n)$ και $\mathbf{u}_{ref}=(u_{ref,1}, u_{ref,2}, \dots, u_{ref,n})$ με τις διακριτές τιμές της αριθμητικής λύσης u και της λύσης αναφοράς (π.χ. η πραγματική λύση) στο υπολογιστικό χωρίο. n είναι το πλήθος των σημείων του υπολογιστικού χωρίου στα οποία γίνεται σύγκριση της αριθμητικής με την λύση αναφοράς. Οι νόρμες που χρησιμοποιούνται στην παρούσα εργασία για να εκφράσουν την απόκλιση μεταξύ δύο βαθμωτών λύσεων είναι:

A) Η απόλυτη άπειρη νόρμα,

$$\|\mathbf{u} - \mathbf{u}_{ref}\|_{\infty} = \max_{1 \leq i \leq n} |u_i - u_{ref,i}|. \quad (\Gamma.1)$$

B) Η απόλυτη Ευκλείδεια νόρμα,

$$\|\mathbf{u} - \mathbf{u}_{ref}\|_2 = \left[\sum_{i=1}^n (u_i - u_{ref,i})^2 \right]^{1/2}. \quad (\Gamma.2)$$

Γ) Η σχετική άπειρη νόρμα

$$\frac{\|\mathbf{u} - \mathbf{u}_{ref}\|_{\infty}}{\|\mathbf{u}_{ref}\|_{\infty}} = \frac{\max_{1 \leq i \leq n} |u_i - u_{ref,i}|}{\max_{1 \leq i \leq n} |u_{ref,i}|}. \quad (\Gamma.3)$$

Δ) Η σχετική Ευκλείδεια νόρμα

$$\frac{\|\mathbf{u} - \mathbf{u}_{ref}\|_2}{\|\mathbf{u}_{ref}\|_2} = \frac{\left[\sum_{i=1}^n (u_i - u_{ref,i})^2 \right]^{1/2}}{\left[\sum_{i=1}^n u_{ref,i}^2 \right]^{1/2}}. \quad (\Gamma.4)$$

Γ.2 Νόρμες απόκλισης για διανυσματικές συναρτήσεις

Αν η αριθμητική λύση \mathbf{u} είναι διανυσματική συνάρτηση, τότε ορίζονται οι πίνακες

$$\mathbf{u} = \begin{bmatrix} u_{11} & u_{12} & \dots & u_{1m} \\ u_{21} & u_{22} & \dots & u_{2m} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ u_{n1} & u_{n2} & \dots & u_{nm} \end{bmatrix} \text{ και } \mathbf{u}_{\text{ref}} = \begin{bmatrix} u_{\text{ref},11} & u_{\text{ref},12} & \dots & u_{\text{ref},1m} \\ u_{\text{ref},21} & u_{\text{ref},22} & \dots & u_{\text{ref},2m} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ u_{\text{ref},n1} & u_{\text{ref},n2} & \dots & u_{\text{ref},nm} \end{bmatrix}$$

με τις διακριτές τιμές της αριθμητικής λύσης \mathbf{u} και της λύσης αναφοράς (π.χ. η πραγματική λύση) στο υπολογιστικό χωρίο. n είναι το πλήθος των σημείων του υπολογιστικού χωρίου στα οποία γίνεται σύγκριση της αριθμητικής με την λύση αναφοράς. m είναι η διάσταση της διανυσματικής λύσης. Σε κάθε στήλη των πινάκων περιέχονται οι διακριτές τιμές μίας συνιστώσας των λύσεων στο υπολογιστικό χωρίο. Οι νόρμες που χρησιμοποιούνται στην παρούσα εργασία για να εκφράσουν την απόκλιση μεταξύ δύο διανυσματικών λύσεων είναι:

A) Η απόλυτη άπειρη νόρμα (νόρμα γραμμής),

$$\|\mathbf{u} - \mathbf{u}_{\text{ref}}\|_{\infty} = \|\mathbf{u} - \mathbf{u}_{\text{ref}}\|_F = \max_{1 \leq i \leq n} \sum_j^m |u_{ij} - u_{\text{ref},ij}|. \quad (\Gamma.5)$$

B) Η απόλυτη νόρμα του Frobenius [Weisstein (2004)] που καλείται και Ευκλείδεια νόρμα

$$\|\mathbf{u} - \mathbf{u}_{\text{ref}}\|_F = \left[\sum_{\substack{1 \leq i \leq n \\ 1 \leq j \leq m}} (u_{ij} - u_{\text{ref},ij})^2 \right]^{1/2}. \quad (\Gamma.6)$$

Γ) Η σχετική άπειρη νόρμα

$$\frac{\|\mathbf{u} - \mathbf{u}_{\text{ref}}\|_{\infty}}{\|\mathbf{u}_{\text{ref}}\|_{\infty}} = \frac{\max_{1 \leq i \leq n} \sum_j^m |u_{ij} - u_{\text{ref},ij}|}{\max_{1 \leq i \leq n} \sum_j^m |u_{\text{ref},ij}|}. \quad (\Gamma.7)$$

Δ) Η σχετική νόρμα Frobenius ή σχετική Ευκλείδεια νόρμα

$$\frac{\|\mathbf{u} - \mathbf{u}_{\text{ref}}\|_F}{\|\mathbf{u}_{\text{ref}}\|_F} = \frac{\left[\sum_{\substack{1 \leq i \leq n \\ 1 \leq j \leq m}} (u_{ij} - u_{\text{ref},ij})^2 \right]^{1/2}}{\left[\sum_{\substack{1 \leq i \leq n \\ 1 \leq j \leq m}} u_{\text{ref},ij}^2 \right]^{1/2}}. \quad (\Gamma.8)$$

Παράρτημα Δ

Ζεύγη μεθόδων Runge-Kutta για την επίλυση συστήματος συνήθων διαφορικών εξισώσεων

Περιγράφονται δύο ζεύγη μεθόδων Runge-Kutta για την επίλυση συστήματος συνήθων διαφορικών εξισώσεων. Το πρώτο είναι ζεύγος 4(5) και προτάθηκε από τον Fehlberg [Παπαγεωργίου (1990), σ. 176] και το δεύτερο είναι ζεύγος 5(4) που κατασκευάστηκε με βάση τον αλγόριθμο των Parakostas και Parageorgiou [Parakostas & Parageorgiou (1996)]. Το πλεονέκτημα του ζεύγους μεθόδων είναι ότι το βήμα ολοκλήρωσης είναι μεταβλητό και προσαρμόζεται στη μορφή των προς ολοκλήρωση συναρτήσεων. Ο κώδικας επίλυσης συστήματος συνήθων διαφορικών εξισώσεων με τα παραπάνω ζεύγη επαληθεύεται. Στην εργασία, επίλυση συστήματος διαφορικών εξισώσεων χρειάζεται στον αλγόριθμο εύρεσης ισοΐψους συνάρτησης.

Δ.1 Οι μέθοδοι και τα ζεύγη μεθόδων Runge-Kutta

Για την επίλυση του προβλήματος αρχικών τιμών

$$y' = f(x, y(x)), y(x_0) = y_0, \quad (\Delta.1)$$

η γενική μορφή άμεσης μεθόδου Runge-Kutta (RK) είναι

$$y_{n+1} = y_n + h_n \sum_{i=1}^s b_i f_{ni}, \quad (\Delta.2)$$

$$f_{ni} = f \left(x_n + h_n c_i, y_n + h_n \sum_{j=1}^{i-1} a_{ij} f_{nj} \right), i = 1, 2, \dots, s, \quad (\Delta.3)$$

όπου n είναι ο αύξων αριθμός του βήματος ολοκλήρωσης, h_n το βήμα ολοκλήρωσης και s το πλήθος των υπολογισμών της συνάρτησης f . Οι συντελεστές c_i, a_{ij}, b_i καθορίζουν την τάξη ακρίβειας της μεθόδου.

Η συνάρτηση

$$\Phi(x_n, y_n, h_n) = \sum_{i=1}^s b_i f_{ni} \quad (\Delta.4)$$

καλείται συνάρτηση αύξησης της μεθόδου.

Το σφάλμα αποκοπής της συνάρτησης αύξησης μεθόδου RK προκύπτει από το ανάπτυγμα σε σειρά Taylor και είναι [Παπαγεωργίου & Τσίτουρας (2000), σ. 360] όταν $h_n = h$ (σταθερό)

$$\tau = \sum_{i=1}^{\infty} h^i \left(\sum_{j=1}^{n_i} \tau_j^{(i)} \mathbf{F}_j^{(i)} \right), \quad (\Delta.5)$$

όπου $\mathbf{F}_j^{(i)}$ το στοιχειώδες διαφορικό j τάξης i [Παπαγεωργίου & Τσίτουρας (2000), σ. 352] της συνάρτησης Φ , $\tau_j^{(i)}$ ο αντίστοιχος συντελεστής σφάλματος (error coefficient) και n_i το πλήθος των στοιχειωδών διαφορικών τάξης i .

Μια μέθοδος RK είναι τουλάχιστο τάξης p όταν το σφάλμα της Εξ. (Δ.5) είναι

$$\tau = O(h^{p+1}), \quad (\Delta.6)$$

δηλαδή αν ικανοποιούνται οι εξισώσεις

$$\tau_j^{(i)} = 0, i = 1, 2, \dots, p, j = 1, 2, \dots, n_i. \quad (\Delta.7)$$

Οι συντελεστές σφάλματος είναι συναρτήσεις των συντελεστών c_i, a_{ij}, b_i και οι Εξ. (Δ.7) καλούνται εξισώσεις συνθηκών τάξης (*order conditions*). Επιλέγοντας κατάλληλα τους συντελεστές c_i, a_{ij}, b_i είναι δυνατό να κατασκευαστεί μέθοδοι RK υψηλής τάξης. Η κατασκευή μεθόδων RK υψηλής τάξης είναι επίπονη διαδικασία. Καταρχάς, πρέπει να προσδιοριστούν οι εξισώσεις συνθηκών τάξης των οποίων το πλήθος, καθώς μεγαλώνει η επιθυμητή τάξη, αυξάνει εκθετικά (1 για 1^{ης}, 2 για 2^{ης}, 4 για 3^{ης}, 8 για 4^{ης}, 17 για 5^{ης}). Η δεύτερη δυσκολία αφορά στην επίλυση αυτών των εξισώσεων, οι οποίες είναι μη γραμμικές και χωρίς μοναδική λύση.

Στον Πίνακα Δ.Ι περιέχονται οι εξισώσεις συνθηκών, ώστε η μέθοδος που θα προκύψει να είναι μέχρι 6^{ης} τάξης και άμεση. Ο πίνακας έχει προκύψει από τη συνάρτηση *RungeKuttaOrderConditions[6, s, RungeKuttaMethod → Explicit]* του MATHEMATICA 4.0.

Οι εξισώσεις συνθηκών είναι πάντα λιγότερες από τους αγνώστους (c_i, a_{ij}, b_i) και επομένως το πλήθος των μεθόδων RK τάξης p είναι απροσδιόριστο. Συνήθως, οι εξισώσεις συνθηκών συμπληρώνονται από εξισώσεις που διευκολύνουν την επίλυση.

Υπάρχουν μέθοδοι RK όπου το βήμα h_n παραμένει σταθερό και μέθοδοι όπου το βήμα μεταβάλλεται ελεγχόμενα κατά την ολοκλήρωση. Στις περιπτώσεις που το βήμα h_n μεταβάλλεται, το μέγεθός του ελέγχεται εκτιμώντας το τοπικό σφάλμα σε κάθε βήμα ολοκλήρωσης. Για την εκτίμηση του τοπικού σφάλματος συνήθως χρησιμοποιούνται ζεύγη μεθόδων τάξης p και q ($p \geq q + 1$). Στα ζεύγη μεθόδων η μία είναι «εμβλαπτισμένη» στην άλλη, υπό την έννοια ότι οι συντελεστές c_i, a_{ij} είναι κοινοί για τις δύο μεθόδους. Οι δύο μέθοδοι διαφέρουν στους συντελεστές b_i . Αν η μία μέθοδος του ζεύγους περιγράφεται από τις Εξ. (Δ.2) και (Δ.3) η δεύτερη μέθοδος περιγράφεται από την

$$\hat{y}_{n+1} = y_n + h_n \sum_{i=1}^s \hat{b}_i f_{ni}, \quad (\Delta.8)$$

και την Εξ. (Δ.3).

Πίνακας Δ.1 Εξισώσεις συνθηκών τάξης για μέθοδο RK μέχρι τάξης 6 με s υπολογισμούς.

$\sum_{i=1}^s b_i == 1$	$\sum_{i=2}^s b_i \sum_{j=2}^{-1+i} a_{i,j} \sum_{k=2}^{-1+j} a_{j,k} \sum_{l=2}^{-1+k} a_{k,l} \sum_{m=2}^{-1+l} a_{l,m} C_m ==$
1 ^{ης} τάξης	$\frac{1}{720}$
$\sum_{i=2}^s b_i c_i == \frac{1}{2}$	$\sum_{i=2}^s b_i \sum_{j=2}^{-1+i} a_{i,j} \sum_{k=2}^{-1+j} a_{j,k} \sum_{l=2}^{-1+k} a_{k,l} C_1^2 == \frac{1}{360}$
2 ^{ης} τάξης	$\sum_{i=2}^s b_i \sum_{j=2}^{-1+i} a_{i,j} \sum_{k=2}^{-1+j} a_{j,k} C_k \sum_{l=2}^{-1+k} a_{k,l} C_1 == \frac{1}{240}$
$\sum_{i=2}^s b_i \sum_{j=2}^{-1+i} a_{i,j} C_j == \frac{1}{6}$	$\sum_{i=2}^s b_i \sum_{j=2}^{-1+i} a_{i,j} \sum_{k=2}^{-1+j} a_{j,k} C_k^3 == \frac{1}{120}$
$\sum_{i=2}^s b_i C_i^2 == \frac{1}{3}$	$\sum_{i=2}^s b_i \sum_{j=2}^{-1+i} a_{i,j} C_j \sum_{k=2}^{-1+j} a_{j,k} \sum_{l=2}^{-1+k} a_{k,l} C_1 == \frac{1}{180}$
3 ^{ης} τάξης	$\sum_{i=2}^s b_i \sum_{j=2}^{-1+i} a_{i,j} C_j \sum_{k=2}^{-1+j} a_{j,k} C_k^2 == \frac{1}{90}$
$\sum_{i=2}^s b_i \sum_{j=2}^{-1+i} a_{i,j} \sum_{k=2}^{-1+j} a_{j,k} C_k == \frac{1}{24}$	$\sum_{i=2}^s b_i \sum_{j=2}^{-1+i} a_{i,j} \left(\sum_{k=2}^{-1+j} a_{j,k} C_k \right)^2 == \frac{1}{120}$
$\sum_{i=2}^s b_i \sum_{j=2}^{-1+i} a_{i,j} C_j^2 == \frac{1}{12}$	$\sum_{i=2}^s b_i \sum_{j=2}^{-1+i} a_{i,j} C_j^2 \sum_{k=2}^{-1+j} a_{j,k} C_k == \frac{1}{60}$
$\sum_{i=2}^s b_i C_i \sum_{j=2}^{-1+i} a_{i,j} C_j == \frac{1}{8}$	$\sum_{i=2}^s b_i \sum_{j=2}^{-1+i} a_{i,j} C_j^4 == \frac{1}{30}$
$\sum_{i=2}^s b_i C_i^3 == \frac{1}{4}$	$\sum_{i=2}^s b_i C_i \sum_{j=2}^{-1+i} a_{i,j} \sum_{k=2}^{-1+j} a_{j,k} \sum_{l=2}^{-1+k} a_{k,l} C_1 == \frac{1}{144}$
4 ^{ης} τάξης	$\sum_{i=2}^s b_i C_i \sum_{j=2}^{-1+i} a_{i,j} \sum_{k=2}^{-1+j} a_{j,k} C_k^2 == \frac{1}{72}$
$\sum_{i=2}^s b_i \sum_{j=2}^{-1+i} a_{i,j} \sum_{k=2}^{-1+j} a_{j,k} \sum_{l=2}^{-1+k} a_{k,l} C_1 == \frac{1}{120}$	$\sum_{i=2}^s b_i C_i \sum_{j=2}^{-1+i} a_{i,j} C_j \sum_{k=2}^{-1+j} a_{j,k} C_k == \frac{1}{48}$
$\sum_{i=2}^s b_i \sum_{j=2}^{-1+i} a_{i,j} \sum_{k=2}^{-1+j} a_{j,k} C_k^2 == \frac{1}{60}$	$\sum_{i=2}^s b_i C_i \sum_{j=2}^{-1+i} a_{i,j} C_j^3 == \frac{1}{24}$
$\sum_{i=2}^s b_i \sum_{j=2}^{-1+i} a_{i,j} C_j \sum_{k=2}^{-1+j} a_{j,k} C_k == \frac{1}{40}$	$\sum_{i=2}^s b_i \left(\sum_{j=2}^{-1+i} a_{i,j} C_j \right) \sum_{k=2}^{-1+i} a_{i,k} \sum_{l=2}^{-1+k} a_{k,l} C_1 == \frac{1}{72}$
$\sum_{i=2}^s b_i \sum_{j=2}^{-1+i} a_{i,j} C_j^3 == \frac{1}{20}$	$\sum_{i=2}^s b_i \left(\sum_{j=2}^{-1+i} a_{i,j} C_j \right) \sum_{k=2}^{-1+i} a_{i,k} C_k^2 == \frac{1}{36}$
$\sum_{i=2}^s b_i C_i \sum_{j=2}^{-1+i} a_{i,j} \sum_{k=2}^{-1+j} a_{j,k} C_k == \frac{1}{30}$	$\sum_{i=2}^s b_i C_i^2 \sum_{j=2}^{-1+i} a_{i,j} \sum_{k=2}^{-1+j} a_{j,k} C_k == \frac{1}{36}$
$\sum_{i=2}^s b_i C_i \sum_{j=2}^{-1+i} a_{i,j} C_j^2 == \frac{1}{15}$	$\sum_{i=2}^s b_i C_i^2 \sum_{j=2}^{-1+i} a_{i,j} C_j^2 == \frac{1}{18}$
$\sum_{i=2}^s b_i \left(\sum_{j=2}^{-1+i} a_{i,j} C_j \right)^2 == \frac{1}{20}$	$\sum_{i=2}^s b_i C_i \left(\sum_{j=2}^{-1+i} a_{i,j} C_j \right)^2 == \frac{1}{24}$
$\sum_{i=2}^s b_i C_i^2 \sum_{j=2}^{-1+i} a_{i,j} C_j == \frac{1}{10}$	$\sum_{i=2}^s b_i C_i^3 \sum_{j=2}^{-1+i} a_{i,j} C_j == \frac{1}{12} \sum_{i=2}^s b_i C_i^5 == \frac{1}{6}$
$\sum_{i=2}^s b_i C_i^4 == \frac{1}{5}$	
5 ^{ης} τάξης	6 ^{ης} τάξης

Εκτίμηση για το σφάλμα προκύπτει από τη διαφορά $|y_{n+1} - \hat{y}_{n+1}|$ ή από τη νόρμα $\|y_{n+1} - \hat{y}_{n+1}\|$ όταν επιλύεται σύστημα ΣΔΕ. Ένας τρόπος για τον έλεγχο του βήματος ολοκλήρωσης είναι ο ακόλουθος [Tsitouras & Papakostas (1999)]:

$$h_{n+1} = s_1 h_n \left(\frac{tol}{\|y_{n+1} - \hat{y}_{n+1}\|} \right)^{\frac{1}{q+1}}, \quad (\Delta.9)$$

όπου s_1 είναι παράγοντας ασφάλειας και συνήθως παίρνει τιμή λίγο μικρότερη από την τιμή 1 {π.χ. 0.9, [Press (1997), σ. 718]} και tol είναι το επιβαλλόμενο φράγμα στο τοπικό σφάλμα, το όριο ανοχής του τοπικού σφάλματος.

Όταν το εκτιμώμενο σφάλμα είναι μεγαλύτερο από το επιβαλλόμενο φράγμα, οι υπολογισμοί επαναλαμβάνονται με βήμα μικρότερο, όπως προκύπτει από την Εξ. (Δ.9). Όταν το εκτιμώμενο σφάλμα είναι μικρότερο το αποτέλεσμα (y_{n+1}) γίνεται αποδεκτό και το νέο βήμα ολοκλήρωσης είναι μεγαλύτερο όπως προκύπτει από την Εξ. (Δ.9).

Τα ζεύγη μεθόδων RK χαρακτηρίζονται από την τάξη των μεθόδων. Ο συμβολισμός RK $q(p)$ [$(p \geq q + 1)$] σημαίνει ότι η αριθμητική λύση προκύπτει από τη μέθοδο τάξης q , τη μέθοδο μικρότερης τάξης, ενώ η μέθοδος τάξης p χρησιμοποιείται σε συνδυασμό με τη μέθοδο τάξης q για την εκτίμηση του σφάλματος. Ο συμβολισμός RK $p(q)$ συνεπάγεται αντίστροφους ρόλους για τις δύο μεθόδους του ζεύγους. Τα πρώτα ζεύγη κατασκευάστηκαν από τον Fehlberg και τον Verner και ήταν ζεύγη RK $q(p)$ ενώ τα νεότερα ζεύγη είναι ζεύγη RK $p(q)$ [Papakostas et al. (1996)].

