

# 移動現象シミュレーションにおける OpenFOAMの活用事例

---

大阪大学大学院基礎工学研究科  
物質創成専攻化学工学領域

高木洋平

2010年12月18日(土)

OpenFOAM勉強会 for beginner@関西

# 本日の内容

---

- 自己紹介
  - 阪大岡野研の研究概要
  - 融液内対流の計算事例
  - OpenFOAMの使用感想
  - 勉強会に期待すること
-

# 自己紹介

---

- ~2006年3月 東工大機械宇宙システム専攻
- ~2008年12月 海上技術安全研究所
- ~2010年8月 静大工学部物質工学科
- ~現在 大阪大学大学院基礎工学研究科

機械工学

船舶海洋工学

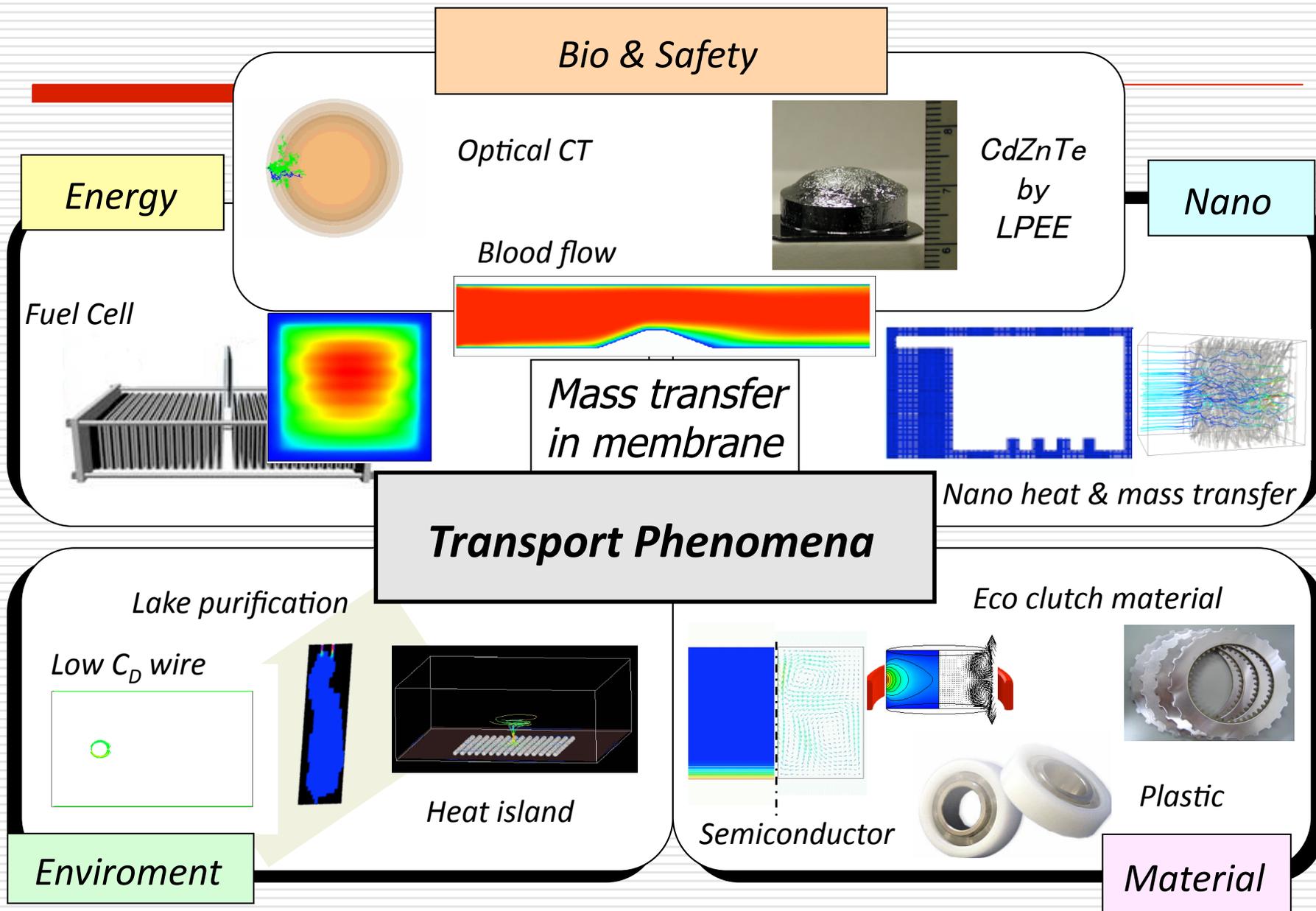
