Бураго Н.Г., Федюшкин А.И., Численное решение задачи Стефана. Материалы XIII Международной конференции по прикладной математике и механике в аэрокосмической отрасли (AMMAI'2020), 6-13 сентября 2020 г., Алушта, Изд-во МАИ (М., 2020), с. 471-473. ISBN 978-5-4316-0699-1

ЧИСЛЕННОЕ РЕШЕНИЕ ЗАДАЧИ СТЕФАНА

Н.Г.Бураго, А.И.Федюшкин

Институт проблем механики им. А.Ю. Ишлинского РАН, Москва, Россия

В работе описан алгоритм решения методом конечных элементов задачи Стефана для моделирования процессов кристаллизации методом Бриджмена с погруженным нагревателем-вибратором.

Постановка задачи.

Течение расплава описывается уравнениями Навье-Стокса для несжимаемой жидкости в приближении Буссинеска:

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0, \quad \rho_0 d\mathbf{u} / dt + \nabla p = \nabla \cdot \left(\rho_0 \nu \nabla \mathbf{u} \right) - \rho_0 g \beta (T - T_0) \mathbf{e}_z ,$$

$$\rho_0 c_V dT / dt = \nabla \cdot (k_T \nabla T), \quad dC / dt = \nabla \cdot (D \nabla C)$$

где использованы традиционные обозначения. Задачи рассматривались в условиях осевой симметрии, поэтому граничные условия удобно записать в цилиндрической системе координат r, θ, z, тогда u, v, w - радиальная, окружная и осевая проекции скорости. Состояние растущего кристалла подчинено следующим соотношениям:

$$u = 0, \ w = 0, \ v = \Omega_0 r, \ \rho_0 c_V dT / dt = \nabla \cdot (k_T \nabla T), \ dC / dt = 0$$

Расчетная область решения показана на рис. 1, где $R = 3.36cm$ – радиус тигля, $\delta = 0.1cm$ - размер зазора (3), $h = 0.8cm$, S_{SH} - область погруженного нагревателя (1). $T_m = 937^0\mathrm{C}$ - температура плавления германия, C - концентрация примеси галлия. На твердых стенках заданы условия прилипания, Ω_{CR} - скорость вращения тигля (дно - кристалл (5) и вертикальные стенки тигля), Ω_b - скорость вращения погруженного нагревателя (1).

Граничные условия принимались в следующем виде:

1) На оси симметрии: $r = 0, \ 0 \le z \le H \ : \ u = 0, \ v = 0, \ \partial w / \partial r = 0, \ \partial T / \partial r = 0, \ \partial C / \partial r = 0$

2) На стенке тигля: $r = R, \ 0 \le z \le h \ : \ u = 0, \ v = 0, \ w = 0, \ \partial T / \partial r = 0, \ \partial C / \partial r = 0$

$r = R, \ h < z \le H \ : \ u = 0, \ v = 0, \ w = 0, \ T = T_{CR}(z), \ \partial C / \partial r = 0$

3) На границе кристалла: $r = R$: $u = 0$, $v = 0$, $w = 0$, $k_T \partial T / \partial r = q_R^*(z,t), \ \partial C / \partial r = 0$

4) На основании кристалла: $z = 0$: $u = 0$, $v = 0$, $w = 0$, $T = T_1, \ C = C_1$

5) На верхней границе: $z = Z$: $\partial u / \partial z = 0$, $\partial v / \partial z = 0$, $\partial w / \partial z = 0$, $\partial T / \partial z = 0$, $C = C_2$

6) на границе расплав-кристалл $z=\eta(r,t)$ ставились условия

Стефана: $z=\eta(r,t)$: $(T)_S=(T)_L=T_m(1+\alpha_1(C)_L)$, $(u)_S=(u)_L=(w)_S=(w)_L=0$,

$(v)_S=(v)_L=2\pi\Omega_0 r$ $u_n\Delta H=\left(k_T\partial T/\partial n\right)_S-\left(k_T\partial T/\partial n\right)_L$, $u_n(C)_L(1-k_*)=\left(D\partial C/\partial n\right)_L$,

$(C)_S=k_*(C)_L$

где u_n - скорость распространения фронта кристаллизации $z=\eta(r,t)$, ΔH - скрытая теплота кристаллизации поглощаемая/выделяемая на фронте. В приведенных формулах индексы "S" и "L" отмечают твердую и жидкую фазы соответственно, α_1 коэффициент зависимости температуры отвердения/плавления от концентрации примеси в расплаве, k_* - коэффициент равновесного распределения (отторжения) примеси. Начальные условия имели вид:

$t=0$: $u=0$, $v=0$, $w=0$, $T=T^*(r,z)$, $C=C^*(r,z)$,

$t=0$: $\eta(r,0)=z_0$, $T^*(r,z_0)=T_mC^*(r,z_0)$

Метод решения.

Решение выполнено по явно-неявной схеме безматричного метода конечных элементов [1] с использованием подвижной конечно-элементной сетки. Подвижность узлов сетки обусловлена переменной геометрией области решения из-за движения межфазной границы расплав-кристалл. Новые положения узлов подвижной сетки рассчитывались по модели упругих сеток [1], поддерживая приближенное равенство объемов ячеек сетки. Узлы сетки, принадлежащие подвижной границе между расплавом и растущим кристаллом, двигались в соответствии с условиями Стефана.

