

На правах рукописи

Пивоваров Юрий Владимирович

МОДЕЛИРОВАНИЕ КОНВЕКЦИИ РАСПЛАВА
ПОЛУПРОВОДНИКОВОГО МАТЕРИАЛА
ПРИ ЗОННОЙ ПЛАВКЕ

05.13.18 — математическое моделирование, численные
методы и комплексы программ

АВТОРЕФЕРАТ
диссертации на соискание ученой степени
кандидата физико-математических наук

Новосибирск — 2006

Работа выполнена в Институте гидродинамики им. М. А. Лаврентьева
СО РАН.

Научный руководитель: доктор физико-математических наук,
профессор Воеводин Анатолий Федорович

Официальные оппоненты: доктор физико-математических наук
Попов Владимир Николаевич
доктор физико-математических наук,
профессор Хакимзянов Гаяз Салимович

Ведущая организация: Институт вычислительного моделирования
СО РАН, г. Красноярск

Защита состоится ___ декабря 2006 года в ___ часов на заседании
диссертационного совета Д 003.046.01 при Институте вычислительных
технологий СО РАН по адресу: 630090, г. Новосибирск, пр. Академика
М. А. Лаврентьева, 6.

С диссертацией можно ознакомиться в читальном зале вычислительной
математики и информатики отделения ГПНТБ.

Автореферат разослан ___ ноября 2006 г.

Учёный секретарь диссертационного совета
доктор физико-математических наук,
профессор

Л.Б. Чубаров

ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

Актуальность темы. Зонная плавка — кристаллографический метод рафинирования материалов, состоящий в перемещении узкой расплавленной зоны вдоль длинного твердого стержня из рафинируемого материала. В диссертации рассматриваются два варианта зонной плавки.

1 вариант: бестигельная зонная плавка (БЗП) в магнитном поле (МП), применяемая, в частности, для выращивания монокристаллов кремния большого радиуса (более 5 см). Верхняя (заготовка) и нижняя (выращиваемый монокристалл) части вертикального цилиндрического образца медленно движутся вниз и вращаются в противоположных направлениях с разными угловыми скоростями. Часть нижней границы заготовки покрыта жидкой пленкой, остальная часть граничит с плавающей зоной, находящейся между заготовкой и монокристаллом, поддерживаемой в жидком состоянии неподвижным источником высокочастотного электромагнитного поля — индуктором, и удерживаемой между твердыми частями образца силами поверхностного натяжения и магнитного давления. Токи, наводимые индуктором, сосредоточены в тонком скин-слое, примыкающем к свободной границе расплава. Они приводят к выделению джоулева тепла и создают ponderomotorную силу, направленную ортогонально свободной границе, экспоненциально убывающую при удалении от нее, и являющуюся одним из источников конвекции в расплаве.

Полученные методом БЗП в МП монокристаллы кремния большого радиуса используются в основном в двух направлениях:

- 1) в силовой электронике — создание тиристоров, силовых транзисторов, используемых в мощных силовых преобразователях;
- 2) при изготовлении высокоэффективных солнечных батарей.

2 вариант: зонная очистка поликристаллического полупроводникового материала (в частности, германия). Цилиндрический полый контейнер наполнен полупроводниковым материалом и расположен под небольшим углом к горизонту. Он вращается и одновременно совершает медленное поступательное движение вдоль своей оси, при этом часть его нагревается до высокой температуры. Материал полупроводника плавится. Образуются фронты плавления и кристаллизации. Расплав не целиком заполняет контейнер: имеется свободная поверхность. Предполагается также, что расплав отделяет от стенки контейнера тонкий слой мелкодисперсной смазки.

Очищенный полупроводниковый германий применяется для создания транзисторов и солнечных батарей.

Осесимметричная нестационарная задача о БЗП в МП была численно решена в полной постановке немецким ученым А. А. Мюльбауэром с

четырьмя соавторами в 1995 г. Были рассчитаны характеристики электромагнитного поля, найдены форма границы плавающей зоны, поля скоростей и температуры. При этом, чтобы не слишком мельчить сетку вблизи свободной границы, пондеромоторная сила была снесена из уравнения импульса в граничное условие для вихря. Это удалось сделать в предположении о малости конвективных членов по сравнению с вязкими в уравнении импульса в скин-слое. В 1997 г. А. А. Мюльбауэр с двумя латвийскими учеными рассчитывает распределение примеси в растущем кристалле при БЗП в МП, а в 1999 г. группой немецких и латвийских ученых решается аналогичная задача уже в трехмерной постановке. В 2001 и 2005 гг. решаются осесимметричная и трехмерная задачи о БЗП в МП при наличии дополнительного низкочастотного индуктора, позволяющего получить дополнительное управление процессом.

Однако анализ показывает, что указанное предположение, сделанное во всех перечисленных работах, на практике не выполняется. Поэтому **актуальной** является разработка модели процесса БЗП в МП с учетом пондеромоторной силы не в граничном условии, а в уравнении для вихря (уравнении импульса).

Во втором варианте зонной плавки течение является существенно трехмерным и весьма сложным. Прямой его расчет — очень трудная задача. Поэтому для эффективного расчета гидродинамики расплава область течения предлагается разделить на ядро, где продольная компонента скорости мала и движение в первом приближении можно считать плоским, и пограничные слои возле фронтов плавления и кристаллизации. В диссертации рассматривается только течение в ядре, то есть решается задача о плоскопараллельном стационарном движении вязкой несжимаемой жидкости в горизонтальном цилиндрическом вращающемся контейнере. В имеющейся литературе рассматривался лишь случай, когда жидкость целиком покрывает стенки контейнера, то есть область течения является двусвязной, а на твердой границе жидкость прилипает к стенкам. Поэтому **актуальной** является задача о движении жидкости во вращающемся контейнере для случая, когда область течения является односвязной, что соответствует экспериментальным условиям во втором варианте зонной плавки, а на границе с твердой стенкой ставятся условия проскальзывания, моделирующие действие слоя мелкодисперсной смазки.

