



Math-Net.Ru

Общероссийский математический портал

М. А. Кирюшина, Т. Г. Елизарова, А. С. Епихин, Моделирование течения расплава в методе Чохральского в рамках открытого пакета OpenFOAM с применением квазигидродинамического алгоритма, *Матем. моделирование*, 2023, том 35, номер 8, 79–96

DOI: 10.20948/mm-2023-08-06

Использование Общероссийского математического портала Math-Net.Ru подразумевает, что вы прочитали и согласны с пользовательским соглашением
<http://www.mathnet.ru/rus/agreement>

Параметры загрузки:

IP: 217.9.82.130

25 июля 2023 г., 12:36:37



МОДЕЛИРОВАНИЕ ТЕЧЕНИЯ РАСПЛАВА В МЕТОДЕ ЧОХРАЛЬСКОГО В РАМКАХ ОТКРЫТОГО ПАКЕТА OpenFOAM С ПРИМЕНЕНИЕМ КВАЗИГИДРОДИНАМИЧЕСКОГО АЛГОРИТМА

© 2023 г. *М.А. Кирюшина^{1,*}, Т.Г. Елизарова¹, А.С. Епихин²*

¹ ИПМ им. М.В. Келдыша РАН

* m_ist@mail.ru

² ИСП им. В.П. Иванникова РАН

DOI: 10.20948/mm-2023-08-06

Приведены постановка задачи, метод численного решения и пример моделирования течения расплава в задаче о выращивании кристалла методом Чохральского. Математическая модель основана на регуляризованных, или квазигидродинамических уравнениях для описания течений вязкой несжимаемой теплопроводной жидкости. Численный алгоритм реализован на базе открытого пакета OpenFOAM в рамках решателя mulesQHDFoam. Предложенный подход позволяет проводить расчеты нестационарного трехмерного течения с заданной геометрией для высоких чисел Рейнольдса и Грасгофа. В качестве примера приведены результаты расчета течения в упрощенной конфигурации. Получено несимметричное нестационарное течение.

Ключевые слова: открытый пакет OpenFOAM, квазигидродинамический (КГидД) алгоритм, вязкая несжимаемая жидкость, тепловая конвекция, вычислительный шаблон метода Чохральского.

NUMERICAL MODELING OF MELT FLOW IN THE CHOCHRALSKY METHOD WITHIN THE OpenFOAM PACKAGE USING A QUASI-HYDRO DYNAMIC ALGORITHM

M.A. Kirushina, T.G. Elizarova, A.S. Epikhin

The work presents the task statement, the numerical solution method and the description of the test calculation case for modeling the melt flow in the problem of crystal growth by the Chochralsky method. The mathematical model is based on regularized or quasi-hydrodynamic equations to describe the currents of a viscous, non-compressible thermally conductive fluid. The numerical algorithm is implemented on the basis of the OpenFOAM package within the mulesQHDFoam solver. The proposed approach allows calculations of non-stationary three-dimensional flow in a crucible with a given geometry for high numbers Reynolds and Grashoff. As an example, the results of calculating the flow in a simplified configuration crucible are given. An asymmetric transient flow is obtained.

Key words: OpenFOAM package, quasi-hydro dynamic algorithm, viscous incompressible fluid, Chochralsky computational case.

Введение

Метод Чохральского является одним из наиболее распространенных методов выращивания кристаллов из расплава: на свободную поверхность расплава помещается затравка кристалла, которая по мере роста кристалла вытягивается вверх. При этом выращиваемый слиток получает ту же кристаллическую структуру, что и исходный затравочный кристалл. Для выращивания кристаллов в методе Чохральского используются тигли – контейнеры, устойчивые к расплаву и параметрам установки. Для обеспечения равномерного распределения температуры и примесей по объёму расплава затравочный кристалл с нарастающим на нём монокристаллом и тигель с расплавом вращают в противоположных направлениях. Для увеличения выхода кристаллического вещества расплав непрерывно подогревается. Классический тигель имеет скругленную форму, в который сверху над расплавом помещается теплоизолирующий слой.

Форма получаемого кристалла близка к цилиндрической с искажениями, определяемыми тепловыми условиями выращивания, скоростью вытягивания, кристаллической структурой и кристаллографической ориентацией выращиваемого образца. Для последующего использования кристаллов в производстве приборов микроэлектроники выращенный кристалл должен быть максимально однородным. Учитывая высокую стоимость исходных материалов и самой установки, высокие температуры, при которых протекает процесс кристаллизации, невозможность визуализации течения и измерения параметров расплава, а также токсичность всего процесса в целом, очевиден интерес к математическому моделированию течения расплава в методе Чохральского.

В реальных промышленных установках метода Чохральского течение расплава представляет собой трехмерное нестационарное движение, которое можно описывать в рамках уравнений вязкой несжимаемой жидкости в поле силы тяжести в приближении Буссинеска [1, 2]. Численное описание этого процесса широко освещено в литературе, подробный анализ которой не представляется возможным в данной работе. В силу сложности процесса и недостаточной мощности вычислительных средств авторы ранних работ использовали достаточно жесткие упрощающие предположения: течение предполагалось осесимметричным и стационарным см., например, [3,4], библиографию к ним и обзор [5]. В дальнейшем проводилось моделирование гравитационной конвекции для приближенных к реальности параметров установок, в том числе и для не осесимметричных нестационарных режимов, близких к турбулентным режимам, например, [6-9]. Однако в виду

сложности анализа результатов в зависимости от чисел Грасгофа и Рейнольдса, проводились исследования и в упрощенных постановках, например, моделирование трехмерных стационарных и нестационарных течений в поле силы тяжести без учета вращения [10]. В основном задачи решались в рамках индивидуальных исследовательских кодов.

В общем случае для описания течения расплава в методе Чохральского требуется численный алгоритм, который позволяет проводить расчеты при больших числах Рейнольдса и Грасгофа, не ориентированный на симметрию или стационарность течения и позволяющий проводить расчеты для формы тигля, используемой в установках. В силу трудоемкости расчета, для увеличения эффективности алгоритма требуется его реализация на многопроцессорной вычислительной системе.

В данной работе приведено сжатое описание метода, позволяющего проводить численное моделирование нестационарного течения расплава в методе Чохральского в полной трехмерной постановке с учетом вращения и реальных параметров расплава. Алгоритм основан на регуляризованных, или квазигидродинамических (КГидД) уравнениях для описания течений вязкой несжимаемой жидкости. Численная реализация выполнена с помощью солвера `mulesQHDFoam`, имплементированного в открытый программный комплекс `OpenFOAM`. Последнее позволяет применять произвольные неструктурированные пространственные сетки в целях описания сложной конфигурации тигля и многопроцессорные вычислительные комплексы для ускорения расчета.

