

# ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ТЕРМОКАПИЛЛЯРНОЙ КОНВЕКЦИИ ВО ВНЕШНЕМ МАГНИТНОМ ПОЛЕ

Т.Г. Елизарова<sup>1</sup>, И.С. Калачинская<sup>2</sup>, Ю.В. Шеретов<sup>3</sup>, И.А. Широков<sup>2</sup>

<sup>1</sup> Институт математического моделирования РАН,

<sup>2</sup> МГУ им. М. В. Ломоносова, факультет ВМиК,

<sup>3</sup> Тверской государственный университет

E-mail addresses: telizar@mail.ru, kalach@cs.msu.su, Yurii.Sheretov@tversu.ru, ivansh@ttk.ru

## Аннотация

В рамках квазигидродинамического подхода предложен новый алгоритм численного анализа конвективных течений полупроводниковых расплавов при наличии однородного внешнего магнитного поля. Решены задачи о конвекции Марангони в кавернах прямоугольной и цилиндрической формы.

**Ключевые слова** – численное моделирование, полупроводниковый расплав, магнитное поле, термокапиллярная конвекция

## 1. Введение

Конвективное течение, возникающее под действием гравитационных или термокапиллярных сил, может быть подавлено путем помещения расплава во внешнее магнитное поле. Возможность использования этого эффекта для улучшения свойств выращиваемых кристаллов широко изучается в настоящее время с помощью как натуральных [1], [2], так и вычислительных экспериментов [3], [4]. Численное моделирование процессов взаимодействия магнитного поля и электропроводной жидкости представляется достаточно сложной математической и вычислительной проблемой.

В данной работе выписана квазигидродинамическая (КГД) модель течений квазинейтральной электропроводной жидкости во внешнем электромагнитном поле, предложенная в [5]. Построен ее упрощенный вариант, ориентированный на плоские и 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 приближении Обербека–Буссинеска, предложенную в [5]. Эта система может быть представлена в виде

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

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

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

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

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

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

В уравнениях (1)–(7) температурный коэффициент расширения жидкости  $\beta$ , динамическая вязкость  $\eta = \rho \nu$ , температуропроводность  $\chi$  и электропроводность  $\sigma$  считаются заданными положительными постоянными. Вектор  $\vec{g}$  – ускорение свободного падения,  $c$  – скорость света в вакууме. Релаксационный параметр  $\tau$ , имеющий размерность времени, связан с коэффициентом кинематической вязкости  $\nu$  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).

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

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

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

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

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

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

Здесь

$$w_r = \tau \left( u_r \frac{\partial u_r}{\partial r} + u_z \frac{\partial u_r}{\partial z} + \frac{\partial p}{\partial r} + Ha^2 u_r \right), \quad (12)$$

$$w_z = \tau \left( u_r \frac{\partial u_z}{\partial r} + u_z \frac{\partial u_z}{\partial z} + \frac{\partial p}{\partial z} - GrT \right). \quad (13)$$

Компоненты навье–стоксовского тензора вязких напряжений  $\Pi^{NS}$  вычисляются по формулам

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

$$\Pi_{\varphi\varphi}^{NS} = 2 \frac{u_r}{r}, \quad \Pi_{zz}^{NS} = 2 \frac{\partial u_z}{\partial z}.$$

Система (8)–(13) 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 полости 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  $\Theta$  – температура в точке  $(1, 0)$ . Безразмерное значение  $\tau$  вычисляется по формуле

$$\tau = \frac{1}{Re_s^2}. \quad (14)$$

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

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

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

$$(u_r)|_{t=0} = (u_z)|_{t=0} = 0, \quad T|_{t=0} = 1 - |z|. \quad (15)$$

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

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

$$u_r = 0, \frac{\partial u_z}{\partial r} = 0, \frac{\partial p}{\partial r} = 0, \frac{\partial T}{\partial r} = 0; \quad (16)$$

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

$$u_r = 0, \frac{\partial u_z}{\partial r} = -\frac{Ma}{Pr} \frac{\partial T}{\partial z}, \frac{\partial p}{\partial r} = 0, T = 1 - |z|; \quad (17)$$

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

$$u_r = u_z = 0, \frac{\partial p}{\partial z} = GrT, T = 0. \quad (18)$$

Здесь

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

– число Марангони,  $\sigma_T$  – коэффициент поверхностного натяжения. Чтобы исключить неоднозначность в определении давления, используется нормировка  $p(0,0) = 0$ . Постановка задачи и система КМГД уравнений для плоского течения расплава приведена в [6].