Цель работы: осуществить математическую формулировку задач, разработать численные алгоритмы и произвести численные расчеты движения расплава при БЗП в МП и во вращающемся контейнере.

Научная новизна. В работе впервые

- решена гидродинамическая часть задачи о БЗП в МП с учетом пондеромоторной силы в уравнении для вихря;
- выведены уравнения осесимметричного движения жидкости с переменной вязкостью для вихря и азимутальной компоненты скорости в дивергентной форме в ортогональных переменных;
- реализована консервативная монотонная разностная схема при решении задачи о БЗП в МП на ортогональной сетке, полученной с помощью конформного отображения прямоугольника на область, занятую расплавом;
- численно и аналитически решена задача о движении жидкости во вращающемся контейнере для случая, когда область течения является в первом приближении сегментом круга.

Достоверность численных результатов обосновывается тестовыми расчетами с проверкой на сходимость к точному решению задачи, если такое имеет, и на сходимость "в себе" в противном случае.

Научная и практическая ценность. Работа представляет собой существенное продвижение на пути к построению полных двумерных моделей процессов зонной плавки, которые могут использоваться для оптимизации этих процессов.

Методы исследования. При численном решении задач расчета конвекции при обоих вариантах зонной плавки использовался конечно-разностный метод переменных направлений. При построении асимптотики вихря и функции тока в окрестности угловых точек области и построении аналитических решений при втором варианте зонной плавки использовался метод интегральных уравнений. При аналитическом решении задачи для определения формы свободной границы — метод функции Грина.

Апробация работы. Результаты работы докладывались на Всесоюзном семинаре по математическому моделированию процессов кристаллизации (Рига, 1989 г.), на десятой Зимней Школе по механике сплошных сред (Пермь, 1995 г.), на третьей Сибирской школе-семинаре "Математические проблемы механики сплошных сред" (Новосибирск, 1999 г.), на Всероссийской конференции "Теория и приложения задач со свободными границами" (Бийск, 2002 г.), на семинаре отдела прикладной гидродинамики Института гидродинамики им. М. А. Лаврентьева СО РАН и на объединенном семинаре "Информационно-вычислительные технологии" под руководством академика Ю. И. Шокина и профессора В. М. Ковени в Институте вычислительных технологий СО РАН. .

Публикации. По теме диссертации опубликовано 7 печатных работ. Из них 4 — в изданиях, рекомендуемых ВАК для представления

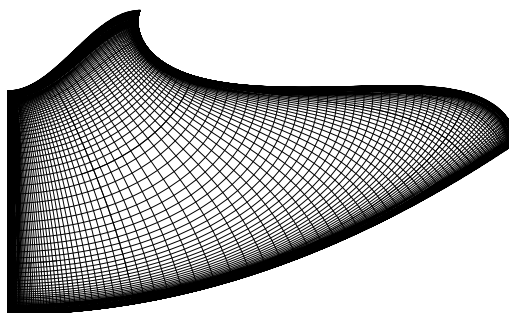


Рис. 1

основных результатов диссертации (в журнале "Вычислительные технологии"), 1 — монография, в которой 5 глава написана лично автором, и 2 статьи в сборниках. Все публикации в журналах — без соавторов.

Структура и объем диссертации. Диссертация состоит из введения, 4 глав, заключения и списка литературы. Работа изложена на 135 страницах, содержит 19 рисунков. Список литературы содержит 67 наименований.

СОДЕРЖАНИЕ РАБОТЫ

Во введении диссертации обосновывается актуальность темы диссертации и кратко излагаются результаты, полученные в работе.

В главе 1 строится последовательность ортогональных разностных сеток применительно к задаче о БЗП в МП с помощью конформного отображения прямоугольника на заданный криволинейный четырехугольник методом В. А. Веретенцева (1989 г.). Форма области при этом берется близкой к рассчитанной А. А. Мюльбауэром в 1995 г. (Она удовлетворительно согласуется с результатами экспериментальных измерений.) На рис. 1 приведена сетка максимальной размерности — 120×120 . Она сильно сгущается как в окрестности свободной (правой) границы, где действует пондеромоторная сила и выделяется джоулево тепло, так и в окрестности остальных границ, где образуются пограничные слои.

В главе 2 производится расчет осесимметричной нестационарной конвекции жидкого кремния в плавающей зоне при заданной форме ее границы на построенной в главе 1 последовательности ортогональных разностных сеток.

В разделе 2.1 приводятся значения размерных параметров задачи. Плотность ρ и поверхностное натяжение σ расплава считаются линейными функциями температуры T (переменность плотности учитывается в приближении Буссинеска). Кроме того, ρ терпит скачек при фазовом переходе. Кинематическая вязкость представляется функцией вида

$$\nu(T) = a_\nu + b_\nu/(T - c_\nu).$$

В разделе 2.2 приводятся используемые в дальнейшем безразмерные критерии подобия. При этом в качестве масштабов длины, скорости, времени, вязкости и температуры выбираются соответственно $l = 1.5$ см, $v_1 = 10$ см/с, $l/v_1 = 0.15$ с, $\nu_m = 3.2 \cdot 10^{-3}$ см²/с и $\Delta T = 50$ К.

В разделе 2.3 рассматривается электромагнитная часть задачи.