Τα ζεύγη άμεσων μεθόδων RK μπορούν να παρασταθούν με το λεγόμενο πίνακα Butcher,

c_i	a_{ij}			
0				
c_2	a_{21}			
c_3	a_{31}	a_{32}		
.	.	.	.	
.
.
c_s	a_{s1}	a_{s2}	.	$a_{s,s-1}$
b_i	b_1	b_2	b_3	b_s
\hat{b}_i	\hat{b}_1	\hat{b}_2	\hat{b}_3	\hat{b}_s

όπου s είναι το πλήθος υπολογισμών της f και b_i οι συντελεστές της μεθόδου που δίνει τη λύση.

Ο πίνακας Butcher για μια μέθοδο RK σταθερού βήματος είναι ίδιος με τον παραπάνω, απλά δεν περιέχει την τελευταία γραμμή.

Δ.2 Η θεωρητική τάξη των μεθόδων

Δοκιμάστηκαν για την επίλυση δύο ζεύγη μεθόδων RK. Το πρώτο ζεύγος [Παπαγεωργίου (1990), σ. 176] κατασκευάστηκε από τον Fehlberg και περιγράφεται από τον Πίνακα Δ.Π. Η πηγή δεν αναφέρει την τάξη των μεθόδων του ζεύγους, αλλά όπως θα αποδειχθεί παρακάτω είναι ζεύγος RK 4(5) με 6 υπολογισμούς της συνάρτησης f .

Πίνακας Δ.Π Πίνακας Butcher για ζεύγος μεθόδων RK 4(5) με 6 υπολογισμούς.

c_i	a_{ij}					
0						
$\frac{1}{4}$	$\frac{1}{4}$					
$\frac{3}{8}$	$\frac{3}{32}$	$\frac{9}{32}$				
12	1932	$-\frac{7200}{13}$	$\frac{7296}{13}$			
13	2197	2197	2197			
1	$\frac{439}{216}$	-8	$\frac{3680}{513}$	$-\frac{845}{4104}$		
$\frac{1}{2}$	$-\frac{8}{27}$	2	$-\frac{3544}{2565}$	$\frac{1859}{4104}$	$-\frac{11}{40}$	
b_i	$\frac{25}{216}$	0	$\frac{1408}{2565}$	$\frac{2197}{4104}$	$-\frac{1}{5}$	
\hat{b}_i	$\frac{16}{135}$	0	$\frac{6656}{12825}$	$\frac{28561}{56430}$	$-\frac{9}{50}$	$\frac{2}{55}$

Η δεύτερη μέθοδος προκύπτει από τον αλγόριθμο που παρουσιάζεται από τους Parakostas και Parageorgiou [Parakostas & Parageorgiou (1996)] και είναι ζεύγος RK 5(4) με 6 υπολογισμούς της f . Φαίνεται από τον πίνακα Butcher του ζεύγους (Πίνακας Δ.ΠΙ) που ακολουθεί ότι είναι 7 οι υπολογισμοί της f , ωστόσο μια προσεκτική ματιά φανερώνει ότι ο τελευταίος υπολογισμός σε ένα βήμα ολοκλήρωσης είναι ο πρώτος στο επόμενο ($b_j = a_{7j}$, $j=1,2,\dots,6$).

Πίνακας Δ. III Πίνακας Butcher για ζεύγος μεθόδων RK 5(4) με 6 υπολογισμούς.

c_i	a_{ij}					
0						
$\frac{1}{5}$	$\frac{1}{5}$					
$\frac{3}{10}$	$\frac{3}{40}$	$\frac{9}{40}$				
$\frac{4}{5}$	$\frac{44}{45}$	$-\frac{56}{15}$	$\frac{32}{9}$			
$\frac{8}{9}$	$\frac{19372}{6561}$	$-\frac{25360}{2187}$	$\frac{64448}{6561}$	$-\frac{212}{729}$		
1	$\frac{9017}{3168}$	$-\frac{355}{33}$	$\frac{46732}{5247}$	$\frac{49}{176}$	$-\frac{5103}{18656}$	
1	$\frac{35}{384}$	0	$\frac{500}{1113}$	$\frac{125}{192}$	$-\frac{2187}{6784}$	$\frac{11}{84}$
b_i	$\frac{35}{384}$	0	$\frac{500}{1113}$	$\frac{125}{192}$	$-\frac{2187}{6784}$	$\frac{11}{84}$
\hat{b}_i	$\frac{5179}{57600}$	0	$\frac{7571}{16695}$	$\frac{393}{640}$	$-\frac{92097}{339200}$	$\frac{187}{2100}$

Για την εύρεση της τάξης των μεθόδων του πρώτου ζεύγους και την επιβεβαίωση της τάξης αυτών του δεύτερου, ελέγχεται αν ισχύουν οι εξισώσεις συνθηκών (Πίνακας Δ.Ι) υπολογίζονται οι συντελεστές σφάλματος. Στον Πίνακα Δ.ΙV φαίνονται οι τιμές των συντελεστών σφάλματος με τη σειρά που εμφανίζονται στον Πίνακα Δ.Ι για κάθε μία από τις μεθόδους των δύο ζευγών. Έχουν υπολογιστεί προσεγγιστικά, δηλαδή χρησιμοποιώντας αριθμητικές προσεγγίσεις των κλασμάτων των πινάκων Butcher.

Τα αποτελέσματα αποδεικνύουν ότι η 1^η μέθοδος του 1^{ου} ζεύγους είναι 4^{ης} τάξης, η 2^η του 1^{ου} ζεύγους είναι 5^{ης} τάξης, η 1^η μέθοδος του 2^{ου} ζεύγους είναι 5^{ης} τάξης και η 2^η του 2^{ου} ζεύγους είναι 4^{ης} τάξης. Σημειώνεται ότι η 1^η μέθοδος κάθε ζεύγους χρησιμοποιείται για την εκτίμηση της λύσης, ενώ η 2^η μαζί με την 1^η για την εκτίμηση του τοπικού σφάλματος. Τελικά, το 1^ο ζεύγος είναι RK 4(5) και το 2^ο είναι RK 5(4).

Πίνακας 4.IV Αριθμητικός υπολογισμός των συντελεστών σφάλματος για κάθε μέθοδο των δύο ζευγών RK 4(5) και RK 5(4).

Μέθοδος RK→ Συνθήκες τάξης ↓	1 ^η /1 ^ο ζεύγος (Πίνακας Δ.Ι, συντελεστές b_i)	2 ^η /1 ^ο ζεύγος (Πίνακας Δ.Ι, συντελεστές \hat{b}_i)	1 ^η /2 ^ο ζεύγος (Πίνακας Δ.ΙΙ, συντελεστές b_i)	2 ^η /2 ^ο ζεύγος (Πίνακας Δ.ΙΙ, συντελεστές \hat{b}_i)
1	0.00E+00	0.00E+00	-2.22E-16	-1.11E-16
2	0.00E+00	0.00E+00	1.11E-16	0.00E+00
3	1.11E-16 5.55E-17	0.00E+00 2.78E-17	-8.33E-17 8.33E-17	-5.55E-17 2.78E-17
4	6.94E-18	6.94E-18	-3.47E-17	-1.39E-17
	6.94E-18	0.00E+00	-1.39E-17	6.94E-18
	2.78E-17	-5.55E-17	-1.39E-17	0.00E+00
	6.94E-18	6.94E-18	2.08E-17	6.94E-18
5	1.28E-03	-1.73E-18	-8.67E-18	8.08E-04
	8.01E-05	0.00E+00	-8.67E-18	1.03E-04
	2.40E-04	6.94E-18	6.94E-18	3.08E-04
	8.01E-05	1.73E-18	0.00E+00	1.03E-04
	-1.28E-03	0.00E+00	-6.94E-18	-7.89E-04
	-8.01E-05	-6.94E-18	-6.94E-18	-4.38E-05
	-1.20E-04	-1.39E-17	-6.25E-17	-6.57E-05
	-1.20E-04	6.25E-17	3.47E-17	-6.57E-05
-2.00E-05	1.73E-18	5.20E-18	-1.10E-05	
6	-1.39E-03	-9.08E-04	2.78E-04	-4.72E-05
	-3.74E-04	-3.74E-04	-2.17E-18	1.44E-05
	-5.61E-04	-5.61E-04	-2.60E-18	2.17E-05
	-1.72E-03	-1.12E-03	-3.47E-18	-2.39E-04
	3.32E-03	1.82E-03	8.67E-19	1.00E-03
	1.12E-03	7.48E-04	6.17E-05	4.88E-04
	8.37E-04	5.61E-04	4.63E-05	3.66E-04
	1.67E-03	1.12E-03	9.26E-05	7.31E-04
	3.35E-03	2.24E-03	1.85E-04	1.46E-03
	2.67E-03	1.55E-03	-2.78E-04	7.94E-04
	5.34E-04	4.54E-04	-6.94E-18	2.23E-04
	8.01E-04	6.81E-04	-3.47E-18	3.35E-04
	2.20E-03	1.36E-03	2.08E-17	9.67E-04
	-2.30E-03	-1.23E-03	-1.73E-17	-7.98E-04
	-6.38E-04	-4.14E-04	-3.09E-05	-1.62E-04
	-4.60E-03	-2.46E-03	1.39E-17	-1.60E-03
-1.28E-03	-8.28E-04	-6.17E-05	-3.24E-04	
-9.57E-04	-6.21E-04	-4.63E-05	-2.43E-04	
-1.91E-03	-1.24E-03	-9.26E-05	-4.86E-04	
-3.83E-03	-2.48E-03	-1.85E-04	-9.71E-04	

Δ.3 Επαλήθευση κώδικα επίλυσης συστήματος διαφορικών εξισώσεων με τα ζεύγη μεθόδων Runge-Kutta

Στην παρούσα παράγραφο α) ελέγχεται αν το πραγματικό σφάλμα ξεπερνά το επιβαλλόμενο από το χρήστη φράγμα (*tol*) και β) επαληθεύεται η τάξη ακρίβειας της λύσης στα παρακάτω 8 προβλήματα αρχικών τιμών για τα οποία η αναλυτική λύση είναι γνωστή:

$$(\Delta.A): \frac{dy}{dx} = -\frac{y^3}{2}, x \in [0, 10], y(0) = 1, \text{ με αναλυτική λύση } y = \frac{1}{\sqrt{1+x}}.$$

$$(\Delta.B): \frac{dy}{dx} = \frac{y}{4} \left(1 - \frac{y}{20} \right), x \in [0, 10], y(0) = 1, \text{ με αναλυτική λύση } y = \frac{20}{(1+19e^{-x/4})}.$$

$$(\Delta.Γ): \frac{dy}{dx} = xy^2 - y, x \in [0, 1], y(0) = 2, \text{ με αναλυτική λύση } y = \frac{1}{\left(1+x - \frac{1}{2}e^x \right)}.$$

$$(\Delta.Δ): \frac{dy}{dx} = \frac{y+2x^3}{x}, x \in [1, 2], y(1) = 1, \text{ με αναλυτική λύση } y = x^3.$$

$$(\Delta.E): \frac{dy}{dx} = \begin{cases} \frac{y}{4} \left(1 - \frac{y}{20} \right), & x \in [0, 10] \\ -\frac{y^2}{2}, & x \in [10, 20] \end{cases}, y(0) = 1, \text{ με αναλυτική λύση}$$

$$y = \begin{cases} \frac{20}{(1+19e^{-x/4})}, & x \in [0, 10] \\ \frac{2}{x+2c_1}, & x \in [10, 20] \end{cases}, c_1 = \frac{(1+19e^{-x/4})}{20} - 5$$

$$(\Delta.ΣΤ): \frac{dy}{dx} = \begin{cases} x-y, & x \in [0, 0.5] \\ 1, & x \in [0.5, 1] \\ x-y, & x \in [1, 2] \end{cases}, y(0) = 1, \text{ με αναλυτική λύση}$$

$$y = \begin{cases} x-1+c_1e^{-x}, & x \in [0, 0.5] \\ x+c_2, & x \in [0.5, 1] \\ x-1+c_3e^{-x}, & x \in [1, 2] \end{cases}, c_1 = 3, c_2 = c_1e^{-1/2} - 1, c_3 = (1+c_2)e.$$

$$(\Delta.Z): \frac{dy_1}{dx} = -\frac{1}{x(x^2+1)}y_1 + \frac{1}{x^2(x^2+1)}y_2 + \frac{1}{x} \text{ και}$$

$$\frac{dy_2}{dx} = -\frac{x^2}{(x^2+1)}y_1 + \frac{2x^2+1}{x(x^2+1)}y_2 + 1,$$

$x \in [1, 5]$, $y_1(1) = 1$ και $y_2(1) = 0$, με αναλυτική λύση

$$y_1 = \frac{1}{2}x + \frac{1}{2x} + \ln(x) \text{ και } y_2 = \frac{1}{2}x - \frac{1}{2}x^2 + x \ln(x).$$

$$(\Delta.H): \frac{dy_1}{dx} = -y_2 \text{ και}$$

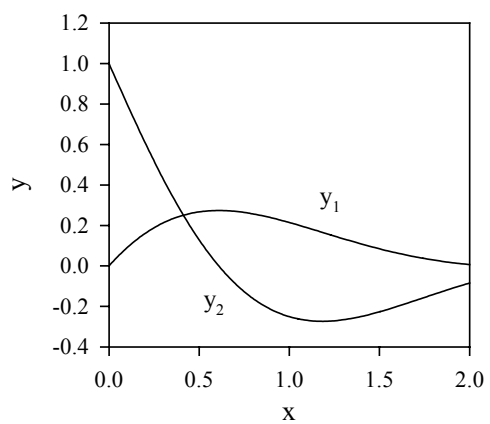
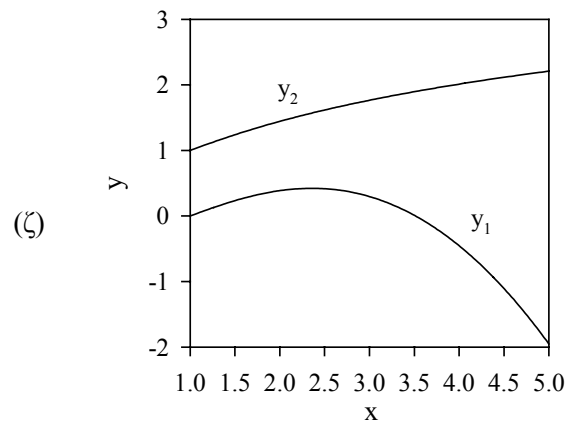
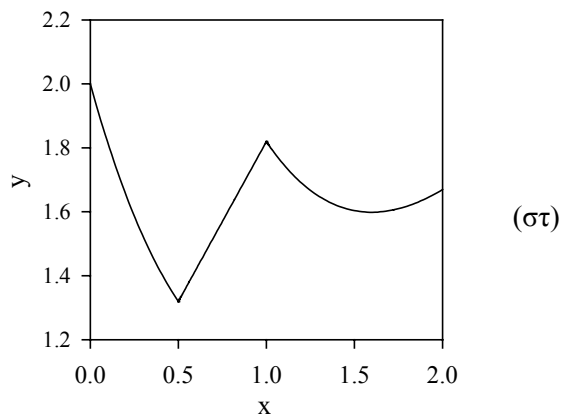
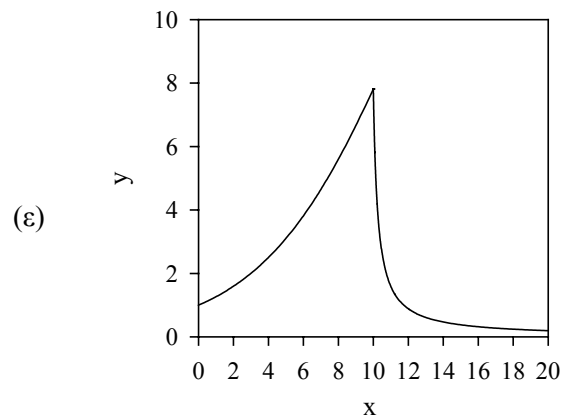
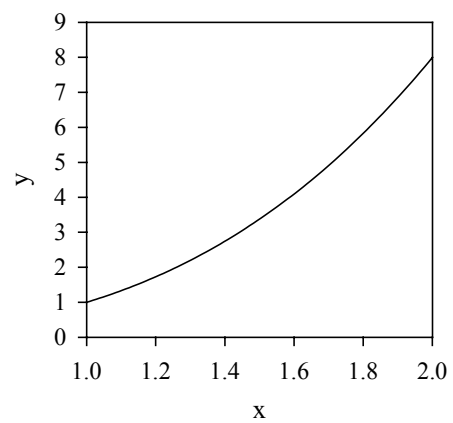
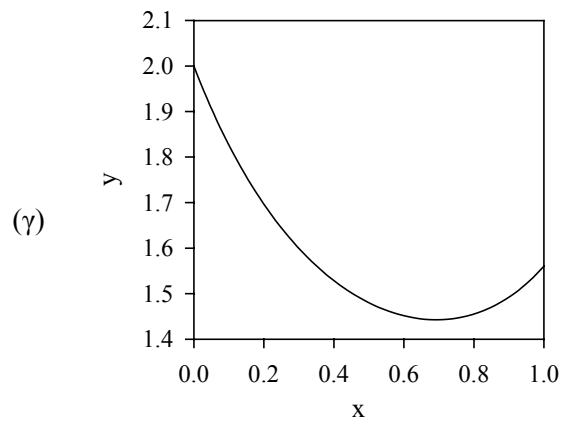
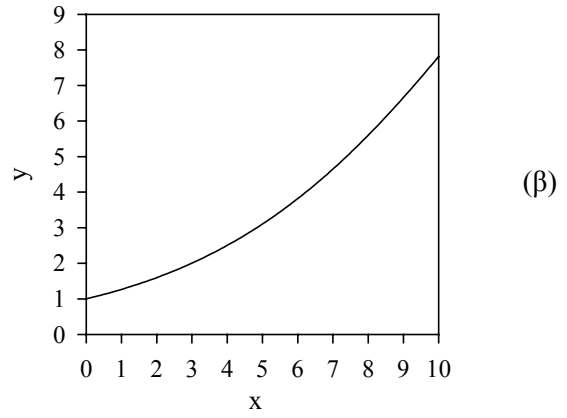
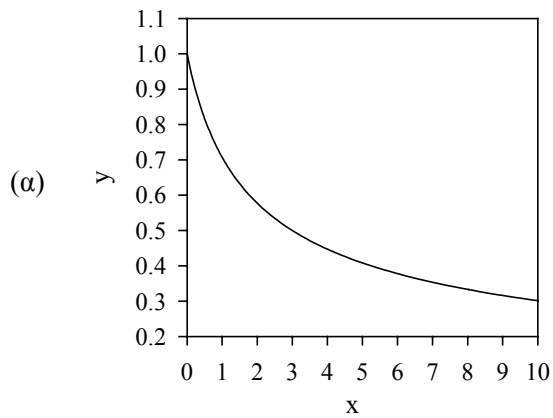
$$\frac{dy_2}{dx} = -2y_2 - 5y_1 + e^{-x} \sin(x),$$

$x \in [0, 2]$, $y_1(0) = 0$ και $y_2(0) = 1$, με αναλυτική λύση

$$y_1 = \frac{1}{3}e^{-x} [\sin(2x) + \sin(x)] \text{ και } y_2 = \frac{1}{3}e^{-x} [2 \cos(2x) + \sin(2x) + \cos(x) - \sin(x)].$$

Η παραπάνω λίστα περιέχει μη γραμμικές συνήθεις διαφορικές εξισώσεις, περιπτώσεις όπου η παράγωγος της λύσης δεν είναι συνεχής ($\Delta.E$, $\Delta.ΣΤ$) καθώς και συστήματα διαφορικών εξισώσεων ($\Delta.Z$, $\Delta.H$). Οι γραφικές παραστάσεις των λύσεων των παραπάνω προβλημάτων φαίνονται στο Σχήμα $\Delta.1$.

Στον Πίνακα $\Delta.V$ φαίνεται το επιβαλλόμενο από το χρήστη φράγμα του τοπικού σφάλματος και το παρατηρούμενο σφάλμα, κατά την επίλυση των παραδειγμάτων $\Delta.A - \Delta.H$ με το ζεύγος RK 4(5). Τα ίδια φαίνονται στον Πίνακα $\Delta.VI$ για το ζεύγος RK 5(4).



Σχήμα 4.1 Αναλυτική λύση για το πρόβλημα (α) Δ.Α, (β) Δ.Β, (γ) Δ.Γ, (δ) Δ.Δ, (ε) Δ.Ε, (στ) Δ.ΣΤ, (ζ) Δ.Ζ, (η) Δ.Η.

