Т. Г. Елизарова, А. В. Жериков, И. С. Калачинская, Ю.В. Шеретов

ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ КОНВЕКТИВНЫХ ТЕЧЕНИЙ ЭЛЕКТРОПРОВОДНОЙ ЖИДКОСТИ В КАВЕРНЕ*

1. Введение

Процессы тепло-массопереноса в расплавах полупроводниковых материалов оказывают определяющее воздействие на структуру и свойства выращиваемых кристаллов. Основной причиной возникновения примесных неоднородностей в кристаллах, получаемых методом бестигельной зонной плавки, является нестационарное конвективное движение в расплаве, возникающее в процессе кристаллизации [1]. В земных условиях преобладает гравитационная конвекция, в невесомости – термокапиллярная или концентрационно-капиллярная конвекция.

Известно, что вне зависимости от направления магнитного поля по отношению к вектору скорости течения электропроводной жидкости возникающие массовые силы тормозят движение расплава. Возможность использования этого эффекта для подавления конвективного движения и улучшения свойств выращиваемых образцов широко изучается в настоящее время с помощью как натурных [2], [3], так и вычислительных экспериментов [4] - [6]. Численное моделирование процессов взаимодействия магнитного поля и электропроводной жидкости представляется достаточно сложной математической и вычислительной проблемой.

В данной работе предложена оригинальная математическая модель для описания течений расплавов в постоянном внешнем магнитном поле. Построен алгоритм ее численной реализации. Приведены результаты расчетов термокапиллярных течений в квадратной каверне.

2. Квазигидродинамическая система для квазинейтральной сжимаемой электропроводной жидкости

Для величин, характеризующих течения квазинейтральной электропроводной жидкости, будем использовать следующие обозначения: $\rho = \rho(\vec{x},t)$ – плотность, $\vec{u} = \vec{u}(\vec{x},t)$ – вектор гидродинамической скорости, $p = p(\vec{x},t)$ – давление, $T = T(\vec{x},t)$ – температура, $\varepsilon = \varepsilon(\vec{x},t)$ – внутренняя энергия единицы массы, $s = s(\vec{x},t)$ – удельная энтропия, $\vec{H} = \vec{H}(\vec{x},t)$ и $\vec{E} = \vec{E}(\vec{x},t)$ – напряженности магнитного и электрического полей, $\vec{F}$ – мас-

*Работа выполнена при поддержке грантов РФФИ N 01-01-00061 и INTAS N 2000-0617.

совая плотность внешних сил, c – скорость света в вакууме. В качестве исходной математической модели будем использовать предложенную в [7] – [9] квазимагнитогидродинамическую (КМГД) систему

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + div(\rho \vec{u}) = div(\rho \vec{w}), \tag{1}$$

$$\begin{gathered}\frac{\partial(\rho \vec{u})}{\partial t} + div(\rho \vec{u} \otimes \vec{u}) + \vec{\nabla} p = \rho \vec{F} + \frac{1}{c}[\vec{j} \times \vec{H}] + div \Pi_{NS} + \\ + div[(\rho \vec{w} \otimes \vec{u}) + (\rho \vec{u} \otimes \vec{w})],\end{gathered} \tag{2}$$

$$\begin{gathered}\frac{\partial}{\partial t}\left[\rho\left(\frac{\vec{u}^2}{2} + \varepsilon\right)\right] + div\left[\rho \vec{u}\left(\frac{\vec{u}^2}{2} + \varepsilon\right) + p\vec{u}\right] + div \vec{q} = \\ = \rho\left((\vec{u} - \vec{w}) \cdot \vec{F}\right) + (\vec{j} \cdot \vec{E}) + div(\Pi_{NS} \cdot \vec{u}) + \\ + div\left[\rho \vec{w}\left(\frac{\vec{u}^2}{2} + \varepsilon\right) + p\vec{w} + \rho \vec{u}(\vec{w} \cdot \vec{u})\right],\end{gathered} \tag{3}$$

$$rot\ \vec{E} = -\frac{1}{c}\frac{\partial \vec{H}}{dt}, \quad div\ \vec{H} = 0, \quad \vec{j} = \frac{4\pi}{c}\ rot\ \vec{H}. \tag{4}$$

Величины Π_{NS}, $\vec{q}$ и $\vec{j}$, интерпретируемые как тензор вязких напряжений, вектор теплового потока и вектор плотности электрического тока, вычисляются по формулам

$$\Pi_{NS} = \eta\left[\left(\vec{\nabla} \otimes \vec{u}\right) + \left(\vec{\nabla} \otimes \vec{u}\right)^T - \frac{2}{3} I\ div\ \vec{u}\right], \tag{5}$$

$$\vec{q} = -æ \vec{\nabla}\ T, \tag{6}$$

$$\vec{j} = \sigma\left(\vec{E} + \frac{1}{c}(\vec{u} - \vec{w}) \times \vec{H}\right), \tag{7}$$

где

$$\vec{w} = \frac{\tau}{\rho}\left(\rho(\vec{u} \cdot \vec{\nabla})\vec{u} + \vec{\nabla} p - \rho \vec{F} - \frac{1}{c}\left[\vec{j} \times \vec{H}\right]\right). \tag{8}$$

Символы $\cdot$, $\times$ и $\otimes$ используются для обозначения операций скалярного, векторного и прямого тензорного произведения векторов; *div* и *rot* – операторы дивергенции и ротора; I – единичный тензор второго ранга. Диэлектрическую и магнитную проницаемости среды считаем равными единице. Система становится замкнутой, если ее дополнить уравнениями состояния

$$p = \Psi_1(\rho,\ T), \qquad \varepsilon = \Psi_2(\rho,\ T), \qquad s = \Psi_3(\rho,\ T),$$

а также выражениями

$$\eta = \Psi_4(\rho,\ T), \qquad æ = \Psi_5(\rho,\ T), \qquad \sigma = \Psi_6(\rho,\ T)$$

для вычисления коэффициентов динамической вязкости η, теплопроводности æ и электропроводности σ. Релаксационный параметр τ, имеющий размерность времени, определяется с помощью выражения

$$\tau = \frac{\eta}{\rho c_s^2},$$

где c_s – скорость звука в среде при отсутствии электромагнитного поля. Формальный переход в (1) – (8) к пределу при $\tau \to 0$ дает классическую систему МГД в квазинейтральном приближении [10], [11].

С помощью тождества Гиббса $Tds = d\varepsilon + pd(1/\rho)$ из (1) – (8) можно вывести уравнение баланса энтропии

$$\frac{\partial(\rho s)}{\partial t} + div(\rho\vec{u}s) = div(\rho\vec{w}s) + div(æ\frac{\vec{\nabla}T}{T}) + æ(\frac{\vec{\nabla}T}{T})^2 + \frac{\Phi}{T}$$

с неотрицательной диссипативной функцией

$$\Phi = \frac{\left(\Pi_{NS} : \Pi_{NS}\right)}{2\eta} + \frac{\rho\vec{w}^2}{\tau} + \frac{\vec{j}^2}{\sigma}$$

3. КМГД-система в безындукционном приближении Обербека – Буссинеска

КМГД-система в так называемом безындукционном приближении Обербека - Буссинеска имеет вид

$$div\ \vec{u} = div\vec{w}, \tag{9}$$

$$\frac{\partial\vec{u}}{\partial t} + div\ (\vec{u} \otimes \vec{u}) + \frac{1}{\rho}\vec{\nabla}p =$$
$$= -\beta\vec{g}T + \frac{\sigma}{\rho c^2}\left[\left[\left(\vec{u} - \vec{w}\right) \times \vec{H_0}\right] \times \vec{H_0}\right] + \tag{10}$$
$$+ \frac{1}{\rho}div\ \Pi_{NS} + div\ \left[\left(\vec{w} \otimes \vec{u}\right) + \left(\vec{u} \otimes\vec{w}\right)\right],$$

$$\frac{\partial T}{\partial t} + div\ (\vec{u}T) = div\ (\vec{w}T) + \chi \Delta T. \qquad (11)$$