化学工学



流体力学

---

# 大阪大学岡野研究室の研究概要



# 結晶成長

- 半導体結晶
  - シリコン(Si)
  - 化合物
    - SiGe, InGaAs, ZnTe

高性能・高品質なバルク  
単結晶の作製

✓ 融液・溶液内に半導体結晶  
を入れて成長させる

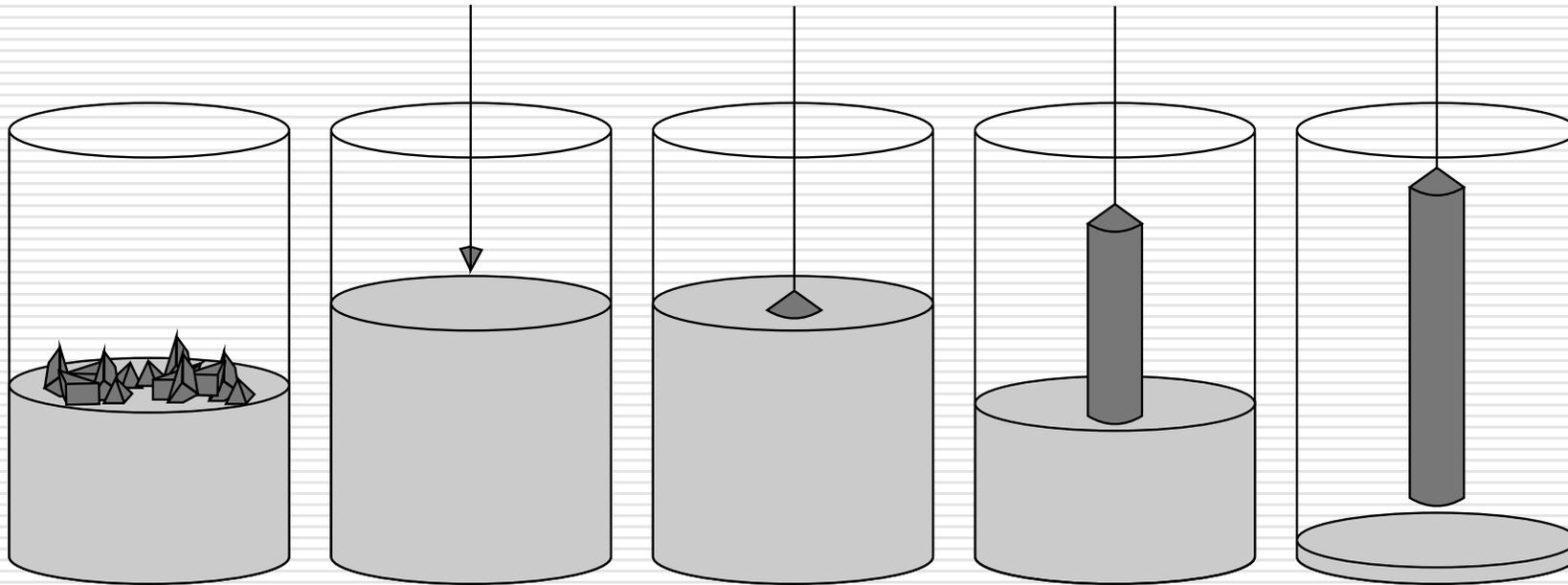


Siバルク単結晶

# 結晶成長法(シリコン)

---

## □ Czochralski法



Melting of  
polysilicon,  
doping

Introduction of  
the seed crystal

Beginning of  
the crystal  