Статья имеет следующую структуру: в первом разделе приведено краткое описание КГидД уравнений для задач гравитационной конвекции в приближении Буссинеска. Во втором разделе приведена постановка типичной задачи метода Чохральского с заданием соответствующих параметров в открытом комплексе `OpenFOAM`. В третьем разделе описана реализация расчета в пакете `OpenFOAM`, для которого соответствующий кейс (вычислительный шаблон) находится в свободном доступе. Результаты тестового расчета, подтверждающие нестационарный характер течения, приводятся в четвертом разделе. В заключении анализируются результаты расчета и делаются некоторые выводы.

1. КГидД система уравнений для описания течения вязкой несжимаемой теплопроводной жидкости и численный алгоритм

Уравнения Навье-Стокса для описания течений вязкой несжимаемой теплопроводной жидкости включают в себя уравнения несжимаемости, импульса и уравнение для температуры. При моделировании конвективных

движений жидкости, находящихся в поле силы тяжести, широко применяется упрощенный вариант системы, предложенной в работах А. Обербека (1879) и Ж. Буссинеска (1903) для уравнений Навье-Стокса. Это приближение предполагает, что плотность зависит только от температуры в виде $\rho = \rho_0(1 - \beta(T - T_0))$, где $(T - T_0)$ – отклонение температуры от ее значения T_0 , $\rho_0 = \text{const} > 0$ – постоянное значение плотности, $\beta > 0$ – коэффициент теплового расширения. При этом изменение плотности от температуры учитывается только в слагаемом с внешней силой, которая определяет тепловую конвекцию в жидкости. Кроме температуры в модель могут включаться зависимость плотности от концентрации примесей.

Система уравнений Навье-Стокса для тепловой конвекции в приближении Буссинеска имеет вид, см., например, [1, 2]

$$\text{div } \mathbf{u} = 0, \quad (1)$$

$$\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \text{div}(\mathbf{u} \otimes \mathbf{u}) + \frac{1}{\rho_0} \nabla p = \frac{1}{\rho_0} \text{div } \Pi_{NS} - \beta \mathbf{g}(T - T_0), \quad (2)$$

$$\frac{\partial T}{\partial t} + \text{div}(\mathbf{u}T) = x \Delta T. \quad (3)$$

Здесь $\mathbf{u} = \mathbf{u}(\mathbf{x}, t)$ – гидродинамическая скорость, $p = p(\mathbf{x}, t)$ – давление, отсчитываемое от гидростатического, $(\mathbf{u} \otimes \mathbf{u})$ – тензор второго ранга, полученный в результате прямого произведения двух векторов, $\Pi_{NS} = \mu[(\nabla \otimes \mathbf{u}) + (\nabla \otimes \mathbf{u})^T]$ – тензор вязких напряжений Навье-Стокса, μ – коэффициент динамической вязкости, x – коэффициент температуропроводности. В системе уравнений удобно использовать ν – коэффициент кинематической вязкости, который связан с коэффициентом динамической вязкости μ как $\mu = \nu \rho_0$. Величины ν и x , как правило, являются постоянными.

Вычисляя дивергенцию от уравнения (2) и учитывая справедливость уравнения (1), получаем уравнение Пуассона для определения давления

$$\frac{1}{\rho_0} \Delta p = -\text{div}[(\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{u}] - \text{div}(\beta \mathbf{g}(T - T_0)). \quad (4)$$

Способ получения уравнения Пуассона как следствие системы (1), (2) приводит к необходимости включения в численный алгоритм дополнительного этапа. Численное решение подправляется так, что для вычисленных скоростей с достаточной точностью должно выполняться уравнение (1), которое является выражением закона сохранения массы в рассматриваемой задаче.

Граничные условия для системы (1)–(3) не включают в себя граничное условие для давления, которое необходимо для решения уравнения Пуассона. Граничные условия для давления, необходимые в численном алгоритме, выписываются на основе различных предположений. При записи разностных уравнений на разнесенных пространственных сетках удается исключить использование граничных условий для давления. Однако указанные математические проблемы усложняют процедуру численного решения исходной системы уравнений, делая ее многоэтапной.

Существует целый ряд способов численного решения системы уравнений (1)–(3) (например, [2]). В данной работе для численного моделирования гидродинамической задачи используется КГидД метод, основой которого является регуляризация системы уравнений Навье-Стокса (1)–(3). Систему КГидД, или регуляризованных, уравнений ввел Ю.В. Шеретов в 1993 г. Приведем вид КГидД системы уравнений в приближении Обербека-Буссинеска согласно, например, [11-14]:

$$\operatorname{div}(\mathbf{u} - \mathbf{w}) = 0, \tag{5}$$

$$\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \operatorname{div}((\mathbf{u} - \mathbf{w}) \otimes \mathbf{u}) + \frac{1}{\rho_0} \nabla p = \frac{1}{\rho_0} \operatorname{div} \Pi - \beta \mathbf{g}(T - T_0), \tag{6}$$

$$\frac{\partial T}{\partial t} + \operatorname{div}((\mathbf{u} - \mathbf{w})T) = x \Delta T. \tag{7}$$

Вектор поправки к скорости \mathbf{w} и тензор вязких напряжений Π вычисляются как

$$\mathbf{w} = \frac{\tau}{\rho_0} \left[(\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{u} + \frac{1}{\rho_0} \nabla p - \beta \mathbf{g}(T - T_0) \right], \quad \Pi = \Pi_{NS} + \rho_0 \mathbf{u} \otimes \mathbf{w}. \tag{8}$$

Здесь τ – параметр регуляризации, который имеет размерность времени. КГидД система тесно связана с исходной системой уравнений (1)–(3) и, в частности, обладает следующими свойствами: регуляризованная система имеет ряд точных решений, совпадающих с точными решениями исходной системы; для стационарной задачи любое решение, являющееся точным решением исходной системы, оказывается также и точным решением регуляризованных уравнений. В частности, точное решение стационарной задачи о течении между вращающимися бесконечными цилиндрами в рамках уравнений Навье-Стокса является также и точным решением этой задачи для КГидД уравнений [11,12]. При $\tau = 0$ регуляризованная система переходит в исходную систему уравнений.

КГидД система является более сложной, чем исходные уравнения. Од-

нако новая система уравнений позволяет строить более простые методы численного решения задач гидродинамики, отличающиеся от методов, которые традиционно используются для численного решения системы уравнений Навье-Стокса, записанных в переменных скорость-давление. В частности, это касается использования центральных разностей для аппроксимации пространственных производных и вычисления давления, которое является неотъемлемой частью всей вычислительной процедуры в целом.

Для КГидД системы уравнение Пуассона для давления непосредственно следует из уравнения неразрывности. Действительно, подставляя в уравнение неразрывности (5) выражение (8) для \mathbf{w} , сразу получаем уравнение для давления при постоянных значениях ρ_0 и τ :

$$\frac{1}{\rho_0} \Delta p = -\operatorname{div}[(\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{u}] + \frac{1}{\tau} \operatorname{div} \mathbf{u} - \operatorname{div}(\beta \mathbf{g}(T - T_0)). \quad (9)$$

Обратим внимание на то, что уравнение (9) отличается от уравнения (4) наличием слагаемого с коэффициентом $1/\tau$ в правой части.