Поскольку схема интегрирования уравнений по времени неявна по диффузионным членам, она устойчива при обычном условии Куранта по скорости конвекции $\Delta t^n \le \min_k\left(h_k^n/max(|\mathbf{u}_k^n-\mathbf{w}_k^n|,1e^{-6})\right)$, где h_k^n - размер окрестности узла k, $\mathbf{u}$ и $\mathbf{w}$ - скорости материальной и координатной сред. Расчет движения межфазовых границ реализован экономичным методом сквозного счета Самарского-Моисеенко [2]. Положение границы определялось из условия

$\Phi(r,z,t)=T(r,z,t)-T_m-\alpha_1C(r,z,t)=0$

Выделение/поглощение тепла при фазовом переходе учитывалось уравнением

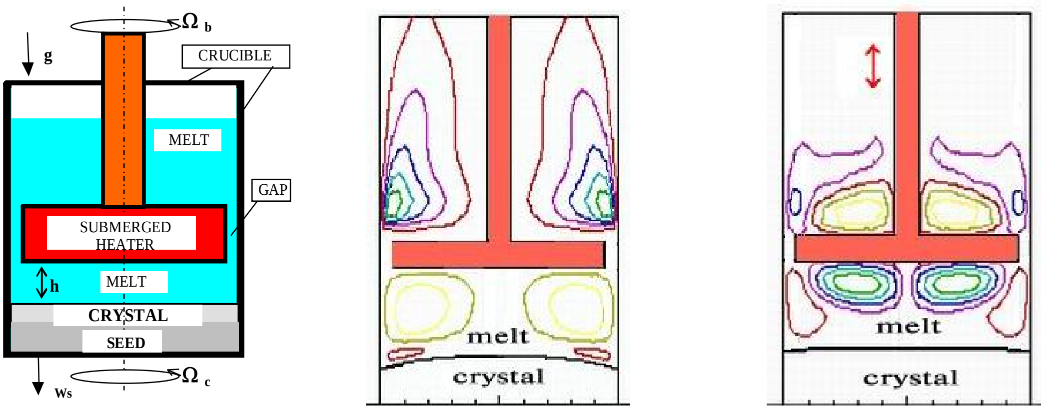
$\rho_0c_V dT/dt=\nabla\cdot\left(k_T\nabla T\right)-\Delta H\delta(\Phi)dT/dt$.

При численной реализации дельта-функция аппроксимировалась выражением $\delta(\Phi)=H(1-|(\Phi)_i|/\Delta T_m))/(2.0\Delta T_m)$

Проверка алгоритмов сделана путем расчета известных тестовых задач Валь Девиса [3] и Вилера [4] о течении расплава в методе Чохральского.

Результаты расчета.

На Рис. 1 показаны результаты моделирования гидродинамики расплава и теплообмена при выращивании монокристаллов арсенида галлия вертикальным методом Бриджмена с погруженным вибратором. Схема расчетной области изображена на рис. 1а. Результаты решения задачи Стефана с определением формы фронта кристаллизации $NaNO_3$ показаны на рис. 1б, и рис.1в. Представлены изолинии функции тока и форма фронта кристаллизации при отсутствии вибраций погруженного вибратора (рис. 1б) и с вибрациями (на рис.1в представлены изолинии функции тока осредненного течения). Вибрации позволяют форму фронта кристаллизации сделать более плоской, что показывает сравнение рис.1б и рис.1в. Вибрации задавались в виде гармонической функции времени для перемещения или скорости на заданной границе или на погруженном вибраторе. Предполагается, что погруженный вибратор либо кристалл совершают колебательные движения по закону: $z = A\cos(2\pi ft)$ с частотой f и малой амплитудой А. Амплитуды вибраций были постоянными со значениями в диапазоне от 0 до 400мкм, а частоты были в диапазоне от 0 до 100Гц.



а) б) в)

Рис. 1. а) Область решения. Форма фронта кристаллизации:

б) без вибраций, в) с вибрациями.

Работа выполнена при финансовой поддержке государственных программ АААА-А20-120011690132-4 и *АААА-А20-120011690131-7*.

1. *Бураго Н.Г., Никитин И.С., Якушев В.Л.* Гибридный численный метод решения нестационарных задач механики сплошной среды с применением адаптивных наложенных сеток. Журнал вычислительной математики и математической физики. 2016. т. 56. N6. С. 1082-1092. DOI: 10.7868/S0044466916060107.
2. *Самарский А.А., Моисеенко Б.Д.* Экономичная схема сквозного счета для многомерной задачи Стефана. Журнал вычислительной математики и математической физики, 1965, т.5, N5. С. 816-827.
3. *Davis de Vahl G. and Jones I. P.* Natural convection in square cavity: A comparison exercise. Intern. J. Numer. Meth. Fluids. 3, 227 (1983)
4. *Wheeler A. A.* Four test problems for the numerical simulation of flow in Chochralski crystal growth, J. Crystal Growth, 99, 910 (1990)