При этом величины Π_{NS} и $\vec{w}$ вычисляются по формулам

$$\begin{aligned} \Pi_{NS} &= \eta\left[\left(\vec{\nabla} \otimes \vec{u}\right) + \left(\vec{\nabla} \otimes \vec{u}\right)^T\right], \\ \vec{w} &= \tau\left((\vec{u}\cdot\vec{\nabla})\vec{u} + \frac{1}{\rho}\vec{\nabla}p + \beta\vec{g}T - \frac{\sigma}{\rho c^2}\left[\left[\vec{u} \times \overrightarrow{H_0}\right] \times \overrightarrow{H_0}\right]\right). \end{aligned} \qquad (12)$$

Они выводятся из полных уравнений (1) – (8) при следующих допущениях:

1) Используется приближение типа Обербека - Буссинеска. Член с диссипативной функцией в уравнении переноса тепла опущен.

2) Рассматриваются течения полупроводникового расплава, как течения квазинейтральной жидкости. Влиянием электрического поля пренебрегаем.

3) Отклонения магнитного поля в расплаве от величины однородного внешнего магнитного поля $\overrightarrow{H_0}$ считаются малыми.

4) Индуцируемые токи малы. Джоулев нагрев в уравнении переноса тепла не учитывается.

Здесь $\rho = const > 0$ – среднее значение плотности, $\vec{u} = \vec{u}(\vec{x},t)$ – вектор гидродинамической скорости, $p = p(\vec{x},t)$ – давление, отсчитываемое от гидростатического, $T = T(\vec{x},t)$ – отклонение температуры от ее среднего значения $T_0 = const > 0$, Δ – оператор Лапласа в пространстве $R^3_{\vec{x}}$. Температурный коэффициент расширения жидкости β, динамическая вязкость $\eta = \rho\nu$, температуропроводность $\chi = æ/(\rho c_p)$ и электропроводность σ считаются заданными положительными постоянными.

4. Постановка задачи

Рассмотрим задачу о конвекции полупроводникового расплава в полости прямоугольного сечения длины L и высоты AL. Одна из границ полости свободная, остальные твердые. Пусть $\Theta > 0$ – температура левой стенки каверны. Температуру правой стенки положим равной нулю. Однородное внешнее магнитное поле направлено перпендикулярно свободной поверхности.

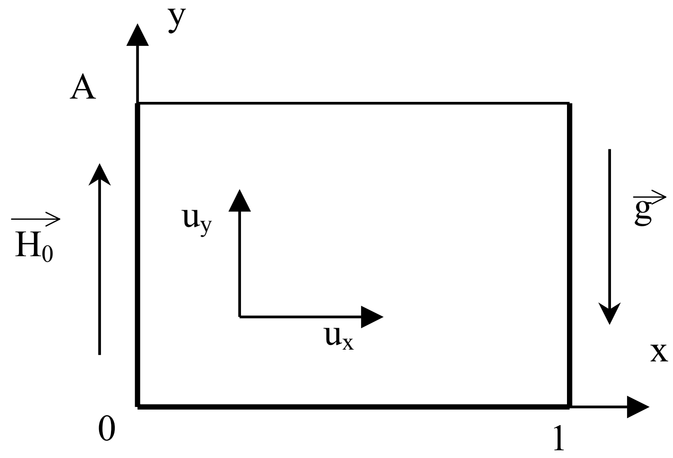

Рис.1

Основной математической моделью будем считать систему (9) – (12), которую запишем в декартовых координатах *(x, y)*:

$$\frac{\partial u_x}{\partial x}+\frac{\partial u_y}{\partial y}=\frac{\partial w_x}{\partial x}+\frac{\partial w_y}{\partial y}, \tag{13}$$

$$\begin{gathered}\frac{\partial u_x}{\partial t}+\frac{\partial (u_x{}^2)}{\partial x}+\frac{\partial (u_x u_y)}{\partial y}+\frac{\partial p}{\partial x}=\frac{\partial (\Pi_{xx}^{NS})}{\partial x}+\frac{\partial (\Pi_{yx}^{NS})}{\partial y}+\\ +2\ \frac{\partial (u_x w_x)}{\partial x}+\frac{\partial (u_x w_y)}{\partial y}+\frac{\partial (u_y w_x)}{\partial y}-Ha^2\left(u_x-\ w_x\right),\end{gathered} \tag{14}$$

$$\begin{gathered}\frac{\partial u_y}{\partial t}+\frac{\partial (u_y{}^2)}{\partial y}+\frac{\partial (u_x u_y)}{\partial x}+\frac{\partial p}{\partial y}=\frac{\partial (\Pi_{xy}^{NS})}{\partial x}+\frac{\partial (\Pi_{yy}^{NS})}{\partial y}+\\ +\ \frac{\partial (u_y w_x)}{\partial x}+\frac{\partial (u_x w_y)}{\partial x}+2\frac{\partial (u_y w_y)}{\partial y}\ +\ GrT,\end{gathered} \tag{15}$$

$$\begin{gathered}\frac{\partial T}{\partial t}+\frac{\partial (u_x T)}{\partial x}+\frac{\partial (u_y T)}{\partial y}=\frac{\partial (w_x T)}{\partial x}+\frac{\partial (w_y T)}{\partial y}+\\ +\frac{1}{\Pr}\left[\frac{\partial^2 T}{\partial x^2}+\frac{\partial^2 T}{\partial y^2}\right],\end{gathered} \tag{16}$$

$$w_x\ =\ \tau\left(u_x\frac{\partial u_x}{\partial x}\ +\ u_y\frac{\partial u_x}{\partial y}\ +\ \frac{\partial p}{\partial x}\ +\ Ha^2 u_x\right), \tag{17}$$

$$w_y = \tau\left(u_x \frac{\partial u_y}{\partial x} + u_y \frac{\partial u_y}{\partial y} + \frac{\partial p}{\partial y} - Gr\,T\right), \qquad (18)$$

Компоненты навье-стоксовского тензора вязких напряжений Π^{NS} имеют вид

$$\Pi^{NS}_{xx} = 2\frac{\partial u_x}{\partial x}, \quad \Pi^{NS}_{yx} = \Pi^{NS}_{xy} = \left(\frac{\partial u_x}{\partial y} + \frac{\partial u_y}{\partial x}\right), \quad \Pi^{NS}_{yy} = 2\frac{\partial u_y}{\partial y}. \qquad (19)$$

Система (13) – (19) представлена в безразмерной форме. В качестве единиц измерения $x, y, t, u_x, u_y, w_x, w_y, p, T$ соответственно выбраны величины $L, L, L^2/\nu, \nu/L, \nu/L, \nu/L, \nu/L, \rho(\nu/L)^2, \Theta$. Числа Грасгофа Gr, Гартмана Ha, Прандтля Pr, Марангони Ma и звуковое число Рейнольдса Re_s определяются с помощью выражений

$$Gr = \frac{g\beta\Theta L^3}{\nu^2}, \quad Ha = \frac{LH_0}{c}\sqrt{\frac{\sigma}{\eta}}, \quad \Pr = \frac{\nu}{\chi}, \quad Ma = -\frac{\Theta L}{\eta\chi}\frac{\partial\sigma_T}{\partial T}, \quad \mathrm{Re}_s = \frac{c_s L}{\nu}.$$