В силу условий задачи в уравнениях Максвелла отбрасывается ток смещения, а в законе Ома не учитывается движение среды. Электромагнитное поле проникает в расплав на расстояние порядка толщины скин-слоя $\varepsilon_m = 0.0285$ см. Средние по периоду колебаний тока во времени нормальная \bar{f}_n и касательная \bar{f}_s к свободной границе Γ плавающей зоны составляющие вектора пондеромоторной силы, а также объемная плотность мощности выделяющегося джоулева тепла \bar{q} представимы в виде:

$$\bar{f}_n(s, n) = \frac{H_0^2}{8\pi\varepsilon_m} f_n(s, n), \quad (1)$$

$$\bar{f}_s(s, n) = 0, \quad (2)$$

$$\bar{q}(s, n) = \frac{\omega_0 H_0^2}{8\pi} f_n(s, n), \quad (3)$$

где

$$f_n(s, n) = f(s/s_m) e^{-2n/E_m}, \quad (4)$$

s, n — безразмерные касательная и внутренняя нормаль к Γ , образующие правую систему координат, H_0 — максимум амплитуды колебаний s -й компоненты напряженности магнитного поля на границе Γ $\hat{H}_s|_\Gamma$, $\omega_0 = 1.76 \cdot 10^7$ рад/с — круговая частота тока в индукторе, $s_m = 3$ — безразмерная длина Γ , $E_m = 0.019$ — безразмерная толщина скин-слоя,

$$f(s/s_m) = (\hat{H}_s|_\Gamma)^2 / H_0^2. \quad (5)$$

В диссертации рассматривается 2 варианта задания функции $f(x)$. Первый и второй варианты показаны соответственно кривыми 1 и 3 на рис. 2. Первый вариант использовался также при вычислении формы свободной границы в главе 1. Кривая 2 — форма $f(x)$, вычисленная в

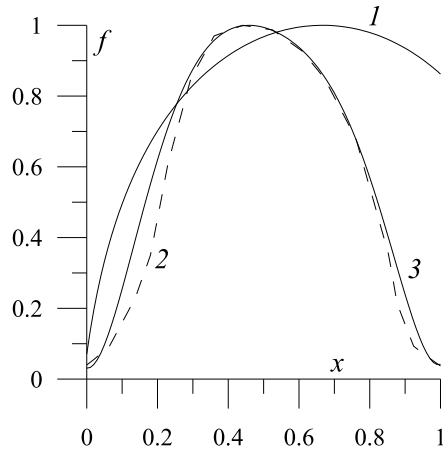


Рис. 2

1991 г. в работе 3-х зарубежных авторов для процесса БЗП в МП при радиусе кристалла 3.8 см.

В разделе 2.4 рассматривается гидродинамическая часть задачи.

Пусть функции $r(x, y)$, $z(x, y)$ осуществляют конформное отображение прямоугольника $0 \leq x \leq 1$, $0 \leq y \leq Y$ на область, занятую расплавом, так, что стороны $x = 0$, $x = 1$, $y = 0$, $y = Y$ прямоугольника переходят соответственно в ось симметрии ($r = 0$) Γ_0 , свободную (правую) границу Γ_m , фронт кристаллизации Γ_c (нижнюю границу расплав – монокристалл) и фронт плавления Γ_f (верхнюю границу расплав – заготовка). Пусть $u(x, y, t)$, $v(x, y, t)$, $w(x, y, t)$ – компоненты скорости расплава в направлениях x , y , φ , где φ – полярный угол цилиндрической системы координат r, z, φ ; r – полярный радиус. Введем функцию тока Ψ и вихрь ω по формулам

$$u = \frac{1}{rH} \frac{\partial \Psi}{\partial y}, \quad v = -\frac{1}{rH} \frac{\partial \Psi}{\partial x}, \quad \omega = \frac{1}{H^2} \left(\frac{\partial(uH)}{\partial y} - \frac{\partial(vH)}{\partial x} \right), \quad (6)$$

где $H = \sqrt{(\partial r / \partial x)^2 + (\partial r / \partial y)^2}$ – коэффициент Ламэ. Введем также модифицированные скорости U , V , W и модифицированный вихрь Ω по формулам

$$W = rw, \quad \Omega = \frac{\omega}{r}, \quad (7)$$

$$U = \frac{\partial \Psi}{\partial y}, \quad V = -\frac{\partial \Psi}{\partial x}. \quad (8)$$

Обозначим

$$\begin{aligned}
F^1 &= \Omega, \quad p^1 = -\frac{1}{Re} \left(2 \frac{\partial r}{\partial x} \nu + r \frac{\partial \nu}{\partial x} \right), \quad q^1 = -\frac{1}{Re} \left(2 \frac{\partial r}{\partial y} \nu + r \frac{\partial \nu}{\partial y} \right), \\
\mu^1 &= \frac{\nu r}{Re}, \quad G^1 = \frac{1}{rH^2} \left[-\frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\partial r}{\partial y} \frac{W^2}{r^3} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\frac{\partial r}{\partial x} \frac{W^2}{r^3} \right) + \right. \\
&+ \frac{2}{Re} \left(\frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\partial \nu}{\partial x} \left(-\frac{1}{H} \frac{\partial u}{\partial y} + \frac{v}{H^2} \frac{\partial H}{\partial x} \right) - \frac{\partial \nu}{\partial y} \left(\frac{1}{H} \frac{\partial v}{\partial y} + \frac{u}{H^2} \frac{\partial H}{\partial x} \right) \right) + \right. \\
&+ \left. \frac{\partial}{\partial y} \left(\frac{\partial \nu}{\partial x} \left(\frac{1}{H} \frac{\partial u}{\partial x} + \frac{v}{H^2} \frac{\partial H}{\partial y} \right) - \frac{\partial \nu}{\partial y} \left(-\frac{1}{H} \frac{\partial v}{\partial x} + \frac{u}{H^2} \frac{\partial H}{\partial y} \right) \right) \right] - \\
&- \frac{Gr}{Re^2} \left(\frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\partial r}{\partial x} T \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\frac{\partial r}{\partial y} T \right) \right) - Eu_m \frac{\partial}{\partial y} (H f_{nxy}), \\
F^2 &= W, \quad p^2 = \frac{2}{Re} \frac{\partial r}{\partial x} \nu, \quad q^2 = \frac{2}{Re} \frac{\partial r}{\partial y} \nu, \quad \mu^2 = \frac{\nu r}{Re}, \\
G^2 &= 0, \quad F^3 = T, \quad p^3 = 0, \quad q^3 = 0, \quad \mu^3 = \frac{r}{Pe}, \quad G^3 = Qe f_{nxy}, \quad (9)
\end{aligned}$$