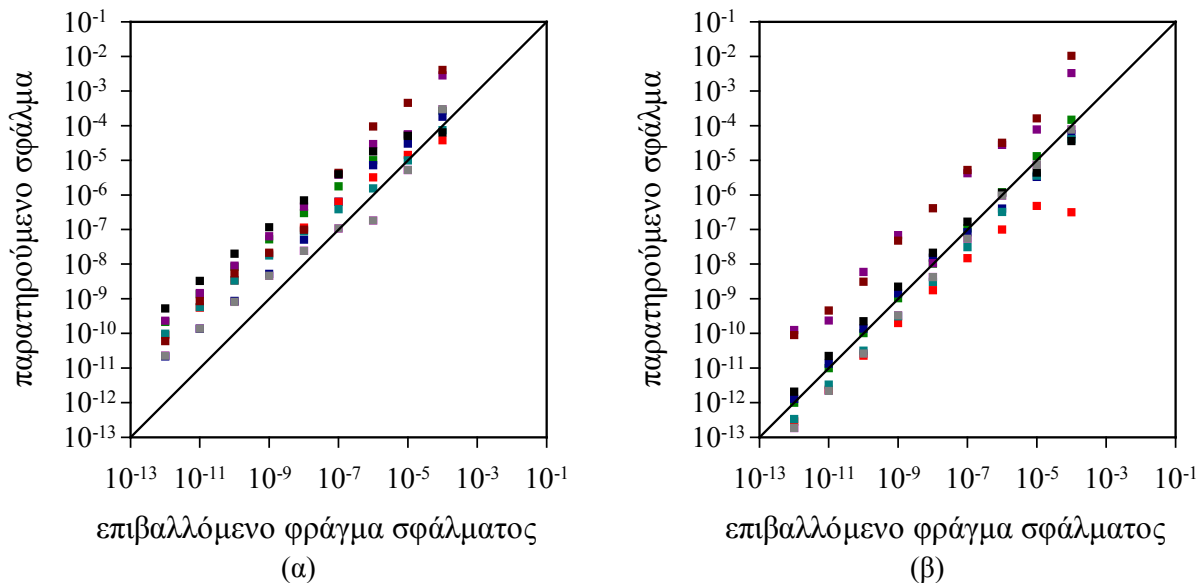
Πίνακας 4.V Παρατηρούμενο σφάλμα $\|e\|_{\infty}$, $e = (e_1, e_2, \dots, e_k)$, $e_i = \|y_i - y_{i,real}\|_{\infty}$, $y_i = (y_{i,1}, y_{i,2}, \dots, y_{i,n})$, k το πλήθος των ΣΔΕ και n το πλήθος των βημάτων ολοκλήρωσης] κατά την επίλυση των παραδείγματων $\Delta.A - \Delta.H$ με το ζεύγος RK 4(5), συναρτήσει του επιβαλλόμενου φράγματος στο τοπικό σφάλμα.

Παράδειγμα \rightarrow Φράγμα \downarrow	($\Delta.A$)	($\Delta.B$)	($\Delta.G$)	($\Delta.\Delta$)	($\Delta.E$)	($\Delta.\Sigma T$)	($\Delta.Z$)	($\Delta.H$)
10^{-4}	2.98E-04	2.69E-04	1.81E-04	3.77E-05	2.84E-03	4.03E-03	6.41E-05	3.36E-04
10^{-5}	5.23E-06	5.31E-05	3.06E-05	1.44E-05	5.61E-05	4.55E-04	5.08E-05	4.77E-05
10^{-6}	1.82E-07	1.01E-05	7.17E-06	3.23E-06	2.91E-05	9.44E-05	1.81E-05	6.74E-06
10^{-7}	1.08E-07	1.76E-06	6.38E-07	6.25E-07	3.85E-06	4.30E-06	3.95E-06	9.88E-07
10^{-8}	2.44E-08	3.00E-07	5.09E-08	1.13E-07	4.54E-07	9.87E-08	6.98E-07	1.49E-07
10^{-9}	4.63E-09	5.24E-08	5.24E-09	2.01E-08	6.38E-08	2.13E-08	1.16E-07	2.31E-08
10^{-10}	8.15E-10	8.42E-09	8.63E-10	3.41E-09	9.04E-09	5.39E-09	2.01E-08	3.60E-09
10^{-11}	1.38E-10	1.35E-09	1.37E-10	5.53E-10	1.46E-09	8.58E-10	3.25E-09	5.62E-10
10^{-12}	2.27E-11	2.17E-10	2.17E-11	8.96E-11	2.34E-10	6.03E-11	5.24E-10	8.83E-11

Πίνακας 4.VI Παρατηρούμενο σφάλμα $\|e\|_{\infty}$, $e = (e_1, e_2, \dots, e_k)$, $e_i = \|y_i - y_{i,real}\|_{\infty}$, $y_i = (y_{i,1}, y_{i,2}, \dots, y_{i,n})$, k το πλήθος των ΣΔΕ και n το πλήθος των βημάτων ολοκλήρωσης] κατά την επίλυση των παραδείγματων $\Delta.A - \Delta.H$ με το ζεύγος RK 5(4), συναρτήσει του επιβαλλόμενου φράγματος στο τοπικό σφάλμα.

Παράδειγμα \rightarrow Φράγμα \downarrow	($\Delta.A$)	($\Delta.B$)	($\Delta.G$)	($\Delta.\Delta$)	($\Delta.E$)	($\Delta.\Sigma T$)	($\Delta.Z$)	($\Delta.H$)
10^{-4}	7.73E-05	1.49E-04	5.67E-05	3.15E-07	3.30E-03	1.04E-02	3.58E-05	6.16E-05
10^{-5}	7.37E-06	1.31E-05	3.29E-06	4.78E-07	7.68E-05	1.63E-04	4.40E-06	5.87E-06
10^{-6}	9.53E-07	1.19E-06	4.02E-07	1.00E-07	2.78E-05	3.21E-05	1.15E-06	5.78E-07
10^{-7}	5.44E-08	1.08E-07	8.41E-08	1.49E-08	4.21E-06	5.24E-06	1.69E-07	6.09E-08
10^{-8}	4.24E-09	1.03E-08	1.52E-08	1.77E-09	1.07E-08	4.12E-07	2.14E-08	6.02E-09
10^{-9}	3.32E-10	1.03E-09	1.42E-09	1.99E-10	6.89E-08	4.75E-08	2.24E-09	6.00E-10
10^{-10}	2.64E-11	1.01E-10	1.37E-10	2.29E-11	5.97E-09	3.09E-09	2.25E-10	6.02E-11
10^{-11}	2.17E-12	9.99E-12	1.33E-11	2.36E-12	2.37E-10	4.60E-10	2.22E-11	6.02E-12
10^{-12}	1.86E-13	1.00E-12	1.30E-12	2.87E-13	1.25E-10	8.99E-11	2.08E-12	6.02E-13

Συγκεντρωτικά τα αποτελέσματα για όλα τα παραδείγματα φαίνονται στα Σχήματα Δ.2α και Δ.2β, όπου φαίνεται το παρατηρούμενο σφάλμα συναρτήσει του επιβαλλόμενου φράγματος όταν χρησιμοποιείται το ζεύγος RK 4(5) και RK 5(4) αντίστοιχα.



Σχήμα 4.2 (α) Παρατηρούμενο σφάλμα [$\|e\|_\infty$, $e = (e_1, e_2, \dots, e_k)$, $e_i = \|\mathbf{y}_i - \mathbf{y}_{i,real}\|_\infty$, $\mathbf{y}_i = (y_{i,1}, y_{i,2}, \dots, y_{i,n})$, k το πλήθος των ΣΔΕ και n το πλήθος των βημάτων ολοκλήρωσης] κατά την επίλυση των παραδειγμάτων Δ.Α – Δ.Η με το ζεύγος RK 4(5), συναρτήσει του επιβαλλόμενου φράγματος. (β) Το ίδιο με (α) για το ζεύγος RK 5(4).

Γενικά το ζεύγος RK 5(4) δίδει καλύτερα αποτελέσματα, ειδικά για χαμηλές τιμές φράγματος. Το σφάλμα για το ζεύγος RK 5(4) είναι σχεδόν ίσο με το φράγμα σε κάθε παράδειγμα. Το σύνολο των σημείων που υπερβαίνει τη διαγώνιο στο Σχήμα Δ.2β αφορούν στα παραδείγματα Δ.Ε και Δ.ΣΤ όπου υπάρχει ασυνέχεια στην παράγωγο της λύσης (Σχήματα Δ.1ε και Δ.1στ). Ωστόσο, ακόμη και σε αυτές τις περιπτώσεις τα αποτελέσματα κρίνονται ικανοποιητικά.

Για την επαλήθευση του κώδικα, υπολογίζεται η παρατηρούμενη τάξη ακρίβειας της μεθόδου του ζεύγους που χρησιμοποιείται για την εκτίμηση της λύσης, δηλαδή της RK 4 του 1^{ου} ζεύγους όπως ορίζεται από τον Πίνακα Δ.ΙΙ (αγνοώντας τη γραμμή των συντελεστών \hat{b}_i) και της RK 5 του 2^{ου} ζεύγους όπως ορίζεται από τον Πίνακα Δ.ΙΙΙ (αγνοώντας τη γραμμή των συντελεστών \hat{b}_i). Σε κάθε περίπτωση υπολογίζεται η αριθμητική λύση για σταθερό βήμα h . Πρόκειται για επαλήθευση με τη μέθοδο των κατασκευασμένων λύσεων, και για αυτό το λόγο η παρατηρούμενη τάξη υπολογίζεται μόνο για εκείνα τα παραδείγματα τα οποία ικανοποιούν τις οδηγίες της §Α.4.3 για την κατασκευή λύσεων. Εξαιρούνται δηλαδή τα παραδείγματα Δ.Ε και Δ.ΣΤ όπου υπάρχει ασυνέχεια στην παράγωγο της λύσης.

Στον Πίνακα Δ.ⅦΙ φαίνεται το παρατηρούμενο σφάλμα συναρτήσει του βήματος ολοκλήρωσης (μέτρο διακριτοποίησης). Στον ίδιο πίνακα φαίνεται και η παρατηρούμενη τάξη (§Β.4).

Πίνακας Δ.VII Παρατηρούμενο σφάλμα [$\|e\|_\infty$, $e = (e_1, e_2, \dots, e_k)$, $e_i = \|y_i - y_{i,real}\|_\infty$, $y_i = (y_{i,1}, y_{i,2}, \dots, y_{i,n})$, k το πλήθος των ΣΔΕ και n το πλήθος των βημάτων ολοκλήρωσης] και παρατηρούμενη τάξη κατά την επίλυση των παραδειγμάτων Δ.Α – Δ.Η με τις μεθόδους RK 4 του ζεύγους RK 4(5) (Πίνακας Δ.II) RK 5 του ζεύγους RK 5(4) συναρτήσει του βήματος ολοκλήρωσης h .

Μέθοδος		RK 4 του ζεύγους RK 4(5)		RK 5 του ζεύγους RK 5(4)	
Παρά- δειγμα	h	παρατηρούμενο σφάλμα	παρατηρούμενη τάξη	παρατηρούμενο σφάλμα	παρατηρούμενη τάξη
(Δ.Α)	1	8.65E-03		9.55E-03	
	0.5	9.46E-05	6.51	1.06E-04	6.49
	0.25	1.31E-07	9.50	9.53E-07	6.80
	0.125	4.01E-08	1.70	1.09E-08	6.45
	0.0625	2.80E-09	3.84	1.63E-10	6.06
	0.03125	1.75E-10	4.00	3.08E-12	5.72
	0.015625	1.09E-11	4.01	7.02E-14	5.45
(Δ.Β)	1	1.40E-05		1.05E-06	
	0.5	1.04E-06	3.75	3.05E-08	5.10
	0.25	7.13E-08	3.87	9.08E-10	5.07
	0.125	4.65E-09	3.94	2.76E-11	5.04
	0.0625	2.97E-10	3.97	8.50E-13	5.02
	0.03125	1.88E-11	3.98	3.20E-14	4.73
	0.015625	1.20E-12	3.97	8.88E-15	1.85
(Δ.Γ)	1	1.15E-06		4.52E-08	
	0.5	4.71E-08	4.61	1.15E-09	5.30
	0.25	2.10E-09	4.49	2.85E-11	5.34
	0.125	1.04E-10	4.34	7.26E-13	5.30
	0.0625	5.59E-12	4.21	2.58E-14	4.82
	0.03125	3.16E-13	4.15	7.11E-15	1.86
	0.015625	2.49E-14	3.67	6.88E-15	0.05
(Δ.Δ)	0.2	8.48E-06		2.36E-07	
	0.1	7.78E-07	3.45	1.36E-08	4.12
	0.05	5.77E-08	3.75	5.43E-10	4.65
	0.025	3.91E-09	3.88	1.90E-11	4.84
	0.0125	2.54E-10	3.94	6.61E-13	4.85
	0.00625	1.61E-11	3.98	1.10E-13	2.58
	0.003125	9.49E-13	4.08	1.30E-13	-0.24
(Δ.Ζ)	1	6.66E-04		2.26E-04	
	0.5	5.86E-05	3.51	1.99E-06	6.83
	0.25	1.06E-05	2.46	3.61E-07	2.46
	0.125	9.34E-07	3.51	1.81E-08	4.32
	0.0625	6.74E-08	3.79	6.85E-10	4.72
	0.03125	4.50E-09	3.90	2.35E-11	4.87
	0.015625	2.91E-10	3.95	7.65E-13	4.94
(Δ.Η)	0.4	1.39E-03		2.16E-04	
	0.2	6.15E-05	4.50	4.44E-06	5.61
	0.1	3.17E-06	4.28	1.24E-07	5.16
	0.05	1.79E-07	4.15	3.65E-09	5.09
	0.025	1.06E-08	4.07	1.11E-10	5.04
	0.0125	6.47E-10	4.04	3.41E-12	5.02
	0.00625	3.99E-11	4.02	1.08E-13	4.99

Η τάξη ακρίβειας επιβεβαιώνεται σε κάθε παράδειγμα. Η απόκλιση από τη θεωρητική τάξη ακρίβειας σε μικρές τιμές του h κάποια παραδείγματα οφείλονται στην μικρή απόλυτη τιμή του σφάλματος που προσεγγίζει την ακρίβεια του υπολογιστή για τους αριθμούς διπλής ακρίβειας (double precision, 16 σημαντικά ψηφία).

Παράρτημα Ε

Φίλτρο ελαχίστου και δυαδικό δένδρο

Η υλοποίηση της μεθόδου ταχυ-βηματισμού βασίζεται σε δομή δεδομένων που περιγράφεται με τον όρο φίλτρο ελαχίστου και επιταχύνει την άμεση επίλυση της εξίσωσης Eikonal. Περιγράφονται οι βασικές έννοιες του σχήματος καταχώρισης του φίλτρου ελαχίστου, δηλαδή του δυαδικού δένδρου, καθώς και οι αλγόριθμοι χειρισμού δεδομένων του φίλτρου ελαχίστου.

E.1 Εισαγωγή

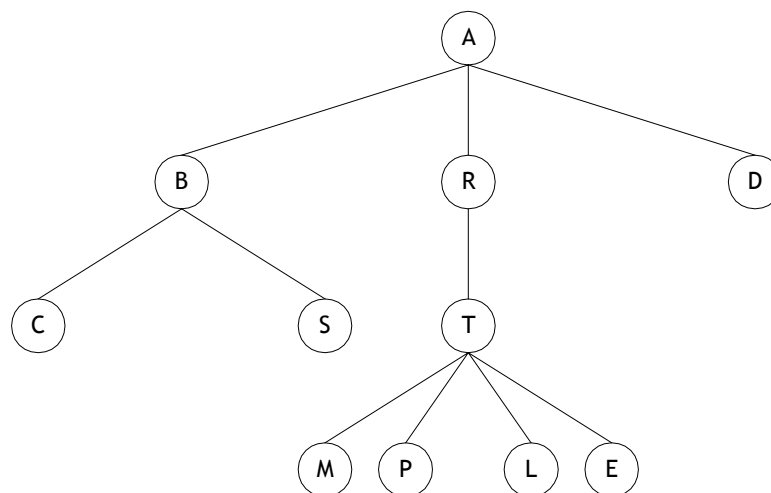
Αρχικά περιγράφονται οι βασικές αρχές των σχημάτων καταχώρισης δεδομένων δένδρο και δυαδικό δένδρο και στη συνέχεια περιγράφεται η λειτουργία μιας ουράς προτεραιότητας. Ο σκοπός είναι ο εντοπισμός του ελαχίστου μιας συλλογής δεδομένων, η οποία είναι δυναμική δηλαδή, συμβαίνουν εισαγωγές και διαγραφές στοιχείων σε αυτή.

E.2 Δένδρο

Δένδρο είναι ένα σχήμα καταχώρισης δεδομένων που αποτελείται από κόμβους (nodes, vertices) και ακμές (edges, lines) που ικανοποιούν συγκεκριμένες απαιτήσεις [Sedgewick (1992), σ. 35]. Ο *κόμβος* είναι η μονάδα αναφοράς σε μια δομή δεδομένων: σε αυτόν αποθηκεύεται οποιοσδήποτε τύπος δεδομένων (π.χ. αντικείμενα, πληροφορίες). *Ακμή* είναι η γραμμή σύνδεσης μεταξύ δύο κόμβων. *Βαθμός* (degree) ενός κόμβου είναι το πλήθος των ακμών που είναι συνδεδεμένοι με αυτόν τον κόμβο.

Διαδρομή ή *μονοπάτι* (path) σε ένα δένδρο είναι μια λίστα από διακριτούς κόμβους στην οποία οι διαδοχικοί κόμβοι συνδέονται με ακμές του δένδρου.

Ένας κόμβος στο δένδρο ορίζεται ως η *ρίζα* (root) του δένδρου. *Η χαρακτηριστική ιδιότητα ενός δένδρου είναι ότι υπάρχει ακριβώς μία διαδρομή μεταξύ της ρίζας και κάθε κόμβου στο δένδρο.* Στο Σχήμα E.1 φαίνεται ένα παράδειγμα δένδρου.



Σχήμα E.1 Παράδειγμα δένδρου. Στους κόμβους του έχουν καταχωρηθεί γράμματα του λατινικού αλφαβήτου.

Η απεικόνιση δένδρου που συνήθως χρησιμοποιείται έχει τη ρίζα στην κορυφή (ο κόμβος με το A στο Σχήμα E.1). Ο κόμβος y είναι κάτω από τον κόμβο x (και ο x πάνω από τον y), αν ο κόμβος x είναι στη διαδρομή από το y προς τη ρίζα. Με άλλα λόγια, ο y είναι κάτω από τον κόμβο x , αν η διαδρομή που τους συνδέει δεν περνά από τη ρίζα. Κάθε κόμβος, εκτός από τη ρίζα, έχει ακριβώς ένα κόμβο πάνω από αυτόν, ο οποίος καλείται

πατρικός του (parent). Οι κόμβοι ακριβώς κάτω από κάποιο κόμβο ονομάζονται *θυγατρικοί* του (children, sons). Για παράδειγμα, στο Σχήμα E.1 οι κόμβοι με τα γράμματα M, P, L, E είναι θυγατρικοί του κόμβου με το γράμμα T. *Αδελφικοί* (sibling) λέγονται οι κόμβοι που έχουν τον ίδιο πατρικό κόμβο. Κόμβος χωρίς θυγατρικούς καλείται *φύλλο* (leaf).

Ο κόμβος x είναι *απόγονος* {descendant, [Γεωργακόπουλος (2002), σ. 611]} του y, εάν υπάρχει μια σειρά κόμβων που αρχίζει από τον y και τελειώνει στον x, έτσι ώστε ο επόμενος κόμβος να είναι θυγατρικός του προηγούμενου. Ο κόμβος y είναι *πρόγονος* (ancestor) του x, εάν και μόνον αν, ο x είναι απόγονος του y. Στο Σχήμα E.1 ο κόμβος με το γράμμα R είναι πρόγονος των κόμβων με τα T, M, P, L, E και απόγονος του κόμβου με το A.

Κάθε κόμβος είναι η ρίζα για το *υπόδενδρο* (subtree) που αποτελείται από αυτόν τον κόμβο και όλους τους κόμβους κάτω από αυτόν. Στο δένδρο που φαίνεται στο Σχήμα E.1, υπάρχουν 7 υπόδενδρα με 1 κόμβο, 1 υπόδενδρο με 3 κόμβους, 1 υπόδενδρο με 5 κόμβους και 1 με 6 κόμβους. *Δάσος* είναι ένα σύνολο δένδρων. Για παράδειγμα, αν διαγραφεί η ρίζα του δένδρου του Σχήματος E.1 και οι ακμές που ξεκινούν από αυτή, προκύπτει ένα δάσος με τρία δένδρα με ρίζες τους κόμβους με τα B, R, και D.