Здесь $\sigma_T = \sigma_T(T)$ – коэффициент поверхностного натяжения расплава. Безразмерный релаксационный параметр τ связан с $\mathrm{Re_s}$ соотношением $\tau = 1/(\mathrm{Re}_s^2)$. Проекции вектора плотности потока массы вычисляются по формулам

$$j_{mx} = u_x - w_x, \quad j_{my} = u_y - w_y.$$

Пусть $G = \{(x, y) : 0 < x < 1, 0 < y < A\}$ – область течения. Дополним систему (13) – (19) начальными условиями

$$u_x\big|_{t=0} = u_y\big|_{t=0} = 0, \quad T\big|_{t=0} = 0, \quad (x, y) \in G, \qquad (20)$$

Пусть жидкость прилипает к правой, левой и нижней границам полости, а на верхней действуют силы поверхностного натяжения. Горизонтальные границы полости теплоизолированы. Схема расчетной области приведена на Рис. 1. Такой физической постановке соответствуют граничные условия:

- левая стенка *(x = 0, 0 < y < A):*

$$u_x = u_y = 0, \quad \frac{\partial p}{\partial x} = 0, \quad T = 1; \qquad (21)$$

- правая стенка *(x = 1, 0 < y < A):*

$$u_x = u_y = 0, \quad \frac{\partial p}{\partial x} = 0, \quad T = 0; \qquad (22)$$

- нижняя стенка *(0 < x < 1, y = 0):*

$$u_x = u_y = 0, \quad \frac{\partial p}{\partial y} = Gr\ \ T, \quad \frac{\partial T}{\partial y} = 0; \tag{23}$$

- верхняя стенка *(0 < x <1, y = A):*

$$\frac{\partial u_x}{\partial y} = -\frac{Ma}{\Pr}\frac{\partial T}{\partial x}, \quad u_y = 0, \quad \frac{\partial p}{\partial y} = Gr\ \ T, \quad \frac{\partial T}{\partial y} = 0. \tag{24}$$

Чтобы устранить неоднозначность в определении давления, будем использовать нормировку

$$p(0,\ 0,\ t) = 0. \tag{25}$$

Задача состоит в нахождении функций $u_x = u_x(x,\ y,\ t)$, $u_y = u_y(x,\ y,\ t)$, $p = p(x,\ y,\ t)$ и $T = T(x,\ y,\ t)$, удовлетворяющих в области $Q = G \times [0,\ T]$ системе (13) – (19), а также условиям (20) – (25).

Для построения вычислительного алгоритма уравнение (13) удобно представить в виде

$$\begin{aligned} &\frac{\partial^2 p}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 p}{\partial y^2} = \frac{1}{\tau}\left[\frac{\partial u_x}{\partial x} + \frac{\partial u_y}{\partial y}\right] - \\ &-\frac{\partial}{\partial x}\left(u_x\frac{\partial u_x}{\partial x} + u_y\frac{\partial u_x}{\partial y} + Ha^2 u_x\right) - \frac{\partial}{\partial y}\left(u_x\frac{\partial u_y}{\partial x} + u_y\frac{\partial u_y}{\partial y} - Gr T\right). \end{aligned} \tag{26}$$

Введем также функцию тока Ψ, связанную с соленоидальным полем $\vec{u} - \vec{\omega}$ посредством соотношений

$$u_x - w_x = \frac{\partial \Psi}{\partial y}, \quad u_y - w_y = -\frac{\partial \Psi}{\partial x}.$$

5. Вычислительный алгоритм

Область G покроем равномерной сеткой с числом ячеек $N_x \times N_y$. Пусть

$$\omega_h = \{(x_i,\ y_j) : x_i = (i - 1/2)h_x,\ y_j = (j - 1/2)h_y,$$
$$i = \overline{1,\ N_x},\ j = \overline{1,\ N_y},\ h_x = 1/N_x,\ h_y = 1/N_y\ \}$$

– множество точек, являющихся центрами этих ячеек, $\Delta\, t$ – шаг по времени,

$$\overline{\omega}_h = \omega_h \cup \gamma_h = \{(x_i,\ y_j) : x_i = (i - 1/2)h_x,\ y_j = (j - 1/2)h_y,$$
$$i = \overline{0,\ N_x + 1},\ j = \overline{0,\ N_y + 1},\ h_x = 1/N_x,\ h_y = 1/N_y\ \}.$$

Гидродинамические величины u_x, u_y и p будем относить к узлам сетки ω_h. Значения произвольной функции ψ из множества $\{u_x,\ u_y,\ p\}$ в точках $\left(x_{i\pm 1/2},\ y_j\right)$, $\left(x_i,\ y_{j\pm 1/2}\right)$, $\left(x_{i+1/2},\ y_{j\pm 1/2}\right)$ и $\left(x_{i-1/2},\ y_{j\pm 1/2}\right)$ определим с помощью выражений

$$\psi_{i\pm 1/2,\, j} = 0.5(\psi_{i\pm 1,\, j} + \psi_{ij}), \quad \psi_{i,\, j\pm 1/2} = 0.5(\psi_{i,\, j\pm 1} + \psi_{ij}),$$
$$\psi_{i+1/2,\, j\pm 1/2} = 0.25(\psi_{i+1,\, j\pm 1} + \psi_{i,\, j\pm 1} + \psi_{i+1,\, j} + \psi_{ij}),$$
$$\psi_{i-1/2,\, j\pm 1/2} = 0.25(\psi_{i-1,\, j\pm 1} + \psi_{i,\, j\pm 1} + \psi_{i-1,\, j} + \psi_{ij})$$

В момент времени $t = 0$ положим

$$(u_x)_{ij} = (u_y)_{ij} = 0, \quad T_{ij} = 0, \quad (x_i,\ y_j) \in \omega_h. \tag{27}$$

Чтобы аппроксимировать граничные условия для скорости и температуры, сеточные функции $(u_x)_{ij}$, $(u_y)_{ij}$ и T_{ij} в центрах фиктивных ячеек из γ_h вычислим по формулам

$$T_{0j} = 2 - T_{1j}, \quad T_{N_x+1,j} = -T_{N_x,j}, \quad j = \overline{1,\ N_y};$$
$$T_{i0} = T_{i1}, \quad T_{i,N_y+1} = T_{i,N_y}, \quad i = \overline{1,\ N_x};$$
$$T_{00} = 2 - T_{11}, \quad T_{0,N_y+1} = 2 - T_{1N_y},$$
$$T_{N_x+1,0} = -T_{N_x,1}, \quad T_{N_x+1,N_y+1} = -T_{N_x,N_y};$$

$$(u_x)_{0j} = -(u_x)_{1j}, \quad (u_y)_{0j} = -(u_y)_{1j},$$
$$(u_x)_{N_x+1,j} = -(u_x)_{N_x,j}, \quad (u_y)_{N_x+1,j} = -(u_y)_{N_x,j}, \quad j = \overline{1,\ N_y};$$
$$(u_x)_{i0} = -(u_x)_{i1}, \quad (u_y)_{i0} = -(u_y)_{i1},$$
$$(u_x)_{i,N_y+1} = (u_x)_{i,N_y} - \frac{Ma}{\Pr}\frac{h_y}{h_x}\frac{T_{i+1,N_y} - T_{i-1,N_y}}{2},$$
$$(u_y)_{i,N_y+1} = -(u_y)_{i,N_y}, \quad i = \overline{1,\ N_x};$$
$$(u_x)_{00} = (u_x)_{11}, \quad (u_y)_{00} = (u_y)_{11},$$
$$(u_x)_{N_x+1,0} = (u_x)_{N_x,1}, \quad (u_y)_{N_x+1,0} = (u_y)_{N_x,1},$$
$$(u_x)_{0,N_y+1} = -(u_x)_{1,N_y} + \frac{Ma}{\Pr}\frac{h_y}{h_x}\frac{T_{2,N_y} - T_{0,N_y}}{2},$$
$$(u_y)_{0,N_y+1} = (u_y)_{1,N_y},$$
$$(u_x)_{N_x+1,N_y+1} = -(u_x)_{N_x,N_y} + \frac{Ma}{\Pr}\frac{h_y}{h_x}\frac{T_{N_x+1,N_y} - T_{N_x-1,N_y}}{2}, \tag{28}$$
$$(u_y)_{N_x+1,N_y+1} = (u_y)_{N_x,N_y}.$$