Граничные условия для давления в этом случае являются прямым следствием поставленных в задаче граничных условий для векторов скорости \mathbf{u} и добавки к скорости \mathbf{w} . Например, для твердой непроницаемой стенки в качестве граничного условия можно поставить равенства нулю нормальной к границе компоненты скорости $\mathbf{u}_n = 0$ и $\mathbf{w}_n = 0$. Из этих двух условий непосредственно следует граничное условие для давления в виде

$$\nabla p = -\rho_0 \beta \mathbf{g}(T - T_0). \quad (10)$$

Для проведения расчетов с применением КГидД системы необходимо подбирать параметр регуляризации τ . Его величину удобно связать с характерным гидродинамическим временем задачи, которое обозначим τ_0 . Характерное время в задачах вынужденной конвекции можно определить через коэффициент кинематической вязкости ν и характерную скорость u_0 в размерном виде как

$$\tau_0 = \nu / u_0^2. \quad (11)$$

Параметр τ имеет порядок характерного времени τ_0 . При слишком больших значениях τ слагаемые, пропорциональные этому коэффициенту (регуляризаторы), начинают доминировать, что приводит к разрушению численного решения. Если τ слишком мало, то для устойчивости численного решения требуется неприемлемо малый шаг по времени. Как показывает опыт вычислений, начиная с некоторого значения уменьшение параметра τ переста-

ет влиять на точность численного решения. Выбор параметра регуляризации определяет устойчивость алгоритма, его точность и трудоемкость, поэтому в расчете следует подбирать его оптимальное значение.

Как показывает вычислительная практика, шаг интегрирования по времени, обеспечивающий условную устойчивость разностного алгоритма, не должен превосходить величину τ и часто выбирается в виде $\Delta t = \tau / 2$.

Для численного решения системы (1)–(3) применялся ее регуляризованный аналог в виде (5)–(7). Пространственная аппроксимация строится с помощью метода конечных объемов с аппроксимацией для всех пространственных производных с помощью центральных разностей. В разностном алгоритме используется явная разностная схема для всех слагаемых кроме слагаемых с молекулярной вязкостью, для которых используется неявный итерационный метод [15, с.665]. Этот метод включен как один из базовых элементов в комплекс OpenFOAM. КГидД алгоритм не включает в себя лимитеров и других ограничителей потока, и устойчивость алгоритма обеспечивает искусственная τ -диссипация, нелинейная структура которой подстраивает ее величину в зависимости от градиентов численного решения.

Опыт использования КГидД уравнений для задач моделирования нестационарных течений вязкой несжимаемой жидкости достаточно обширен, см., например, [11,13,14], где приведены результаты расчетов в рамках исследовательских кодов. В [16–18] приведены результаты расчетов, полученных с помощью КГидД алгоритма в рамках открытого пакета OpenFOAM. В [16,17] описаны детали реализации алгоритма на пространственных неструктурированных сетках и его преимущества по сравнению с другими вычислительными ядрами, включенными в этот пакет.

Отметим, что уравнение теплопроводности в КГидД системе, реализованное в настоящее время в решателе на базе открытой платформы OpenFOAM, включает в себя дополнительное по сравнению с (7) слагаемое в правой части и имеет вид

$$\partial T / \partial t + \text{div}(\mathbf{u}T) = \text{div}(\mathbf{w}T) + \chi \Delta T + \text{div}(\tau \mathbf{u}(\mathbf{u} \cdot \nabla T)). \quad (12)$$

Впервые такой вид регуляризации для уравнения переноса был предложен в [19] в рамках приближения мелкой воды. Для моделирования течений смеси двухкомпонентного газа [20] успешно применялся вид регуляризации типа (12) для расчета переноса плотностей отдельных компонент смеси.

2. Постановка задачи

Для демонстрации работы алгоритма используется упрощенный вариант геометрии тигля, схема которого приведена на рис.1. Для расчета взяты

параметры тигля [8,9]: высота внешнего цилиндра $H=0.1$ м, диаметр цилиндра равен $D=2R=0.15$ м. Тигель вращается с постоянной угловой скоростью $\omega_1=5$ об/мин= 0.52 рад/с, кристалл вращается в противоположном направлении с угловой скоростью $\omega_2=-10$ об/мин= 1.04 рад/с. Диаметр кристалла взят из реальных технологических размеров равным 0.0508 м [9]. Близкие по своей геометрии задачи представлены в [7]. Сразу отметим, что в рамках применения пакета OpenFOAM и решателя на основе КГидД уравнений построение сетки и расчет варианта с требуемой геометрией не представляет сложности.

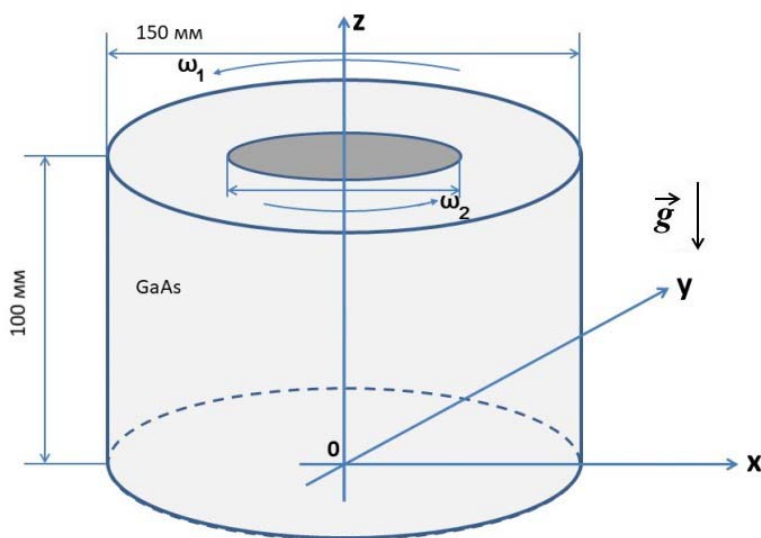


Рис.1. Упрощенная схема тигля, используемая в расчете.

Расчетная область в упрощенной постановке представляет из себя цилиндр, в котором боковая поверхность, соединенная с дном, вращается с угловой скоростью ω_1 . В тигель помещен расплав арсенида галлия GaAs. На верхней поверхности темным цветом обозначена область роста кристалла. Кристалл вращается в противоположную сторону с угловой скоростью ω_2 . Кольцевая область между вращающимися в разные стороны тиглем и кристаллом является свободной поверхностью. В начальный момент времени жидкость неподвижна. Боковая и нижняя поверхности тигля являются непроницаемыми стенками. Система находится в поле силы тяжести $g=9.81$ м/сек².