Οι κόμβοι ενός δένδρου ανήκουν σε *επίπεδα*: Το *επίπεδο* (level) στο οποίο ανήκει ένας κόμβος είναι το πλήθος των κόμβων στη διαδρομή από αυτό τον κόμβο μέχρι τη ρίζα (χωρίς να συμπεριλαμβάνεται ο ίδιος) ή αλλιώς το πλήθος των ακμών από τον κόμβο μέχρι τη ρίζα. Στο Σχήμα 1 οι κόμβοι με τα L, B βρίσκονται στα επίπεδα 3 και 1 αντίστοιχα.

Κλάδος (branch) δένδρου είναι σειρά κόμβων από τη ρίζα έως ένα φύλλο, στην οποία ο ένας κόμβος είναι θυγατρικός του προηγούμενου. Το *μήκος κλάδου* είναι το πλήθος των ακμών του κλάδου ή αλλιώς το επίπεδο του φύλλου του κλάδου. Καταχρηστικά, κλάδος καλείται και το τμήμα κλάδου.

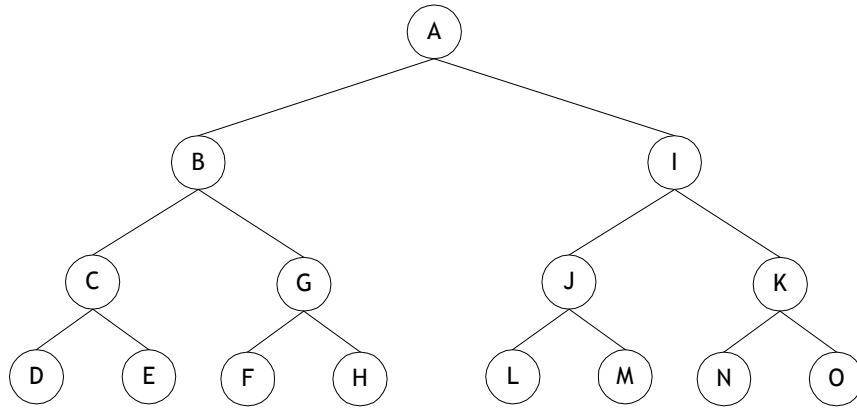
Το *βάθος κόμβου* (node depth) ονομάζεται το μήκος τμήματος κλάδου που οδηγεί από τη ρίζα έως αυτόν. Κόμβοι με το ίδιο βάθος ανήκουν στο ίδιο επίπεδο.

Το *ύψος κόμβου* (node height) είναι το μήκος του μέγιστου τμήματος κλάδου που εκκινεί από τον κόμβο και καταλήγει σε φύλλο του δένδρου.

Το *ύψος ενός δένδρου* (height) ορίζεται ως η μέγιστη απόσταση της ρίζας του δένδρου από τα φύλλα του. Προκύπτει από το μέγιστο κλάδο του δένδρου.

E.3 Δυαδικό δένδρο

Δυαδικό (binary) ονομάζεται το δένδρο στο οποίο κάθε κόμβος έχει κανένα, ένα ή δύο διακεκριμένους θυγατρικούς κόμβους. Οι θυγατρικοί κόμβοι διακρίνονται σε αριστερό και δεξιό. Ένα παράδειγμα δυαδικού δένδρου φαίνεται στο Σχήμα E.2.



Σχήμα E.2 Παράδειγμα πλήρως ισορροπημένου δυαδικού δένδρου. Στους κόμβους του έχουν καταχωρηθεί γράμματα του λατινικού αλφαβήτου.

Όταν ανά δύο όλοι οι κλάδοι του δυαδικού δένδρου έχουν διαφορά μήκους λιγότερο (ή ίσο) από (ή με) k , το δένδρο ονομάζεται $(\pm k)$ *ισορροπημένο* (balanced). Πλήρως ισορροπημένο λέγεται όταν $k=1$ [Γεωργακόπουλος (2002), σ. 62]. Το δυαδικό δένδρο στο Σχήμα E.2 είναι ένα παράδειγμα πλήρως ισορροπημένου δυαδικού δένδρου.

Το δυαδικό δένδρο αποτελεί σχήμα καταχώρισης δεδομένων που χρησιμοποιείται ευρύτατα. Το ύψος h του δένδρου είναι σημαντική παράμετρος στο υπολογιστικό κόστος των διαδικασιών σε ένα δυαδικό δένδρο και είναι επιθυμητό να είναι το ελάχιστο δυνατό. Το μικρότερο δυνατό ύψος, h , για πλήθος N στοιχείων συλλογής σε δυαδικό δένδρο επιτυγχάνεται [ο.π., σ. 57] όταν το δένδρο είναι πλήρως ισορροπημένο, όταν δηλαδή κάθε κλάδος του δένδρου έχει το ίδιο μήκος $\approx h$ (ή περίπου το ίδιο). Στο πλήρως ισορροπημένο δυαδικό δένδρο το πλήθος των στοιχείων του είναι

$$\begin{aligned}
 N &= 2^0 \text{ στο επίπεδο } 0 \\
 &+ 2^1 \text{ στο επίπεδο } 1 \\
 &+ 2^2 \text{ στο επίπεδο } 2 \\
 &+ \dots \\
 &+ 2^{h-1} \text{ στο επίπεδο } (h-1) = \\
 &= 2^h - 1 \text{ (άθροισμα } h \text{ πρώτων όρων γεωμετρικής προόδου)}
 \end{aligned}$$

οπότε $h = \log_2 N$.

E.4 Εντοπισμός ελαχίστου ή μεγίστου στοιχείου συλλογής δεδομένων. Ουρά προτεραιότητας

Τα δεδομένα της συλλογής μπορεί να μην είναι ακέραιοι ή πραγματικοί αριθμοί (που περικλείουν την έννοια της διάταξης) αλλά και αντικείμενα με κάποιο στοιχείο διάταξης. Ο εντοπισμός ελαχίστου ή μεγίστου στοιχείου αφορά σε αυτό το στοιχείο διάταξης των

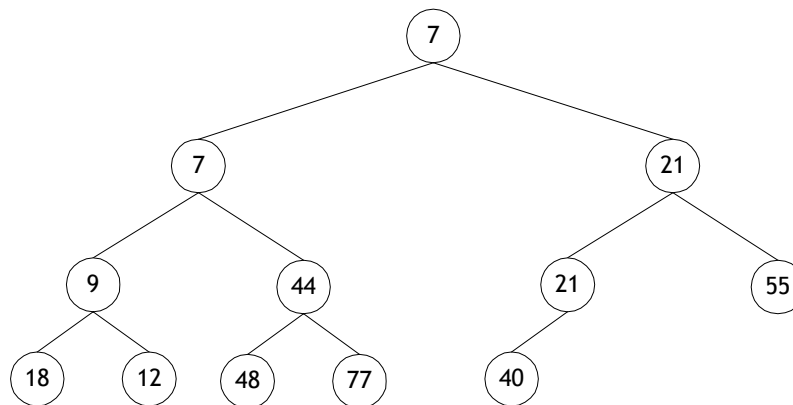
αντικειμένων της συλλογής. Από εδώ και στο εξής ο όρος ελάχιστο (μέγιστο) στοιχείο συλλογής θα σημαίνει το δεδομένο (π.χ. αντικείμενο, πληροφορία) με το ελάχιστο (μέγιστο) στοιχείο διάταξης.

Το ζητούμενο είναι τρόπος καταχώρισης στοιχείων επί των οποίων ορίζεται μια γραμμική διάταξη (π.χ. διάταξη πραγματικών αριθμών), τέτοιος ώστε να εντοπίζεται και να λαμβάνεται το ταχύτερο δυνατό το εκάστοτε μικρότερο (ή μεγαλύτερο) ως προς τη διάταξη.

Αν όλα τα δεδομένα της συλλογής είναι εξ' αρχής γνωστά, το παραπάνω πρόβλημα σχετίζεται με το πρόβλημα της ταξινόμησης. Ωστόσο, υπάρχει το ενδεχόμενο να συμβαίνουν «αφίξεις» (εισαγωγές) και «αναχωρήσεις» (διαγραφές) στοιχείων στη συλλογή, όποτε και προστίθενται στις ήδη οι απαιτήσεις ταχείας εισαγωγής και διαγραφής.

Ουρά προτεραιότητας {priority queue, [Γεωργακόπουλος (2002), σ. 55]} καλείται μία δομή δεδομένων με την οποία είναι εφικτή η ταχεία εισαγωγή και διαγραφή στοιχείων συλλογής, καθώς και ο άμεσος εντοπισμός του ελαχίστου (μεγίστου) στοιχείου.

Το σχήμα καταχώρισης της ουράς προτεραιότητας που εξυπηρετεί τον παραπάνω στόχο είναι το δυαδικό δένδρο. Τα στοιχεία της συλλογής είναι τοποθετημένα στους κόμβους του δυαδικού δένδρου που ικανοποιεί τη συνθήκη φίλτρου {heap condition, [Sedgewick (1992), σ. 149]} ελαχίστου (μεγίστου): κάθε κόμβος του δυαδικού δένδρου περιέχει στοιχείο μικρότερο (μεγαλύτερο) ή ίσο από τα στοιχεία των θυγατρικών του κόμβων. Στο Σχήμα E.3 φαίνεται η καταχώριση συλλογής στοιχείων σε δυαδικό δένδρο που ικανοποιεί τη συνθήκη φίλτρου ελαχίστου.



Σχήμα E.3 Καταχώριση της συλλογής ακεραίων αριθμών {18,12,48,77,40,55,21,44,9,7,21,7} σε φίλτρο ελαχίστου (δυαδικό δένδρο που ικανοποιεί τη συνθήκη φίλτρου ελαχίστου). Το δυαδικό δένδρο είναι πλήρως ισορροπημένο και διαδοχικά συμπληρωμένο.

Το κορυφαίο στοιχείο σε κάθε φίλτρο ελαχίστου (ρίζα του δυαδικού δένδρου) περιέχει το ελάχιστο στοιχείο, στοιχείο το οποίο μπορεί να ληφθεί άμεσα. Αν το πρώτο στοιχείο του φίλτρου διαγραφεί, το νέο ελάχιστο βρίσκεται στην κορυφή ενός εκ των δύο υποδένδρων και είναι άμεσα διαθέσιμο: αρκεί η επιλογή του μικρότερου από τα δύο αυτά στοιχεία. Προωθώντας το μικρότερο από τα δύο αυτά στοιχεία στην κορυφή ουσιαστικά διαγράφεται από το αντίστοιχο υπόδενδρο. Η διαδικασία διαγραφής-προώθησης μπορεί να

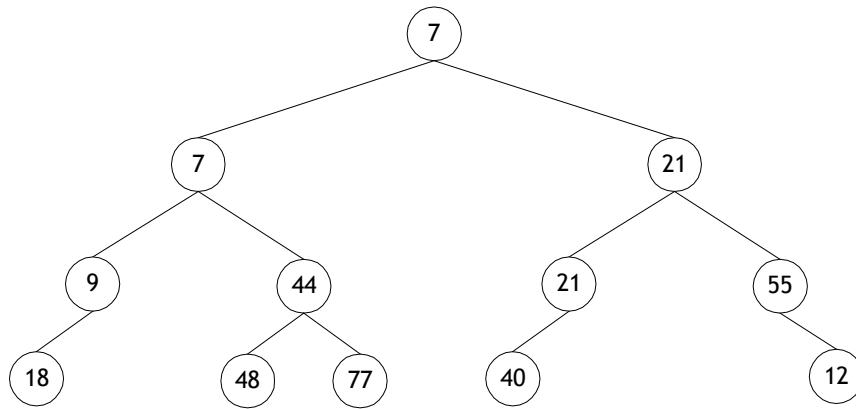
συνεχιστεί σε όλο το φίλτρο αναδρομικά. Με αυτό τον τρόπο η διαγραφή του κορυφαίου στοιχείου του φίλτρου διατηρεί αναλλοίωτη τη συνθήκη του φίλτρου και άρα της απαίτησης για τον ταχύ (άμεσο) εντοπισμό του νέου ελάχιστου στοιχείου (βρίσκεται στη ρίζα του δυαδικού δένδρου).

Στο σημείο κρίνεται αναγκαίο να γίνει διάκριση των όρων ουρά προτεραιότητας – φίλτρο ελάχιστου – δυαδικό δένδρο. Και οι τρεις όροι περικλείονται στην έννοια της δομής δεδομένων [Sedgewick (1992), σ. 27]. Ο πρώτος όρος (ουρά προτεραιότητας) είναι το αφηρημένο σχήμα της δομής που περιγράφει τις λειτουργίες και τις επιδόσεις της. Ο δεύτερος όρος (φίλτρο ελάχιστου) είναι η υλοποίησή της, δηλαδή ο τρόπος οργάνωσης των δεδομένων (με βάση τη συνθήκη ελάχιστου) καθώς και οι αλγόριθμοι χειρισμού των δεδομένων που διατηρούν τον τρόπο οργάνωσης (η εισαγωγή, διαγραφή στοιχείου, εντοπισμός ελάχιστου). Ο τρίτος όρος (δυαδικό δένδρο) είναι το σχήμα καταχώρισης των δεδομένων της δομής. Γενικά, ο χαρακτηρισμός μιας δομής δεδομένων προκύπτει από την υλοποίησή της: η δομή δεδομένων για τον εντοπισμό του ελάχιστου στοιχείου συλλογής που περιγράφηκε παραπάνω λέγεται φίλτρο ελάχιστου. Αν δεν είναι γνωστή η υλοποίηση, τότε η δομή χαρακτηρίζεται από το αφηρημένο σχήμα της (ουρά προτεραιότητας στο παραπάνω παράδειγμα).

E.5 Υλοποίηση ουράς προτεραιότητας σε φίλτρο ελάχιστου

Το φίλτρο ελάχιστου αποτελεί την υλοποίηση της ουράς προτεραιότητας. Το σχήμα καταχώρισης είναι το δυαδικό δένδρο, ενώ οι διαδικασίες – αλγόριθμοι χειρισμού των δεδομένων – στοιχείων είναι: α) εισαγωγή στοιχείων στο δυαδικό δένδρο, β) διαγραφή στοιχείων από το δυαδικό δένδρο και γ) η επιλογή του ελάχιστου στοιχείου.

Οι αλγόριθμοι χειρισμού των στοιχείων οφείλουν να διατηρούν αναλλοίωτη τη συνθήκη φίλτρου. Μόνον τότε το φίλτρο ελάχιστου θα εξυπηρετεί το σκοπό για τον οποίο σχεδιάστηκε: τον εντοπισμό του ελάχιστου στοιχείου. Επίσης, για λόγους ταχύτητας, οι αλγόριθμοι χειρισμού θα πρέπει να επιβάλλουν στο δυαδικό δένδρο το ελάχιστο δυνατό ύψος, h , το οποίο επιτυγχάνεται όταν το δυαδικό δένδρο είναι πλήρως ισορροπημένο [Γεωργακόπουλος (2002), σ. 57]. Όλοι οι αλγόριθμοι χειρισμού (όπως θα φανεί και παρακάτω) διεξάγονται σε κάποια διαδρομή του δυαδικού δένδρου μεταξύ της ρίζας και των φύλλων: είτε από θυγατρικό προς πατρικό κόμβο, είτε στην αντίθετη κατεύθυνση. Αν το ύψος είναι μικρό η πολυπλοκότητα των αλγορίθμων θα είναι μειωμένη και η ταχύτητα τους αυξημένη. Επομένως, οι αλγόριθμοι χειρισμού θα πρέπει να διατηρούν την ισορροπία του δυαδικού δένδρου. Αν υπάρχει τρόπος για τη διατήρηση της ισορροπίας του πλήρως ισορροπημένου δυαδικού δένδρου, τότε υπάρχει τρόπος και για την κατασκευή του: γίνεται εισαγωγή των στοιχείων ένα-ένα.



Σχήμα E.4 Καταχώριση της συλλογής ακεραίων αριθμών {18,12,48,77,40,55,21,44,9,7,21,7} σε φίλτρο ελαχίστου (δυναδικό δένδρο που ικανοποιεί τη συνθήκη φίλτρου ελαχίστου). Το δυναδικό δένδρο είναι πλήρως ισορροπημένο αλλά όχι διαδοχικά συμπληρωμένο.

Μια ακόμη απαίτηση από τους αλγόριθμους χειρισμού είναι να διατηρούν το δυναδικό δένδρο διαδοχικά συμπληρωμένο. Διαδοχικά συμπληρωμένο είναι το δυναδικό δένδρο που τα επίπεδα του είναι όλα πλήρη εκτός ίσως από το τελευταίο. Αν το τελευταίο δεν είναι πλήρες τότε τα στοιχεία διαδοχικά συμπληρώνουν το επίπεδο γεμίζοντας τους κόμβους από αριστερά προς τα δεξιά. Με αυτό τον τρόπο οι αλγόριθμοι χειρισμού γίνονται ταχύτεροι και η αποθήκευση των στοιχείων συμπαγής. Το δυναδικό δένδρο στο Σχήμα E.3 είναι διαδοχικά συμπληρωμένο, ενώ το αντίστοιχο στο Σχήμα E.4 δεν είναι.

Παρακάτω περιγράφονται οι αλγόριθμοι χειρισμού των στοιχείων στο φίλτρο ελαχίστου.

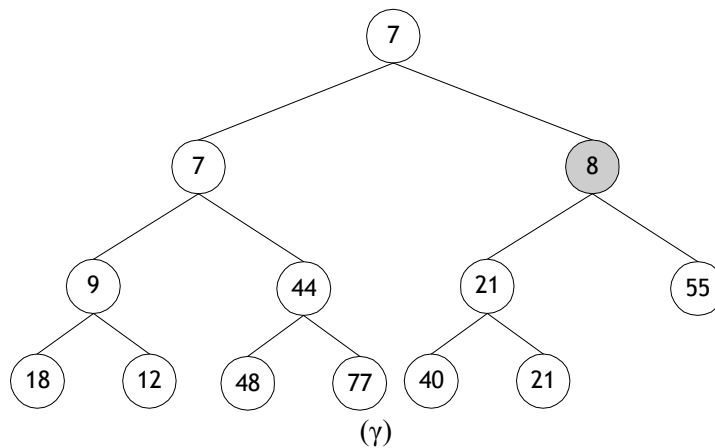
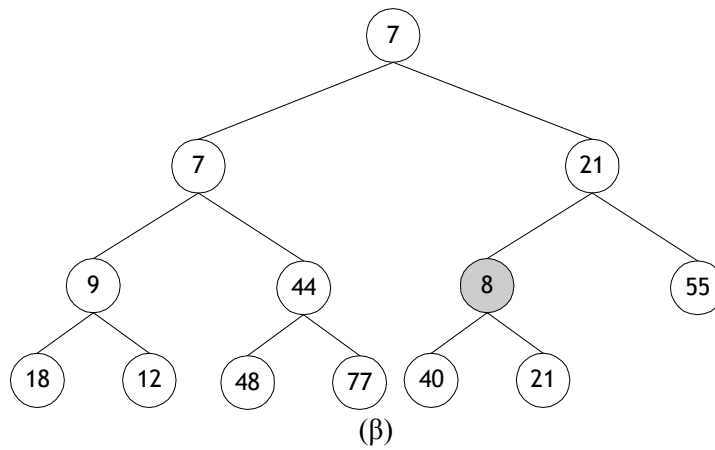
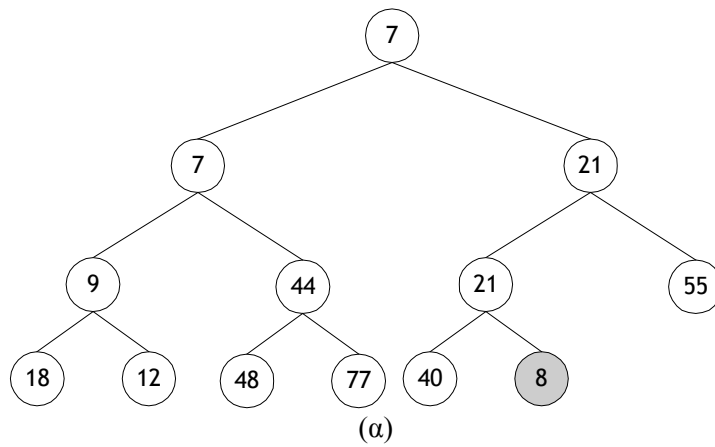
E.5.1 Εισαγωγή στοιχείου στο φίλτρο ελαχίστου

Η εισαγωγή νέου στοιχείου γίνεται στην αμέσως επόμενη διαθέσιμη θέση του τελευταίου επιπέδου. Έτσι, αυξάνονται τα μήκη των κλάδων κατά ένα, λαμβάνοντας αυτούς διαδοχικά. Κατ' αυτόν τον τρόπο η διαφορά των μηκών τους δεν πρόκειται να ξεπεράσει τη μονάδα.

Η εισαγωγή στοιχείου δεν πρέπει να μεταβάλλει τη συνθήκη φίλτρου. Το εισαχθέν στοιχείο θα πρέπει να πάρει κατάλληλη θέση στο δυναδικό δένδρο: συγκρίνεται με αυτό στον πατρικό του κόμβο και αν είναι μικρότερο αλλάζει θέση με το στοιχείο στον πατρικό. Η διαδικασία επαναλαμβάνεται μέχρι να βρεθεί πατρικός κόμβος με στοιχείο μικρότερο ή ίσο με το εισαχθέν. Στο Σχήμα E.4 φαίνονται τα βήματα εισαγωγής στοιχείου σε φίλτρο ελαχίστου.