Во всех $(x_i,\ y_j) \in \omega_h$ заменим дифференциальное уравнение (26) разностным:

$$\frac{1}{h_x^2}(p_{i+1,j} - 2p_{ij} + p_{i-1,j}) + \frac{1}{h_y^2}(p_{i,j+1} - 2p_{ij} + p_{i,j-1}) = -\varphi_{ij}. \quad (29)$$

Здесь

$$\varphi_{ij} = \frac{1}{h_x^2}\Big[(u_x)_{i+1/2,j}\big((u_x)_{i+1,j} - (u_x)_{ij}\big) - (u_x)_{i-1/2,j}\big((u_x)_{ij} - (u_x)_{i-1,j}\big)\Big] +$$

$$+\frac{1}{h_x h_y}\Big[(u_y)_{i+1/2,j}\big((u_x)_{i+1/2,j+1/2} - (u_x)_{i+1/2,j-1/2}\big) -$$

$$-(u_y)_{i-1/2,j}\big((u_x)_{i-1/2,j+1/2} - (u_x)_{i-1/2,j-1/2}\big)\Big] +$$

$$+ \frac{Ha^2}{h_x}\Big[(u_x)_{i+1,j} - 2(u_x)_{ij} + (u_x)_{i-1,j}\Big] +$$

$$+\frac{1}{h_x h_y}\Big[(u_x)_{i,j+1/2}\big((u_y)_{i+1/2,j+1/2} - (u_y)_{i-1/2,j+1/2}\big) -$$

$$- (u_x)_{i,j-1/2}\big((u_y)_{i+1/2,j-1/2} - (u_x)_{i-1/2,j-1/2}\big)\Big] +$$

$$+ \frac{1}{h_y^2}\Big[(u_y)_{i,j+1/2}\big((u_y)_{i,j+1} - (u_y)_{ij}\big) - (u_y)_{i,j-1/2}\big((u_y)_{ij} - (u_y)_{i,j-1}\big)\Big] -$$

$$-\frac{Gr}{h_y}\Big[T_{i,j+1/2} - T_{i,j-1/2}\Big] - \frac{1}{\tau h_x}\Big[(u_x)_{i+1/2,j} - (u_x)_{i-1/2,j}\Big] -$$

$$-\frac{1}{\tau h_y}\Big[(u_y)_{i,j+1/2} - (u_y)_{i,j-1/2}\Big].$$

Присоединим к (29) краевые условия

$$\begin{aligned}
&p_{0j} = p_{1j}, \quad p_{N_x+1,j} = p_{N_x,j}, \quad j = \overline{1,\ N_y};\\
&p_{i0} = p_{i1} - h_y Gr T_{i,1/2},\\
&p_{i,N_y+1} = p_{i,N_y} + h_y Gr T_{i,N_y+1/2}, \quad i = \overline{1,\ N_x};\\
&p_{00} = p_{11} + h_y Gr T_{1,1/2},\\
&p_{0,N_y+1} = p_{1,N_y} - h_y Gr T_{1,N_y+1/2},\\
&p_{N_x+1,0} = p_{N_x,1} + h_y Gr T_{N_x,1/2},\\
&p_{N_x+1,N_y+1} = p_{N_x,N_y} - h_y Gr T_{N_x,N_y+1/2},
\end{aligned} \quad (30)$$

Будем также считать, что

$$p_{11} = 0. \tag{31}$$

Дискретные аналоги уравнений движения (14), (15) и уравнения переноса тепла (16) имеют вид

$$\begin{aligned}
&\frac{(\widehat{u}_x)_{ij} - (u_x)_{ij}}{\Delta t} + \frac{1}{h_x}\left[(u_x)^2_{i+1/2,j} - (u_x)^2_{i-1/2,j}\right] + \\
&+\frac{1}{h_y}\left[(u_y u_x)_{i,j+1/2} - (u_y u_x)_{i,j-1/2}\right] + \frac{1}{h_x}\left[p_{i+1/2,j} - p_{i-1/2,j}\right] = \\
&= \frac{1}{h_x}\left[\left(\Pi^{NS}_{xx}\right)_{i+1/2,j} - \left(\Pi^{NS}_{xx}\right)_{i-1/2,j}\right] + \frac{1}{h_y}\left[\left(\Pi^{NS}_{yx}\right)_{i,j+1/2} - \left(\Pi^{NS}_{yx}\right)_{i,j-1/2}\right] + \\
&+\frac{2}{h_x}\left[(u_x w_x)_{i+1/2,j} - (u_x w_x)_{i-1/2,j}\right] + \frac{1}{h_y}\left[(u_x w_y)_{i,j+1/2} - (u_x w_y)_{i,j-1/2}\right] + \\
&+\frac{1}{h_y}\left[(u_y w_x)_{i,j+1/2} - (u_y w_x)_{i,j-1/2}\right] - Ha^2\left[(u_x)_{ij} - (w_x)_{ij}\right],
\end{aligned} \tag{32}$$

$$\begin{aligned}
&\frac{(\widehat{u}_y)_{ij} - (u_y)_{ij}}{\Delta t} + \frac{1}{h_x}\left[(u_x u_y)_{i+1/2,j} - (u_x u_y)_{i-1/2,j}\right] + \\
&+\frac{1}{h_y}\left[(u_y)^2_{i,j+1/2} - (u_y)^2_{i,j-1/2}\right] + \frac{1}{h_y}\left[p_{i,j+1/2} - p_{i,j-1/2}\right] = \\
&= \frac{1}{h_x}\left[\left(\Pi^{NS}_{xy}\right)_{i+1/2,j} - \left(\Pi^{NS}_{xy}\right)_{i-1/2,j}\right] + \frac{1}{h_y}\left[\left(\Pi^{NS}_{yy}\right)_{i,j+1/2} - \left(\Pi^{NS}_{yy}\right)_{i,j-1/2}\right] + \\
&+\frac{1}{h_x}\left[(u_y w_x)_{i+1/2,j} - (u_y w_x)_{i-1/2,j}\right] + \frac{1}{h_x}\left[(u_x w_y)_{i+1/2,j} - (u_x w_y)_{i-1/2,j}\right] + \\
&+\frac{2}{h_y}\left[(u_y w_y)_{i,j+1/2} - (u_y w_y)_{i,j-1/2}\right] + Gr\,T_{ij},
\end{aligned} \tag{33}$$

$$\begin{aligned}
&\frac{\widehat{T}_{ij} - T_{ij}}{\Delta t} + \frac{1}{h_x}\left[(u_x T)_{i+1/2,j} - (u_x T)_{i-1/2,j}\right] + \frac{1}{h_y}\left[(u_y T)_{i,j+1/2} - (u_y T)_{i,j-1/2}\right] = \\
&= \frac{1}{h_x}\left[(w_x T)_{i+1/2,j} - (w_x T)_{i-1/2,j}\right] + \frac{1}{h_y}\left[(w_y T)_{i,j+1/2} - (w_y T)_{i,j-1/2}\right] + \\
&+\frac{1}{h_x^2 \Pr}\left[T_{i+1,j} - 2T_{ij} + T_{i-1,j}\right] + \frac{1}{h_y^2 \Pr}\left[T_{i,j+1} - 2T_{ij} + T_{i,j-1}\right].
\end{aligned} \tag{34}$$

