Т.Г.Елизарова, Ю.В. Шеретов, И.А. Широков

ПОДАВЛЕНИЕ ТЕРМОКАПИЛЛЯРНОЙ КОНВЕКЦИИ В ЦИЛИНДРИЧЕСКОМ ОБРАЗЦЕ МАГНИТНЫМ ПОЛЕМ*

1. Введение

При выращивании полупроводниковых кристаллов методом плавающей зоны важную роль играет температурный режим на фронте кристаллизации. Неоднородности температуры или ее колебания часто приводят к нарушению однородности получаемого образца. Источником неравномерного распределения температуры в расплаве является конвективное течение, возникающее под действием гравитационных или термокапиллярных сил. Его интенсивность может быть уменьшена наложенным магнитным полем. Известен целый ряд экспериментов по изучению влияния постоянного и переменного магнитного поля на движение расплава и распределение примеси в нем [1]–[3].

Математическое моделирование процессов тепло–массообмена в электропроводной жидкости является важным инструментом для детального исследования механизмов выращивания кристаллов. В данной работе выписана квазигидродинамическая (КГД) модель течений квазинейтральной электропроводной жидкости во внешнем электромагнитном поле, предложенная в [4]. Построен ее упрощённый вариант, ориентированный на осесимметричные течения полупроводниковых расплавов. Приведены примеры расчетов, демонстрирующие работоспособность используемого численного алгоритма.

2. Математическая модель

Для величин, характеризующих конвективные течения квазинейтральной электропроводной жидкости, будем использовать следующие обозначения: $\rho = const > 0$ – 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 $T_0 = const > 0$, $\vec{H} = \vec{H}(\vec{x},t)$ и $\vec{E} = \vec{E}(\vec{x},t)$ – напряженности магнитного и электрического полей соответственно. В качестве основной математической модели будем использовать квазимагнитогидродинамическую (КМГД) систему в

* Работа выполнена при финансовой поддержке грантов ИНТАС № 2000–0617 и РФФИ № 01-01-00061.

приближении Обербека–Буссинеска, предложенную [4]. Эта система может быть представлена в виде:

$$div\ \vec{u} = div\ \vec{w}, \ (1)$$

$$\frac{\partial \vec{u}}{\partial t} + div\ (\vec{u} \otimes \vec{u}) + \frac{1}{\rho}\vec{\nabla} p = -\beta \vec{g} T + \frac{1}{\rho} div\ \Pi_{NS} +$$
$$div\ \left[(\vec{w} \otimes \vec{u}) + (\vec{u} \otimes \vec{w})\right] + \frac{1}{\rho c}[\vec{j}_e \times \vec{H}], \qquad (2)$$

$$\frac{\partial T}{\partial t} + div\ (\vec{u} T) = div\ (\vec{w} T) + \chi \Delta T, \ (3)$$

$$rot\ \vec{E} = -\frac{1}{c}\ \frac{\partial \vec{H}}{\partial t}, \quad div\ \vec{H} = 0, \quad \vec{j}_e = \frac{c}{4\pi} rot\ \vec{H}. \ (4)$$

Здесь

$$\Pi_{NS} = \eta[(\vec{\nabla} \otimes \vec{u}) + (\vec{\nabla} \otimes \vec{u})^T] \quad (5)$$

– навье–стоксовский тензор вязких напряжений. Плотность электрического тока вычисляется по формуле

$$\vec{j}_e = \sigma\left(\vec{E} + \frac{1}{c}[(\vec{u} - \vec{w}) \times \vec{H}]\right), \quad (6)$$

причем

$$\vec{w} = \tau\left[(\vec{u} \cdot \vec{\nabla})\vec{u} + \frac{1}{\rho}\vec{\nabla} p + \beta \vec{g} T - \frac{1}{\rho c}[\vec{j}_e \times \vec{H}]\right]. \qquad (7)$$

В уравнениях (1)–(7) температурный коэффициент расширения жидкости β, динамическая вязкость $\eta = \rho\nu$, температуропроводность χ и электропроводность σ считаются заданными положительными постоянными. Вектор $\vec{g}$ – ускорение свободного падения, c – скорость света в вакууме. Релаксационный параметр τ, имеющий размерность времени, связан с коэффициентом кинематической вязкости ν и скоростью звука при отсутствии электромагнитного поля c_s соотношением $\tau = \nu / c_s^2$. В записи (1)–(7) использованы стандартные обозначения из тензорного анализа.

3. Постановка задачи

Рассмотрим осесимметричные течения полупроводникового расплава в цилиндрической полости с твёрдыми стенками. Пусть $\Omega = \{(r,z) : 0 < r < R,\ -A < z < A\}$ – расчетная область, однородное внешнее магнитное поле $\vec{H}_0$ направленно параллельно оси симметрии цилиндра, вектор $\vec{g}$ направлен противоположно $\vec{H}_0$ (см. рис. 1).

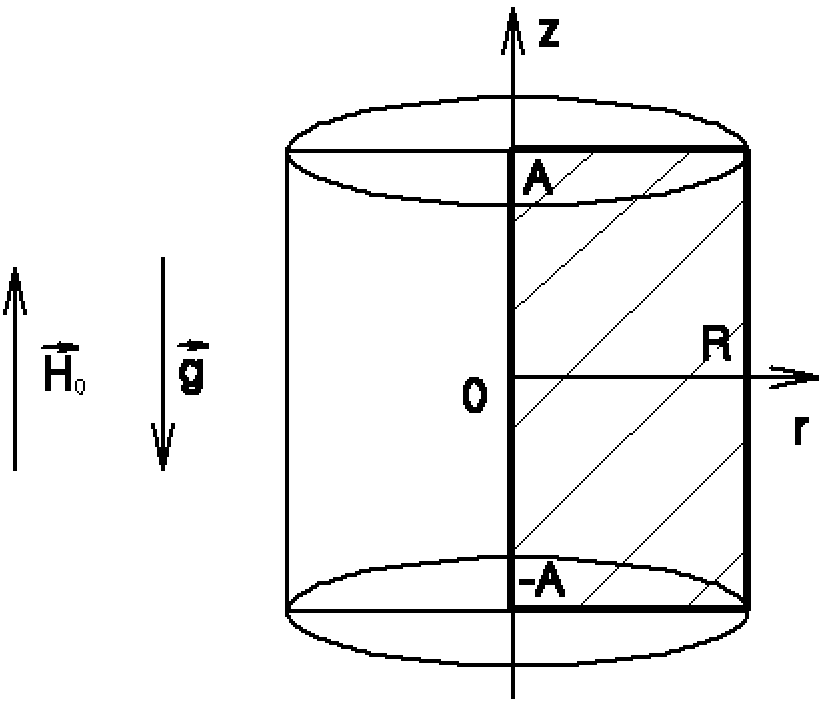

Рис. 1. Схема расчётной области

Безындукционное приближение системы (1)–(7) в цилиндрических координатах (r,z) имеет вид

$$\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}\left(r\frac{\partial p}{\partial r}\right)+\frac{\partial^2 p}{\partial z^2}=\frac{1}{\tau}\left[\frac{1}{r}\frac{\partial (ru_r)}{\partial r}+\frac{\partial u_z}{\partial z}\right]-$$
$$-\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}\left[r\left(u_r\frac{\partial u_r}{\partial r}+u_z\frac{\partial u_r}{\partial z}+Ha^2 u_r\right)\right]-$$
$$-\frac{\partial}{\partial z}\left(u_r\frac{\partial u_z}{\partial r}+u_z\frac{\partial u_z}{\partial z}-GrT\right), \quad (8)$$

$$\frac{\partial u_r}{\partial t}+\frac{1}{r}\frac{\partial (ru_r^2)}{\partial r}+\frac{\partial (u_z u_r)}{\partial z}+\frac{\partial p}{\partial r}=\frac{1}{r}\frac{\partial (r\Pi_{rr}^{NS})}{\partial r}+\frac{\partial \Pi_{zr}^{NS}}{\partial z}-\frac{\Pi_{\varphi\varphi}^{NS}}{r}+$$