Το πλήθος των βημάτων (π.χ. συγκρίσεων, αναθέσεων) είναι ευθέως ανάλογο με το ύψος του δένδρου. Πιο συγκεκριμένα, διεξάγονται το πολύ περίπου h συγκρίσεις και το πολύ περίπου $3h$ αναθέσεις, δηλαδή σύνολο περίπου $4h$ βήματα. Συνεπώς, η πολυπλοκότητα αυτού του αλγορίθμου είναι $O(h)$ στη χειρίστη περίπτωση (περίπτωση όπου το εισαχθέν είναι το ελάχιστο), όπου h το ύψος του δυναδικού δένδρου. Όμως για πλήρως ισορροπημένο

δυναδικό δένδρο είναι $h = \log_2 N$, όπου N το πλήθος των στοιχείων του φίλτρου. Συνεπώς, η πολυπλοκότητα της εισαγωγής ενός στοιχείου στο φίλτρο ελαχίστου είναι $O(\log_2 N)$ στη χειρίστη περίπτωση.

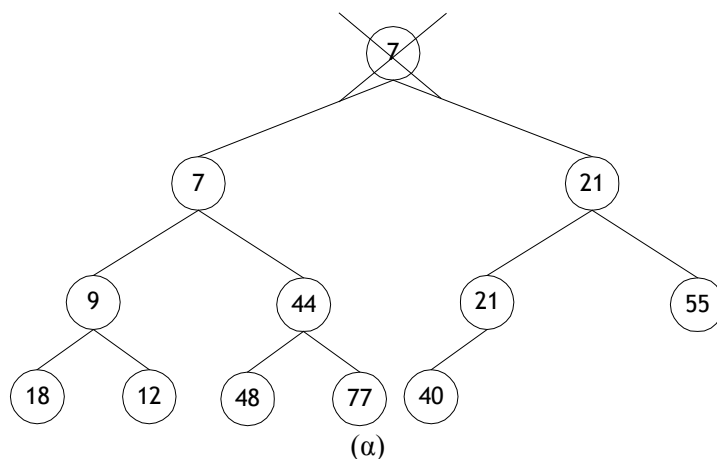


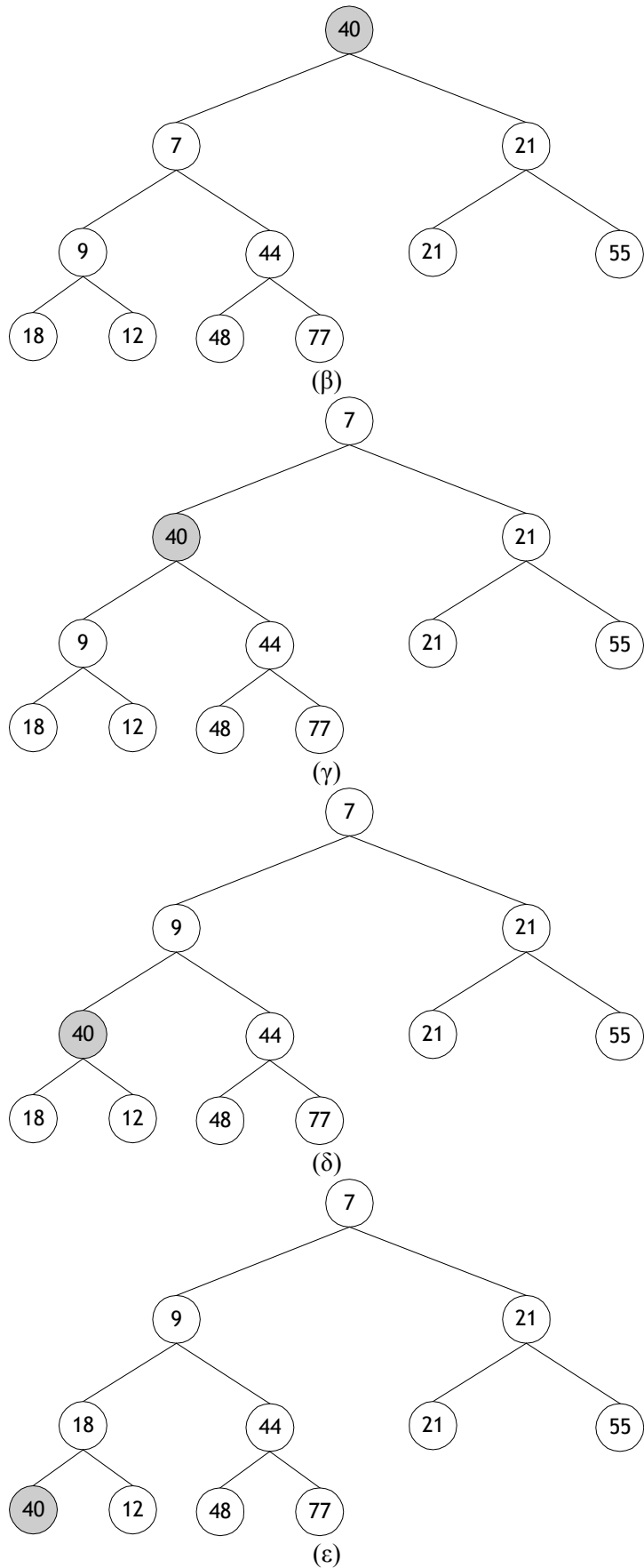
Σχήμα E.5 Διαδικασία εισαγωγής στοιχείου σε φίλτρο ελαχίστου. Το δυαδικό δένδρο είναι πλήρως ισορροπημένο και διαδοχικά συμπληρωμένο. (α) Εισαγωγή του νέου στοιχείου {8} στην αμέσως επόμενη διαθέσιμη θέση του τελευταίου επιπέδου. (β) Προώθηση προς τα πάνω του νέου στοιχείου {8} στη θέση του πατρικού του κόμβου {21} διότι $8 < 21$. (γ) Προώθηση προς τα πάνω του νέου στοιχείου {8} στη θέση του νέου πατρικού του κόμβου {21} διότι $8 < 21$.

E.5.2 Διαγραφή στοιχείου σε φίλτρο ελαχίστου

Αν κάποιο στοιχείο του φίλτρου διαγραφεί, προωθείται στη θέση του το ελάχιστο των στοιχείων των δύο υποδένδρων. Προωθώντας το μικρότερο από τα δύο αυτά στοιχεία στην κορυφή ουσιαστικά διαγράφεται από το αντίστοιχο υπόδενδρο. Η διαδικασία διαγραφής-προώθησης μπορεί να συνεχιστεί σε όλο το δυαδικό δένδρο αναδρομικά. Με αυτό τον τρόπο διατηρείται αναλλοίωτη η συνθήκη του φίλτρου. Ωστόσο, η διαγραφή στοιχείου με τον παραπάνω τρόπο αφήνει μια κενή θέση στο τελευταίο επίπεδο του δένδρου. Αυτό γενικά παύει να είναι διαδοχικά συμπληρωμένο.

Το πρόβλημα μπορεί να λυθεί αν εισάγουμε το τελευταίο στοιχείο του τελευταίου επιπέδου στον κόμβο στον οποίο έγινε η διαγραφή. Το στοιχείο που μετακινήθηκε θα πρέπει να τοποθετηθεί κατάλληλα στο δένδρο, δηλαδή να προωθηθεί προς τα πάνω ή προς τα κάτω μέσα από συγκρίσεις με πατρικούς και θυγατρικούς κόμβους. Το πιο πιθανό είναι να μετακινηθεί προς τα κάτω στο δυαδικό δένδρο, διότι εφόσον βρισκόταν στο τελευταίο επίπεδο είναι ένα από τα μεγάλα στοιχεία του φίλτρου ελαχίστου. Το στοιχείο συγκρίνεται με τα στοιχεία στους δύο θυγατρικούς του κόμβους (πρώτα τον αριστερό έπειτα το δεξιό): αν βρεθεί μεγαλύτερο από κάποιο από τα δύο αλλάζει θέση με αυτό. Η διαδικασία επαναλαμβάνεται μέχρι να το στοιχείο που αντικατέστησε το διαγραφέν να γίνει μικρότερο από τα στοιχεία στους δύο θυγατρικούς του κόμβους. Αν το στοιχείο πρέπει να μετακινηθεί προς τα πάνω (είναι μικρότερο από το στοιχείο στον πατρικό του κόμβο), τότε ακολουθείται η διαδικασία προώθησης προς τα πάνω που ακολουθείται και στην εισαγωγή νέου στοιχείου. Στο Σχήμα 6 περιγράφεται η διαδικασία διαγραφής του στοιχείου που βρίσκεται στη ρίζα του δυαδικού δένδρου, του ελάχιστου στοιχείου του φίλτρου.





Σχήμα E.6 Διαδικασία διαγραφής στοιχείου σε φίλτρο ελαχίστου (επιλέγεται η διαγραφή του στοιχείου που βρίσκεται στη ρίζα του δένδρου, του ελαχίστου του φίλτρου ελαχίστου). Το δυαδικό

δένδρο είναι πλήρως ισορροπημένο και διαδοχικά συμπληρωμένο. (α) Διαγραφή του στοιχείου που βρίσκεται στη ρίζα του δένδρου. (β) Πλήρωση της κενής θέσης με το τελευταίο στοιχείο του τελευταίου επιπέδου $\{40\}$. (γ) Προώθηση προς τα κάτω του στοιχείου $\{40\}$ διότι $40 > 7$. (δ) Προώθηση προς τα κάτω του στοιχείου $\{40\}$ διότι $40 > 9$. (ε) Προώθηση προς τα κάτω του στοιχείου $\{40\}$ διότι $40 > 18$.

Η χείριστη περίπτωση υλοποίησης του αλγόριθμου διαγραφής είναι το διαγραφέν στοιχείο να βρίσκεται στη ρίζα και το στοιχείο που το αντικατέστησε να προωθείται προς τα κάτω (μέσω συγκρίσεων και με τα δύο στοιχεία στους θυγατρικούς κόμβους) μέχρι να φτάσει σε φύλλο του δυαδικού δένδρου. Το πλήθος των συγκρίσεων που διεξάγονται στη χείριστη περίπτωση είναι περίπου $2\log_2 N$, όπου N το πλήθος των στοιχείων του φίλτρου. Το πλήθος των αναθέσεων στη χείριστη περίπτωση είναι περίπου $3\log_2 N$. Συνεπώς, η πολυπλοκότητα της διαγραφής στοιχείου από το φίλτρο είναι $O(\log_2 N)$ στη χείριστη περίπτωση.

E.5.3 Εντοπισμός ελαχίστου στοιχείου

Το ελάχιστο στοιχείο βρίσκεται στη ρίζα του δυαδικού δένδρου. Η πολυπλοκότητα αυτής της διαδικασίας είναι $O(1)$ στη χείριστη περίπτωση.

E.6 Υλοποίηση της καταχώρισης N στοιχείων σε δυαδικό δένδρο

Η καταχώριση N στοιχείων σε δυαδικό δένδρο είναι δυνατό να γίνει με χρήση πινάκων ή με χρήση αλυσίδων (linked lists) και απαιτεί τη γνώση των παρακάτω:

- A) Ποιο είναι το στοιχείο στον πατρικό κόμβο κάθε στοιχείου.
- B) Ποια είναι τα στοιχεία στους θυγατρικούς κόμβους κάθε στοιχείου.
- Γ) Ποια είναι η επόμενη διαθέσιμη θέση στο τελευταίο επίπεδο (προκειμένου να διατηρηθεί το δένδρο πλήρως ισορροπημένο και διαδοχικά συμπληρωμένο).

Η καταχώριση με χρήση πίνακα είναι η καλύτερη λύση {[Sedgewick (1992), σ. 149], NIST}, όταν το δυαδικό δένδρο είναι διαδοχικά συμπληρωμένο και πλήρως ισορροπημένο.

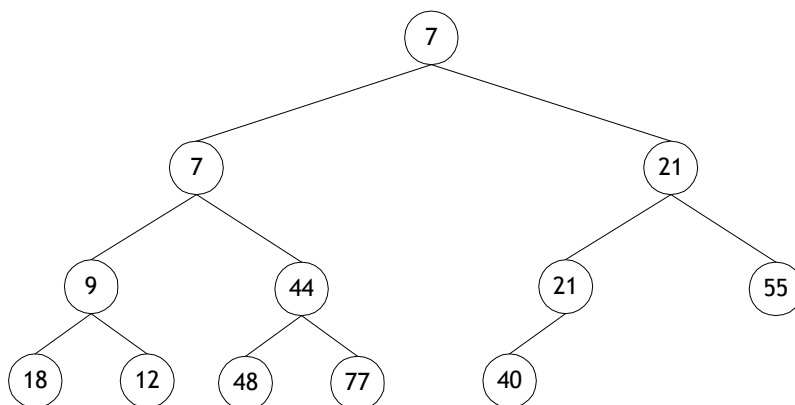
Στη δυαδική δενδρική καταχώριση με χρήση πίνακα η σχέση πατρική – θυγατρική θέση εκφράζεται αριθμητικά:

- A) Πατρική θέση της υπ' αριθμόν k θέσης είναι η υπ' αριθμόν $k/2$ θέση.

Β) Οι θυγατρικές της υπ' αριθμόν k θέσης είναι οι θέσεις $2k$ και $2k+1$.

Γ) Η επόμενη διαθέσιμη θέση είναι η επόμενη θέση του τελευταίου στοιχείου.

Στο Σχήμα Ε.7 φαίνεται ο τρόπος διευθέτησης δυαδικού δένδρου σε πίνακα.



K	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12
$A[k]$	7	7	21	9	44	21	55	18	12	48	77	40

Σχήμα Ε.7 Διαδοχική διευθέτηση στοιχείων δυαδικού δένδρου σε πίνακα A .

Ε.7 Αξιολόγηση φίλτρου ελαχίστου

Οι αλγόριθμοι χειρισμού δεδομένων του φίλτρου ελαχίστου (εισαγωγή, διαγραφή στοιχείου) απαιτούν πλήθος πράξεων εξαρτώμενο από το πλήθος των στοιχείων της συλλογής. Δεν απαιτούν όμως πλήθος πράξεων ανάλογο προς το μέγεθος της δομής (πλήθος στοιχείων της συλλογής), αλλά ανάλογο προς το λογάριθμο με βάση 2 του μεγέθους της δομής. Αυτό είναι εφικτό υπολογιστικό κόστος ακόμη και για προβλήματα που απαιτούν δομές τεραστίου μεγέθους. Για παράδειγμα, ισχύει ότι $\log_2(10^6) < 20$, άρα με κατάλληλη οργάνωση των στοιχείων της συλλογής το εκάστοτε ελάχιστο από ένα εκατομμύριο στοιχεία βρίσκεται με περίπου 20 πράξεις!

Ένα φίλτρο ελαχίστου γενικά μπορεί να χρησιμοποιηθεί για την εύρεση του ελαχίστου μιας συλλογής στοιχείων, είναι όμως ένας αλγόριθμος με υψηλή πολυπλοκότητα: Η εφαρμογή του φίλτρου ελαχίστου για την εύρεση του ελαχίστου συλλογής στοιχείων είναι $O(\log_2 N!)$ (χείριστη περίπτωση, ΧΙΙ) σε αντιδιαστολή με την τάξη $O(N)$ (ΧΙΙ) της απλής αναζήτησης του ελαχίστου μιας συλλογής. Ωστόσο, η οργάνωση των στοιχείων που επιτυγχάνεται με το φίλτρο ελαχίστου διασφαλίζει υψηλότερη ταχύτητα αν αναζητηθεί το δεύτερο σε αύξουσα σειρά στοιχείο της συλλογής: η αναζήτηση του ελαχίστου με το φίλτρο ελαχίστου είναι τώρα τάξης $\log_2 N$ (ΧΙΙ), ενώ η απλή αναζήτηση εξακολουθεί να είναι τάξης $O(N)$ (ΧΙΙ).

Το φίλτρο ελαχίστου μπορεί να χρησιμοποιηθεί και σε προβλήματα ταξινόμησης συλλογής στοιχείων. Οι καλύτεροι αλγόριθμοι του είδους είναι {[Sedgewick (1992), σ. 94], [Press et al. (1997), σ. 329]} τάξης $O(N \log_2 N)$ (XII). Η ταξινόμηση στοιχείων με το φίλτρο ελαχίστου, ή αλλιώς ο αλγόριθμος heapsort είναι τάξης $O(N \log_2 N)$ (XII). Στον Πίνακα Ε.Ι φαίνεται η τάξη των γνωστότερων αλγορίθμων ταξινόμησης.

Πίνακας Ε.Ι Τάξη των γνωστότερων αλγορίθμων ταξινόμησης (χειρίστη περίπτωση).

Αλγόριθμος	Τάξη (πολυπλοκότητα)
quick sort [Sedgewick (1992), σ. 115]	N^2
heap sort [ο.π., σ. 145]	$N \log_2 N$
merge sort [ο.π., σ. 163]	$N \log_2 N$
shell sort [ο.π., σ. 110]	$N^{3/2}$
selection sort [ο.π., σ. 96]	N^2
insertion sort [ο.π., σ. 98]	N^2
bubble sort [ο.π., σ. 100]	N^2

Σημειώνεται ότι ο αλγόριθμος quicksort γενικά (μέση περίπτωση) είναι ο ταχύτερος {[Sedgewick (1992), σ. 115] , [Press et al. (1997), σ. 329]}, αλλά ο heapsort περισσότερο ευέλικτος. Η χρησιμοποίηση συγκεκριμένου αλγορίθμου εξαρτάται από το πρόβλημα που αντιμετωπίζεται.

Το φίλτρο ελαχίστου είναι πρόσφορο [Sedgewick (1992), σ. 145] όταν οι απαιτήσεις του προβλήματος είναι, εκτός από τον ταχύ εντοπισμό του ελαχίστου στοιχείου συλλογής, η ταχεία εισαγωγή και διαγραφή στοιχείων από αυτή.

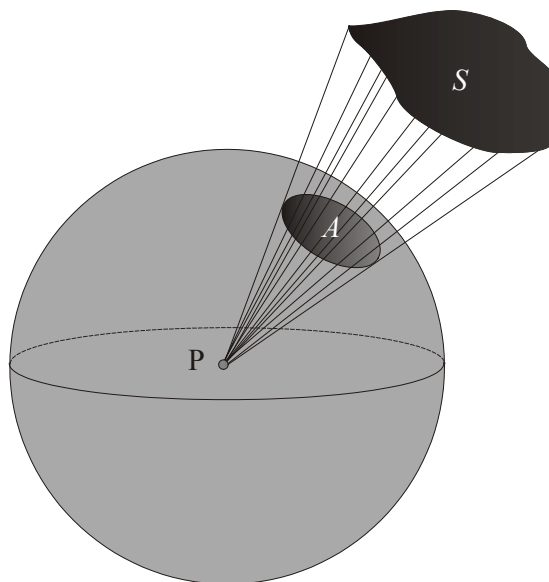
Παράρτημα ΣΤ

Η στερεά γωνία

ΣΤ.1 Η στερεά γωνία και εξισώσεις υπολογισμού της

Η στερεά γωνία ορίζεται κατ' αντιστοιχία με την επίπεδη γωνία. Είναι μια γωνία σε τρεις διαστάσεις. Η επίπεδη γωνία ορίζεται ως μήκος τόξου μοναδιαίου κύκλου (μήκος περιφέρειας 2π ακτίνια). Αντίστοιχα η στερεά γωνία ορίζεται ως επιφάνεια μοναδιαίας σφαίρας, η οποία έχει εμβαδό 4π στερεοακτίνια.

Έστω επιφάνεια S και ένα σημείο P όπως φαίνονται στο Σχήμα ΣΤ.1. Η στερεά (ή κωνική) γωνία υπό την οποία το σημείο P «βλέπει» την επιφάνεια S προκύπτει φέροντας ευθύγραμμα τμήματα που ενώνουν την το σύνορο της επιφάνειας S με το σημείο P . Το μέτρο αυτής της στερεάς γωνίας είναι το εμβαδό της επιφάνειας A του Σχήματος ΣΤ.1. Το σύνορο της επιφάνειας A ορίζεται από την στερεά γωνία (ή τον κώνο που ορίζουν τα ευθύγραμμα τμήματα που ξεκινούν από το P και διατρέχουν το σύνορο της S) και τη μοναδιαία σφαίρα με κέντρο το P .



Σχήμα ΣΤ.1 Στερεά ή κωνική γωνία υπό την οποία το σημείο P «βλέπει» την επιφάνεια S . Το μέτρο της είναι το εμβαδό της επιφάνειας A , η οποία ορίζεται από τη στερεά γωνία και τη μοναδιαία σφαίρα με κέντρο το σημείο P .