Разностные аналоги компонент навье-стоксовского тензора вязких напряжений вычисляются по формулам

$$
\begin{aligned}
&\left(\Pi_{xx}^{NS}\right)_{i+1/2,j} = \frac{2}{h_x}\left[(u_x)_{i+1,j} - (u_x)_{ij}\right], \quad \left(\Pi_{xx}^{NS}\right)_{i`-1/2,j} = \frac{2}{h_x}\left[(u_x)_{ij} - (u_x)_{i-1,j}\right],\\
&\left(\Pi_{yx}^{NS}\right)_{i,j+1/2} = \frac{1}{h_y}\left[(u_x)_{i,j+1} - (u_x)_{ij}\right] + \frac{1}{h_x}\left[(u_y)_{i+1/2,j+1/2} - (u_y)_{i-1/2,j+1/2}\right],\\
&\left(\Pi_{yx}^{NS}\right)_{i,j-1/2} = \frac{1}{h_y}\left[(u_x)_{ij} - (u_x)_{i,j-1}\right] + \frac{1}{h_x}\left[(u_y)_{i+1/2,j-1/2} - (u_y)_{i-1/2,j-1/2}\right],\\
&\left(\Pi_{xy}^{NS}\right)_{i+1/2,j} = \frac{1}{h_y}\left[(u_x)_{i+1/2,j+1/2} - (u_x)_{i+1/2,j-1/2}\right] + \frac{1}{h_x}\left[(u_y)_{i+1,j} - (u_y)_{ij}\right],\\
&\left(\Pi_{xy}^{NS}\right)_{i-1/2,j} = \frac{1}{h_y}\left[(u_x)_{i-1/2,j+1/2} - (u_x)_{i-1/2,j-1/2}\right] + \frac{1}{h_x}\left[(u_y)_{ij} - (u_y)_{i-1,j}\right],\\
&\left(\Pi_{yy}^{NS}\right)_{i+1/2,j} = \frac{2}{h_y}\left[(u_y)_{i+1,j} - (u_y)_{ij}\right], \quad \left(\Pi_{yy}^{NS}\right)_{i`-1/2,j} = \frac{2}{h_y}\left[(u_y)_{ij} - (u_y)_{i-1,j}\right],
\end{aligned}
\tag{35}
$$

где

$$
\begin{aligned}
(w_x)_{i+1/2,j} = \tau\Bigg[&(u_x)_{i+1/2,j}\frac{(u_x)_{i+1,j} - (u_x)_{ij}}{h_x} +\\
&+(u_y)_{i+1/2,j}\frac{(u_x)_{i+1/2,j+1/2} - (u_x)_{i+1/2.j-1/2}}{h_y} + \frac{p_{i+1,j} - p_{ij}}{h_x} + Ha^2(u_x)_{i+1/2,j}\Bigg],
\end{aligned}
\tag{36}
$$

$$
\begin{aligned}
(w_x)_{i-1/2,j} = \tau\Bigg[&(u_x)_{i-1/2,j}\frac{(u_x)_{ij} - (u_x)_{i-1,j}}{h_x} +\\
&+(u_y)_{i-1/2,j}\frac{(u_x)_{i-1/2,j+1/2} - (u_x)_{i-1/2,j-1/2}}{h_y} + \frac{p_{ij} - p_{i-1,j}}{h_x} + Ha^2(u_x)_{i-1/2,j}\Bigg],
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
(w_x)_{i,j+1/2} = \tau\Bigg[&(u_x)_{i,j+1/2}\frac{(u_x)_{i+1/2,j+1/2} - (u_x)_{i-1/2,j+1/2}}{h_x} +\\
&+ (u_y)_{i,j+1/2}\frac{(u_x)_{i,j+1} - (u_x)_{ij}}{h_y} + \frac{p_{i+1/2,j+1/2} - p_{i-1/2,j+1/2}}{h_x} + Ha^2(u_x)_{i,j+1/2}\Bigg],
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
(w_x)_{i,j-1/2} = \tau\Bigg[&(u_x)_{i,j-1/2}\frac{(u_x)_{i+1/2,j-1/2} - (u_x)_{i-1/2,j-1/2}}{h_x} +\\
&+(u_y)_{i,j-1/2}\frac{(u_x)_{ij} - (u_x)_{i,j-1}}{h_y} + \frac{p_{i+1/2,j+1/2} - p_{i-1/2,j-1/2}}{h_x} + Ha^2(u_x)_{i,j-1/2}\Bigg];
\end{aligned}
$$

$$(w_y)_{i+1/2,j} = \tau\left[(u_x)_{i+1/2,j}\frac{(u_y)_{i+1,j}-(u_y)_{ij}}{h_x}+\right.$$

$$\left.+(u_y)_{i+1/2,j}\frac{(u_y)_{i+1/2,j+1/2}-(u_y)_{i+1/2.j-1/2}}{h_y}+\frac{p_{i+1/2,j+1/2}-p_{i+1/2,j-1/2}}{h_y}-Gr\,T_{i+1/2,j}\right],$$

$$(w_y)_{i-1/2,j} = \tau\left[(u_x)_{i-1/2,j}\frac{(u_y)_{ij}-(u_y)_{i-1,j}}{h_x}+\right.$$

$$\left.+(u_y)_{i-1/2,j}\frac{(u_y)_{i-1/2,j+1/2}-(u_y)_{i-1/2,j-1/2}}{h_y}+\frac{p_{i-1/2,j+1/2}-p_{i-1/2,j-1/2}}{h_y}-Gr\,T_{i-1/2,j}\right],$$

$$(w_y)_{i,j+1/2} = \tau\left[(u_x)_{i,j+1/2}\frac{(u_y)_{i+1/2,j+1/2}-(u_y)_{i-1/2,j+1/2}}{h_x}+\right.$$

$$\left.+(u_y)_{i,j+1/2}\frac{(u_y)_{i,j+1}-(u_y)_{ij}}{h_y}+\frac{p_{i,j+1}-p_{ij}}{h_y}-GrT_{i,j+1/2}\right],$$

$$(w_y)_{i,j-1/2} = \tau\left[(u_x)_{i,j-1/2}\frac{(u_y)_{i+1/2,j-1/2}-(u_y)_{i-1/2,j-1/2}}{h_x}+\right.$$

$$\left.+(u_y)_{i,j-1/2}\frac{(u_y)_{ij}-(u_y)_{i,j-1}}{h_y}+\frac{p_{ij}-p_{i,j-1}}{h_y}-Gr\,T_{i,j-1/2}\right];$$

$$\left.+\frac{p_{i+1/2,j+1/2}-p_{i-1/2,j-1/2}}{h_x}+Ha^2(u_x)_{i,j-1/2}\right];$$

$$(w_x)_{ij} = \tau\left[(u_x)_{ij}\frac{(u_x)_{i+1/2,j}-(u_x)_{i-1/2,j}}{h_x}+\right.$$

$$\left.+(u_y)_{ij}\frac{(u_x)_{i,j+1/2}-(u_x)_{i,j-1/2}}{h_y}+\frac{p_{i+1/2,j}-p_{i-1/2,j}}{h_x}+Ha^2(u_x)_{ij}\right]; \qquad (37)$$

Алгоритм расчета включает следующие этапы:

1) Вычисление полей скорости и температуры в начальный момент времени с помощью (27) - (28).