growth

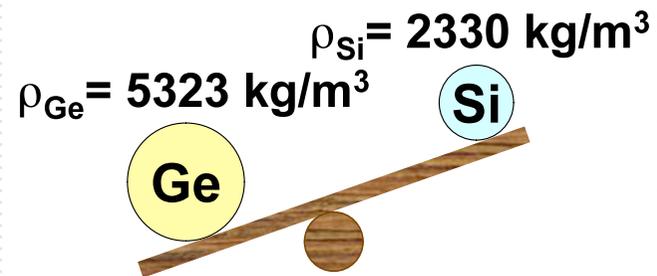
Crystal  
pulling

Formed crystal  
with a residue  
of melted silicon

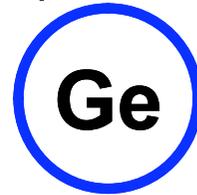
---

# 化合物半導体の結晶成長

## □ SiGeの性質



$T_{\text{mp}} = 1211\text{K}$



$T_{\text{mp}} = 1687\text{K}$



重力偏析

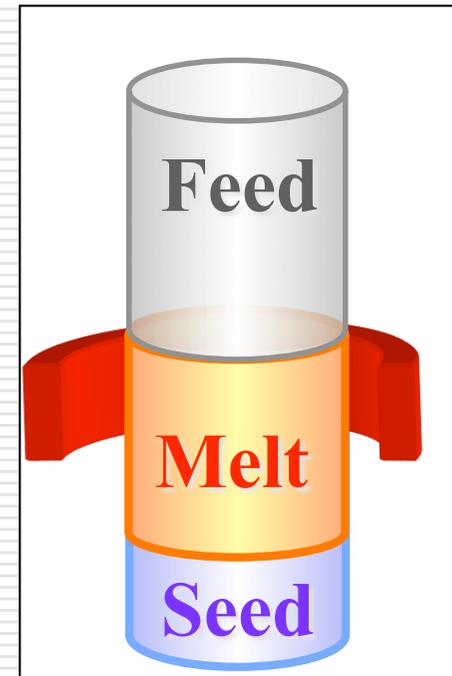
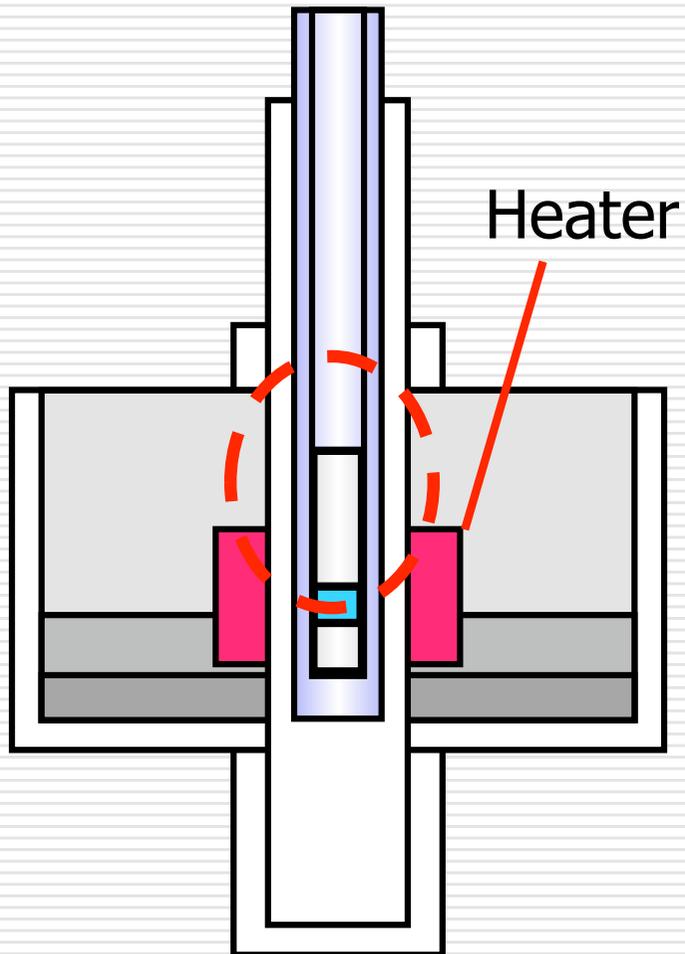