$$+\frac{2}{r}\frac{\partial(ru_r w_r)}{\partial r}+\frac{\partial(u_r w_z)}{\partial z}+\frac{\partial(u_z w_r)}{\partial z}-Ha^2(u_r-w_r), \qquad (9)$$

$$\frac{\partial u_z}{\partial t}+\frac{1}{r}\frac{\partial(ru_r u_z)}{\partial r}+\frac{\partial(u_z^2)}{\partial z}+\frac{\partial p}{\partial z}=\frac{1}{r}\frac{\partial(r\Pi_{rz}^{NS})}{\partial r}+\frac{\partial\Pi_{zz}^{NS}}{\partial z}+\frac{1}{r}\frac{\partial(ru_z w_r)}{\partial r}+$$
$$+\frac{1}{r}\frac{\partial(ru_r w_z)}{\partial r}+2\frac{\partial(u_z w_z)}{\partial z}+GrT, \qquad (10)$$

$$\frac{\partial T}{\partial t}+\frac{1}{r}\frac{\partial(ru_r T)}{\partial r}+\frac{\partial(u_z T)}{\partial z}=\frac{1}{r}\frac{\partial(rw_r T)}{\partial r}+\frac{\partial(w_z T)}{\partial z}+$$
$$+\frac{1}{\Pr}\left[\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}\left(r\frac{\partial T}{\partial r}\right)+\frac{\partial^2 T}{\partial z^2}\right]. \qquad (11)$$

Здесь

$$w_r=\tau\,(u_r\frac{\partial u_r}{\partial r}+u_z\frac{\partial u_r}{\partial z}+\frac{\partial p}{\partial r}+Ha^2u_r), (12)$$
$$w_z=\tau\,(u_r\frac{\partial u_z}{\partial r}+u_z\frac{\partial u_z}{\partial z}+\frac{\partial p}{\partial z}-GrT). \quad (13)$$

Компоненты навье–стоксовского тензора вязких напряжений Π^{NS} вычисляются по формулам

$$\Pi_{rr}^{NS}=2\frac{\partial u_r}{\partial r},\ \Pi_{zr}^{NS}=\Pi_{rz}^{NS}=\left(\frac{\partial u_r}{\partial z}+\frac{\partial u_z}{\partial r}\right),$$
$$\Pi_{\varphi\varphi}^{NS}=2\frac{u_r}{r},\ \Pi_{zz}^{NS}=2\frac{\partial u_z}{\partial z}. \qquad (14)$$

Система (8)–(14) представлена в безразмерной форме. Она выводится из (1)–(7) при следующих упрощающих предположениях:

- Индуцируемые токи малы. Влиянием электрического поля пренебрегаем.
- Отклонения магнитного поля от $\vec{H}_0$ в заполняющей полость жидкости считаются малыми.

Закон сохранения массы (1) записан в форме уравнения Пуассона для давления (8).

В качестве единиц измерения $r,\ z,\ t,\ u_r,\ u_z,\ w_r,\ w_z,\ p,\ T$ выбраны величины $R,\ R,\ R^2/\nu,\ \nu/R,\ \nu/R,\ \nu/R,\ \nu/R,\ \rho(\nu/R)^2,\ \Theta$ соответственно, где Θ – температура в точке $(1,0)$. Безразмерное значение τ вычисляется по формуле

$$\tau = \frac{1}{\mathrm{Re}_s^2}. \qquad (15)$$

Числа Грасгофа Gr, Гартмана Ha, Прандтля Pr и звуковое число Рейнольдса Re_s определяются с помощью выражений

$$Gr = \frac{g\beta\Theta R^3}{\nu^2}, \quad Ha = \frac{RH_0}{c}\sqrt{\frac{\sigma}{\eta}}, \quad \mathrm{Pr} = \frac{\nu}{\chi}, \quad \mathrm{Re}_s = \frac{c_s R}{\nu}.$$

Будем считать, что высота цилиндра $2A = 2R = 2$. Жидкость прилипает к верхней и нижней крышкам цилиндра. Начальные условия следующие:

$$(u_r)|_{t=0} = (u_z)|_{t=0} = 0, \quad T|_{t=0} = 1 - |z|. \qquad (16)$$

На внешней поверхности действуют силы поверхностного натяжения, обусловленные заданным температурным режимом. Граничные условия представим в виде:

- ось симметрии $(r = 0,\ -1 < z < 1)$:

$$u_r = 0,\ \frac{\partial u_z}{\partial r} = 0,\ \frac{\partial p}{\partial r} = 0,\ \frac{\partial T}{\partial r} = 0; \quad (17)$$

- боковая стенка $(r = 1,\ -1 < z < 1)$:

$$u_r = 0,\ \frac{\partial u_z}{\partial r} = -\frac{Ma}{\mathrm{Pr}}\frac{\partial T}{\partial z},\ \frac{\partial p}{\partial r} = 0,\ T = 1 - |z|; \qquad (18)$$

- нижняя $(0 < r < 1,\ z = -1)$ и верхняя $(0 < r < 1,\ z = 1)$ стенки:

$$u_r = u_z = 0,\ \frac{\partial p}{\partial z} = GrT,\ T = 0. \qquad (19)$$

Здесь

$$Ma = -\frac{\Theta R}{\eta\chi}\frac{\partial \sigma_T}{\partial T}$$

– число Марангони, σ_T – коэффициент поверхностного натяжения. Чтобы исключить неоднозначность в определении давления, будем использовать нормировку

$$p(0,0) = 0. \qquad (20)$$

4. Вычислительный метод

Для построения явной разностной схемы решения начально–краевой задачи (8)–(20) введем в Ω неравномерную сетку

$$\omega=\{(r_i,z_j);\ i=\overline{0,N_r-1};\ j=\overline{0,\,N_z-1};$$
$$r_0=-0.5(r_1-r_0),\ r_{Nr-1}=1+0.5(r_{Nr-1}-r_{Nr-2}),$$
$$z_0=-1-0.5(z_1-z_0),\ z_{Nz-1}=1+0.5(z_{Nz-1}-z_{Nz-2})\}.$$

Компоненты скорости, давление и температуру будем относить к узлам ω. Аппроксимируем пространственные производные центральными разностями, а производные по времени – разностями вперед. Величины в узлах с полуцелыми индексами определим как полусуммы их значений в соответствующих точках с целыми индексами. Макропараметры в центрах прямоугольных ячеек вычислим как среднее арифметическое их значений в прилегающих угловых точках. Для аппроксимации граничных условий узлы по границам ω используем в качестве фиктивных.

Стационарные течения ищем методом установления при $t\to\infty$. Итерации прекращаются при выполнении условия

$$\frac{1}{N_rN_z}\max_{\lambda\in\{r,z\}}\sum_{(r_i,z_j)\in\omega}|(u_\lambda^{up})_{ij}-(u_\lambda)_{ij}|<\varepsilon, \qquad (21)$$

где $(u_\lambda^{up})_{ij}$ – значения компоненты скорости на верхнем временном слое в точках (r_i,z_j), ε – заданная точность.

Таким образом, метод конечных разностей приводит к двум вложенным итерационным алгоритмам: внешний (разностная схема для уравнений движения и переноса тепла (9)–(14)) и внутренний (определение давления путем решения дискретного аналога уравнения Пуассона (8)). Число итераций по давлению N_p считается заданным. В начальный момент времени во всех узлах ω используем условие $p_{ik}^{(0)}=0$. Далее величины $p_{ik}^{(0)}$ считаются равными значениям p_{ik} на предыдущем слое по времени. На протяжении всего расчёта давление в точке (0,0) поддерживается постоянным и равным нулю. Для обеспечения устойчивости величина τ вычисляется по формуле

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

где τ_0 – подбираемый в процессе вычислений искусственный регуляризирующий параметр.