Предполагается, что расплав GaAs в тигле в начальный момент времени имеет температуру плавления 1511 К, давление равно атмосферному. Начальные условия задачи представлены в табл.1.

Таблица 1. Начальные условия расчета.

Давление p	Скорость U	Температура T
10^6 Па	(0,0,0)	1511К

В начальный момент расплав неподвижен и вслед за тиглем и кристаллом за счет вязкости вовлекается во вращение.

Температура стенок тигля в технологической установке поддерживается в необходимом для работы режиме за счет притока тепла извне, в упрощенной постановке стенки и дно выбраны адиабатическими. Свободная поверхность расплава также полагается адиабатической, поскольку в экспериментальных условиях на поверхности имеется слой пены, который затрудняет отток тепла в атмосферу. Поверхность кристалла поддерживается более холодной, чем расплав, с температурой 1500К.

Для скорости на свободной поверхности ставится условие непротекания со скольжением, на твердых стенках тигля и кристалла ставятся условия прилипания к вращающимся поверхностям тигля и кристалла.

Для давления на твердых границах расчетной области ставятся дополнительные граничные условия вида (10), которые обеспечивают отсутствие потока массы через эти границы. На боковых вертикальных твердых стенках эти условия вырождаются в условие равенства нулю нормальной к боковой стенке производной давления $\partial p / \partial \mathbf{n} = 0$, на горизонтальных твердых стенках условие принимает вид $\partial p / \partial z = -\beta \rho_0 g (T - T_0)$. Здесь $T_0 = 1511\text{К}$. На свободной поверхности расплава поддерживается атмосферное давление. Список граничных условия для давления, скорости и температуры приведен в табл.2.

Таблица 2. Граничные условия для основных гидродинамических величин.

	Тигель	Кристалл	Свободная поверхность
Давление p	$\frac{\partial p}{\partial \mathbf{n}} = -\beta \rho_0 \mathbf{g}(T - T_0)$	$\frac{\partial p}{\partial \mathbf{n}} = -\beta \rho_0 \mathbf{g}(T - T_0)$	10^6 Па
Скорость \mathbf{U}	$\omega_1 = 0.52 \text{ рад/с}$	$\omega_2 = -1.04 \text{ рад/с}$	$\mathbf{u}_z = 0, \partial \mathbf{u}_x / \partial z = \partial \mathbf{u}_y / \partial z = 0$
Температура T	$\partial T / \partial \mathbf{n} = 0$	1500К	$\partial T / \partial \mathbf{n} = 0$

3. Особенности реализации расчета в пакете OpenFOAM

Вычислительный шаблон с рассматриваемой задачей и описанием ее решения, рассчитанного солвером `mulesQHD Foam`, находится в свободном доступе на https://github.com/m-ist/Chochralsky_mulesQHDFoam [21,22].

При численном моделировании течения вязкой несжимаемой жидкости с тепловой конвекцией с помощью солвера `mulesQHDFoam`, имплементированного в открытый программный комплекс OpenFOAM, используются величины в размерном виде в системе Си. Соответствующие величины для GaAs приведены в табл.3. Заметим, что значение молярной массы в решателях на базе QHDFoam не используется, хотя формально эту величину следует указать.

Таблица 3. Параметры расплава GaAs в размерном виде.

Молярная масса М	144.6446 г/моль
Динамическая вязкость	0.00279 кг/(м*сек)
Кинематическая вязкость	$0.49 \cdot 10^{-6}$ м ² /с
Теплопроводность при температуре расплава	0.178 Вт/(см*К)
Коэффициент теплового расширения расплава β	$1.87 \cdot 10^{-4}$ К ⁻¹
Число Прандтля Pr	0.068
Плотность ρ_0	5720.0 кг/м ³
Теплоемкость при постоянном давлении Cp	434.0 Дж/(кг*К)

Граничные условия для гидродинамических величин задаются в соответствующих словарях папки 0/. Граница разбита на три области: тигель, кристалл и свободная поверхность (табл.4).

Таблица 4. Задание граничных условий в кейсе Chochralsky_mulesQHDFoam.

	Тигель (outerCylinder)	Кристалл (disk)	Свободная поверхность (outlet)
p	qhdFlux	qhdFlux	10^6 Па
U	outerCylinder {type rotatingWallVelocity; origin (0 0 0); axis (0 0 1); omega 0.52;}	Disk {type rotatingWallVelocity; origin (0 0 0); axis (0 0 1); omega -1.04;}	Slip
T	$\partial T / \partial \mathbf{n} = 0$	1500K	$\partial T / \partial \mathbf{n} = 0$

Для проведения тестового расчета была построена наиболее простая пространственная сетка, которая является структурированной, большинство ячеек сетки имеет форму прямоугольного параллелепипеда с близкими по длине сторонами.

На рис.2 слева представлены расчетные сетки на поверхности тигля и кристалла, справа – расчетная поверхность, дополненная свободной поверхностью. Кристалл в данной реализации имеет высоту в 3 ячейки сетки.

Расчетная сетка построена с помощью утилит blockMesh и snappyHexMesh. Цилиндрические тигель и кристалл задаются в разделе geometry с соответствующими радиусами. С применением утилиты topoSet определяются соответствующие грани свободной поверхности, тигля и кристалла. Общее количество ячеек расчетной сетки имеет порядок 7000.

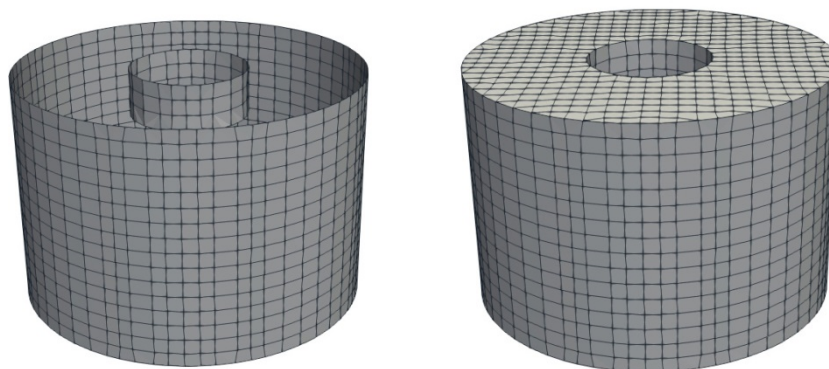


Рис.2. Виды расчетной сетки на границах расчетной области.

Расчётный случай с рассматриваемой задачей, вычисленный солвером `mulesQHDFoam`, можно скачать [22] и произвести расчет с другими параметрами задачи. В папке `0/` можно менять скорости вращения тигля и кристалла, сделать тигель изотермическим или задать постоянный приток тепла на стенках, задать нужное внешнее относительное давление. В папке `constant/thermophysicalProperties` в разделе `QGD` можно варьировать параметр регуляризации τ . Также в этой папке можно задать параметры для другого расплава в тигле, задав ρ_0 , C_p , μ , Pr и β . В папке `system/snappyHexMesh` задаются параметры цилиндров тигля и кристалла, положение и радиус которых можно менять. Параметры пространственной сетки можно изменять в разделе `refinementSurfaces`. В папке `system/controlDict` задана функция с записью полей скорости, давления и температуры в контрольных точках.