Έστω $d\omega$ το στοιχείο στερεάς γωνίας υπό την οποία σημείο P «βλέπει» στοιχειώδη επιφάνεια dS (Σχήμα ΣΤ.2). Έστω dS_0 η προβολή της dS πάνω στη σφαίρα με κέντρο το P και ακτίνα $r = PQ$, όπου Q το κοντινότερο στο σημείο P σημείο της dS . Το στοιχείο στερεάς γωνίας είναι {[Present (1958), σ. 26], [Cole (1974), σ. 55]}

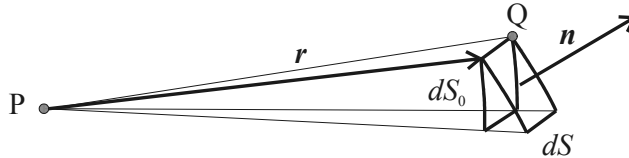
$$d\omega = \frac{dS_0}{r^2}. \quad (\Sigma\text{T.1})$$

Όμως [Παπαϊωάννου (1993), σ. 92]

$$dS_0 = (\hat{\mathbf{r}} \cdot \mathbf{n})dS , \quad (\Sigma\text{T.2})$$

άρα

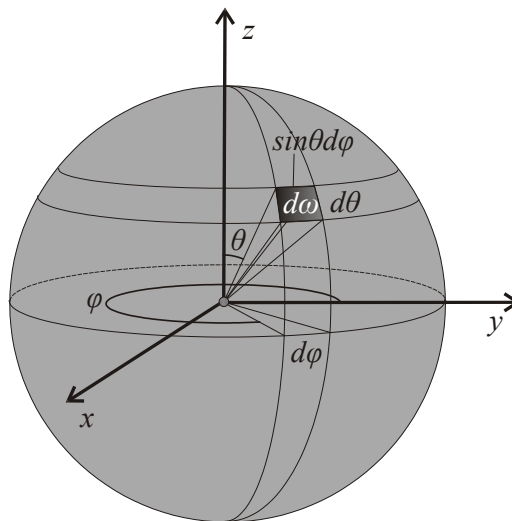
$$d\omega = \frac{(\hat{\mathbf{r}} \cdot \mathbf{n})dS}{r^2} . \quad (\Sigma\text{T.3})$$



Σχήμα ΣΤ.2 Στοιχείο στερεάς γωνίας υπό την οποία σημείο P «βλέπει» στοιχειώδη επιφάνεια dS . dS_0 είναι η προβολή της dS πάνω στη σφαίρα με κέντρο το P και ακτίνα $r = PQ$, όπου Q το κοντινότερο στο σημείο P σημείο της dS . \mathbf{n} είναι το μοναδιαίο κάθετο στην επιφάνεια dS και r είναι κάθετο στην dS_0 με μέτρο r .

Στο σύστημα των σφαιρικών συντεταγμένων της παρούσας εργασίας το στοιχείο στερεάς γωνίας φαίνεται στο Σχήμα ΣΤ.3 και είναι

$$d\omega = \sin\theta d\theta d\varphi . \quad (\Sigma\text{T.4})$$



Σχήμα ΣΤ.3 Το στοιχείο στερεάς γωνίας στο σφαιρικό σύστημα συντεταγμένων που χρησιμοποιείται στην παρούσα εργασία. Η ακτίνα της σφαίρας είναι 1.

Βιβλιογραφία

- [Abachev et al. (1992)] Abachev M. K., Baryshev Y. P., Lukichev V. F., and Orlikovsky A. A., “Modeling of deep silicon etching in multicomponent plasma”, *Vacuum* 43, 565 (1992).
- [Abdollahi-Alibeik (1999)] Abdollahi-Alibeik S., McVittie J. P., Saraswat K. C., Sukharev V., and Schoenborn P., “Analytical modeling of silicon etch process in high density plasma”, *J. Vac. Sci. Technol. A* 17, 2485 (1999).
- [Abraham & Chen (1996)] Abraham-Shrauner B. and Chen W., “Neutral shadowing in circular trench holes”, *J. Vac. Sci. Technol. B* 14, 3492 (1996).
- [Abraham & Wang (1995)] Abraham-Shrauner B. and Wang C. D., “Model of etching profiles for ion energy flux dependent etch rates in a collisionless plasma sheath”, *J. Appl. Phys.* 77, 3445 (1995).
- [Abraham & Wang (1996)] Abraham-Shrauner B. and Wang C. D., “Etching profiles and neutral shadowing in long trenches”, *J. Electrochem. Soc.* 143, 672 (1996).
- [Abraham (2001)] Abraham-Shrauner B., “Plasma etch profiles of passivated open-area trenches”, *J. Vac. Sci. Technol. B* 19, 711 (2001).
- [Abrams & Graves (1999)] Abrams C. F. and Graves D. B., “Molecular dynamics simulations of Si etching by energetic CF_3^+ ”, *J. Appl. Phys.* 86, 5938 (1999).
- [Adalsteinsson & Sethian (1995)] Adalsteinsson D. and Sethian J. A., “A fast level set method for propagating interfaces”, *J. Comp. Phys.* 118, 269 (1995).
- [Adalsteinsson & Sethian (1995b)] Adalsteinsson D. and Sethian J. A., “A level set approach to a unified model for etching, deposition, and lithography I: algorithms and two dimensional simulations”, *J. Comp. Phys.* 122, 128 (1995).
- [Adalsteinsson & Sethian (1995c)] Adalsteinsson D. and Sethian J. A., “A level set approach to a unified model for etching, deposition, and lithography II: three dimensional simulations”, *J. Comp. Phys.* 122, 348 (1995).
- [Adalsteinsson & Sethian (1997)] Adalsteinsson D. and Sethian J. A., “A level set approach to a unified model for etching, deposition, and lithography III: redeposition, reemission, surface diffusion and complex simulations”, *J. Comp. Phys.* 138, 193 (1997).
- [Adalsteinsson & Sethian (1999)] Adalsteinsson D. and Sethian J. A., “The fast construction of extension velocities in level set methods”, *J. Comp. Phys.* 148, 2 (1999).

[Aoi et al. (1999)] Aoi N., Hayashi S., Yamanaka M., Kubota M., and Ogura, M., "Contact hole etch scaling toward 0.1 μm ", Jpn. J. Appl. Phys. 38, 7119 (1999).

[Arnold & Sawin (1991)] Arnold J. C. and Sawin H. H., "Charging of pattern feature during plasma etching", J. Appl. Phys. 70, 5314 (1991).

[Arnold et al. (1993)] Arnold J. C., Gray D. C., and Sawin H. H., "Influence of reactant transport on fluorine reactive ion etching of deep trenches in silicon", J. Vac. Sci. Technol. B 11, 2071 (1993).

[Arnold et al. (1994)] Arnold J. C., Sawin H. H., Dalvie M., and Hamaguchi S., "Simulation of surface topography evolution during plasma etching by the method of characteristics", J. Vac. Sci. Technol. A 12, 620 (1994).

[Atkins (1999)] Atkins P. W., "Physical chemistry", 6th edition, Oxford University Press, New York, 1999.

[Atkinson (1976)] Atkinson K. E., "A survey of Numerical Methods for the Solution of Fredholm Integral Equations of the Second Kind", Society for Industrial and Applied Mathematics, Philadelphia, 1976.

[Atkinson (2000)] Atkinson K. E., "The planar radiosity equation and its numerical solution", IMA J. Num. Anal. 20, 303 (2000).

[Bailey III et al. (1995)] Bailey III A. D., Van de Sanden M. C. M., Gregus J. A. and Gottscho R. A., "Scaling of Si and GaAs trench etch rates with aspect ratio, feature width, and substrate temperature", J. Vac. Sci. Technol. B 13, 92 (1995).

[Barabasi & Stanley (1995)] A. L. Barabasi and H. E. Stanley, "Fractal concepts in surface growth", Cambridge University Press, 1995.

[Barone & Graves (1995)] Barone M. E. and Graves D. B., "Molecular-dynamics simulations of direct reactive ion etching of silicon by fluorine and chlorine", J. Appl. Phys. 78, 6604 (1995).

[Bertz et al. (2002)] Bertz A., Kuchler M., Knofler R., and Gessner T., "A novel high aspect ratio technology for MEMS fabrication using standard silicon wafers", Sensors and Actuators A 97-98, 691 (2002).

[Bloomfield & Cale (2004)] Bloomfield M. O. and Cale T. S., "Formation and evolution of grain structures in thin films", Microelectron. Eng. 79, 195 (2004).

[Blottner & Lopez (1998)] Blottner F. G. and Lopez A. R., "Determination of solution accuracy of numerical schemes as part of code and calculation verification", Sandia Report SAND98-2222, Sandia National Laboratories, 1998.

[Boucher et al. (2004)] Boucher R., Hubner H., Morgenroth W., Roth H., Meyer H.-G., Schmidt M., and Eich M., "Etching of sub-micron high aspect ratio holes in oxides and polymers", *Microelectron. Eng.* 73-74, 330 (2004).

[Boufnichel et al. (2002)] Boufnichel M., Aachboun S., Grangeon F., Lefauchaux P., and Ranson P., "Profile control of high aspect ratio trenches of silicon. I. Effect of process parameters on local bowing", *J. Vac. Sci. Technol. B* 20, 1508 (2002).

[Brault et al. (1998)] Brault P., Dumas, P., and Salvan F., "Roughness scaling of plasma-etched silicon surfaces", *J. Phys.: Condens. Matter* 10, L32 (1998).

[Cale & Raupp (1990)] Cale T. S. and Raupp G. B., "A unified line-of-sight model of deposition in rectangular trenches", *J. Vac. Sci. Technol. B* 8, 1242 (1990).

[Cale (1991)] Cale T. S., "Flux distributions in low pressure deposition and etch models", *J. Vac. Sci. Technol. B* 9, 2551(1991).

[Cale et al. (1991)] Cale T. S., Gandy T. H., and Raupp G. B., "A fundamental feature scale model for low pressure deposition processes", *J. Vac. Sci. Technol. A* 9, 524 (1991).

[Cale et al. (1997)] Cale T. S., Mahadev V., Tang Z., Rajagopalan G., and Borucki L. J., "Topography evolution during semiconductor processing", *Plasma Processing of Semiconductors*, NATO ASI Series 336, Kluwer Academic Publishers, Dordrecht 1997.

[Cale et al. (1998)] Cale T. S., Rogers B. R., Merchant T. P., and Borucki L. J., "Deposition and etch processes: continuum film evolution in microelectronics", *Computational Materials Science* 12, 333 (1998).

[Chae et al. (2003)] Chae H., Vitale S. A., and Sawin H. H., "Silicon dioxide etching yield measurements with inductively coupled fluorocarbon plasmas", *J. Vac. Sci. Technol. A* 21, 381 (2003).

[Chang & Sze (1996)] Chang C. Y. and Sze S. M., "ULSI Technology", McGraw-Hill 1996.

[Chattopadhyay (2002)] Chattopadhyay A. K., "Thermal re-emission model", *Phys. Rev. B* 65, 41405 (2002).

[Chen & Chang (2003)] Chen F. F. and Chang J. P., "Lecture notes on principles of plasma processes", Kluwer Academic, 2003.

[Chen (1984)] Chen F. F., "Introduction to plasma physics and controlled fusion, Volume 1: Plasma Physics", 2nd edition, Plenum Press, New York, 1984.

[Chen et al. (2002)] Chen K. -S., Ayon A. A., Zhang X., and Spearing S. M., "Effect of process parameters on the surface morphology and mechanical performance of silicon structures after deep reactive ion etching (DRIE)", *J. Microelectromech. Syst.* 11, 264 (2002).

[Cheng et al. (1991)] Cheng L. -Y., McVittie J. P., and Saraswat K. C., "New test structure to identify step coverage mechanisms in chemical vapor deposition of silicon dioxide", *Appl. Phys. Lett.* 58, 2147 (1991).

[Chin et al. (1985)] Chin D., Dhong S. H., and Long G. J., "Structural effects on a submicron trench process", *J. Electroch. Soc.* 132, 1705 (1985).

[Chopp (1993)] Chopp D. L., "Computing minimal surfaces via level set curvature flow", *J. Comp. Phys.* 106, 77 (1993).

[Chopp (2001)] Chopp D. L., "Some improvements of the fast marching method", *SIAM J. Sci. Comput.* 23, 230 (2001).

[Choptuick (1999)] Choptuick M. W., "Numerical Analysis with applications in theoretical physics", Lecture notes for Taller de Verano 1999 de FENOMECC, 1999.

[Coburn & Winters (1979)] Coburn J. W. and Winters H. F., "Ion and electron assisted gas-surface chemistry. An important effect in plasma etching", *J. Appl. Phys.* 50, 3189 (1979).

[Coburn & Winters (1989)] Coburn J. W. and Winters H. F., "Conductance considerations in the reactive ion etching of high aspect ratio features", *Appl. Phys. Lett.* 55, 2730 (1989).

[Cole (1974)] Cole R. J., "Vector methods", Van Nostrand Reinhold Company 1974.

[Collatz (1966)] Collatz L., "The numerical treatment of differential equations", 3rd edition, Springer Verlag, Berlin 1966.

[Cooperberg et al. (2002)] Cooperberg D. J., Vahedi V., and Gottscho R. A., "Semiempirical profile simulation of aluminum etching in a Cl_2/BCl_3 plasma", *J. Vac. Sci. Technol. A* 20, 1536 (2002).

[Coronell & Jensen (1994)] Coronell D. G. and Jensen K. F., "Simulation of rarified gas transport and profile evolution in non planar substrate chemical vapor deposition", *J. Electrochem. Soc.* 141, 2545 (1994).

[Crandall & Lions (1983)] Crandall M.G. and P. L. Lions, "Viscosity solutions of Hamilton-Jacobi equations", *Mathematics of Computation* 277, 1 (1983).

[Crandall & Lions (1984)] Crandall M.G. and P. L. Lions, "Two approximations of solutions of Hamilton-Jacobi equations", *Mathematics of Computation* 43, 1 (1984).

- [Dahlquist & Bjorck (1974)] Dahlquist G. and Bjorck A., "Numerical Methods", Translated by N. Anderson, Prentice-Hall, New Jersey, 1974.
- [Dalton et al. (1993)] Dalton T. J., Arnold J. C., Sawin H. H., Swan S., and Corliss D., "Microtrench formation in polysilicon plasma etching over thin gate oxide", J. Electrochem. Soc. 140, 2395 (1993).
- [Delves & Mohamed (1985)] Delves L. M. and Mohamed J. L., "Computational methods for integral equations", Cambridge University Press, Cambridge, 1985.
- [Dew et al. (1991)] Dew S. K., Smy T., Tait R. N., and Brett M. J., "Modeling bias sputter planarization of metal films using a ballistic deposition simulation", J. Vac. Sci. Technol. A 9, 519 (1991).
- [Ding & Hershkowitz (1996)] Ding J. and Hershkowitz N., "Symmetric rate model for fluorocarbon plasma etching of SiO₂", Appl. Phys. Lett. 68, 1996.
- [Doemling et al. (1996)] Doemling M. F., Rueger N. R., and Oehrlein G. S., "Observation of inverse reactive ion etching lag for silicon dioxide etching in inductively coupled plasmas", Appl. Phys. Lett. 68, 10 (1996).
- [Doh et al. (1997)] Doh H. -H., Yeon C. -K., and Whang K. -W, "Effects of bias frequency on reactive ion etching lag in an electron cyclotron resonance plasma etching system", J. Vac. Sci. Technol. A 15, 664 (1997).
- [Drotar et al. (2000)] Drotar J. T., Zhao Y. -P., Lu T. -M., and Wang G. -C., "Surface roughening in shadowing growth and etching in 2+1 dimensions", Phys. Rev. B 62, 2118 (2000).
- [Drotar et al. (2000b)] Drotar J. T., Zhao Y. -P., Lu T. -M., and Wang G. -C., "Mechanisms for plasma and reactive ion etch-front roughening", Phys. Rev. B 61, 3012 (2000).
- [Duff & Scott (1999)] Duff I. S. and Scott J. A., "A frontal code for the solution of sparse positive-definite symmetric systems arising from finite-elements applications", Advances in Computational Mathematics Transactions on Mathematical Software 25, 404 (1999).
- [Durand (1999)] Durand F., "3d visibility: analysis study and applications", Ph.D. Thesis, university J. Fourier, Grenoble 1999.
- [Economou (2000)] Economou D., "SiO₂ etching in inductively coupled C₂F₆ plasmas: surface chemistry and two-dimensional simulations", Thin Solid Films 374, 311 (2000).
- [Epstein (1924)] Epstein P. S., "On the resistance experienced by spheres in their motion through gases", Phys. Rev. 23, 710 (1924).

[Feres & Yablonsky (2004)] Feres R. and Yablonsky G., "Knudsen's cosine law and random billiards", Chem. Eng. Sci. 59, 1541 (2004).

[Ferziger & Peric (1997)] Ferziger J. H. and Peric M., "Computational methods for fluid dynamics", Springer, 1997.

[FINLE Technologies Inc. (1999)] PROLITH Lithography Simulation Tools, PROLITH/2 V 6.1.2, FINLE Technologies Inc., Austin, Texas, 1999.

[Gardner et al. (2001)] Gardner J. W., Varadan V. K., and Awadelkarim O. O., "Microsensors, MEMS and smart devices", Wiley & Sons 2001.

[Gerodolle & Pelletier (1991)] Gerodolle A. F. and Pelletier J., "Two-dimensional implications of a purely reactive model for plasma etching", IEEE Transactions on Electron Devices 38, 2025 (1991).

[Giapis et al. (1990)] Giapis K. P., Scheller G. R., Gottscho R. A., Hobson W. S., and Lee Y. H., "Microscopic and macroscopic uniformity control in plasma etching", Appl. Phys. Lett. 57, 983 (1990).

[Gogolides & Sawin (1992)] Gogolides E. and Sawin H. H., "Continuum modeling of radio frequency glow discharges. I. Theory and results for electropositive and electronegative gases", J. Appl. Phys. 72, 3971 (1992).

[Gogolides et al. (2000)] Gogolides E., Vauvert P., Kokkoris G., Turban G., and Boudouvis A. G., "Etching of SiO₂ and Si in fluorocarbon plasmas: A detailed surface model accounting for etching and deposition", J. Appl. Phys. 88, 5570 (2000).

[Gogolides et al. (2004)] Gogolides E., Boukouras C., Kokkoris G., Brani O., Tserepi A., and Constantoudis V., "Si etching in high-density SF₆ plasmas for microfabrication: surface roughness formation", Microelectron. Eng. 73-74, 312 (2004).

[Goldberg (1979)] Goldberg M. A., "Solutions Methods for Integral Equations. Theory and Applications, Mathematical Concepts and Methods in Science and Engineering Vol. 18", Plenum Press, New York, 1979.

[Gottlieb & Shu (1998)] Gottlieb S. and Shu C. W., "Total variation diminishing Runge-Kutta schemes", Mathematics of Computation 67, 73 (1998).

[Gottlieb et al. (2001)] Gottlieb S., Shu C. W., and Tadmor E., "Strong stability-preserving high-order time discretization methods", SIAM Rev. 43, 89 (2001).

[Gottscho et al. (1992)] Gottscho R. A., Jurgensen C. W. and Vitkavage D. J., "Microscopic uniformity in plasma etching", J. Vac. Sci. Technol. B 10, 2133 (1992).

- [Graves & Humbird (2002)] Graves D. B. and Humbird D., "Surface chemistry associated with plasma etching processes", *Appl. Surf. Sci.* 192, 72 (2002).
- [Graves & Kushner (2003)] Graves D. B. and Kushner M. J., "Influence of modeling and simulation on the maturation of plasma technology: Feature evolution and reactor design", *J. Vac. Sci. Technol. A* 21, S152 (2003).
- [Gray et al. (1991)] Gray D. C., Sawin H. H., and Butterbaugh J. W., "Quantification of surface film formation effects in fluorocarbon plasma etching of polysilicon", *J. Vac. Sci. Technol. A* 9, 779 (1991).
- [Gray et al. (1993)] Gray D. C., Tepermeister I., and Sawin H. H., "Phenomenological modeling of ion-enhanced surface kinetics in fluorine-based plasma etching", *J. Vac. Sci. Technol. B* 11, 1243 (1993).
- [Greenwood (2002)] Greenwood J., "The correct and incorrect generation of a cosine distribution of scatteres particles for Monte-Carlo modeling of vacuum systems", *Vacuum* 67, 217 (2002).
- [Hamaguchi et al. (1993)] Hamaguchi S., Dalvie M., Farouki R. T., and Sethuraman S., "A shock-tracking algorithm for surfceace evolution under reactive ion etching", *J. Appl. Phys.* 74, 5172 (1993).
- [Han et al. (1995)] Han J. S., McVittie J. P., and Zheng J., "Profile modeling of high density plasma oxide etching", *J. Vac. Sci. Technol. B* 13, 1893 (1995).
- [Harafuji and Misaka (1995)] Harafuji K. and Misaka A., "Dry etching topography simulator with a new surface reaction model: MODERN", *IEEE Transactions on Electron Devices* 42, 1903 (1995).
- [Harafuji et al. (1999)] Harafuji K., Ohkumi M., Kubota M., Nakagawa H., and Misaka A., "Simulation approach for achieving layout independent polysilicon gate etching", *IEEE Trans. Electron Devices* 46, 1105 (1999).
- [Harten et al. (1987)] Harten A., Engquist B., Osher S. and Chakravarthy S. R., "Uniformly high order accurate essentially non-oscillatory schemes, III", *J. Comp. Phys.* 71, 231 (1987).
- [Helmer & Graves (1998)] Helmer B. A. and Graves D. B., "Molecular dynamics simulations of Ar⁺ and Cl⁺ impacts onto silicon surfaces: Distributions of reflected energies and angles", *J. Vac. Sci. Technol. A* 16, 3502 (1998).
- [Helmsen et al. (1996)] Helmsen J., Pukett E. G., Collela P. and Dorr M., "Two new methods for simulating photolithography development in 3D", *Proc. SPIE* 2726, 253 (1996).
- [Hoekstra et al. (1997)] Hoekstra R. J., Grappenhaus M. J., and Kushner M. J., "Integrated plasma equipment model for polysilicon etch profiles in an inductively coupled plasma reactor with subwafer and superwafer topography", *J. Vac. Sci. Technol. A* 15, 1913 (1997).