#### 4. Вычислительный метод и примеры численных расчетов

Для численного решения начально–краевой задачи (8)–(18) используется явная конечно–разностная схема второго порядка точности, описанная в [6], [7]. Стационарные течения ищем методом установления при  $t \rightarrow \infty$ . Итерации прекращаются при выполнении условия

$$\frac{1}{N_r N_z} \max_{i,j} \sum | (u^{up})_{ij} - u_{ij} | < \varepsilon,$$

где  $(u^{up})_{ij}$  – значения компоненты скорости на верхнем временном слое в точках  $(i, j)$ ,  $\varepsilon$  – заданная точность,  $N_r, N_z$  – число точек разностной сетки в направлениях  $r$  и  $z$ . На каждом шаге по времени уравнение Пуассона (8) решается итерационным методом, адаптированным для использования многопроцессорной вычислительной системы кластерного типа [8].

Для обеспечения устойчивости величина  $\tau$  (14) вычисляется по формуле

$$\tau = \frac{1}{Re_s^2} + \tau_0,$$

где  $\tau_0$  – подбираемый в процессе вычислений регуляризирующий параметр. Для исследуемых течений число  $Re_s$  весьма велико. Если  $L = 1 \text{ см}$ ,  $v \sim 0.01 \text{ см}^2 / \text{с}$ ,  $c_s \sim 10^5 \text{ см} / \text{с}$ , то  $Re_s$  есть величина порядка  $10^7$ . Поэтому можно считать, что  $\tau = \tau_0$ .

В численных расчетах проверена работоспособность используемого алгоритма решения КМГД–уравнений. Исследована сходимость разностного решения при сгущении пространственной сетки. Изучено влияние магнитного поля на структуру и интенсивность конвективного движения в расплаве на примере задачи о термокапиллярной конвекции полупроводникового расплава в цилиндрической и плоской каверне (Рис.1, 2) при отсутствии силы тяжести ( $Gr = 0$ ). Конвективное течение в этом случае возникает благодаря силам поверхностного натяжения. Расчеты проведены для следующих значений безразмерных параметров:  $A = 1$ ;  $Ma = 1000$ ;  $Pr = 0.018$ ;  $Ha = 0, 50, 100$ . Во всех вариантах шаг по времени составлял  $\Delta t = 10^{-7}$ .

При расчетах течения в цилиндрической каверне (см. рис. 1) безразмерный параметр  $\tau = 2 \cdot 10^{-7}$ . Течение считалось установившемся при  $\varepsilon = 10^{-4}$ . Использовалась

равномерная сетка с квадратными ячейками. Вычисления проводились на многопроцессорном кластерном вычислительном комплексе 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. С увеличением интенсивности магнитного поля течение становится многослойным, и основной вихрь смещается к свободной поверхности расплава.

На рис. 3–5 показаны линии уровня функции тока и температуры. Линии тока в области главного вихря и изотермы расположены эквидистантно. Функция тока  $\Psi$  вычисляется на основе выражений

$$u_r - w_r = -\frac{1}{r} \frac{\partial \Psi}{\partial z}, \quad u_z - w_z = \frac{1}{r} \frac{\partial \Psi}{\partial r}$$

с нормировкой  $\Psi = 0$  на границе. Полученное течение симметрично относительно плоскости  $z = 0$ , что обусловлено симметричным заданием распределения температуры на боковой стенке и отсутствием гравитации ( $Gr = 0$ ). Расчёты для  $Ha = 100$  (см. табл. 1) демонстрируют сходимость вычислительного метода по сетке.

При моделировании течения в квадратной полости (см. рис. 2) в качестве граничных условий для температуры выбирались условия адиабатичности верхней и нижней граней. На левой стенке полагалось  $T=1$ , на правой –  $T=0$ . Безразмерный параметр  $\tau$  полагался равным  $2 \cdot 10^{-5}$ . Течение считалось установившемся при достижении точности  $\varepsilon = 10^{-3}$ . Использовалась последовательность равномерных пространственных сеток с числом узлов  $22 \times 22$ ,  $42 \times 42$  и  $82 \times 82$ . Полученные в установившемся режиме результаты представлены на рис. 6 - 10 и в табл. 2. Стрелками показаны направления магнитного поля.