где $Re = 4688$ — число Рейнольдса, $Gr = 9.703 \cdot 10^5$ — число Грасгофа, $Eu_m = 824.4$ — магнитное число Эйлера, $Pe = 54.37$ — число Пекле, $Qe = 11.10$ — отношение характерных интенсивностей джоулева тепло-выделения и конвективного теплопереноса,

$$\begin{aligned}
f_{nxy}(x, y) &= f_n(s(y), n(x, y)), \quad s(y) = \int_0^y H(1, \tilde{y}) d\tilde{y}, \\
n(x, y) &= H(1, y)(1 - x), \quad (10)
\end{aligned}$$

$f_n(s, n)$ определена в (4).

Тогда уравнения для Ω , W , T можно записать в следующем дивергентном виде

$$\left(\frac{\partial}{\partial t} + L_1^i + L_2^i \right) F^i = G^i, \quad i = 1, 2, 3, \quad (11)$$

где

$$\begin{aligned}
L_1^i F^i &= \frac{1}{rH^2} \left[\frac{\partial((p^i + U)F^i)}{\partial x} - \frac{\partial}{\partial x} \left(\mu^i \frac{\partial F^i}{\partial x} \right) \right], \\
L_2^i F^i &= \frac{1}{rH^2} \left[\frac{\partial((q^i + V)F^i)}{\partial y} - \frac{\partial}{\partial y} \left(\mu^i \frac{\partial F^i}{\partial y} \right) \right]. \quad (12)
\end{aligned}$$

Уравнение для функции тока

$$\frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{1}{r} \frac{\partial \Psi}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\frac{1}{r} \frac{\partial \Psi}{\partial y} \right) = rH^2 \Omega. \quad (13)$$

Граничные условия следующие:

$$\frac{\partial \Omega}{\partial x} = 0, \quad x = 0; \quad \Omega = \frac{Ma}{Re} \cdot \frac{1}{rH\nu} \frac{\partial T}{\partial y}, \quad x = 1 \quad (14)$$

(условие Марангони),

$$\begin{aligned} \Omega &= -(2K_c - Al) \frac{1}{r^2 H} \frac{\partial \Psi}{\partial y} + (2K_c S - Al) \frac{V_c}{rH} \frac{\partial z}{\partial x}, \quad y = 0, \\ \Omega &= -(2K_f + Al) \frac{1}{r^2 H} \frac{\partial \Psi}{\partial y} + (2K_f S + Al) \frac{V_f}{rH} \frac{\partial z}{\partial x}, \quad y = Y \end{aligned} \quad (15)$$

(условия проскальзывания),

$$W = 0, \quad x = 0; \quad \frac{\partial W}{\partial x} - 2 \frac{\partial r}{\partial x} \frac{W}{r} = 0, \quad x = 1 \quad (16)$$

(условие отсутствия касательного напряжения в направлении φ),

$$W = \Omega_c r^2, \quad y = 0, \quad W = \Omega_f r^2, \quad y = Y \quad (17)$$

(условия прилипания),

$$\frac{\partial T}{\partial x} = 0, \quad x = 0; \quad \frac{1}{H} \frac{\partial T}{\partial x} + Bi \left(\frac{T}{T_0} \right)^4 = 0, \quad x = 1 \quad (18)$$

(закон Стефана - Больцмана),

$$T = T_0, \quad y = 0, \quad y = Y, \quad (19)$$

$$\begin{aligned} \Psi &= 0, \quad x = 0, \quad \Psi = -\frac{R_f^2}{2} V_f S, \quad x = 1, \\ \Psi &= -\frac{r^2}{2} V_c S, \quad y = 0, \quad \Psi = -\frac{r^2}{2} V_f S, \quad y = Y, \end{aligned} \quad (20)$$

где $Ma = 2.895 \cdot 10^5$ — число Марангони,

$$K_{c,f} = \frac{1}{H^3} \left(\frac{\partial^2 z}{\partial x^2} \frac{\partial r}{\partial x} - \frac{\partial^2 r}{\partial x^2} \frac{\partial z}{\partial x} \right) \Big|_{\Gamma_{c,f}} \quad (21)$$

— кривизна границ фазового перехода, $Al = 5000$ — параметр проскальзывания, $S = 0.9091$ — отношение плотностей в твердой и жидкой фазах, $V_c = -5.520 \cdot 10^{-4}$, $V_f = -8.085 \cdot 10^{-3}$ — безразмерные скорости протягивания, $\Omega_c = 7.860 \cdot 10^{-2}$, $\Omega_f = 3.240 \cdot 10^{-1}$ — безразмерные скорости вращения, $Bi = 0.7377$ — число Био, $T_0 = 34$ — безразмерная температура плавления, $R_f = 0.8884$ — безразмерная координата r верхней точки трехфазного контакта.