5. Алгоритм решения уравнения Пуассона в цилиндрической геометрии

На каждом шаге по времени необходимо решать краевую задачу для разностного аналога уравнения Пуассона (8), который запишем в виде

$$G_{ik} f_{ik} = A_{ik} f_{i-1,k} + B_{ik} f_{i+1,k} + E_{ik} f_{i,k-1} + F_{ik} f_{i,k+1} + H_{ik}. \qquad (22)$$

Здесь

$$A_{ik} = [r_i + r_{i-1}]/[r_i(r_{i+1} - r_{i-1})(r_i - r_{i-1})],$$
$$B_{ik} = [r_{i+1} + r_i]/[r_i(r_{i+1} - r_{i-1})(r_{i+1} - r_i)],$$
$$E_{ik} = 2/[(z_{k+1} - z_{k-1})(z_k - z_{k-1})],$$
$$F_{ik} = 2/[(z_{k+1} - z_{k-1})(z_{k+1} - z_k)],$$
$$G_{ik} = A_{ik} + B_{ik} + E_{ik} + F_{ik}. \qquad (23)$$

Величины H_{ik} определяется правой частью (8). Пусть

$$f_{ik} = \alpha_{ik} f_{i+1,k} + \gamma_{ik} f_{i,k+1} + \delta_{ik}. \quad (24)$$

Подставляя (24) в (22), выводим соотношения для прогоночных коэффициентов:

$$\alpha_{ik} = B_{ik}/K_{ik}, \gamma_{ik} = F_{ik}/K_{ik},$$
$$\delta_{ik} = [A_{ik}\left(\gamma_{i-1,k} f_{i-1,k+1} + \delta_{i-1,k}\right) +$$
$$+ E_{ik}\left(\alpha_{i,k-1} f_{i+1,k-1} + \delta_{i,k-1}\right) + H_{ik}]/K_{ik}, \quad (25)$$

где $K_{ik} = G_{ik} - A_{ik}\alpha_{i-1,k} - E_{ik}\gamma_{i,k-1}$.

Формулы (23)–(25) лежат в основе быстросходящегося итерационного алгоритма, аналогичного описанному в [5]. Значения $f_{i-1,k+1}$, $f_{i+1,k-1}$ в последнем равенстве (25) берутся с нижнего итерационного слоя. На каждом шаге выполняется процедура заполнения значений f в фиктивных узлах для обеспечения аппроксимации граничных условий.

Для распараллеливания алгоритма решения разностного уравнения Пуассона расчетную область Ω разобьем на N приблизительно одинаковых подобластей Ω_l прямыми, перпендикулярными оси r, таким образом, чтобы Ω_l и Ω_{l+1} перекрывались. Длины перекрывающихся частей составляют примерно 10–20% от длины любой из пересекающихся областей. Задействуем N процессоров. Каждый процессор реализует вычисления в одной из подобластей, а алгоритм вычислений идентичен описанному выше. В качестве условий на внутренней границе подобласти используются значения, найденные соседним процессором. При этом результат вычислений слабо зависит как от количества используемых подобластей (процессоров), так и от размеров перекрывающихся частей. Измерения времени работы программ показали, что эффективность распараллеливания алгоритмов такого типа близка к единице, т.е. производительность ЭВМ увеличивается линейно с ростом числа процессоров [6].

6. Примеры расчётов

Моделирование течения в цилиндрической полости проводилось для следующих значений параметров: $Ma = 1000$, $\Pr = 0.018$, $Ha = 0,\ 50,\ 100$, $Gr = 0$, $\tau = 2 \cdot 10^{-7}$, $\varepsilon = 10^{-4}$. Использовалась равномерная сетка с квадратными ячейками. Шаг по времени: $\Delta t = 10^{-7}$. Для ускорения сходимости величина N_p полагалась равной единице. Вычисления проводились на ЭВМ МВС–1000М с использованием стандарта MPI. Число шагов по времени до сходимости заметно уменьшалось с ростом числа Гартмана (см. табл. 1). Это объясняется уменьшением скоростей конвекции в магнитном поле.

Таблица 1. Параметры расчётов

№ расчёта	Число Гартмана Ha	Сетка $N_r \times N_z$	Число шагов по времени до сходимости N_t	Минимум функции тока ψ	Максимум функции тока ψ	Результаты представлены на рисунках
1	0	82×162	569477	–249.6	249.6	2–5, 18–19
2	50	82×162	84326	–52.2	52.2	6–9, 18–19
3	100	82×162	45400	–37.1	37.1	10–13, 18–19
4	100	162×322	45574	–37.0	37.0	14–17, 18–19

На рис. 2–17 показаны векторы скорости, линии тока (касательные к скоростям) и линии уровня функции тока, давления и температуры. Функция тока ψ вычисляется на основе выражений

$$u_r - w_r = -\frac{1}{r}\frac{\partial\psi}{\partial z},\ u_z - w_z = \frac{1}{r}\frac{\partial\psi}{\partial r} \qquad (26)$$

(см. [7], с. 279), с нормировкой $\psi = 0$ на границе Ω. Поскольку добавки к скоростям $-w_r$ и $-w_z$ в (26) невелики, касательные к скоростям ведут себя приблизительно так же, как и линии уровня ψ. Полученное течение практически симметрично относительно плоскости $z = 0$, что обусловлено симметричным заданием распределения температуры на боковой стенке и отсутствием гравитации ($Gr = 0$). На рис. 18 показаны одномерные профили U_r в сечении $r = 0.85$, а на рис. 19 – профили U_z в сечении $z = 0.85$ для всех расчётов.

Расчёт № 4 (см. табл. 1) был выполнен для таких же значений параметров, как и расчёт № 3, но на сетке, сгущённой в два раза. Полученный результат практически идентичен результату расчёта № 3: на рис. 18 и 19 соответствующие кривые почти совпадают, также ср. значения функции тока в табл. 1. Это демонстрирует сходимость вычислительного метода по сетке.

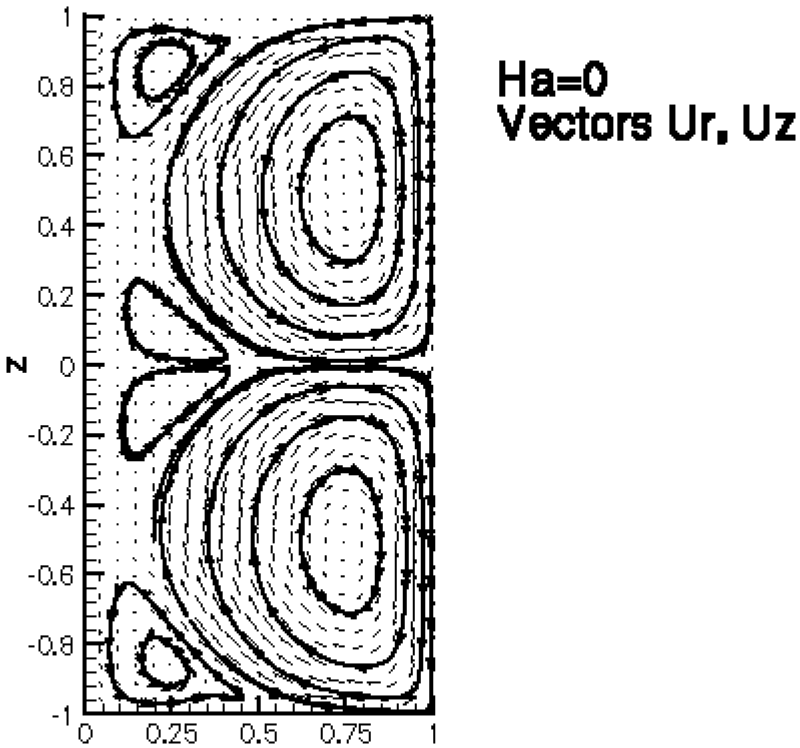

Рис. 2. Векторы скорости и линии тока для $Ha = 0$.