2) Определение поля давления путем решения разностной краевой задачи (29) - (31) для уравнения Пуассона. Это может быть осуществлено с помощью отдельной подпрограммы. При $t = 0$ в качестве нулевого приближения используется сеточная функция $p_{ij}^{(0)} = 0,\ (x_i,\ y_j) \in \omega_h$. Для остальных t величины $p_{ij}^{(0)}$ полагаются равными значениям давления на

предыдущем слое по времени. Условие выхода из итерационного цикла имеет вид

$$\sum_{(x_i,\, y_j)\,\in\,\omega_h} \left(\frac{1}{h_x^2}\left[p_{i+1,j} - 2p_{ij} + p_{i-1,j} \right] + \frac{1}{h_y^2}\left[p_{i,j+1} - 2p_{ij} + p_{i,j-1} \right] + \varphi_{ij} \right)^2 h_x h_y < \varepsilon_p ,$$

где ε_p – заданная точность.

3) Нахождение полей скорости и температуры при $\hat{t} = t + \Delta t$ с помощью (32) - (37).

4) Переброска массивов и возврат к п. 1).

Течение считается установившимся, если

$$\max_{(x_i,\, y_j)\,\in\,\omega_h} \left\{ \left| \frac{(u_x)_{ij}^{n+1} - (u_x)_{ij}^{n}}{\Delta t} \right| + \left| \frac{(u_y)_{ij}^{n+1} - (u_y)_{ij}^{n}}{\Delta t} \right| \right\} < \varepsilon_u .$$

Здесь n – номер шага по времени. Для обеспечения устойчивости счета параметр τ следует вычислять по формуле

$$\tau = \frac{1}{\mathrm{Re}_s^2} + \tau_0 ,$$

где τ_0 – положительный регуляризирующий параметр. Алгоритм, аналогичный описанному выше, использовался ранее в [12] для математического моделирования конвективных течений металлических расплавов.

6. Результаты численных расчетов

В численных расчетах проверена работоспособность описанного выше алгоритма решения КМГД-уравнений. Исследована сходимость разностного решения при сгущении пространственной сетки. Изучено влияние вертикально и горизонтально направленного магнитного поля на структуру и интенсивность конвективного движения в расплаве на примере задачи о термокапиллярной конвекции полупроводникового расплава в квадратной каверне при отсутствии силы тяжести ($Gr = 0$). Конвективное течение в этом случае возникает благодаря силам поверхностного натяжения.

Расчеты были проведены для следующих значений безразмерных параметров: $A = 1$; $Ma = 1000$; $Pr = 0.018$; $Ha = 0, 50, 100$; $\varepsilon_p = 10^{-8}$; $\varepsilon_u = 10^{-3}$. Использовалась последовательность равномерных пространственных сеток с числом узлов *22x22, 42x42 и 82x82*. Полученные результаты представлены в таблице 1 и на рисунках 2–5. Для исследуемых течений число

Re_s весьма велико. Если L = 1см, ν ~ 0.01 см^2/сек, c_s ~ 10^5 см/сек, то Re_s есть величина порядка 10^7. Поэтому можно считать, что $\tau \approx \tau_0$. Во всех вариантах безразмерный параметр τ полагался равным $2*10^{-5}$.

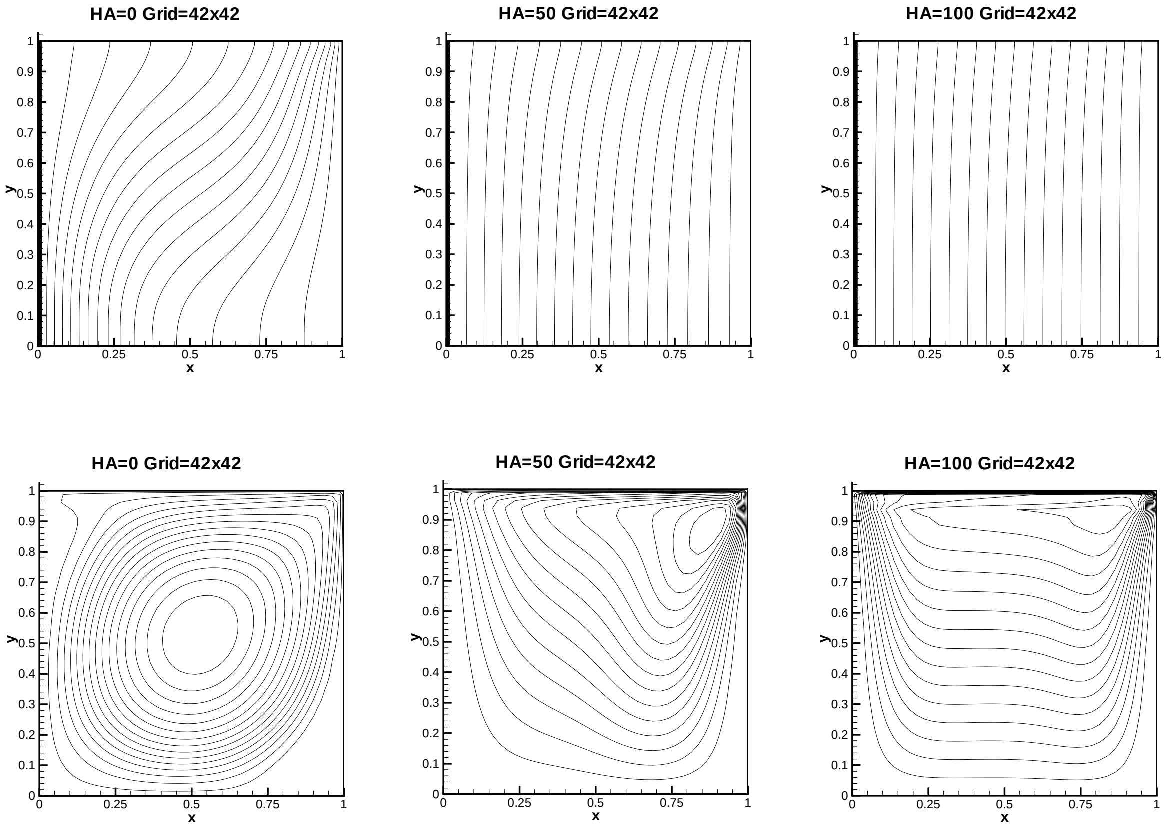

Рис. 2

На рис. 2 изображены изотермы и линии тока в установившихся режимах для чисел Гартмана *Ha = 0, 50* и *100*, полученные на сетке *42x42.* Внешнее магнитное поле направлено вертикально вверх. Изотермы и изолинии функции тока расположены эквидистантно. На границах расчетной области функция тока Ψ обращается в нуль. Минимальные значения Ψ приведены в таблице 1. Стрелками показаны направления магнитного поля. Во всех вариантах шаг интегрирования по времени Δt выбирался равным 10^{-7}. С увеличением интенсивности магнитного поля скорость конвекции движения в каверне падает, а вихрь смещается вправо и вверх, прижимаясь к свободной поверхности расплава. При *Ha = 100* искажение изотерм за счет конвективного движения расплава весьма мало.

Таблица 1

№ варианта	**Расчетная сетка**	*Ha*	Число шагов до установления	Ψ_{min}
1	22x22	50 ↑	437210	–23.83
2	42x42	0	1500000	-134.3
3	42x42	50 ↑	440130	-22.18
4	42x42	100 ↑	353705	-5.224
5	42x42	50 ←	441100	-47.785
6	42x42	100 ←	375754	-41.124
7	82x82	50 ↑	439553	-21.88

Рис. 3 демонстрирует сходимость решения этой задачи при сгущении пространственной сетки для *Ha = 50*. Установлено, что сетка *22x22* оказывается слишком грубой и не обеспечивает адекватной картины течения. Заметим, что в отсутствие магнитного поля разрешающая способность сетки *22x22* оказывается вполне удовлетворительной.