Зададим также начальные условия:

$$\Psi = \Psi_b, \Omega = \Omega_b, W = W_b, T = T_b, t = 0. \quad (22)$$

Итак, задача (8), (11), (13)–(20), (22) служит для определения неизвестных функций Ψ , Ω , U , V , W , T . Компоненты скорости u , v , w восстанавливаются с помощью первых двух равенств (6) и первого равенства (7).

В разделе 2.5 излагается численный алгоритм решения задачи о БЗП в МП. Дифференциальные операторы (12) аппроксимируются монотонными консервативными разностными операторами, имеющими 2-й порядок аппроксимации при малых и первый — при больших числах Рейнольдса и Пекле (Н. И. Булеев, 1989 г.). При решении разностных уравнений используется метод, позволяющий точным образом разделить задачи вычисления вихря и функции тока (А. Ф. Воеводин, 1996 г.). При решении на каждом временном шаге уравнения для функции тока используется эффективный итерационный алгоритм, не требующий информации о свойствах и границах спектра разностного оператора, обобщающий алгоритм В. Г. Зверева (1999 г.).

В разделе 2.6 приводятся результаты тестовых расчетов. Для стационарных уравнений Навье–Стокса в области $0 \leq x \leq 1$, $0 \leq y \leq 1$, имеющих аналитическое решение $\Psi = \sin^2 \pi x \sin^2 \pi y$, при $Re = 0.1$ численное решение сходится к аналитическому со вторым, при $Re = 100$ — с первым порядком, что соответствует теоретическим данным. При $Re = 10\,000$ численное решение не сходится к точному, так как последнее становится неустойчивым, но наблюдается сходимость "в себе" с порядками ниже первого. Для полных стационарных уравнений при $Re = 1$, $Ma = Gr = Eu_m = 0$, $\Omega_c \neq 0$, $\Omega_f \neq 0$ порядки сходимости "в себе" функций Ψ , Ω , W , T , U , V в нормах в C и в L_2 при максимальной размерности сетки 160×320 изменяются в пределах $1.27 \dots 2.32$ и большинство близки к 2 (теоретическое значение). При $Gr = Eu_m = \Omega_c = \Omega_f = 0$, $Ma \neq 0$, $Re = 4688$, $N = M = 120$ порядки сходимости "в себе" функций Ψ , Ω , T , U , V в основном значительно ниже 1 (теоретическое значение). Это может быть объяснено

такими причинами, как недостаточное число разбиений, влияние ошибок округления и др.

В разделе 2.7 приводятся результаты расчета конвекции в плавающей зоне, вызванной такими факторами, как пондеромоторная, термокапиллярная силы, сила плавучести и вращение образца. Конвекцию, вызванную только первым, вторым или третьим факторами, назовем соответственно электроконвекцией, термокапиллярной конвекцией и термогравитационной конвекцией. Конвекцию, вызванную всеми факторами в совокупности, назовем комбинированной конвекцией, а конвекцию, вызванную 3 и 4 факторами — термогравитационной конвекцией с вращением.

При электроконвекции с вторым вариантом задания функции $f(x)$ максимум скорости составляет 38 см/с и достигается на свободной границе, около которой формируется пограничный слой, в котором максимальная скорость уменьшается до 20 см/с. При термокапиллярной конвекции максимум скорости также образуется на свободной границе и составляет 30 см/с, но в пограничном слое он уменьшается на порядок, так что движение внутри области течения очень медленное. При термогравитационной конвекции максимум скорости достигается внутри области и составляет 2.4 см/с. Во всех 3 случаях течение быстро выходит на стационарный режим. Доминирующей из 3 рассмотренных является электроконвекция. При комбинированной конвекции с 1 вариантом задания $f(x)$ движение нестационарно и носит колебательный характер с периодом 0.2 с, а максимум скорости достигается на оси симметрии и составляет 95 см/с. Характерная скорость внутри области составляет 10...20 см/с. При комбинированной конвекции с вторым вариантом задания $f(x)$ движение близко к стационарному, а его характеристики близки к характеристикам электроконвекции. При термогравитационной конвекции с вращением максимум скорости достигается внутри области и составляет 2.2 см/с, а движение носит колебательный характер с периодом 6 с. Во всех случаях, когда действует пондеромоторная сила, т. е. в 1, 4 и 5 из рассмотренных вариантов, в окрестности границы области формируются тепловые пограничные слои толщиной $8...16E_m$, что соответствует теоретическим оценкам.

Результаты для термогравитационной конвекции с вращением близки к полученным А. А. Мюльбауэром в 1995 г., а для комбинированной конвекции — принципиально отличаются от них. Это отличие вызвано тем, что в работе Мюльбауэра отброшены конвективные члены в уравнении импульса в скин-слое, не являющиеся малыми по сравнению с вязкими.

На рис. 3 а–е показаны соответственно изолинии функции Ψ , на

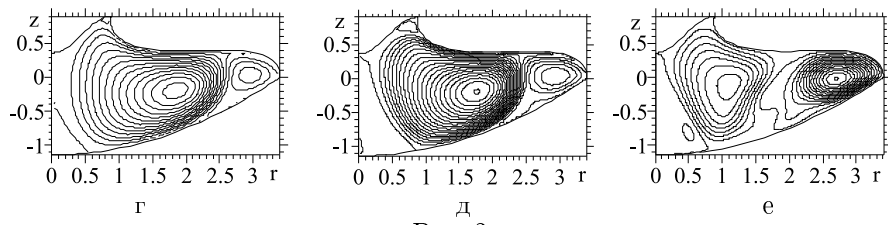
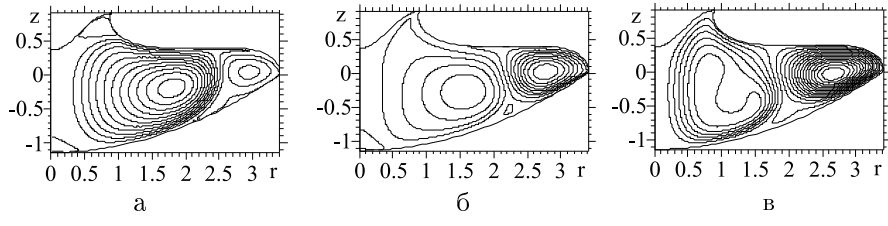