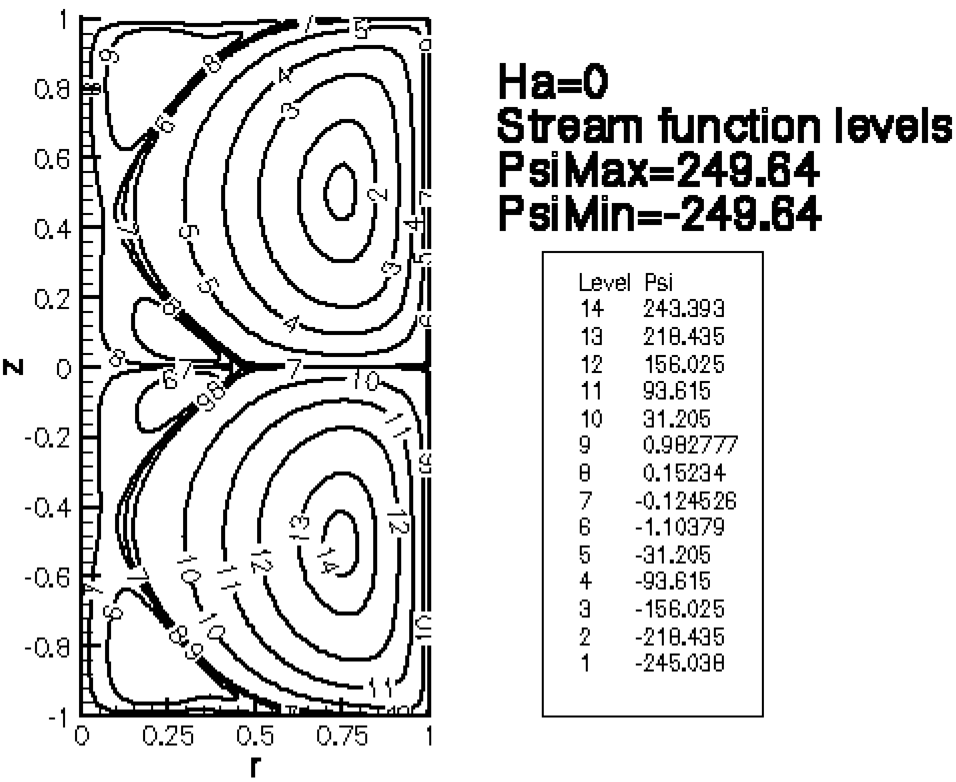

Рис. 3. Линии уровня функции тока для $Ha = 0$.

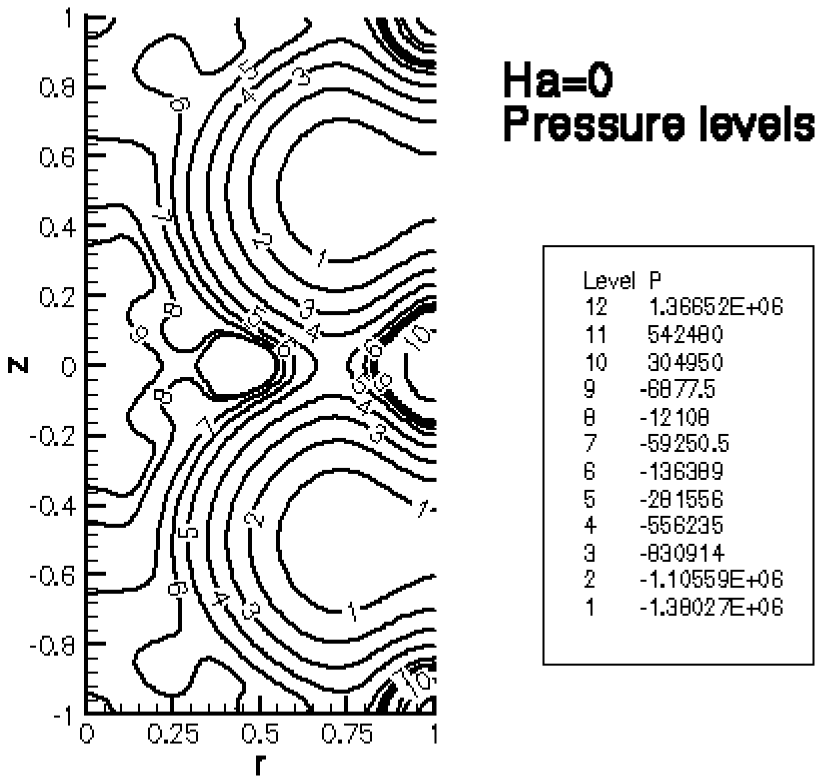

Рис. 4. Линии уровня давления для $Ha = 0$.

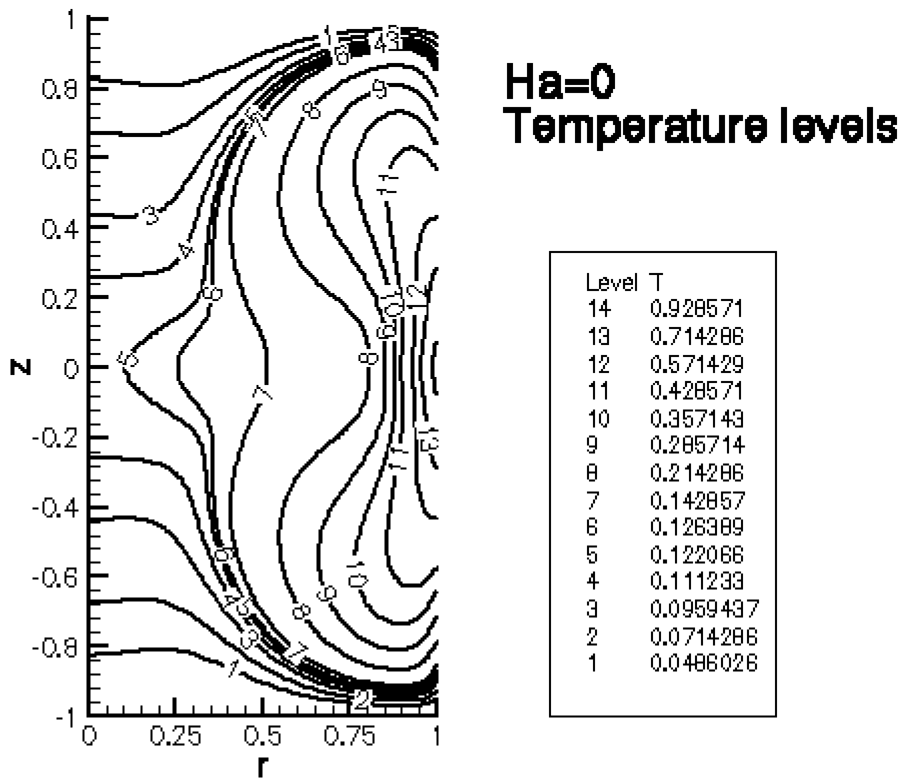

Рис. 5. Линии уровня температуры для $Ha = 0$.

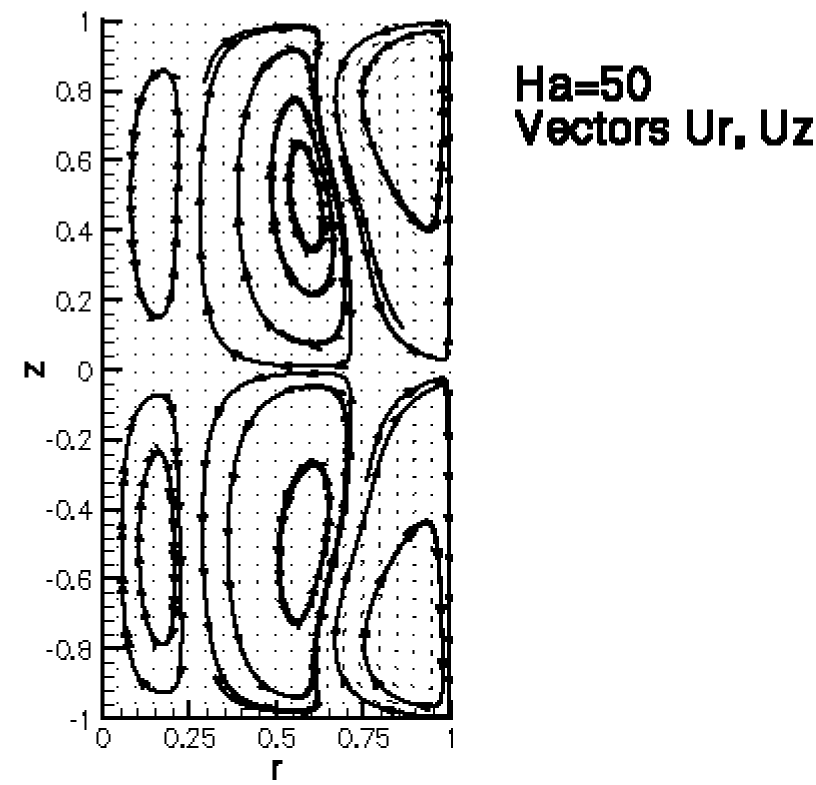

Рис. 6. Векторы скорости и линии тока для $Ha = 50$.