Уравнение для давления решается с помощью стандартного метода сопряженных градиентов с предобуславливателем PCG.

В соответствии с данными табл.3 оценим величину параметра регуляризации. В качестве характерной скорости выберем скорость вращения тигля $u_0 = \omega_1 R = 3.9 \cdot 10^{-2}$ м/сек. Тогда оценка для параметра регуляризации τ имеет вид $\tau_0 = \nu / u_0^2 = 3.3 \cdot 10^{-4}$ сек.

4. Результат расчета

В приведенных далее расчетах параметр τ был выбран больше, чем его оценочное значение, и равным 0.001сек. Расчет проводился с шагом $\Delta t = 5 \cdot 10^{-4}$ сек до времени $t=1200$ сек, что соответствует 100 оборотам тигля.

Анализ полученных результатов показывает, что температура, скорость и давление в расплаве демонстрируют нестационарное поведение. Пример зависимости от времени для температуры и компоненты скорости u_x в точке, расположенной вблизи нижней поверхности растущего кристал-

ла на интервале времени от 0 до 600 сек, приведены на рис.3. Из рисунка следует, что начиная примерно с 50–60 секунд, это соответствует 5 оборотам тигля, картина течения становится устойчиво нестационарной.

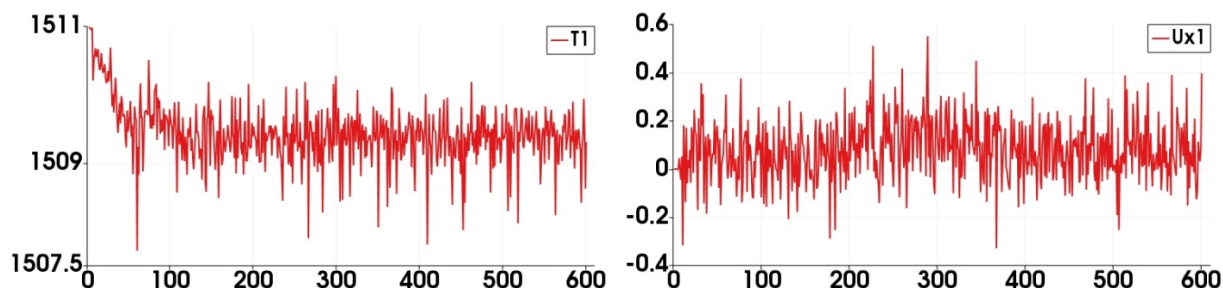


Рис.3. Пример зависимости от времени для температуры (слева) и компоненты скорости u_x (справа).

В качестве примера структуры течения на рис.4 приведены мгновенные траектории частиц в тигле в последовательные моменты времени с интервалом в 1 сек.

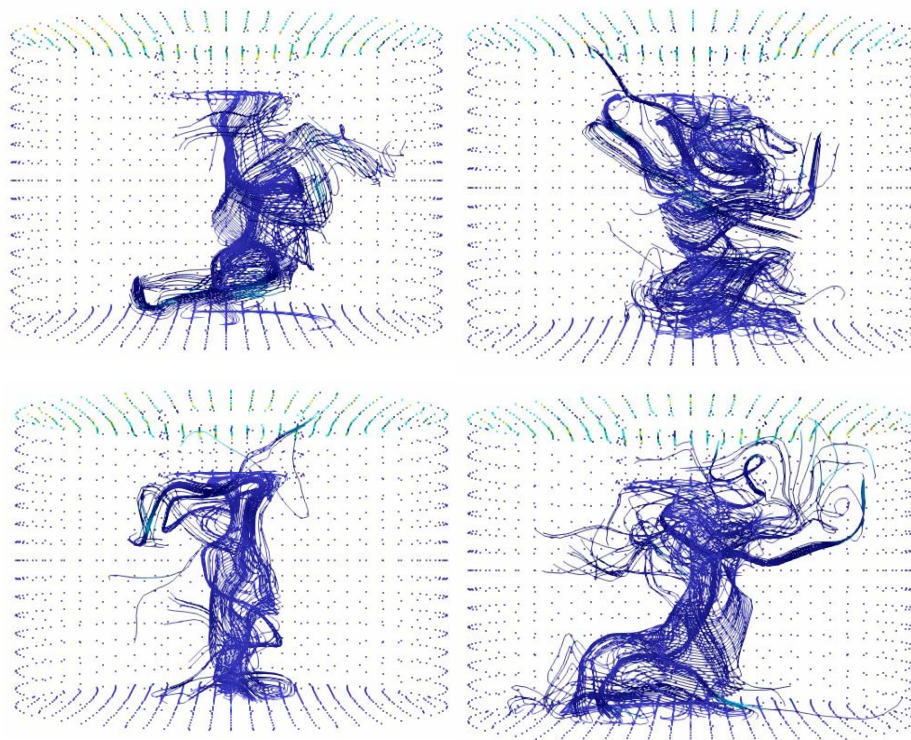


Рис.4. Пространственная картина мгновенных траекторий частиц в моменты времени $t=588, 589, 590$ и 591 с.

Из приведенных рисунков видно, что в отдельные моменты времени в поле течения формируется картина, напоминающая тороидальный вихрь и демонстрирующая опускание охлажденной жидкости под кристаллом вниз. Именно такое течение предполагается в качестве стационарного распределения скоростей в задаче Чохральского в целом ряде работ при моделиро-

вании задачи в стационарном осесимметричном приближении, см., например, [8,9] и оценки, сделанные в [7] и библиографиях к этим работам. Однако вынужденная конвекция при больших числах Рейнольдса делает такое течение неустойчивым и превращает его в хаотическое.

Для того чтобы оценить поле течения во всем объеме и величины скоростей, на рис.5 представлены распределения модуля скорости для пяти сечений по оси z на два момента времени, соответствующих 10 и 50 оборотам тигля. Максимальный модуль скорости не превышает 0.44 м/сек. Из рисунков следует, что течение несимметрично и нестационарно как после 10 оборотов тигля, так и после 50.