Для случая вертикально направленного магнитного поля на рис. 6 - 8 изображены изотермы и изолинии функции тока для чисел Гартмана  $Ha = 0, 50$  и  $100$ , полученные на сетке  $42 \times 42$ . Изотермы и изолинии функции тока расположены эквидистантно. Функция тока определяется соотношениями

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

На границах расчетной области функция тока  $\Psi$  обращается в нуль. Минимальные значения  $\Psi$  приведены в табл. 2. С увеличением интенсивности магнитного поля скорость конвективного движения в каверне падает, а вихрь смещается вправо и вверх, прижимаясь к свободной поверхности расплава. При  $Ha = 100$  искажение изотерм за счет течения расплава весьма мало.

Изотермы и линии тока для случая горизонтального направления вектора напряженности магнитного поля представлены на рис. 9,10. 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. При  $Ha = 50$  наблюдаются три вихревых образования, а при  $Ha = 100$  – четыре. Аналогичные закономерности получены и в расчетах течения в цилиндрической геометрии (Рис.3 – 5).

В [4] для решения аналогичной задачи 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 [4]. Для  $Ha=50$  на сетке  $42 \times 42$  минимальное значение функции тока в центре основного вихря оказалось равным ( $-43.5$ ). Метод [4] привел к результату ( $-44.2$ ). При этом общая структура течения в обоих расчетах была практически идентичной. Приведенное сравнение демонстрирует хорошую точность предложенного авторами подхода.

## 5. 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 цилиндрической камере и в квадратной камере при различных интенсивностях и направлениях магнитного поля. Установлено, что магнитное поле замедляет конвективное движение жидкости и оттесняет его к свободной поверхности. В случае, когда вектор напряженности магнитного поля параллелен свободной поверхности, течение становится многослойным.

Проведено сопоставление расчетных данных с 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] 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] 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.

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

[6] Елизарова Т.Г., Жериков А.В., Калачинская И.С., Шеретов Ю.В. Численное моделирование конвективных течений электропроводной жидкости в камере // Прикладная математика и информатика №13: Труды факультета ВМиК МГУ им. М.В. Ломоносова. М.: МАКС Пресс, 2003. С. 63–81.

[7] 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

[8] Широков И.А. Решение уравнения Пуассона на многопроцессорной системе в задачах моделирования течений несжимаемой жидкости // Дифференциальные уравнения, 2003, №7 (принято к печати).

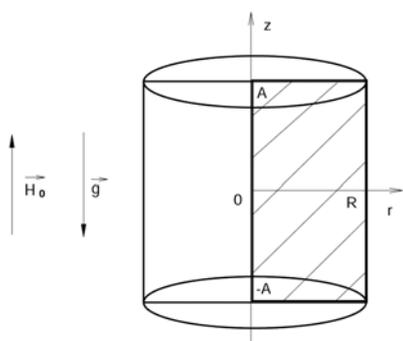


Рис. 1. Схема расчётной области в задаче о цилиндрической камере

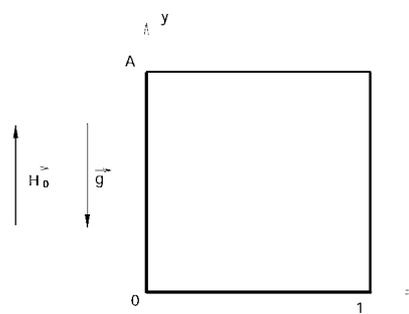


Рис. 2. Схема расчётной области в задаче о камере с прямоугольным сечением

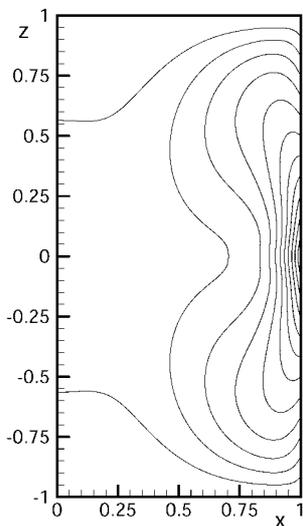
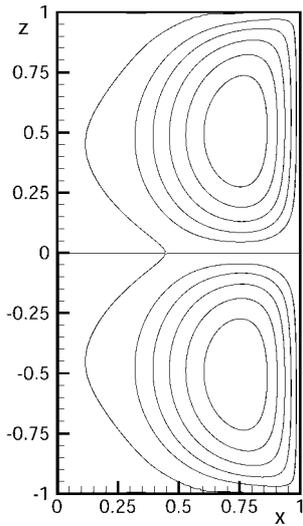


Рис. 3. Линии уровня функции тока (вверху) и температуры (внизу) для  $Na=0$  в задаче о цилиндрической каверне.