Рис. 3

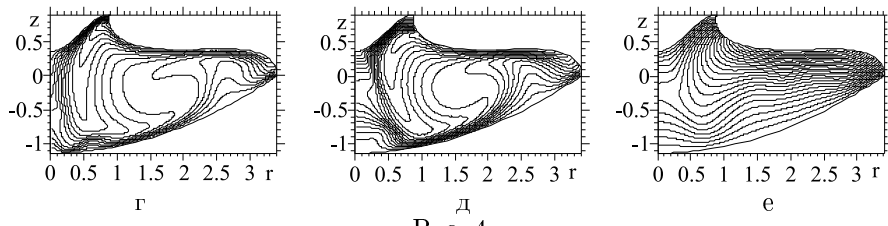
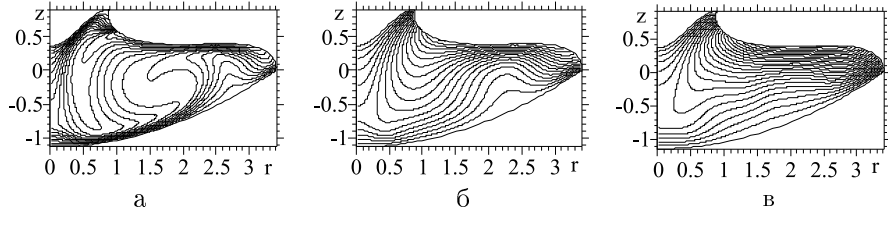


Рис. 4

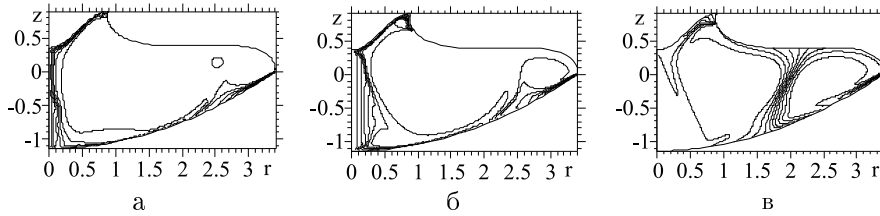


Рис. 5

рис. 4 а–е — изолинии функции T для 1–6 вариантов расчета. На рис. 5 а–в показаны изолинии функции W для 4–6 вариантов.

В главе 3 выводятся условия монотонности разностной схемы, коэффициенты которой удовлетворяют некоторым соотношениям, в виде ограничения на временной шаг, в зависимости от этих коэффициентов и весового параметра γ схемы. При теоретическом исследовании монотонность понимается как положительность коэффициентов разрешающего оператора. В общем случае получены ограничения на временной шаг $\tau \leq \tau_{max}$, достаточные для монотонности схемы. Затем для уравнения теплопроводности при малом числе разбиений области построены аналогичные ограничения $\tau \leq \tau'_{max}$, необходимые и достаточные для монотонности схемы и произведено их сравнение с достаточными условиями монотонности. Оказалось, что достаточные условия близки к необходимым и достаточным при $\gamma \leq 1/2$, а при $\gamma > 1/2$ далеки от них (τ'_{max} не стремится к нулю при $\gamma \rightarrow 1$ в отличие от τ_{max} .) Предложена (без доказательства) новая формула для τ_{max} , снимающая это несоответствие. Затем произведены расчеты для уравнения теплопроводности на равномерной сетке размерности 25×25 с разрывными начальными и граничными в одном из направлений данными. При $\gamma = 0.1$, $\tau = 3\tau_{max}$ в решении в окрестности разрыва возникают осцилляции, которые затем переносятся на всю область, а при $\gamma = 0.1$, $\tau = \tau_{max}$ осцилляций нет. Построен график критического шага по времени $\bar{\tau}_{max}(\gamma)$, при котором решение на первом временном слое еще остается монотонным в направлении разрыва начальных данных. При $0 \leq \gamma \leq 0.5$ $\bar{\tau}_{max}(\gamma)$ монотонно возрастает, как и τ_{max} . Но при $0.5 < \gamma < 0.9$ $\bar{\tau}_{max}(\gamma)$ продолжает монотонно возрастать, в отличие от τ_{max} , имеющего при $\gamma = 0.5$ максимум. При $\gamma = 0.9$ $\bar{\tau}_{max}(\gamma)$ скачком увеличивается в 14.1 раза, а при изменении γ от 0.9 до 1 — уменьшается на 9%. Следовательно, в расчетах лучше использовать схему с γ , близким к единице.

В главе 4 решается задача о плоскопараллельном стационарном дви-

жении вязкой несжимаемой жидкости во вращающемся горизонтальном цилиндрическом контейнере.