溶液成長法の利用



# Traveling Heater Method (THM)

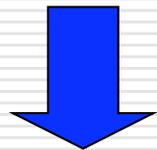
---



# 研究目的

## □ THMにおける対流制御

- 磁場の印加
- るつぼの回転

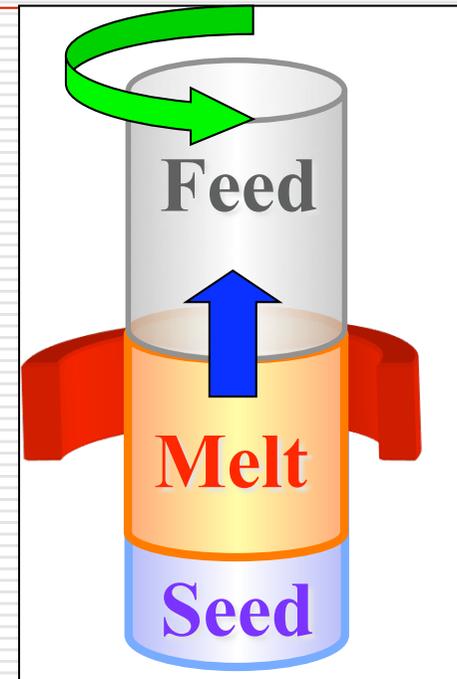


OpenFOAM

## □ 外力の対流抑制効果

## □ 均質な結晶作製のための操作条件

- 界面付近でのSi濃度分布



# 基礎方程式

---

## □ Navier-Stokes方程式

$$\frac{\partial \mathbf{U}}{\partial t} + \mathbf{U} \cdot \nabla \mathbf{U} = -\frac{1}{\rho} \nabla p + \nu \nabla^2 \mathbf{U} + \underline{\mathbf{S}} + \underline{\mathbf{F}}$$

$$\underline{\mathbf{S}} = (\beta_T (T - T_0) + \beta_C (C - C_0)) \mathbf{g}$$

$$\underline{\mathbf{F}} = \mathbf{J} \times \mathbf{B}$$

## □ 誘導方程式

$$\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} = \frac{1}{\sigma \mu} \nabla^2 \mathbf{B} + \nabla \times (\mathbf{U} \times \mathbf{B})$$

## □ エネルギー方程式

$$\frac{\partial T}{\partial t} + \mathbf{U} \cdot \nabla T = \alpha \nabla^2 T$$