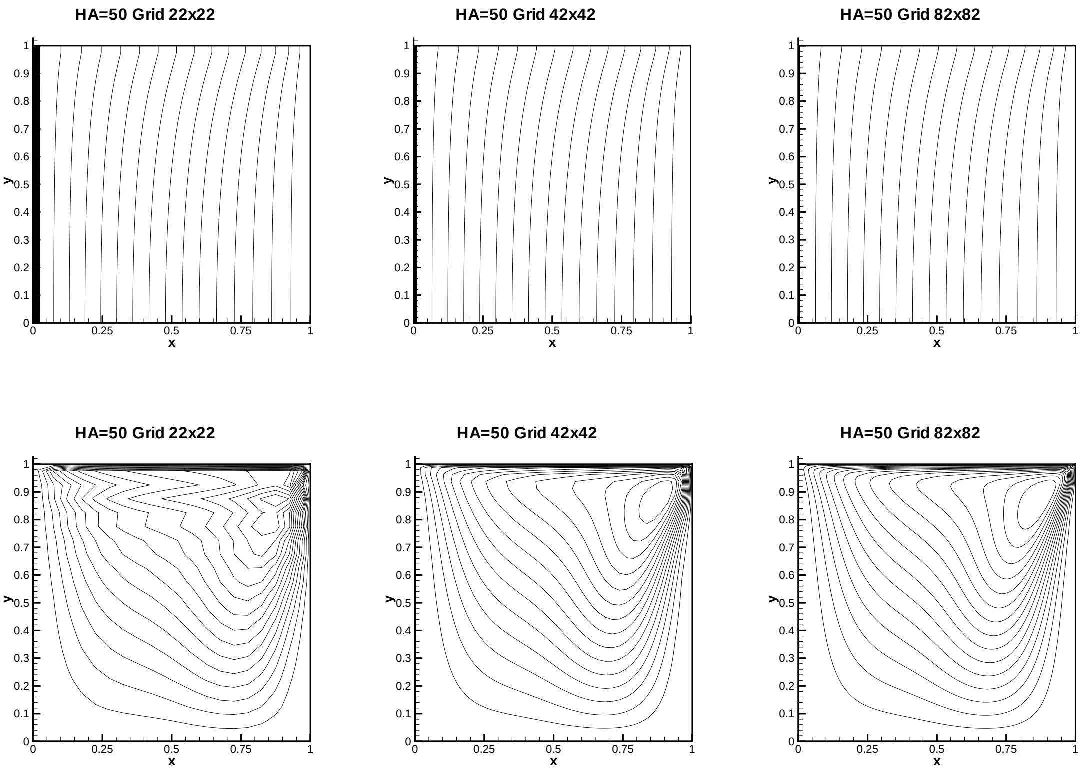

Рис. 3

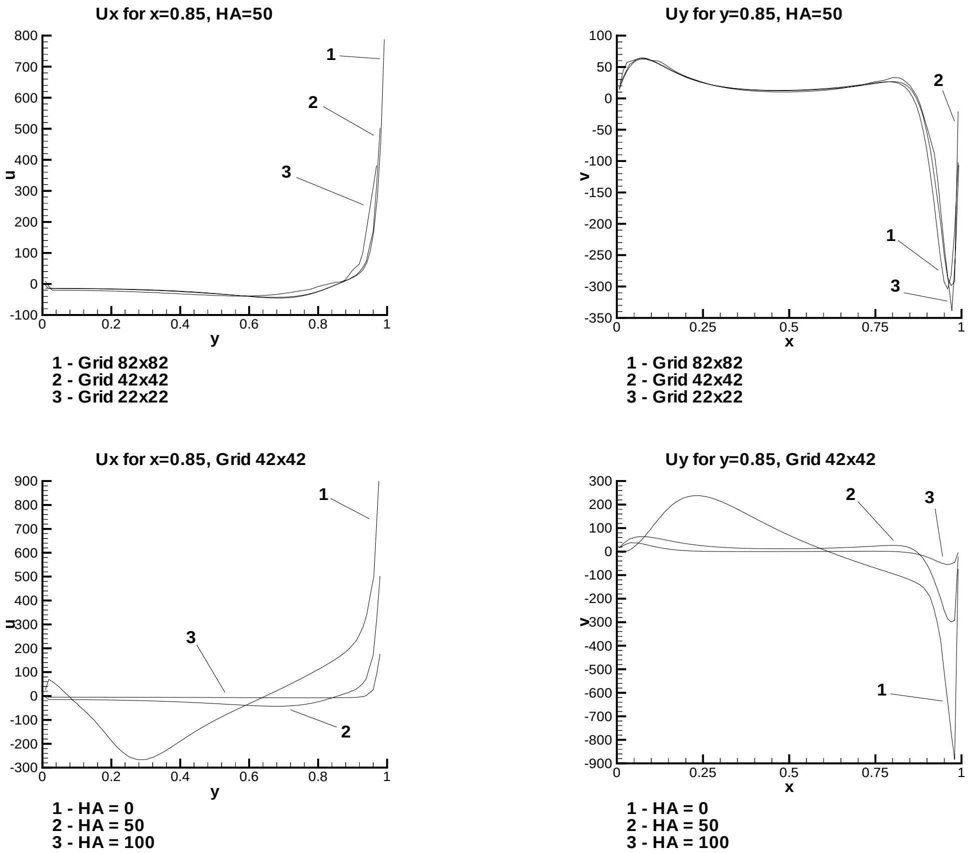

Рис. 4

На рис. 4 приведены распределения компонент скорости течения $u_x(y)$ и $u_y(x)$ в сечениях $x = 0.85$ и $y = 0.85$ соответственно. С ростом числа Гартмана скорость течения в расплаве, в том числе и вблизи поверхности каверны, заметно снижается, а толщина пограничного слоя в окрестности свободной границы уменьшается. Аналогичная закономерность была получена в [5], [6], где на основе классической модели исследовались плоские двумерные термокапиллярные движения расплавов в магнитном поле.

Изотермы и линии тока в установившихся режимах для случая горизонтального направления вектора напряженности магнитного поля изображены на рис. 5. Некоторые данные приведены также в таблице 1. Линии тока в верхней части рисунков и изотермы расположены эквидистантно. В этом случае максимумы модуля функции тока оказываются больше, чем в соответствующих вариантах с вертикальным направлением магнитного поля. Основной вихрь сильно смещается к верхней поверхности и все течение становится многослойным. Для визуализации структуры течения на рис. 5 приведены дополнительные линии тока в центрах вихрей. При $Ha = 50$ наблюдаются три вихревых образования, а при $Ha = 100$

– четыре. Для проведения расчетов с горизонтальным направлением поля постановка задачи (13) – (25) была модифицирована путем исключения членов, содержащих число Гартмана, из уравнений (14), (17) и введения их симметричным образом в уравнения (15), (18). Соответственно, был изменен и алгоритм, описанный в разделе 5.