В разделе 4.1 сначала ставится задача в терминах "давление – скорость". Затем осуществляется переход к переменным "функция тока Ψ – вихрь ω ". Вводятся безразмерные переменные и производится анализ значений параметров, из которого следует, что форма свободной границы слабо зависит от движения расплава. В дальнейшем рассматривается случай горизонтального подхода жидкости к стенкам в состоянии покоя. Тогда невозмущенная свободная граница представляет собой отрезок, а область течения – сегмент круга. Она конформно отображается на бесконечную полосу с помощью преобразования

$$x = x_0 \frac{\sinh \xi}{\cosh \xi - \cos \eta}, \quad y = h_0 - x_0 \frac{\sin \eta}{\cosh \xi - \cos \eta}, \quad (23)$$

где x, y – декартовы координаты с центром на оси цилиндра, $y = h_0$ – уравнение свободной границы, $x_0 = \sqrt{1 - h_0^2}$, ξ, η – новые переменные.

При замене (23) свободная граница перейдет на плоскости (ξ, η) в прямую $\eta = \pi$, твердая граница – в прямую $\eta = \eta_0 = \arccos h_0$, точки контакта $(x, y) = (\pm x_0, h_0)$ – соответственно в точки $\xi = \pm \infty$.

Задача для определения Ψ, ω :

$$\frac{\partial^2 \Psi}{\partial \xi^2} + \frac{\partial^2 \Psi}{\partial \eta^2} = -H^2 \omega,$$

$$\frac{\partial^2 \omega}{\partial \xi^2} + \frac{\partial^2 \omega}{\partial \eta^2} = Re \left(\frac{\partial \Psi}{\partial \eta} \frac{\partial \omega}{\partial \xi} - \frac{\partial \Psi}{\partial \xi} \frac{\partial \omega}{\partial \eta} \right), \quad (\xi, \eta) \in D, \quad (24)$$

$$\Psi(\xi, \pi) = \Psi(\xi, \eta_0) = \omega(\xi, \pi) = 0, \quad (25)$$

$$\omega(\xi, \eta_0) = -Al + (2 - Al) \frac{1}{H_0(\xi)} \frac{\partial \Psi}{\partial \eta} \Big|_{\eta=\eta_0}, \quad (26)$$

где D – область $\eta_0 < \eta < \pi$, $-\infty < \xi < \infty$, Re – число Рейнольдса, Al – параметр проскальзывания,

$$H(\xi, \eta) = \left| \frac{d(x + iy)}{d(\xi + i\eta)} \right| = \frac{x_0}{\cosh \xi - \cos \eta}, \quad H_0(\xi) = H(\xi, \eta_0). \quad (27)$$

Линеаризованная задача для функции $f(x)$, определяющей отклонение свободной границы от состояния покоя, имеет вид:

$$f(x) - \frac{1}{Bo} f''(x) = \Phi(x) + f_0, \quad x \in (-x_0, x_0), \quad (28)$$

$$f'(x)|_{x=-x_0} = -\frac{f(-x_0)}{x_0}, \quad f'(x)|_{x=x_0} = \frac{f(x_0)}{x_0}, \quad (29)$$

$$\int_{-x_0}^{x_0} f(x)dx = 0, \quad (30)$$

где

$$\Phi(x(\xi)) = \left(-\frac{Fr}{2} \left[\frac{1}{H} \frac{\partial \Psi}{\partial \eta} \right]^2 - \frac{Fr}{Re} \left[\int_0^\xi \frac{\partial \omega}{\partial \eta} d\tilde{\xi} - \frac{2}{H} \frac{\partial}{\partial \xi} \left(\frac{1}{H} \frac{\partial \Psi}{\partial \eta} \right) \right] \right)_{\eta=\pi}, \quad (31)$$

f_0 — константа, подлежащая определению, Bo — число Бонда, Fr — число Фруда.

В разделе 4.2 методом интегральных уравнений выводятся асимптотические формулы для функций Ψ , Ω при $|\xi| \rightarrow \infty$. Из них следует, что на линиях разрезом полосы можно ставить "мягкие" граничные условия:

$$\begin{aligned} & \frac{\partial}{\partial |\xi|} \left(\omega - \frac{Al}{2} \omega_0 - (2 - Al) \omega_1 \right) + \\ & + (\beta - 1) \left(\omega - \frac{Al}{2} \omega_0 - (2 - Al) \omega_1 \right) = 0, \end{aligned} \quad (32)$$

$$\frac{\partial}{\partial |\xi|} (\Psi - \Psi_2) + \beta (\Psi - \Psi_2) = 0, \quad |\xi| = \xi_0, \quad (33)$$

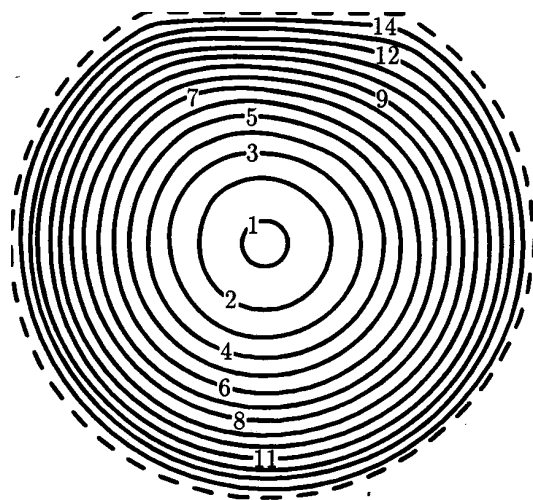
где $\beta = \pi/(\pi - \eta_0) < 2$; ω_0 , ω_1 , Ψ_2 — известные функции.