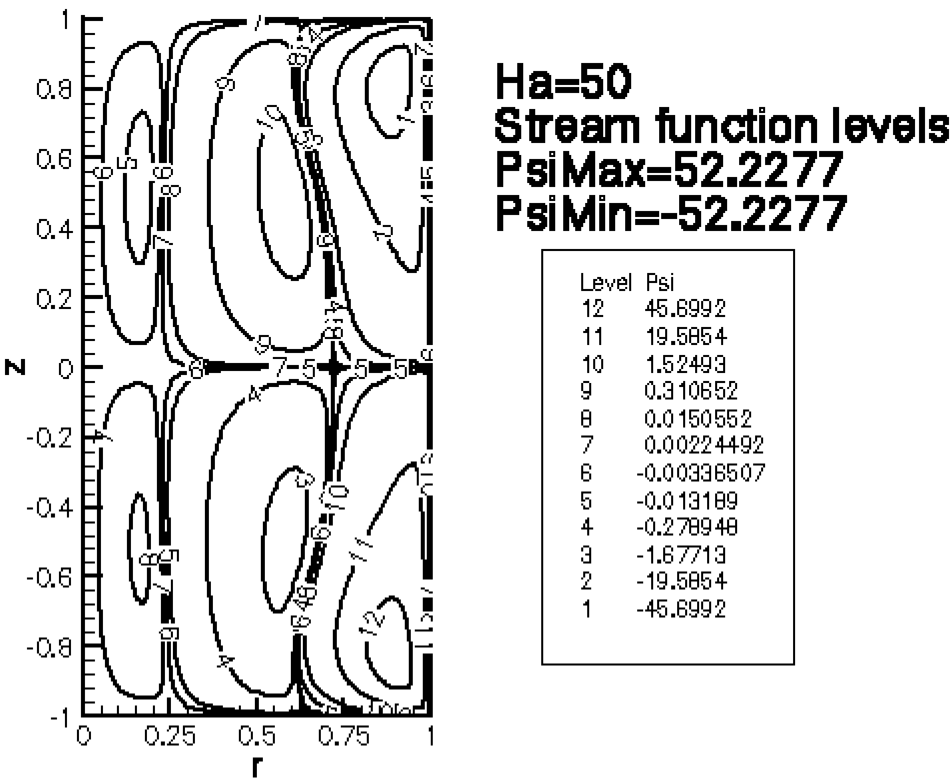

Рис. 7. Линии уровня функции тока для $Ha = 50$.

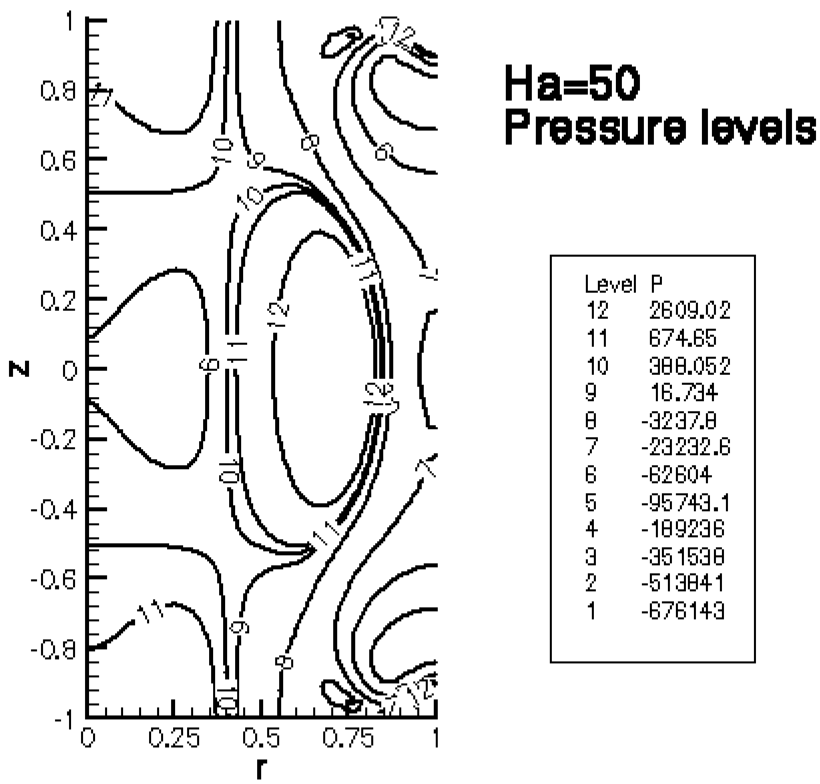

Рис. 8. Линии уровня давления для $Ha = 50$.

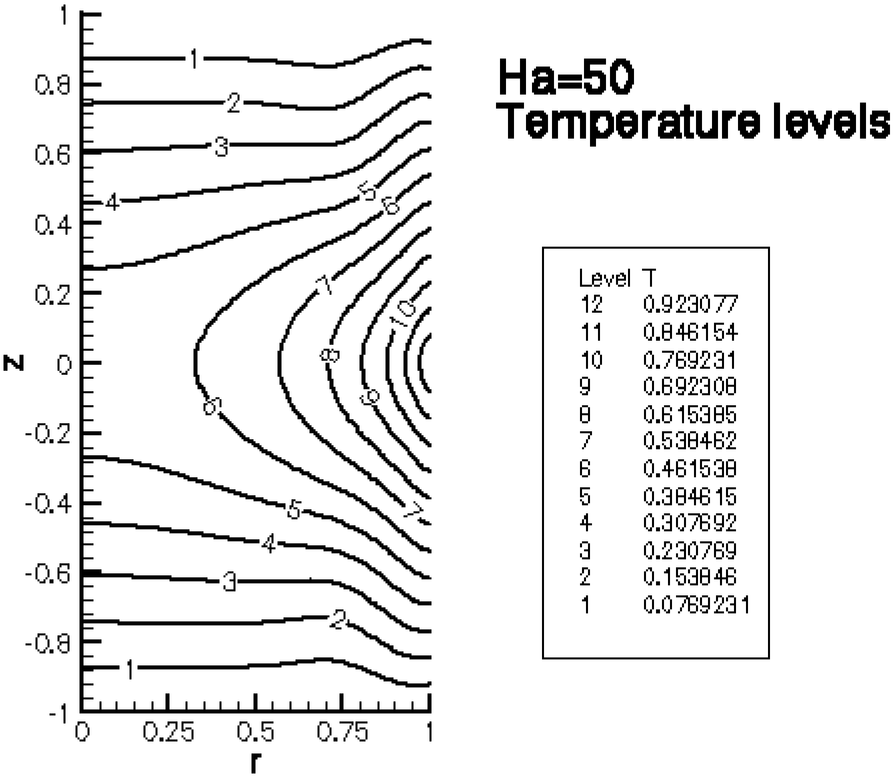

Рис. 9. Линии уровня температуры для $Ha = 50$.