[Hoekstra et al. (1998)] Hoekstra R. J., Kushner M. J., Sukharev V., and Schoenborn P., "Microtrenching resulting from specular reflection during chlorine etching of silicon", *J. Vac. Sci. Technol. B* 16, 2102 (1998).

[Hood (1976)] Hood P., "Frontal solution program for unsymmetric matrices", *Int. J. Num. Meth. Eng.* 10, 379 (1976).

[Horowitz et al. (1998)] Horowitz E., Sahni S., and Rajasekaran S., "Computer algorithms", Computer Science Press, New York, 1998.

[Hsiau et al. (1997)] Hsiau Z. K., Kan E. C., McVittie J. P., and Dutton R. W., "Robust, stable, accurate boundary movement for physical etching and deposition simulation", *IEEE Transactions on Electron Devices* 44, 1375 (1997).

[Humbird & Graves (2004)] Humbird D. and Graves D. B., "Fluorocarbon plasma etching of silicon: Factors controlling etch rate", *J. Appl. Phys.* 96, 65 (2004).

[Hwang & Giapis (1997)] Hwang G. S. and Giapis K. P., "Aspect ratio independent etching of dielectrics", *Appl. Phys. Lett.* 71, 458 (1997).

[Hwang & Giapis (1997)] Hwang G. S. and Giapis K. P., "On the origin of the notching effect during etching in uniform high density plasmas", *J. Vac. Sci. Technol. B* 15, 70 (1997).

[Hwang et al. (1996)] Hwang G. S., Anderson C. M., Gordon M. J., Moore T. A., Minton T. K., and Giapis K. P., "Gas-surface dynamics and profile evolution during etching of silicon", *Phys. Rev. Lett.* 77, 3049 (1996).

[Hwang et al. (1999)] Hwang H. H., Govindan T. R., and Meyyapan M., "Feature profile evolution simulation using a level set method", *J. Electrochem. Soc.* 146, 1889 (1999).

[Hwang et al. (2002)] Hwang H. H., Meyyappan M., Mathad G. S., and Ranade, R., "Simulations and experiments of etching of silicon in HBr plasmas for high aspect ratio features", *J. Vac. Sci. Technol. B* 20, 2199 (2002).

[Im et al. (2001)] Im Y. H., Hahn Y. B., and Pearton S. J., "Level set approach to simulation of feature profile evolution in a high-density plasma-etching system", *J. Vac. Sci. Technol. B* 19, 701 (2001).

[Ingram (1990)] Ingram S. G., "The influence of substrate topography on ion bombardment in plasma etching", *J. Appl. Phys.* 68, 500 (1990).

[Irons (1970)] Irons B. M., "A frontal solution program for finite element analysis", *Int. J. Num. Meth. Eng.* 2, 5 (1970).

- [ITRS (2004a)] International Technology Roadmap for Semiconductors, 2004 Update. Process Integration, Devices, and Structures.
- [ITRS (2004b)] International Technology Roadmap for Semiconductors, 2004 Update. Front End Process.
- [Jeans (1962)] Jeans J., "An introduction to the kinetic theory of gases", Cambridge University Press, London, 1962.
- [Jewett et al. (1977)] Jewett R. E., Hagouel P. I., Neureuther A. R., and Duzer T. V., "Line-profile resist development simulation techniques", Polymer Engineering and Science 17, 381, (1977).
- [Jiang & Peng (2000)] Jiang G. S. and Peng D., "Weighted ENO schemes for Hamilton-Jacobi equations", SIAM J. Sci. Comput. 21, 2126 (2000).
- [Jiang & Shu (1996)] Jiang, G. S. and Shu C. W., "Efficient implementation of weighted ENO schemes", J. Comp. Phys. 126, 202 (1996).
- [Jin & Sawin (2003)] Jin W. and Sawin H. H., "Feature profile evolution in high-density plasma etching of Si with Cl_2 ", J. Vac. Sci. Technol. A 21, 911 (2003).
- [Joubert et al. (1994)] Joubert O., Oehrlein G. S., and Zhang Y., "Fluorocarbon high density plasma. V. Influence of aspect ratio on the etch rate of silicon dioxide in an electron cyclotron resonance plasma", J. Vac. Sci. Technol. A 12, 658 (1994).
- [Joubert et al. (1994b)] Joubert O., Oehrlein G. S., and Surendra M., "Fluorocarbon high density plasma. VI. Reactive ion etching lag model for contact hole silicon dioxide etching in an electron cyclotron resonance plasma", J. Vac. Sci. Technol. A 12, 665 (1994).
- [Joubert et al. (1994c)] Joubert O., Oehrlein G. S., Surendra M., and Zhang Y., "Reactive ion etching lag investigation of oxide etching in fluorocarbon electron cyclotron resonance plasmas", J. Vac. Sci. Technol. A 12, 1957 (1994).
- [Kao et al. (2004)] Kao Y. K., Osher S., and Qian J., "Lax-Friedrichs sweeping scheme for static Hamilton-Jacobi equations", J. Comp. Phys. 196, 367 (2004).
- [Kato et al. (1994)] Kato S., Sato M., and Arita, Y., "Microloading effect prevention in SiO_2 contact-hole etching", J. Vac. Sci. Technol. A 12, 1204 (1994).
- [Kim (2001)] Kim S., A $O(N)$ level set method for eikonal equations, SIAM J. Sci. Comput. 22, 2178 (2001).
- [Kinoshita et al. (1996)] Kinoshita T., Hane M. and McVittie J. P., "Notching as an example of charging in uniform high density plasmas", J. Vac. Sci. Technol. B 14, 560 (1996).

- [Kokkoris et al. (2001)] Kokkoris G., Gogolides E., and Boudouvis A. G., "Simulation of fluorocarbon plasma etching of SiO₂ structures", *Microelectron. Eng.* 57-58, 599 (2001).
- [Kokkoris et al. (2001b)] Kokkoris G., Gogolides E., and Boudouvis A. G., "Simulation and prediction of aspect ratio dependent phenomena during SiO₂ and Si feature etching in fluorocarbon plasmas", *Proceedings of SISPAD (Simulation of Semiconductor Processes and Device Simulation) 01*, Athens, September 2001.
- [Kokkoris et al. (2002)] Kokkoris G., Gogolides E., and Boudouvis A. G., "Etching of SiO₂ features in fluorocarbon plasmas: Explanation of gas-phase-composition effects on aspect ratio dependent phenomena in trenches", *J. Appl. Phys.* 91, 2697 (2002).
- [Kokkoris et al. (2002)] Kokkoris G., Koulidis A., Boudouvis A. G., and Gogolides E., "Calculations of etching rates inside micro-contacts etched in fluorocarbon plasmas", *Proceedings of 4th GRAMC Congress on Computational Mechanics*, Patra, June 2002.
- [Kokkoris et al. (2004)] Kokkoris G., Tserepi A., Boudouvis A. G., and Gogolides E., "Simulation of SiO₂ and Si feature etching for microelectronics and microelectromechanical systems fabrication: A combined simulator coupling modules of surface etching, local flux calculation and profile evolution", *J. Vac. Sci. Technol. A* 22, 1896 (2004).
- [Kress (1989)] Kress R., "Linear integral equations. Applied mathematical sciences 82", Springer Verlag, 1989.
- [La Magna & Garozzo (2003)] La Magna A. and Garozzo G., "Factors affecting profile evolution in plasma etching of SiO₂. Modeling and experimental verification", *J. Electrochem. Soc.* 150, 178 (2003).
- [Labun et al. (2000)] Labun A. H., Moffat H. K., and Cale T. S., "Mechanistic feature-scale profile simulation of SiO₂ low-pressure chemical vapor deposition by tetraethoxysilane pyrolysis", *J. Vac. Sci. Technol. B* 18, 267 (2000).
- [Lafferty (1998)] Lafferty J. M., "Foundations of vacuum science and technology", Wiley, New York, 1998.
- [Lane et al. (2000)] Lane J. M., Klemens F. P., Bogart K. H. A., Malyshev M. V., and Lee J. T. C., "Feature profile evolution during plasma etching. II. Polycrystalline silicon etching", *J. Vac. Sci. Technol. A* 18, 188 (2000).
- [Levandovsky (2001)] Levandosky J., "Partial differential equations of applied mathematics", *Lectures notes of MATH220 at the Department of Mathematics of Stanford University*, 2001.

[Levinson et al. (1997)] Levinson J. A., Shaqfeh E. S. G., Balooch M. and Hamza A. V., “Ion-assisted etching and profile development of silicon in molecular chlorine”, *J. Vac. Sci. Technol. A* 15, 1902 (1997).

[Levinson et al. (2000)] Levinson J. A., Shaqfeh E. S. G., Balooch M., and Hamza, A. V., “Ion-assisted etching and profile development of silicon in molecular and atomic chlorine”, *J. Vac. Sci. Technol. B* 12, 172 (2000).

[Levy (2002)] Levy D., “Computational methods for fronts, waves and interfaces”, Lecture notes of MATH222A at the Department of Mathematics of Stanford University, 2002.

[Lieberman & Lichtenberg (1994)] Lieberman M. A. and Lichtenberg A. J., “Principles of plasma discharges and materials processing”, Wiley & Sons, 1994.

[Lii & Jorne (1990)] Lii Y. -J. T. and Jorne J., “Redeposition during deep trench etching”, *J. Electrochem. Soc.* 137, 2837 (1990).

[Liu et al. (1994)] Liu X. D., Osher S., and Chan T., “Weighted essentially non-oscillatory schemes”, *J. Comp. Phys.* 115, 200 (1994).

[Lukichev & Yunkin (1998)] Lukichev V. F. and Yunkin V. A., “Etch rate scaling and profile similarity upon plasmochemical etching”, *Russian Microelectronics* 27, 194 (1998).

[Lukichev & Yunkin (1999)] Lukichev V. F. and Yunkin V. A., “Scaling of silicon trench etch rates and profiles in plasma etching”, *Microelectronic Engineering* 46, 315 (1999).

[Lukichev (1998)] Lukichev V. F., “New approach to aspect ratio independent etching”, *Microelectron. Eng.* 41-42, 423 (1998).

[Mahorowala & Sawin (2002)] Mahorowala A. P. and Sawin H. H., “Etching of polysilicon in inductively coupled Cl₂ and HBr discharges. II. Simulation of profile evolution using cellular representation of feature deposition and Monte Carlo computation of flux and surface kinetics”, *J. Vac. Sci. Technol. B* 20, 1064 (2002).

[Mahorowala (1998)] Mahorowala A. P., “Feature profile evolution during the high density plasma etching of polysilicon”, PhD thesis, Massachusetts Institute of Technology, Department of Chemical Engineering, 1998.

[Manos & Flamm (1989)] Manos D. M. and Flamm D. L., “Plasma etching. An introduction”, Academic Press, 1989.

[Mantzaris et al. (1995)] Mantzaris N. V., Boudouvis A. G., and Gogolides E., “Radio-frequency plasmas in CF₄: Self-consistent modeling of the plasma physics and chemistry”, *J. Appl. Phys.* 77, 6169 (1995).

- [Mantzaris et al. (1996)] Mantzaris N. V., Gogolides E., Boudouvis A. G., Rhallabi A., and Turban G., "Surface and plasma simulation of deposition processes: CH₄ plasmas for the growth of diamondlike carbon", *J. Appl. Phys.* 79, 3718 (1996).
- [Marcos et al. (2003)] Marcos G., Rhallabi A., and Ranson P., "Monte Carlo simulation method for etching of deep trenches of Si by a SF₆/O₂ plasma mixture", *J. Vac. Sci. Technol. A* 21, 87 (2003).
- [MATLAB 6.5 help (2002)] MATLAB 6.5 help,"Graphics: Creating Specialized Plots: The Contouring Algorithm", The MathWorks 1984–2002.
- [McCash (2001)] McCash E. M., "Surface chemistry", Oxford University Press, New York, 2001.
- [McVittie et al. (1996)] McVittie J. P., Bang D. S., Han J. S., Hsiao K., Li J., Zheng J., and Saraswat K. C., "SPEEDIE 3.0 Manual", Release June 19, 1996.
- [Merchant et al. (2000)] Merchant T. P., Gobbert M. K., Cale T. S., and Borucki L. J., "Multiple scale integrated modeling of deposition processes", *Thin Solid Films* 365, 368 (2000).
- [Millikan (1923)] Millikan R. A., "The general law of fall of a small spherical body through a gas, and its bearing upon the nature of molecular reflection from surfaces", *Phys. Rev.* 22, 1 (1923).
- [Misaka & Harafuji (1997)] Misaka A. and Harafuji K., "Simulation of micro-loading phenomena in silicon dioxide hole etching", *IEEE Transactions on Electron Devices* 44, 751 (1997).
- [Murali (2002)] Murali V. K., "Code verification using the method of manufactured solutions", Master thesis, Mississippi State University, December 2002.
- [Nguyen et al. (1991)] Nguyen S. V., Dobuzinsky D., Stiffler S. R., and Chrisman G., "Substrate trenching mechanism during plasma and magnetically enhanced polysilicon etching", *J. Electrochem. Soc.* 138, 1112 (1991).
- [NIST] National Institute of Standards and Technology, Dictionary of algorithms and data structures, <http://www.nist.gov/dads/HTML/perfectBinaryTree.html>
- [Oberkampf & Trucano (2000)] Oberkampf W. L. and Trucano T. G., "Validation methodology in computational fluid dynamics", *Fluids* 2000, Denver 2000.
- [Oberkampf & Trucano (2002)] Oberkampf W. L. and Trucano T. G., "Verification and validation in computational fluid dynamics", *Progress in Aerospace Science* 38, 209 (2002).
- [Oberkampf et al. (2002)] Oberkampf W. L., Trucano T. G., and Hirsch C., "Verification and validation and predictive capability in computational engineering and physics", invited paper in "Foundations for verification and validation in the 21st century workshop", Johns Hopkins University, October 2002.

[Oehrlein et al. (1986)] Oehrlein G. S., Schad R. G., and Jaso M. A., "Mechanism of silicon surface roughening by reactive ion etching", *Surf. Interface Anal.* 8, 243 (1986).

[Oehrlein et al. (1994)] Oehrlein G. S., Zhang Y., Vender D., and Haverlag M., "Fluorocarbon high-density plasmas. I. Fluorocarbon film deposition and etching using CF_4 and CHF_3 ", *J. Vac. Sci. Technol. A* 12, 323 (1994).

[Oehrlein et al. (1994b)] Oehrlein G. S., Zhang Y., Vender D., and Joubert O., "Fluorocarbon high-density plasmas. II. Silicon dioxide and silicon etching using CF_4 and CHF_3 ", *J. Vac. Sci. Technol. A* 12, 333 (1994).

[Oldham et al. (1979)] Oldham W. G., Nandgaonkar S. N., Neureuther A. R., and O'Toole M., "A general simulator for VLSI lithography and etching processes: Part I - Application to projection lithography", *IEEE Trans. Electron Devices* 26, 717 (1979).

[Oldham et al. (1980)] Oldham W. G., Nandgaonkar S. N., Neureuther A. R., and O'Toole M., "A general simulator for VLSI lithography and etching processes: Part II - Application to deposition and etching", *IEEE Trans. Electron Devices* 27, 1455 (1980).

[Osborne (2003)] Osborne M. J., "Concave and convex functions of many variables", www.chass.utoronto.ca/~osborne/MathTutorial/CVNF.htm (2003)

[Osher & Fedkiw (2001)] Osher S. and Fedkiw R. P., "Level set methods: An overview and some recent results", *J. Comp. Phys.* 169, 463 (2001).

[Osher & Fedkiw (2003)] Osher S. and Fedkiw R., "Level set methods and dynamic implicit surfaces", *Applied Mathematical Sciences*, Volume 153, Springer 2003.

[Osher & Sethian (1988)] Osher S. and Sethian J. A. "Fronts propagating with curvature dependent speed: Algorithms based on Hamilton-Jacobi formulations", *J. Comp. Phys.* 79, 12 (1988).

[Osher & Shu (1991)] Osher S. and Shu C. W., "High-order essentially nonoscillatory schemes for Hamilton-Jacobi equations", *SIAM J. Numer. Anal.* 28, 907 (1991).

[Osher (1993)] Osher S., "A level set formulation for the solution of the Dirichlet problem for Hamilton-Jacobi equations", *SIAM J. Math. Anal.* 24, 1145 (1993).

[Osher (2002)] Osher S., "Dynamic visibility and the level set method", *SIAM News* 35 (4), May 2002.

[Panagopoulos & Economou (1999)] Panagopoulos T. and Economou D. J., "Plasma sheath model and ion energy distribution for all radio frequencies", *J. Appl. Phys.* 85, 3435 (1999).

[Panagopoulos et al. (2002)] Panagopoulos T., Kim D., Midha V., and Economou D. J., “Three-dimensional simulation of an inductively coupled plasma reactor”, *J. Appl. Phys.* 91, 2687 (2002).

[Pandhumsoporn et al. (1998)] Pandhumsoporn T., Wang L., Feldbaum M., Gadgil P., Puech M., and Maquin P., “High etch rate, deep anisotropic plasma etching of silicon for MEMS fabrication”, *SPIE* 3328, 93 (1998).

[Papakostas & Papageorgiou (1996)] Papakostas S. N. and Papageorgiou G., “A family of fifth order Runge-Kutta pairs”, *Mathematics of Computation* 65, 1165 (1996).

[Papakostas (1996)] Papakostas S. N., Tsitouras C., and Papageorgiou G., “A general family of explicit Runge-Kutta pairs of orders 6(5)”, *SIAM J. Numer. Anal.* 33, 917 (1996).

[Pelka et al. (1989)] Pelka J., Weiss M., Hoppe W., and Mewes D., “The influence of ion scattering on dry etching profiles”, *J. Vac. Sci. Technol. B* 7, 1483 (1989).

[Peng et al. (1999)] Peng D., Merriman B., Osher S., Zhao H., and Kang M., “A PDE-based fast local level set method”, *J. Comp. Phys.* 155, 410 (1999).

[Plummer et al. (2000)] Plummer J. D., Deal M., and Griffin P. B., “Silicon VLSI technology. Fundamentals, practice and modeling”, Prentice Hall, 2000.

[Present (1958)] Present R. D., “Kinetic theory of gases”, McGraw-Hill, 1958.

[Press et al. (1997)] Press W. H., Teukolsky S. A., Vetterling W. T., and Flannery B. P., “Numerical recipes in C. The art of scientific computing”, 2nd edition, Cambridge University Press 1997.

[Rangelow (2003)] Rangelow I. W., “Critical tasks in high aspect ratio silicon dry etching for microelectromechanical systems”, *J. Vac. Sci. Technol. A* 21, 1550 (2003).

[Rauf et al. (2002)] Rauf S., Dauksher W. J., Clemens S. B., and Smith K. H., “Model for a multiple-step deep Si etch process”, *J. Vac. Sci. Technol. A* 20, 1177 (2002).

[Reddy (1993)] Reddy J. N., “An introduction to the finite element method”, 2nd edition, McGraw-Hill, 1993.

[Reider et al. (1991)] Reider G. A., Hofer U., and Heinz T. F., “Surface diffusion of hydrogen on Si(111) 7x7”, *Phys. Rev. Lett.* 66, 1994 (1991).

[Richards et al. (2001)] Richards D. F., Bloomfield M. O., Sen S., and Cale T. S., “Extension velocities for level set based surface profile evolution”, *J. Vac. Sci. Technol. A* 19, 1630 (2001).

[Roache (1998)] Roache P. J., “Verification and validation in computational science and engineering”, Hermosa Publishers, Albuquerque, 1998.

[Roache (2002)] Roache P. J., "Code verification by the method of manufactured solutions", *Journal of Fluids Engineering* 124, 4 (2002).

[Robinson & Clark (2003)] Robinson E. A. and Clark D., "The eikonal equation and the secret Pythagorean theorem", *The Leading Edge (SEG)* 22, 749 (2003).