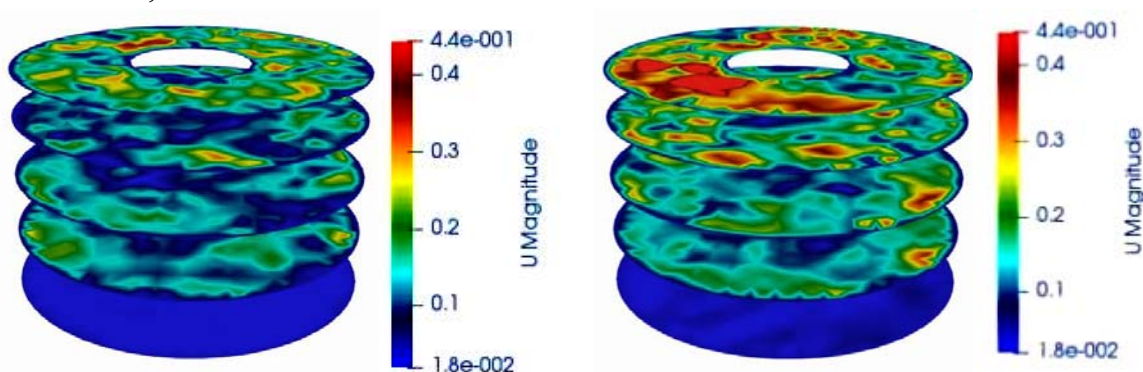


Рис.5. Модуль скорости для 5 срезов, соответствующих $z=0.001, 0.025, 0.05, 0.075$ и 0.095 в моменты времени $t = 120, 600$ сек, что составляет 10 и 50 оборотов тигля.

Однородность выращиваемого кристалла в значительной степени определяется распределением скоростей и температур в непосредственной близости от его нижней поверхности. Для формирования высококачественного кристалла желательно иметь как можно более однородный фон температуры и скоростей вблизи его растущей поверхности, что обеспечивает формирование плоского фронта кристаллизации.

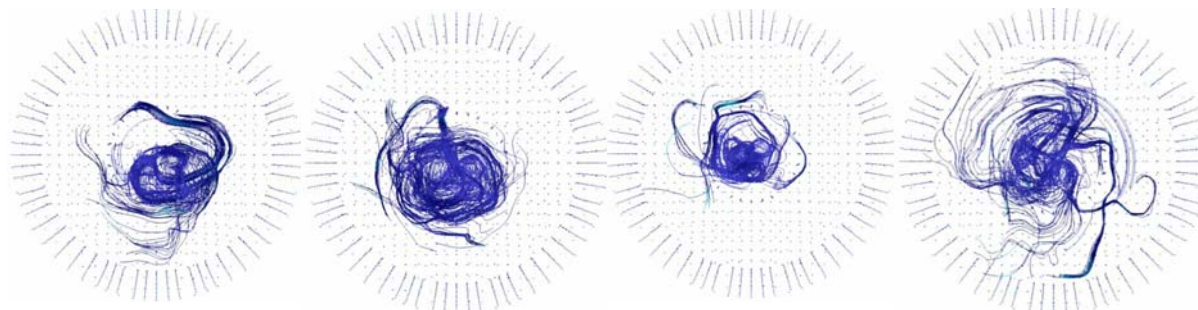


Рис.6. Траектории частиц в азимутальной плоскости в последовательные моменты времени с интервалом в 1 сек.

На рис.6 представлены мгновенные траектории частиц и распределения температуры в сечении $z=0.076$, расположенном в азимутальной плоскости непосредственно под нижней поверхностью кристалла на те же мо-

менты времени, что и на рис.5. Наблюдается хаотическое распределение спиральных вихрей с небольшими скоростями потока.

Распределения температуры под кристаллом при $z=0.076$ в моменты времени 120 и 600 сек представлены на рис.7. Поверхность кристалла расположена в плоскости $z=0.08$. Рисунок показывает, что распределение температуры нестационарно и от края кристалла до его центра меняется на величину около 2 градусов.

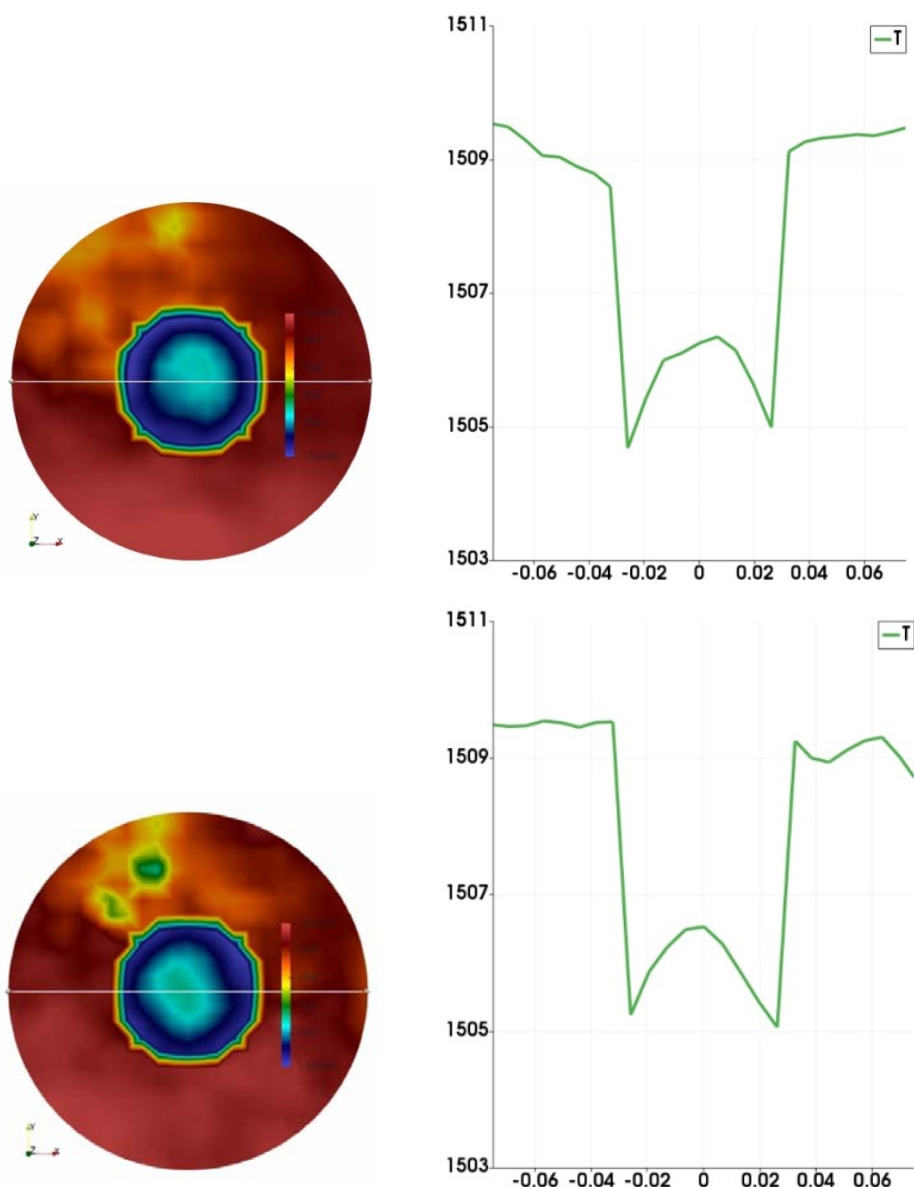


Рис.7. Распределения температуры в моменты времени $t=120$ (вверху) и 600 с (внизу). Слева – в срезе под кристаллом ($z=0.076$), справа – вдоль оси x .