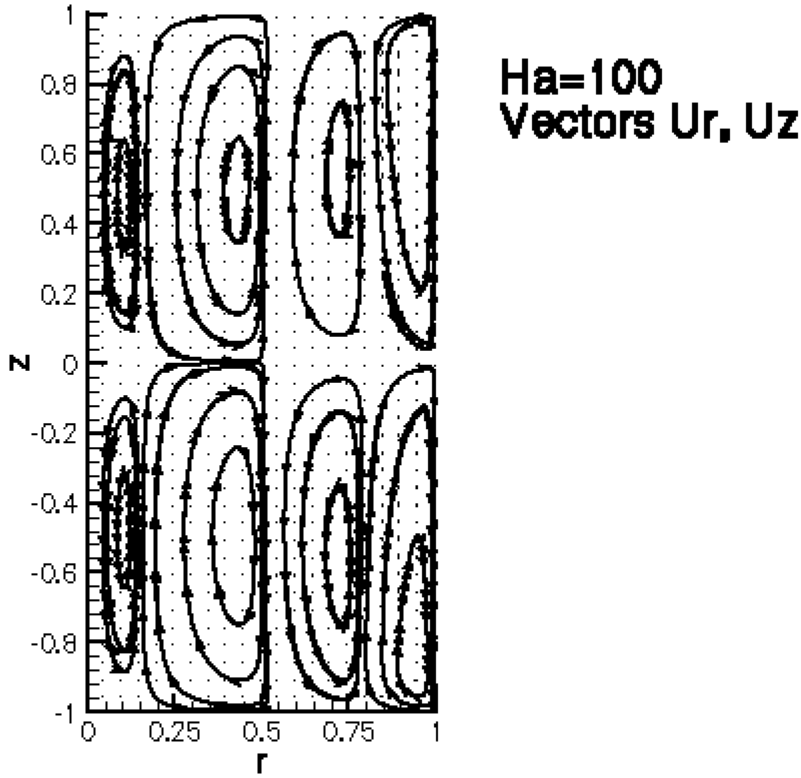

Рис. 10. Векторы скорости и линии тока для $Ha = 100$.

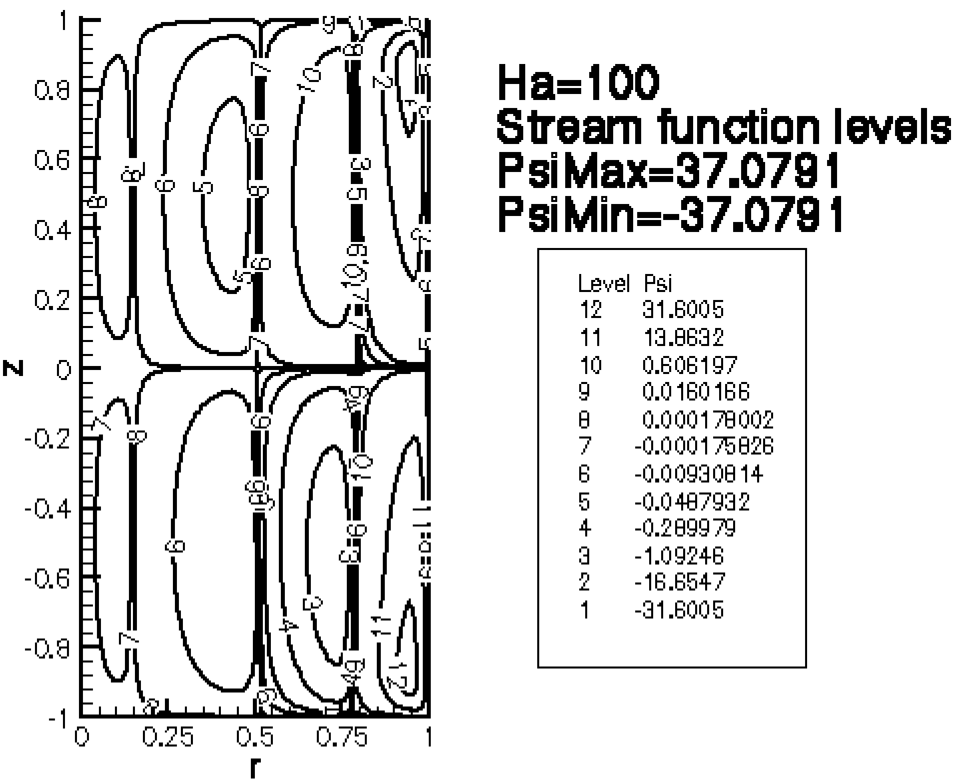

Рис. 11. Линии уровня функции тока для $Ha = 100$.

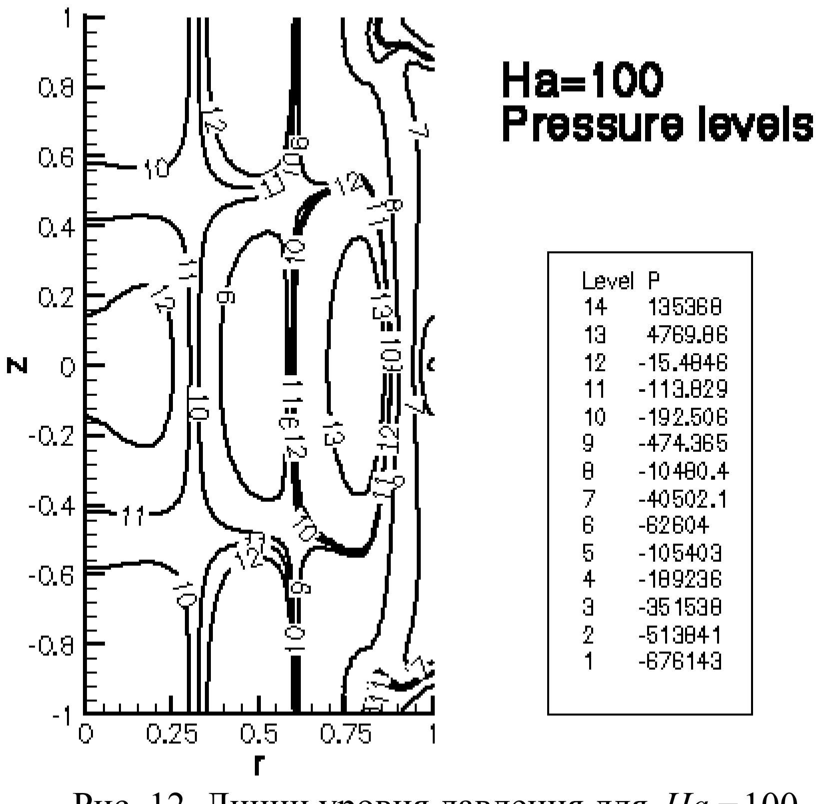

Рис. 12. Линии уровня давления для $Ha = 100$.

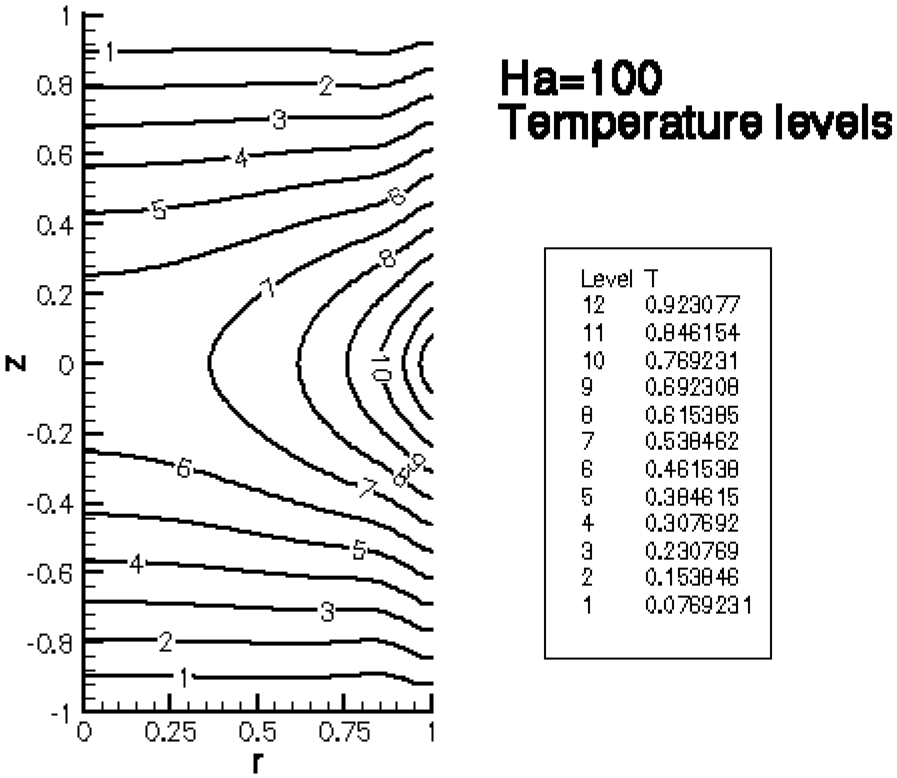

Рис. 13. Линии уровня температуры для $Ha = 100$.