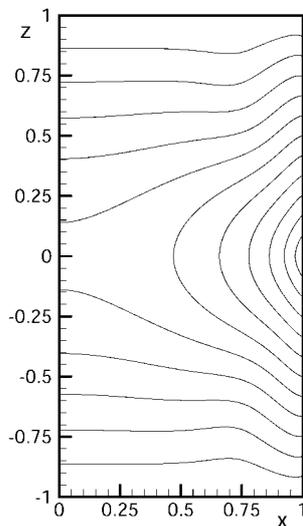
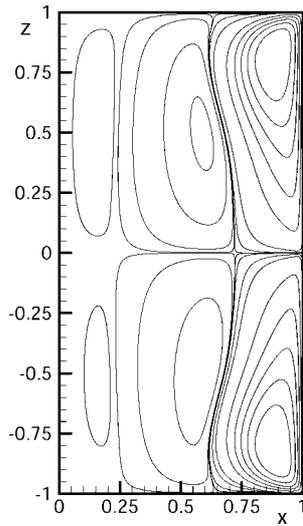


Рис. 4. Линии уровня функции тока (вверху) и температуры (внизу) для  $Na=50$  в задаче о цилиндрической каверне.

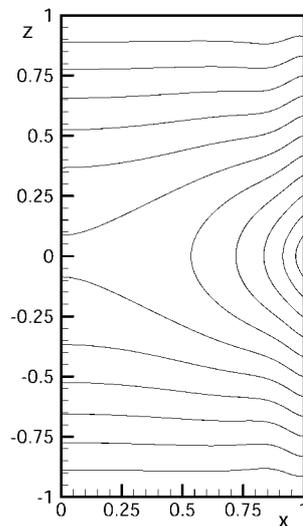
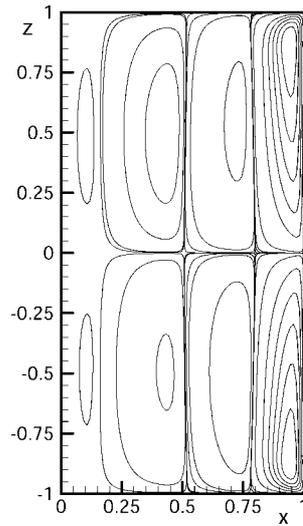


Рис. 5. Линии уровня функции тока (вверху) и температуры (внизу) для  $Na=100$  в задаче о цилиндрической каверне.

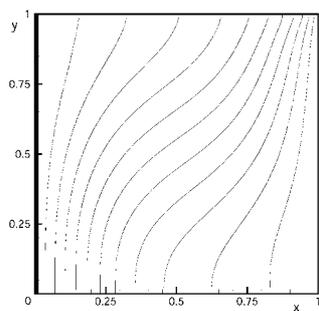
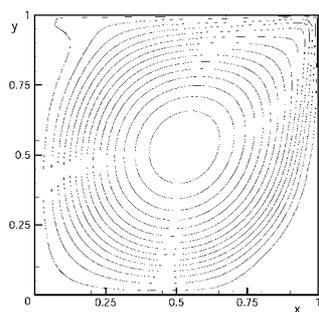


Рис. 6. Линии уровня функции тока (вверху) и температуры (внизу) для  $Na=0$  в задаче о прямоугольной каверне.

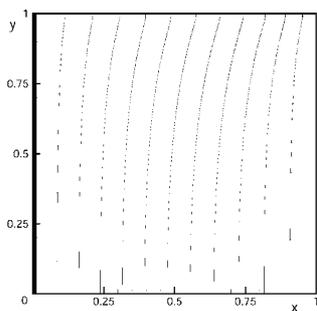
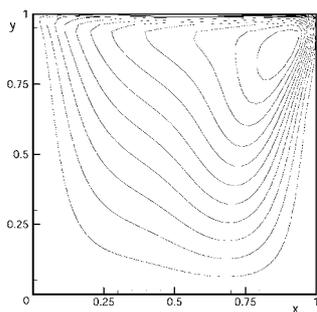


Рис. 7. Линии уровня функции тока (вверху) и температуры (внизу) для  $Na=50$  в задаче о прямоугольной каверне.