В разделе 4.3 с помощью метода интегральных уравнений строятся некоторые аналитические решения задачи (24)–(26) при $Re = 0$. В частности, при $\beta = 2$, когда область течения становится полукругом, построены решения

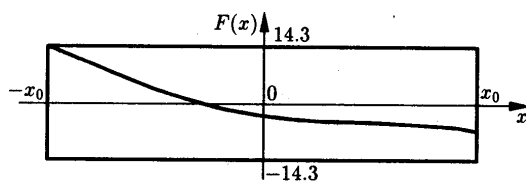
$$\omega(r, \varphi) = \sum_{m=1}^{\infty} \left(\frac{16Alm}{\pi(2m-1)(4m+Al-2)} \right) r^{2m-1} \sin(2m-1)\varphi, \quad (34)$$

$$\Psi(r, \varphi) = \sum_{m=1}^{\infty} \left(\frac{2Al(1-r^2)}{\pi(2m-1)(4m+Al-2)} \right) r^{2m-1} \sin(2m-1)\varphi, \quad (35)$$

где r — полярный радиус, $\varphi \in [-\pi, 0]$ — полярный угол.



а



б

Рис. 6

В разделе 4.4 излагается метод и приводятся результаты расчета течения. Расчет функций Ψ , Ω ведется методом продолжения по числу Рейнольдса, начиная от $Re = 0$. При каждом фиксированном числе Рейнольдса используется метод установления по времени. Задача для определения $f(x)$ решается аналитически, а входящие в решение интегралы от $\Phi(x)$ рассчитываются численно.

На рис. 6, а показаны линии тока при $\eta_0 = 0.5$ рад, $Al = 1.5$, $Re = 150$. Функции Ψ , Ω неположительны. Максимумы их модулей составляют соответственно 0.335 и 1.671. Максимум скорости составляет 0.764. Он достигается на свободной границе. На рис. 6, б показан график $F(x) = f(x)Re/Fr$ (функция $F(x)$ уже не зависит от числа Фруда) при $Bo = 9$.

В заключении приводятся следующие **основные результаты, выносимые на защиту**.

1. Разработан алгоритм и построена последовательность ортогональных разностных сеток в области, занимаемой расплавом при БЗП в МП, на основе известного метода, осуществляющего конформное отображение прямоугольника на заданный криволинейный четырехугольник,

2. Разработан и реализован численный алгоритм решения гидродинамической части задачи о БЗП в МП на основе дивергентной записи уравнений движения жидкости с переменной вязкостью и аппроксимации операторов конвективного и диффузионного переноса монотонными консервативными разностными операторами, использующий раздельное решение разностных задач для вихря и функции тока. Для решения задачи об определении функции тока получено обобщение известного итерационного алгоритма, не требующего информации о свойствах и границах спектра разностного оператора, на случай матриц, отличающихся от трехдиагональных наличием второго и предпоследнего столбцов.

3. Произведены расчеты конвекции в плавающей зоне с учетом пондеромоторной, термокапиллярной сил, силы плавучести, а также вращения и протягивания образца. Обнаружено 2 режима конвекции: колебательный режим и режим, близкий к стационарному, в зависимости от вида функции пондеромоторной силы, действующей вблизи свободной границы.

4. Получены достаточные условия монотонности разностной схемы, используемой при численном решении задачи о БЗП в МП, в виде ограничения на временной шаг, в зависимости от весового параметра γ и коэффициентов схемы. Показано, что хотя полученная зависимость имеет максимум при $\gamma = 0.5$, при расчетах значительно эффективнее схема с γ , близким к единице.

5. Построена асимптотика вихря и функции тока в окрестности бесконечно удаленных точек полосы, соответствующих в биполярных координатах точкам трехфазного контакта, и найдены некоторые аналитические решения для задачи о плоскопараллельном стационарном движении вязкой несжимаемой жидкости внутри горизонтального вращающегося цилиндра, моделирующей процесс зонной плавки во вращающемся контейнере. Разработан алгоритм и произведены расчеты вихря, функции тока и формы свободной границы.

Автор выражает благодарность В. В. Пухначеву за постановку задач, научному руководителю А. Ф. Воеводину, а также В. В. Кузнецову, О. М. Лаврентьевой, А. С. Овчаровой и В. И. Яковлеву за помощь при выполнении работы.

По теме диссертации опубликованы следующие работы.

1. Воеводин А. Ф., Остапенко В. В., Пивоваров Ю. В., Шугрин С. М. Проблемы вычислительной математики. Новосибирск: Изд-во Сиб. отделения РАН. 1995. 154 с.
2. Пивоваров Ю. В. Одномерная тепловая задача о бестигельной зонной плавке в быстропеременном магнитном поле // Динамика сплошной среды: Сб. науч. тр. / РАН. Сиб. отд-ние. Ин-т гидродинамики. 1996. Вып. 111. С. 100–108.
3. Пивоваров Ю. В. Параметрический анализ задачи о бестигельной зонной плавке в магнитном поле // Динамика сплошной среды: Сб. науч. тр. / РАН. Сиб. отд-ние. Ин-т гидродинамики. 2000. Вып. 116. С. 142–147.
4. Пивоваров Ю. В. Условия монотонности факторизованной разностной схемы для эволюционного уравнения с двумя пространственными переменными // Вычислительные технологии. 2001. Т. 6. № 4. С. 81–91.
5. Пивоваров Ю. В. О построении ортогональной разностной сетки в криволинейном четырехугольнике // Вычислительные технологии. 2003. Т. 8. № 5. С. 94–101.
6. Пивоваров Ю. В. Расчет движения жидкости с переменной вязкостью в области с криволинейной границей // Вычислительные технологии. 2005. Т. 10. № 3. С. 87–107.
7. Пивоваров Ю. В. Численное моделирование конвекции в плавающей зоне // Вычислительные технологии. 2006. Т. 11. № 1. С. 81–94.

Подписано к печати 15.11.06
Формат бумаги 60 × 84/16
Тираж 75 экз.

Заказ № 198
Объем 1,2 п.л.
Бесплатно

Ротапринт Института гидродинамики СО РАН
Новосибирск – 90, проспект акад. Лаврентьева, 15