[Rogoff (1991)] Rogoff G. L., "Guest editorial. Special issue on applications of partially ionized plasmas", *IEEE Trans. Plasma Sci.* 19, 989 (1991).

[Rolland et al. (2000)] Rolland L., Peignon M. C., Cardinaud C., and Turban G., "SiO₂/Si selectivity in high density CHF₃/CH₄ plasmas: role of the fluorocarbon layer", *Microelectron. Eng.* 53, 375 (2000).

[Ross (1988)] Ross D. S., "Ion etching: An application of the mathematical theory of hyperbolic conservation law", *J. Electrochem. Soc.* 135, 1235 (1988).

[Rouy & Tourin (1992)] Rouy E. and Tourin A., "A viscosity solutions approach to shape-from-shading", *SIAM J. Num. Anal.* 29, 867 (1992).

[Rueger et al. (1997)] Rueger N. R., Beulens J. J., Schaepkens M., Doemling M. F., Mirza J. M., Standaert T. E. F. M., and Oehrlein G. S., "Role of steady state fluorocarbon films in the etching of silicon dioxide using CHF₃ in an inductively coupled plasma reactor", *J. Vac. Sci. Technol. A* 15, 1881 (1997).

[Rueger et al. (1999)] Rueger N. R., Doemling M. F., Schaepkens M., Beulens, J. J., Standaert T. E. F. M., and Oehrlein, G. S., "Selective etching of SiO₂ over polycrystalline silicon using CHF₃ in an inductively coupled plasma reactor", *J. Vac. Sci. Technol. A* 17, 2492 (1999).

[Ryans & Roper (1986)] Ryans J. L. and Roper D. L., "Process vacuum system design and operation", McGraw-Hill, 1986.

[Salari & Knupp (2000)] Salari K. and Knupp P., "Code verification by the method of manufactured solutions", Sandia Report SAND2000-1444, Sandia National Laboratories, 2000.

[Sato et al. (1991)] Sato M., Kato S., and Arita Y., "Effect of gas species on the depth reduction in silicon deep-submicron trench reactive ion etching", *Jpn. J. Appl. Phys.* 30, 1549 (1991).

[Schaepkens et al. (1999)] Schaepkens M., Standaert T. E. F. M., Rueger N. R., Sebel P. G. M., Oehrlein G. S., and Cook J. M., "Study of the SiO₂-to-Si₃N₄ etch selectivity mechanism in inductively coupled fluorocarbon plasmas and a comparison with the SiO₂-to-Si mechanism", *J. Vac. Sci. Technol. A* 17, 26 (1999).

[Schaepkens et al. (2000)] Schaepkens M., Oehrlein G. S., and Cook M. J., “Effect of radio frequency bias frequency and radio frequency bias pulsing on SiO₂ feature etching in inductively coupled fluorocarbon plasmas”, J. Vac. Technol. B 18, 856 (2000).

[Scheid (1976)] Scheid F., “Αριθμητική ανάλυση”, ΕΣΠΙ, Αθήνα 1976.

[Sedgewick (1992)] Sedgewick R., “Algorithms in C++”, Addison-Wesley, Princeton, 1992.

[Sethian & Adalsteinsson (1997)] Sethian J. A. and Adalsteinsson D., “An overview of level set methods for etching, deposition, and lithography development”, IEEE Trans. Sem. Manuf. 10, 167 (1997).

[Sethian & Smereka (2003)] Sethian J. A. and Smereka P., “Level set methods for fluid interfaces”, Annu. Rev. Fluid Mech. 35, 341 (2003).

[Sethian & Strain (1992)] Sethian J. A. and Strain J., “Crystal growth and dendritic solidification”, J. Comp. Phys. 98, 231 (1992).

[Sethian & Vladimirsky (2000)] Sethian J. A. and Vladimirsky A., “Fast methods for the Eikonal and related Hamilton-Jacobi equations on unstructured meshes”, Proc. Natl. Acad. Sci. 97, 5699 (2000).

[Sethian & Vladimirsky (2001)] Sethian J. A. and Vladimirsky A., “Ordered upwind methods for static Hamilton-Jacobi equations”, Proc. Natl. Acad. Sci. 98, 11069 (2001).

[Sethian & Vladimirsky (2003)] Sethian J. A. and Vladimirsky A., “Ordered upwind methods for static Hamilton-Jacobi equations. Theory and applications”, SIAM J. Num. Anal. 41, 325 (2003).

[Sethian (1996)] Sethian J. A., “Level set methods. Evolving interfaces in geometry, fluid mechanics, computer vision, and materials science”, Cambridge University Press, 1996.

[Sethian (1996b)] Sethian J. A., “A fast marching level set method for monotonically advancing fronts”, Proc. Natl. Acad. Sci. USA 93, 1591 (1996).

[Sethian (1996c)] Sethian J. A., “Fast marching level set methods for three-dimensional photolithography development”, SPIE 2726, 262 (1996).

[Sethian (1999)] Sethian J. A., “Level set methods and fast marching methods. Evolving Interfaces in Computational geometry, fluid mechanics, computer vision, and material science”, Cambridge University Press, 1999.

[Sethian (1999b)] Sethian J. A., “Fast marching methods”, SIAM Rev. 41, 199 (1999).

[Sethian (2001)] Sethian J. A., “Evolution, implementation, and application of level set and fast marching methods for advancing fronts”, J. Comp. Phys. 169, 503 (2001).

- [Shaqfeh & Jurgensen (1989)] Shaqfeh E. S. G. and Jurgensen C. W., "Simulation of reactive ion etching pattern transfer", *J. Appl. Phys.* 66, 4664 (1989).
- [Shibano et al. (1993)] Shibano T., Fujiwara N., Hirayama M., Nagata H., and Demizu K., "Etching yields of SiO₂ by low energy CF_x⁺ and F⁺ ions", *Appl. Phys. Lett.* 63, 2336 (1993).
- [Shu & Osher (1988)] Shu C. W. and Osher S., "Efficient implementation of essentially non-oscillatory shock capturing schemes", *J. Comp. Phys.* 77, 439 (1988).
- [Shu (1990)] Shu C. W., "Numerical experiments on the accuracy of ENO and modified schemes", *J. Sci. Comp.* 5, 125 (1990).
- [Shu (1997)] Shu C. W., "Essentially Non-Oscillatory and weighted essentially non-oscillatory schemes for hyperbolic conservation laws", ICASE Report No. 97-65, NASA/CR-97-206253, November 1997.
- [Singh et al. (1992)] Singh V. K., Shaqfeh E. S. G., and McVittie J. P., "Simulation of profile evolution in silicon reactive ion etching with re-emission and surface diffusion", *J. Vac. Sci. Technol. B* 10, 1091 (1992).
- [Singh et al. (1994)] Singh V. K., Shaqfeh E. S. G., and McVittie J. P., "Study of silicon etching in CF₄/O₂ plasmas to establish surface re-emission as the dominant transport mechanism", *J. Vac. Sci. Technol. B* 12, 2952 (1994).
- [Smith (1985)] Smith G. D., "Numerical Solution of partial differential equations. Finite difference methods, third edition", Clarendon Press, Oxford, 1985.
- [Spiteri & Ruuth (2002)] Spiteri R. J. and Ruuth S. J., "A new class of optimal high-order strong-stability-preserving time discretization methods", *SIAM J. Numer. Anal.* 40, 469 (2002).
- [Standaert et al. (1998)] Standaert T. E. F. M., Schaepkens M., Rueger, N. R., Sebel P. G. M., Oehrlein, G. S., and Cook J. M., "High density fluorocarbon etching of silicon in an inductively coupled plasma: Mechanism of etching through a thick steady state fluorocarbon layer", *J. Vac. Sci. Technol. A* 16, 239 (1998).
- [Steinbruchel (1989)] Steinbruchel C. "Universal energy dependence of physical and ion-enhanced chemical etch yields at low ion energy", *Appl. Phys. Lett.* 55, 1960 (1989).
- [Strang & Fix (1973)] Strang G. and Fix G. J., "An analysis of the finite element method", Prentice-Hall, 1973.
- [Strasser & Selberherr (1995)] Strasser E. and Selberherr S., "Algorithms and models for cellular based topography simulation", *IEEE Transactions on Computer Aided Design of integrated Circuits and Systems* 14, 1104 (1995).

- [Sugawara (1998)] Sugawara M., "Plasma etching. Fundamentals and Applications", Oxford University Press, 1998.
- [Sussman et al. (1994)] Sussman M., Smereka P., and Osher S., "A level set approach for computing solutions to incompressible two-phase flow", *J. Comp. Phys.* 114, 146 (1994).
- [Tachi et al. (1982)] Tachi S., Miyake K., and Tokuyama T., "Chemical and physical roles of individual reactive ions in Si dry etching", *Jpn. J. Appl. Phys.* 21, 141 (1982).
- [Tait et al. (1994)] Tait R. N., Dew S. K., Smy T., and Brett M. J., "Monte Carlo simulation and measurement of silicon reactive ion etching profiles", *J. Vac. Sci. Technol. A* 12, 1085 (1994).
- [Tonks (1967)] Tonks L., "The birth of plasma", *Amer. J. Phys.* 35, 857 (1967).
- [Tsai et al. (2002)] Tsai Y. -H. R., Cheng L. -T., Burchard P., Osher S., and Sapiro G., "Dynamic visibility in an implicit framework", University of California CAM report 02(06), February 2002.
- [Tsai et al. (2003)] Tsai Y. -H. R., Cheng L. -T., Osher S., and Zhao H. -K., "Fast sweeping algorithms for a class of Hamilton-Jacobi equations", *SIAM J. Num. Anal.* 41, 673 (2003).
- [Tsai et al. (2004)] Tsai Y. -H. R., Cheng L. -T., Osher S., Burchard P., and Sapiro G., "Visibility and its dynamics in a PDE based implicit framework", *J. Comp. Phys.* 199, 260 (2004).
- [Tserepi et al. (2003)] Tserepi A., Tsamis C., Kokkoris G., Gogolides E., and Nassiopoulou A. G., "Fabrication of suspended thermally insulating membranes using frontside micromachining of the Si substrate: characterization of the etching process", *J. Micromech. Microeng.* 13, 323 (2003).
- [Tsitouras & Papakostas (1999)] Tsitouras C. and Papakostas S. N., "Cheap error estimation for Runge-Kutta methods", *SIAM J. Sci. Comput.* 20, 2067 (1999).
- [Tsitsiklis (1995)] Tsitsiklis J. N., "Efficient algorithms for globally optimal trajectories", *IEEE Transactions on automatic control* 40, 1528 (1995).
- [Tsynkov (1998)] Tsynkov S. V., "Numerical solution of problems on unbounded domains. A review", *Appl. Num. Math.* 27, 465 (1998).
- [Tu et al. (1981)] Tu Y. -Y., Chuang T. J., and Winters H. F., "Chemical sputtering of fluorinated silicon", *Phys. Rev. B* 23, 823 (1981).
- [Tuda et al. (1997)] Tuda M., Nishikawa K. and Ono K., "Numerical study of the etch anisotropy in low-pressure, high-density plasma etching", *J. Appl. Phys.* 81, 960 (1997).
- [Ulacia & McVittie (1989)] Ulacia J. I. and McVittie J. P., "J. Appl. Phys. 65, 1484 (1989).

- [Ulacia et al. (1988)] Ulacia J. I., Petti C. J., and McVittie J. P., "Crystal-orientation dependent etch rates and a trench model for dry etching", *J. Electrochem. Soc.: Solid-state science and technology* 135, 1521 (1988).
- [Vauvert (1996)] Vauvert P., "Modeling of silicon etching with CF₄ plasma", Engineering Internship Report, Institute of Microelectronics, NCSR Demokritos, Athens 1996.
- [Ventzek et al. (1994)] Ventzek P. L. G., Hoekstra R. J., and Kushner M. J., "Two-dimensional modeling of high density inductively coupled sources for materials processing", *J. Vac. Sci. Technol. B* 12, 461 (1994).
- [Verdonck et al. (2002)] Verdonck P., Goodyear A., Mansano R. D., Barroy P. R. J., and Braithwaite N. S. J., "Importance of fluorine surface diffusion for plasma etching of silicon", *J. Vac. Sci. Technol. B* 20, 791 (2002).
- [Volland & Rangelow (2003)] Volland B. E. and Rangelow I. W., "The influence of reactant transport on the profiles of gas chopping etching processes: a simulation approach", *Microelectron. Eng.* 67, 338 (2003).
- [Volland et al. (2002)] Volland B. E., Ivanov T., and Rangelow I. W., "Profile simulation of gas chopping based etching processes", *J. Vac. Sci. Technol. B* 20, 3111 (2002).
- [Weisstein (2004)] Weisstein E. W., from MathWorld, Wolfram Web Resource, <http://mathworld.wolfram.com/JordanCurveTheorem.html>, <http://mathworld.wolfram.com/SphericalCoordinates.html>, <http://mathworld.wolfram.com/FrobeniusNorm.html>.
- [Westerheim et al. (1995)] Westerheim A. C., Labun A. H., Dubash J. H., Arnold J. C., Sawin H. H., and Yu-Wang V., "Substrate bias effects in high-aspect-ratio SiO₂ contact etching using an inductively coupled plasma reactor", *J. Vac. Sci. Technol. A* 13, 853 (1995).
- [Wise et al. (1995)] Wise R. S., Lymberopoulos D. P., and Economou D. J., "A two-region model of a radiofrequency low-pressure, high-density plasma", *Plasma Sources Sci. Technol.* 4, 317 (1995).
- [Wulu et al. (1991)] Wulu H. C., Saraswat K. C., and McVittie J. P., "Simulation of mass transport for deposition in via holes and trenches", *J. Electrochem. Soc.* 138, 1831 (1991).
- [Yunkin et al. (1996)] Yunkin V. A., Lukichev V. F., Rudenko K. V., Fischer D., and Voges E., "Experimental study and computer simulation of aspect ratio dependent effects observed in silicon reactive ion etching", *Microelectronic Engineering* 30, 345 (1996).
- [Zawaideh & Kim (1988)] Zawaideh E. and Kim N. S., "A generalized plasma etching model", *J. Appl. Phys.* 64, 4199 (1988).

[Zhang & Kushner (2000)] Zhang D. and Kushner M. J., “Surface kinetics and plasma equipment model for Si etching by fluorocarbon plasmas”, J. Appl. Phys. 87, 1060 (2000).

[Zhang & Kushner (2001)] Zhang D. and Kushner M. J., “Investigations of surface reactions during C₂F₆ plasma etching of SiO₂ with equipment and feature scale models”, J. Vac. Sci. Technol. A 19, 524 (2001).

[Zhao et al. (1996)] Zhao H. K., Chan T., Merriman B., and Osher S., “A variational level set approach to multiphase motion”, J. Comp. Phys. 127, 179 (1996).

[Zhao et al. (1999)] Zhao Y. -P., Drotar J. T., Wang G. C., and Lu T. M., “Roughening in plasma etch fronts of Si(100)”, Phys. Rev. Lett. 82, 4882 (1999).

[Zienkiewicz & Taylor (1994)] Zienkiewicz O. C. and Taylor R. L., “The finite element method. Volume 1: Basic formulation and linear problems”, 4th edition, McGraw-Hill, 1994.

[Γεωργακόπουλος (2002)] Γεωργακόπουλος Γ. Φ., «Δομές δεδομένων. Έννοιες, τεχνικές και αλγόριθμοι», Πανεπιστημιακές Εκδόσεις Κρήτης, Ηράκλειο 2002.

[Γιαννάκογλου (1999)] Γιαννάκογλου Κ. Χ., «Υπολογιστικές τεχνικές και αλγόριθμοι επίλυσης. Σύντομη εισαγωγή στη μεθοδολογία των πεπερασμένων διαφορών», Σημειώσεις μαθήματος του ΔΠΜΣ «Υπολογιστική μηχανική», Αθήνα 1999.

[Γογγολίδης (1992)] Γογγολίδης Ε., «Διεργασίες πλάσματος στη Μικροηλεκτρονική», Επιθεώρηση Φυσικής, Β περίοδος 21, 43 (1992).

[Γογγολίδης (1998)] Γογγολίδης Ε., «Διαδικασίες κατασκευής ολοκληρωμένων κυκλωμάτων. Τεχνολογίες αποτύπωσης σχήματος. Λιθογραφία και εγχάραξη», Σημειώσεις μαθήματος «Διαδικασίες κατασκευής ολοκληρωμένων κυκλωμάτων» μεταπτυχιακό Μικροηλεκτρονικής, Αθήνα 1998.

[Κόκκορης (2000)] Κόκκορης Γ., «Προσομοίωση εγχάραξης δομών SiO₂ και Si σε πλάσμα φθοριωμένων υδρογονανθράκων», Διπλωματική εργασία στα πλαίσια του διατμηματικού μεταπτυχιακού προγράμματος «Μικροηλεκτρονικής», Τμήμα Πληροφορικής και Τηλεπικοινωνιών, Σχολή Θετικών Επιστημών, Εθνικό και Καποδιστριακό Πανεπιστήμιο Αθηνών, Αθήνα 2000.

[Κοκολάκης & Σπηλιώτης] Κοκολάκης Γ. και Σπηλιώτης Ι., «Εισαγωγή στη θεωρία πιθανοτήτων και Στατιστική», 2^η έκδοση, Εκδόσεις Συμεών, Αθήνα 1991.

[Κουλίδης (2001)] Κουλίδης Α., «Υπολογιστική ανάλυση εγχάραξης οπών επαφής ολοκληρωμένων κυκλωμάτων με πλάσμα», Διπλωματική εργασία στα πλαίσια του διατμηματικού μεταπτυχιακού προγράμματος «Υπολογιστική Μηχανική», ΕΜΠ, Αθήνα 2001.

[Κουμούτσος & Λυγερού (1991)] Κουμούτσος Ν. και Λυγερού Β., «Μεταφορά μάζας. Σημειώσεις», Τυπογραφείο Εθνικού Μετσόβιου Πολυτεχνείου, Αθήνα 1991.

[Μαρκάτος & Ασημακόπουλος (1995)] Μαρκάτος Ν., Ασημακόπουλος Δ., «Υπολογιστική ρευστοδυναμική», εκδόσεις Παπασωτηρίου, Αθήνα 1995.

[Μαρκόπουλος (1992)] Μαρκόπουλος Ι. Ν., «Μεταφορά μάζας», University Studio Press, Θεσσαλονίκη 1992.

[Μείζον ελληνικό λεξικό (1997)] «Μείζον ελληνικό λεξικό», εκδόσεις Αρμονία Α.Ε, Αθήνα 1997.

[Μπούκουρας (2003)] Μπούκουρας Κ., «Εγχάραξη επιφανειών πυριτίου σε αντιδραστήρα πλάσματος υψηλής πυκνότητας και μελέτη επιφανειακής και πλευρικής τραχύτητας», Διπλωματική εργασία στα πλαίσια του διατμηματικού μεταπτυχιακού προγράμματος «Μικροηλεκτρονικής», Τμήμα Πληροφορικής και Τηλεπικοινωνιών, Σχολή Θετικών Επιστημών, Εθνικό και Καποδιστριακό Πανεπιστήμιο Αθηνών, Αθήνα 2003.

[Μπουντουβής (1992)] Μπουντουβής Α. Γ., «Υπολογιστική ανάλυση με τη μέθοδο των πεπερασμένων στοιχείων», Εκδόσεις ΕΜΠ, Αθήνα 1992.

[Παπαγεωργίου & Τσίτουρας (2000)] Παπαγεωργίου Γ. Σ. και Τσίτουρας Χ. Γ., «Αριθμητική ανάλυση με εφαρμογές σε matlab και mathematica», εκδόσεις Συμεών, Αθήνα 2000.

[Παπαγεωργίου (1990)] Παπαγεωργίου Γ. Σ., «Θέματα αριθμητικής ανάλυσης», εκδόσεις Συμεών, Αθήνα 1990.

[Παπαϊωάννου (1993)] Παπαϊωάννου Α. Θ., «Ανύσματα και ταυνοστές. Μαθηματική ανάλυση και φυσική ερμηνεία», Εκδόσεις Αθανασόπουλος και Παπαδάμης, Αθήνα 1993.

[Παπαϊωάννου (1993b)] Παπαϊωάννου Α. Θ., «Μηχανική των ρευστών Ι», Εκδόσεις Αθανασόπουλος και Παπαδάμης, Αθήνα 1993.

[Σπετσειέρης (2004)] Σπετσειέρης Κ., «Υπολογισμοί εξέλιξης μετώπου με τη μέθοδο ταχυ-βηματισμού. Εφαρμογή σε διεργασίες μικροηλεκτρονικής», Διπλωματική εργασία, Σχολή Χημικών Μηχανικών ΕΜΠ, Αθήνα 2004.

[Τσερέπη (1999)] Τσερέπη Α., «Εργαστηριακός εξοπλισμός και διαδικασίες καθαρού χώρου», Σημειώσεις μαθήματος «Εργαστήριο κατασκευής ολοκληρωμένου κυκλώματος», Αθήνα 1999.