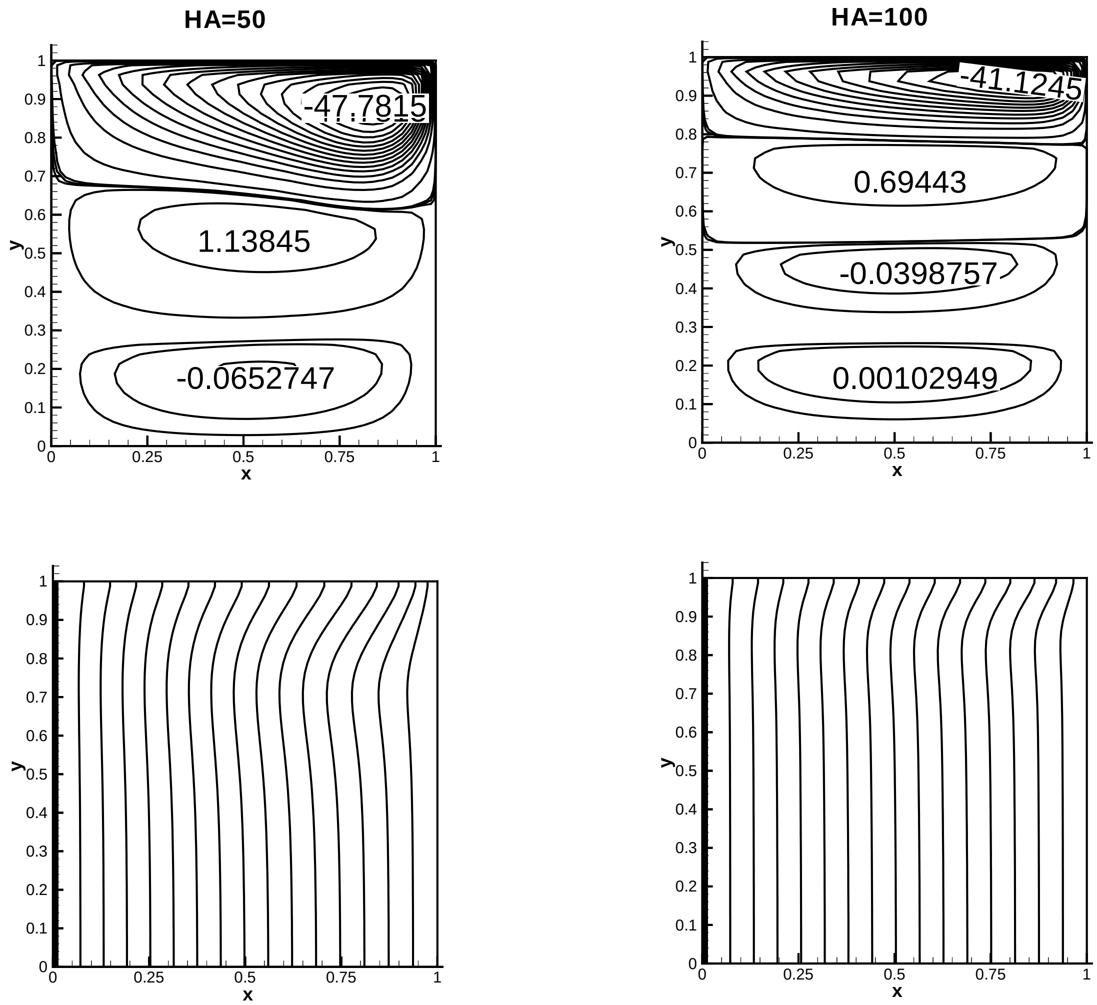

Рис. 5

В работе [6] для численного моделирования течений расплава во внешнем магнитном поле использовался конечно-разностный алгоритм, базирующийся на уравнениях Навье-Стокса. В основу была положена неявная конечно-разностная схема третьего порядка точности по пространственным координатам, построенная в естественных переменных. Для верификации предложенного авторами метода был проведен расчет поля течения расплава в постановке [6]. А именно, задача решалась с измененным граничным условием для температуры на верхней стенке: адиабатическое условие $\partial T(x,\ A)/\partial y = 0$ было заменено на $T(x,\ A) = 1 - x$. Для

$Ha = 50$ на сетке *42x42* минимальное значение функции тока в центре основного вихря оказалось равным *–43.5*. Метод [6] привел к результату *–44.2*. При этом общая структура течения в обоих расчетах была практически идентичной. Приведенное сравнение демонстрирует хорошую точность предложенного авторами подхода, целесообразность его использования в задачах математического моделирования конвективных течений полупроводниковых расплавов при наличии магнитного поля.

7 Заключение

Приведена оригинальная математическая модель для описания течений квазинейтральной сжимаемой электропроводной жидкости – КМГД-система. На ее основе построена упрощенная математическая модель – КМГД-система в безындукционном приближении Обербека – Буссинеска, пригодная для численного моделирования движений полупроводниковых расплавов в постоянном внешнем магнитном поле. Выписан алгоритм ее численного решения, представляющий собой явную по времени однородную конечно-разностную схему с искусственными регуляризаторами специального вида, которые обеспечивают высокую точность и устойчивость численного решения.

Выполнена серия численных расчетов термокапиллярных течений полупроводникового расплава в квадратной каверне при различных интенсивностях и направлениях магнитного поля. Установлено, что магнитное поле заметно влияет на характеристики процесса, существенно замедляя конвективное движение жидкости и оттесняя его к свободной поверхности. Под его воздействием пограничный слой, образующийся вблизи свободной поверхности, становится более тонким. При горизонтальном направлении вектора $\overrightarrow{H_0}$ интенсивность вихревого течения снижается меньше, чем в случае его вертикального направления. При этом течение становится многослойным.

Проведено сопоставление расчетных данных с аналогичными результатами, полученными с помощью классической МГД системы в безындукционном приближении. Показано, что предложенная математическая модель и метод ее численного интегрирования позволяют эффективно проводить расчеты течений электропроводной жидкости, обеспечивая высокую точностью даже на относительно грубых пространственных сетках.

Литература

1. Земсков В.С., Раухман М.Р., Шалимов В.П. Гравитационная чувствительность расплавов при выращивании кристаллов методами Бриджмена и бестигельной зоной плавки в условиях микрогравитации. // Космические исследования. 2001. Т. 39, N 4. С. 375-384.
2. Dold P., Croll A., Benz K.W. Floating-zone growth of silicon in magnetic field I. Weak static axial fields. // Journal of Crystal Growth. 1998. V.183. P. 545-553.
3. Dold P., Croll A., Benz K.W. Floating-zone growth of silicon in magnetic field II. Strong static axial fields. // Journal of Crystal Growth. 1998. V.183. P. 554-563.
4. Kaiser Th., Benz K.W. Floating-zone growth of silicon in magnetic field III. Numerical solution.// Journal of Crystal Growth. 1998. V.183. P. 564-572.
5. Fedoseyev A.I., Kansa E.J., Marin C., Ostrogorsky A.G. Magnetic field suppression of semiconductor melt flow in crystal growth: comparison of three methods for numerical modeling. http://uahtitan.uah.etu/alex/.
6. Феонычев А.И., Долгих Г.А. Эффекты постоянных и меняющихся во времени ускорений при выращивании кристаллов методом направленной кристаллизации на борту космических аппаратов. // Космические исследования. 2001. Т. 39, N 4. С. 390-399.
7. Шеретов Ю.В. Квазигидродинамическая модель течений электропроводной вязкой жидкости в электромагнитном поле. // Применение функционального анализа в теории приближений. Тверь: Тверской гос. ун-т, 1997. С. 155-169.
8. Шеретов Ю.В. О точных решениях квазигидродинамических уравнений. // Применение функционального анализа в теории приближений. Тверь: Тверской гос. ун-т, 1998. С. 213-241.
9. Шеретов Ю.В. Математическое моделирование течений жидкости и газа на основе квазигидродинамических и квазигазодинамических уравнений. Тверь: Тверской гос. ун-т, 2000.
10. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Электродинамика сплошных сред. М.: Физматлит, 2001.
11. Половин Р.В., Демуцкий В.П. Основы магнитной гидродинамики. М.: Энергоатомиздат, 1987.
12. Елизарова Т.Г., Калачинская И.С., Ключникова А.В., Шеретов Ю.В. Использование квазигидродинамических уравнений для моделирования тепловой конвекции при малых числах Прандтля. // Журн. вычисл. математики и мат. физики. 1998. Т. 38, N 10. С. 1732-1742.