Поле модуля скорости, построенное в плоскости z, x для мгновенной и осредненной по времени картин течения представлено на рис.8. Осреднение выполнялось от 600 до 1200 сек с шагом $\Delta t=1$ сек. Полученное поле течения

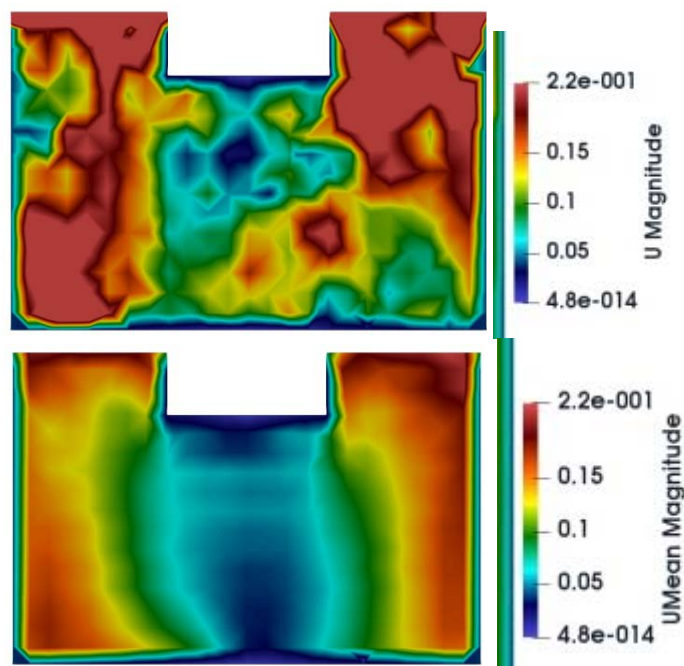


Рис.8. Модуль скорости для мгновенного (вверху) и осредненного (внизу) течения. Время осреднения 600 сек.

показывает, что мгновенное распределение имеет хаотичный характер, а осредненное течение в целом имеет структурированную форму, где некоторая несимметричность может быть связана с несимметричностью пространственной сетки. В структуре осредненного течения прослеживается цилиндрический вихрь, ось которого совпадает с осью вращения тигля и кристалла, а основания расположены под кристаллом и на дне тигля. Скорости в зоне вихря меньше, чем вблизи стенок тигля.

5. Заключительные замечания

В работе впервые приведено описание численного эксперимента по моделированию трехмерного нестационарного течения расплава с применением КГидД алгоритма. Параметры расчета соответствуют реально используемым установкам. Получено, что течение в расплаве является несимметричным и нестационарным, в отличие от предположений, использованных для этой задачи многими авторами. Полученный тип течения определяется присутствием процессу числами Рейнольдса и Грасгофа. Число Рейнольдса, вычисленное по скорости вращения тигля, соответствует развитому турбулентному режиму течения $Re = (u_0 R) / \nu \sim 6 \cdot 10^5$. Оценка для числа Грасгофа дает величину $Gr = (\beta g \Delta T R^3) / \nu^2 \sim 3.4 \cdot 10^6$. Такое число Грасгофа соответствует режиму развитой тепловой конвекции, то есть варианту, когда перенос тепла за счет гравитационной конвекции преобладает над теплопереносом

за счет теплопроводности. Относительная роль гравитационной конвекции по сравнению с вынужденной конвекцией в переносе тепла определяется параметром $\gamma = Gr / Re^2$. При $\gamma > 1$ преобладает тепловая конвекция, в противоположном случае преобладает вынужденная конвекция, вызванная вращением тигля и кристалла. В данном примере $\gamma = 10^5$ и перенос тепла за счет перепада температур мал. Поэтому в расчетах роль гравитационной конвекции можно не учитывать. Однако в представленном примере моделирования включены все тепловые процессы. Число Рэлея, которое часто используется при анализе свойств течения, составляет $Ra = Pr \cdot Gr = 2.3 \cdot 10^5$.

В численных экспериментах [7] проведено моделирование серии течений расплава в постановках, близких к описанным в настоящей работе. Использовалась пространственная сетка в (r, z, θ) геометрии с аппроксимацией пространственных производных не ниже второго. Для режимов при $Gr > 2 \cdot 10^6$ и $Re > 2000$ наблюдаются нестационарные периодические течения различного вида с отклонением от осевой симметрии. Этот факт качественно соответствует приведенным выше результатам.

Опыт двадцатилетнего использования КГидД алгоритма и его тестирования показывает, что метод монотонно сходится при сгущении пространственной сетки, метод условно устойчив при адекватном выборе параметра регуляризации, при уменьшении параметра регуляризации его точность не меняется, но требует уменьшения шага по времени. Эти исследования проводились ранее для тестовых примеров и для данного расчета не представлены.

Изложенное в работе детальное описание расчета в рамках открытого программного комплекса OpenFOAM позволит заинтересованным пользователям подготовить программный вариант и провести свои расчеты задач указанного типа, используя описанный в работе пример в качестве базового. Заметим, что на приведенной сетке время расчета 100 оборотов тигля составляет порядка 10 часов на 12 ядрах многопроцессорного комплекса К100, установленного в ИПМ им. М.В. Келдыша РАН.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц. Теоретическая физика: Учебное пособие. В 10 т. Т. VI. Гидродинамика. 3-е изд., перераб. – М.: Наука. Гл. ред. физ.-мат. лит., 1986, 736с.;
L.D. Landau, E.M. Lifshits. Fluid Mechanics. V.6. – Butterworth-Heinemann, 1987.
2. В.М. Пасконов, В.И. Полежаев, Л.А. Чудов. Численное моделирование процессов тепло- и массообмена. – М.: Наука, 1984.
V.M. Paskonov, V.I. Polezhaev, L.A. Chudov. Chislennoe modelirovanie protsessov teplo- i mascoobmena. – M.: Nauka, 1984.