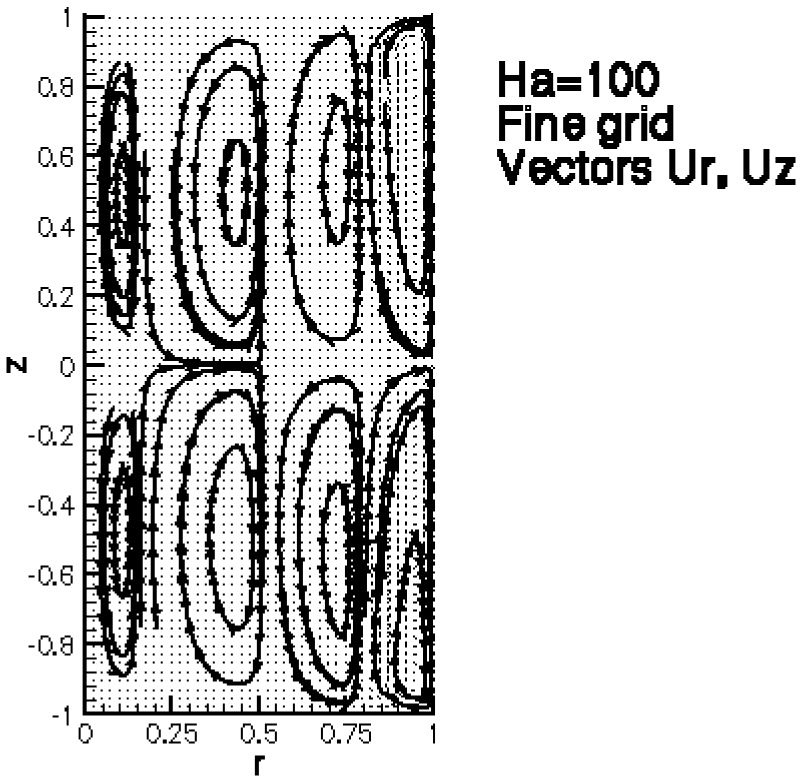

Рис. 14. Векторы скорости и линии тока для $Ha = 100$ при расчёте на подробной сетке.

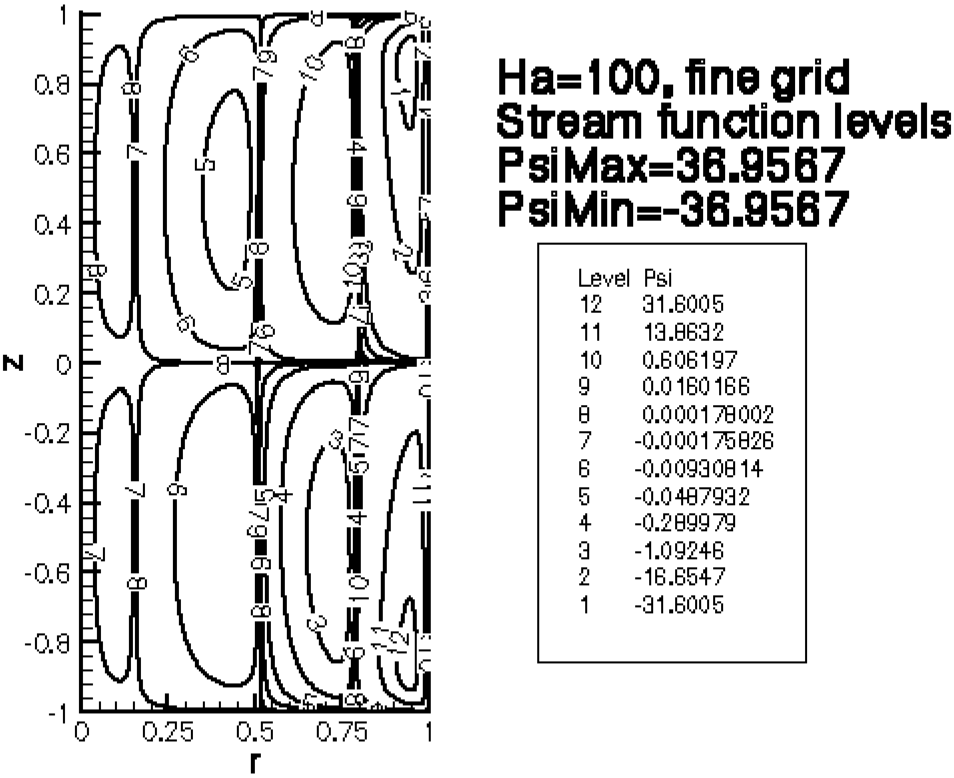

Рис. 15. Линии уровня функции тока для $Ha = 100$ при расчёте на подробной сетке.

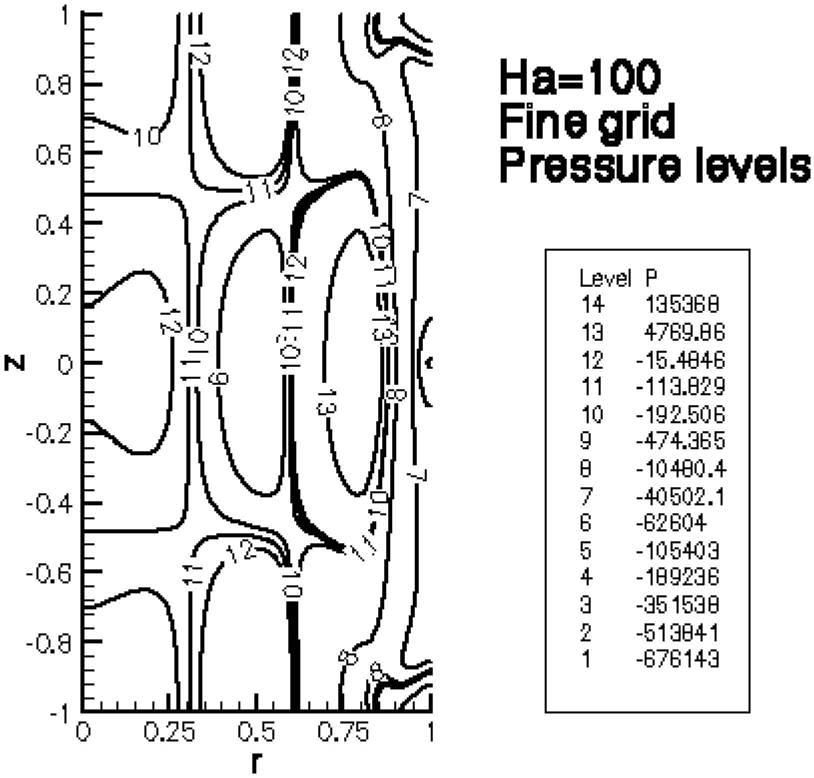

Рис. 16. Линии уровня давления для $Ha = 100$ при расчёте на подробной сетке.

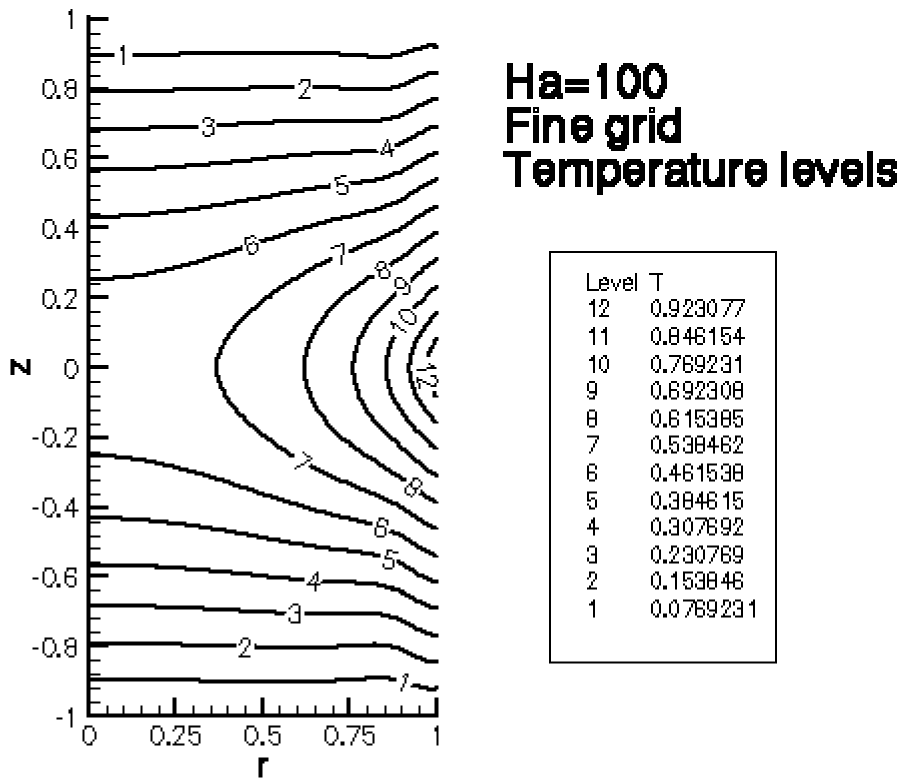

Рис. 17. Линии уровня температуры для $Ha = 100$ при расчёте на подробной сетке.