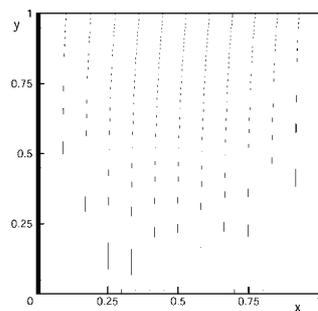
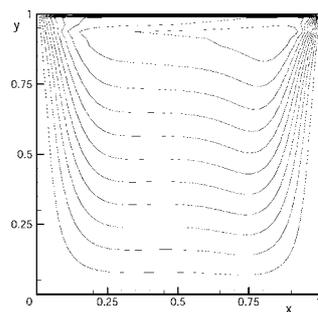


Рис. 8. Линии уровня функции тока (вверху) и температуры (внизу) для  $Na=100$  в задаче о прямоугольной каверне.

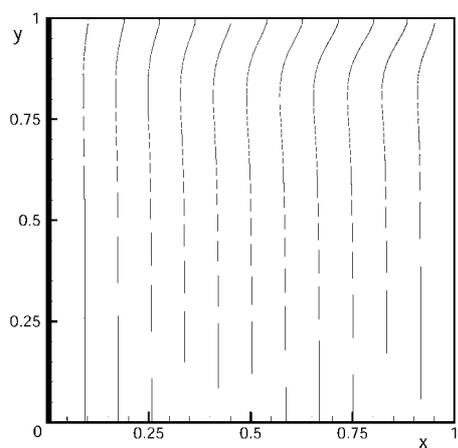
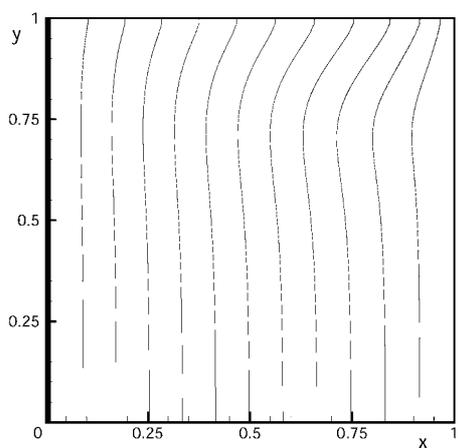
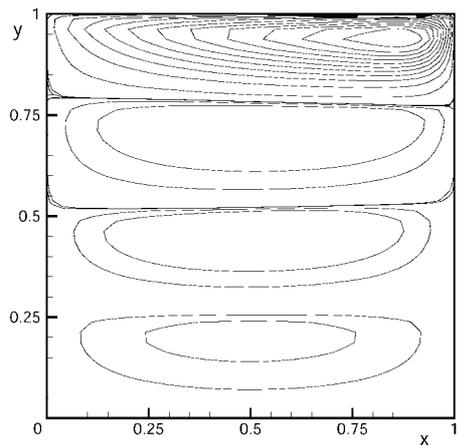
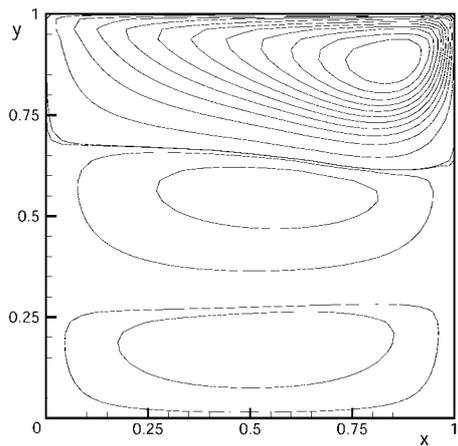


Рис. 9. Линии уровня функции тока (вверху) и температуры (внизу) для  $Na=50$  в задаче о прямоугольной камере с горизонтальным направлением магнитного поля.

Рис. 10. Линии уровня функции тока (вверху) и температуры (внизу) для  $Na=100$  в задаче о прямоугольной камере с горизонтальным направлением магнитного поля.

**Таблица 1. Параметры расчётов для цилиндрической каверны**

$Ha$	Размер сетки $N_r \times N_z$	Число шагов до установления	Минимум функции тока $\Psi_{\min}$
0	82×162	569477	-249.6
50	82×162	84326	-52.2
100	82×162	45400	-37.1
100	162×322	45574	-37.0

**Таблица 2. Параметры расчётов для прямоугольной каверны**

$Ha$	Размер сетки $N_x \times N_y$	Число шагов до установления	Минимум функции тока $\Psi_{\min}$
50 ↑	22x22	437210	-23.83
0	42x42	1500000	-134.3
50 ↑	42x42	440130	-22.18
100 ↑	42x42	353705	-5.224
50 ←	42x42	441100	-47.785
100 ←	42x42	375754	-41.124
50 ↑	82x82	439553	-21.88