3. *В.С. Бердников, В.И. Полежаев, А.И. Простомолотов.* Течение вязкой жидкости в цилиндрическом сосуде при вращении диска // Изв. АН СССР, МЖГ, 1985, (5), с.33-4
V.S. Berdnikov, V.I. Polezhaev, A.I. Prostomolotov. Viscous flow in a cylindrical vessel in the presence of a rotating disk // Fluid Dynamics, 1985, v.20, p.690-697; <https://link.springer.com/article/10.1007/BF01050080>
4. *М.П. Марченко, А.С. Сенченков, И.В. Фрязинов.* Математическое моделирование процесса роста кристаллов из раствора-расплава методом движущегося нагревателя // Матем. моделирование, 1992, т.4, № 5, с.67–79;
M.P. Marchenko, A.S. Senchenkov, I.V. Friazinov. Matematicheskoe modelirovanie processa rosta kristallov iz rastvora-rasplava metodom dvizhushchegosia nagrevatelja // Matem. modelirovanie, 1992, t.4, № 5, s.67–79;
5. *Н.В. Никитин, С.А. Никитин, В.И. Полежаев.* Конвективные неустойчивости в гидродинамической модели роста кристаллов методом Чохральского // Успехи механики, 2003, 2 (4), с.63-105;
N.V. Nikitin, S.A. Nikitin, V.I. Polezhaev. Konvektivnye neustoichivosti v gidrodinamicheskoi modeli rosta kristallov metodom Chokhralskogo // Uspekhi mekhaniki, 2003, 2 (4), s.63-105;
6. *О.А. Бессонов, В.И. Полежаев.* Нестационарные неосесимметричные течения в гидродинамической модели метода Чохральского при больших числах Прандтля // Изв. РАН, Механика жидкости и газа, 2011, №5, с.16-32;
O.A. Bessonov, V.I. Polezhaev. Unsteady nonaxisymmetric flows in the hydrodynamic Czochralski model at high Prandtl numbers // Fluid Dynamics, 2011, v.46, p.684-698; <https://link.springer.com/article/10.1134/S0015462811050024>
7. *О.А. Бессонов.* Влияние вращения кристалла и тигля на устойчивость течения в модели метода Чохральского при низких числах Прандтля // Известия РАН. Механика жидкости и газа, 2016, № 4, с.33-43;
O.A. Bessonov. Effect of crystal and crucible rotation on the flow stability in the Czochralski model at low Prandtl numbers // Fluid Dynamics, 2016, v.51(4), p.469-477.
8. *V. Haslavsky, E. Miroshnichenko, E. Kit, A.Yu. Gelfgat.* Comparison and a possible source of disagreement between experimental and numerical results in a Czochralski model // Tech Science Press. 2013, FDMP, 9 (3), с.209-234.
9. *Reza Faiez, Farzad Najafi, Yazdan Rezaei.* Convection interaction in GaAs/LEC growth model // Intern. J. of Computational Eng. Res. 2015, ISSN (e): 5 (7), p.2250-3005.
10. *О.А. Бессонов, В.И. Полежаев.* Конвективные взаимодействия и устойчивость течений в гидродинамической модели метода Чохральского / Актуальные проблемы механики. 50 лет ИПМех им. А.Ю. Ишлинского РАН. – М.: Наука, 2015, с.177-197;
O.A. Bessonov, V.I. Polezhaev. Konvektivnye vzaimodeistviia i ustoichivost techenii v gidrodinamicheskoi modeli metoda Chokhralskogo / Aktualnye problemy mekhaniki. 50 let IPMekh im. A.Yu. Ishlinskogo RAN. – М.: Nauka, 2015, s.177-197;
11. *Ю.В. Шеретов.* Динамика сплошных сред при пространственно-временном осреднении. – М.– Ижевск, 2009.
Iu.V. Sheretov. Dinamika sploshnykh sred pri prostranstvenno-vremennom osrednenii. – М.– Izhevsk, 2009.
12. *Ю.В. Шеретов.* Регуляризованные уравнения гидродинамики. – Тверь: Тверской го-

- сударственный университет, 2016.
- Iu.V. Sheretov. Regularizovannye uravneniia gidrodinamiki. – Tver: Tverskoi gosudarstvennyi universitet, 2016.*
13. *Т.Г. Елизарова. Квазигазодинамические уравнения и методы расчета газодинамических течений. – М.: Научный мир, 2007.*
T.G. Elizarova. Quasi-Gas Dynamic equations. – Berlin, Springer, 2009.
 14. *Т.Г. Елизарова, И.С. Калачинская, А.В. Ключникова, Ю.В. Шеретов. Использование квазигидродинамических уравнений для моделирования тепловой конвекции при малых числах Прандтля // ЖВМ и МФ, 1998, т.38 (10), с.1732-1742;*
T.G. Elizarova, I.S. Kalachinskaya, A.V. Kluchnikova, Yu.V. Sheretov. Application of quasi-hydrodynamic equations in the modeling of low-Prandtl thermal convection // J. Computational Mathematics and Mathematical Physics, 1998, v.38, №10, p.1662-1671.
 15. *F. Moukalled, L. Mangani, M. Darwish. Fluid dynamics and its applications. The finite volume method in computational fluid dynamics. An advanced introduction with OpenFOAM and Matlab // Springer, 2015.*
 16. *М.В. Крапошин, Д.А. Рязанов, Т.Г. Елизарова. Numerical algorithm based on regularized equations for incompressible flow modeling and its implementation in OpenFOAM, Computer Physics Communications, 2022, v.271, 108216.*
 17. *Д.А. Рязанов. Квазигидродинамический алгоритм в задаче моделирования аттракторов внутренних волн // Матем. моделирование, 2021, т.33, №12, с.3-20. DOI: <https://doi.org/10.2948/mm-2021-12-01>.*
D.A. Ryazanov. Quasi-Hydrodynamic Approach for Simulating Internal Wave Attractors // MM&CS, 2022, v.14, p.547–558. <https://doi.org/10.1134/S2070048222040093>.
 18. *Т.В. Стенина, Т.Г. Елизарова, М.В. Крапошин. Регуляризованные уравнения гидродинамики в задаче моделирования дискового насоса и их реализация в рамках программного комплекса Open FOAM // Препринты ИПМ им. М.В. Келдыша, 2020, №66, 30 с. <https://library.keldysh.ru/preprint.asp?id=2022-66>;*
 19. *Т.Г. Елизарова, А.В. Иванов. Численное моделирование переноса пассивного скаляра в мелкой воде с использованием квазигазодинамического подхода // ЖВМиМФ, 2020, т.60 (7), с.1248-1267;*
D.A. Elizarova, A.V. Ivanov. Numerical Modeling of Passive Scalar Transport in Shallow Water Based on the Quasi-Gasdynamic Approach // Computational Mathematics and Mathematical Physics, 2020, v.60, № 7, p.1208–1227. ISSN 0965-5425, 2020.
 20. *Е.В. Шильников, Т.Г. Елизарова. Квазигазодинамическая модель и численный алгоритм для описания смесей разнородных флюидов // ЖВМиМФ, 2023, т.63, v.7, с.114-127.*
E.V. Shilnikov, T.G. Elizarova. Kvizigazodinamicheskaiia model i chislennyi algoritm dlia opisaniia smesei raznorodnykh fluidov // ZhVMiMF, 2023, t.63 (7), s.114-127.
 21. <https://github.com/unicfdlab/QGDsolver>.
 22. https://github.com/m-ist/Chochralsky_mulesQHDFoam.

Поступила в редакцию 15.05.2023

После доработки 19.06.2023

Принята к публикации 03.07.2023