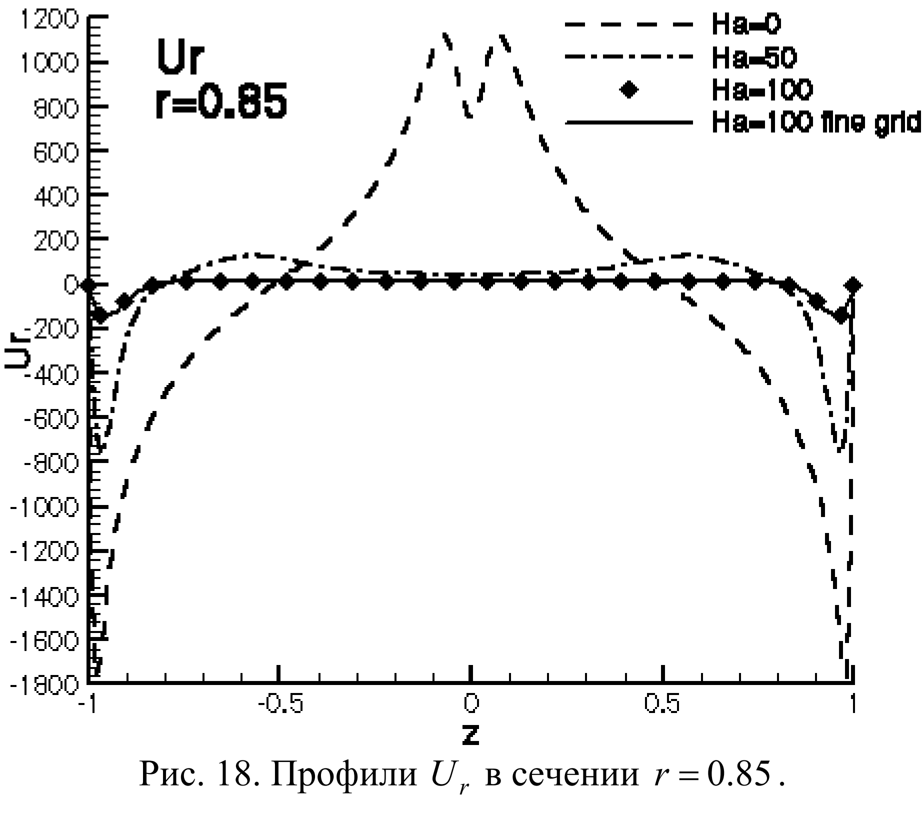

Рис. 18. Профили U_r в сечении $r = 0.85$.

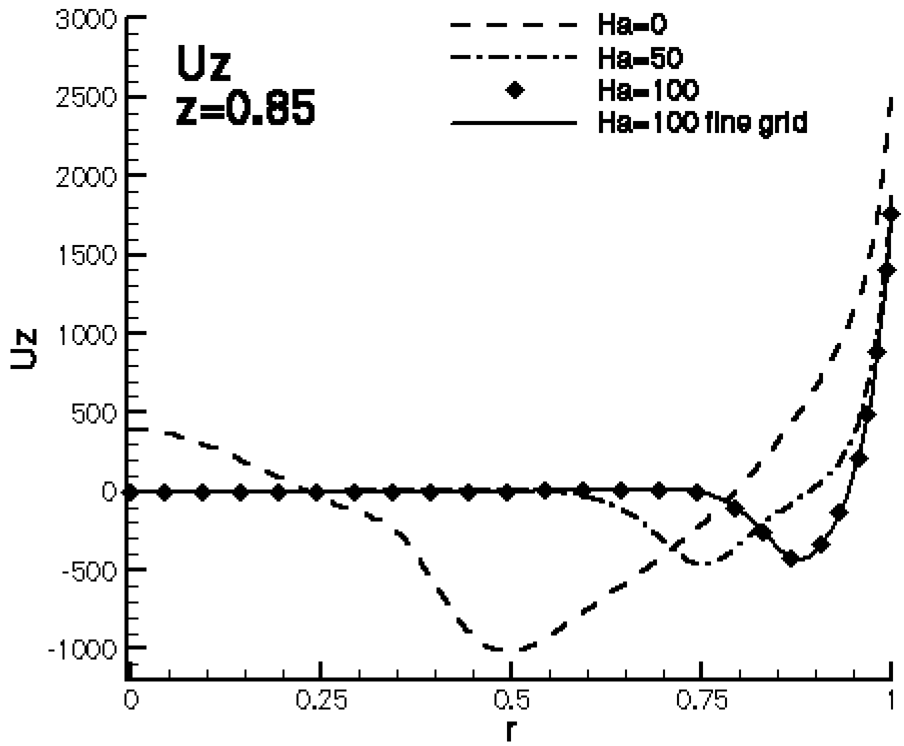

Рис. 19. Профили U_z в сечении $z = 0.85$.

Подобные расчеты проводились ранее на основе двумерных КГД моделей в декартовой геометрии [8], [9]. При этом имеется определенная аналогия с полученными здесь результатами. В частности, присутствие магнитного поля уменьшает скорости конвекции и расслаивает течение.

Литература

[1] Dold P., Croll A., Benz K.W. Floating–zone growth of silicon in magnetic fields. I. Weak static axial fields. // Journal of Crystal Growth. 1998. V. 183. P. 545–553.

[2] Croll A., Szofran F.R., Dold P., Benz K.W. Lehoczky S.L. Floating–zone growth of silicon in magnetic fields. II. Strong static axial fields. // Journal of Crystal Growth. 1998. V. 183. P. 554–563.

[3] Kaiser Th., Benz K.W. Floating–zone growth of silicon in magnetic fields. III. Numerical simulation. // Journal of Crystal Growth. 1998. V. 183. P. 564–572.

[4] Шеретов Ю.В. Математическое моделирование течений жидкости и газа на основе квазигидродинамических и квазигазодинамических уравнений. Тверь: Тверской гос. ун–т, 2000.

[5] Белов И.А., Исаев С.А., Коробков В.А. Задачи и методы расчёта отрывных течений несжимаемой жидкости. Л.: Судостроение, 1989.

[6] Широков И.А. Итерационный метод решения уравнения Пуассона и его реализация на многопроцессорной вычислительной системе. // Прикладная математика и информатика: Труды факультета ВМиК МГУ им. М.В. Ломоносова (принято к печати).

[7] Лойцянский Л.Г. Механика жидкости и газа. М.: Наука, 1978.

[8] Yelizarova T.G., Zherikov A.V., Kalatchinskaia I.S., Sheretov Yu.V. Numerical Modeling of Convective Flows of the Electrically Conducting Fluid: Abstr. of V International Congress on Mathematical Modeling. Dubna, 2002. V. 1. P. 256.

[9] Елизарова Т.Г., Жериков А.В., Калачинская И.С., Шеретов Ю.В. Численное моделирование конвективных течений электропроводной жидкости в каверне. // Прикладная математика и информатика: Труды факультета ВМиК МГУ им. М.В. Ломоносова (принято к печати).