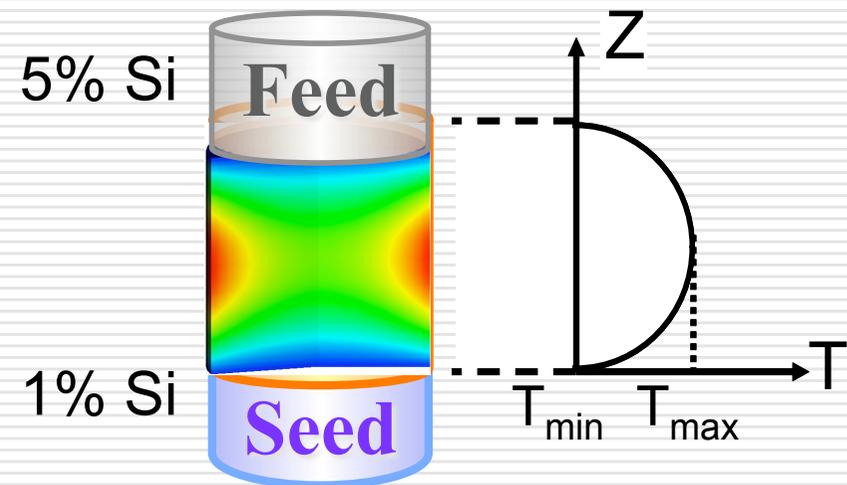
## □ 拡散方程式

$$\frac{\partial C}{\partial t} + \mathbf{U} \cdot \nabla C = D \nabla^2 C$$

---

# 使用ソルバー・境界条件

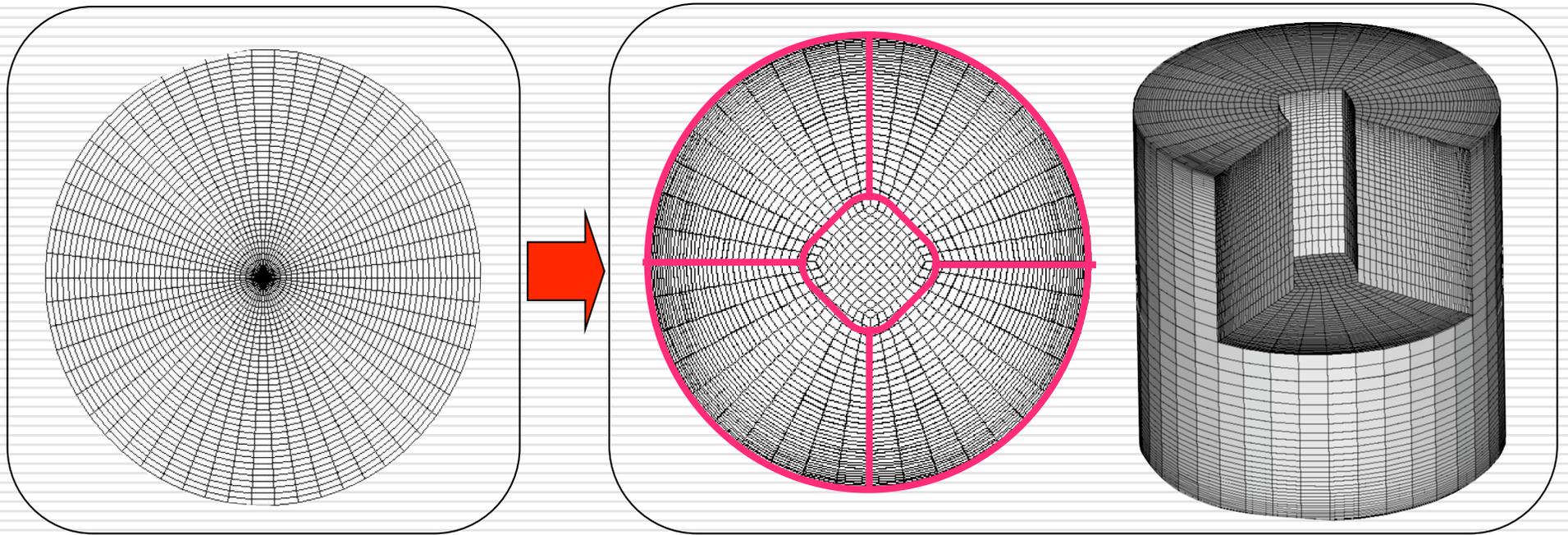
- ソルバー: boussinesqBuoyantFoam + mhdFoam
- 境界条件;
  - 回転: uniformAxialRotation
  - 磁場: 一様縦磁場
  - 温度
  - 濃度



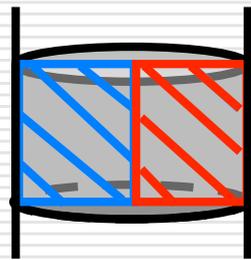
# 計算格子

---

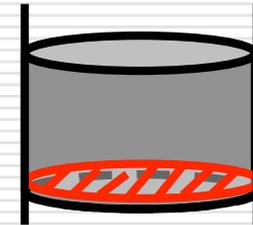
- blockMeshを使用
- 円筒座標系→マルチブロック格子



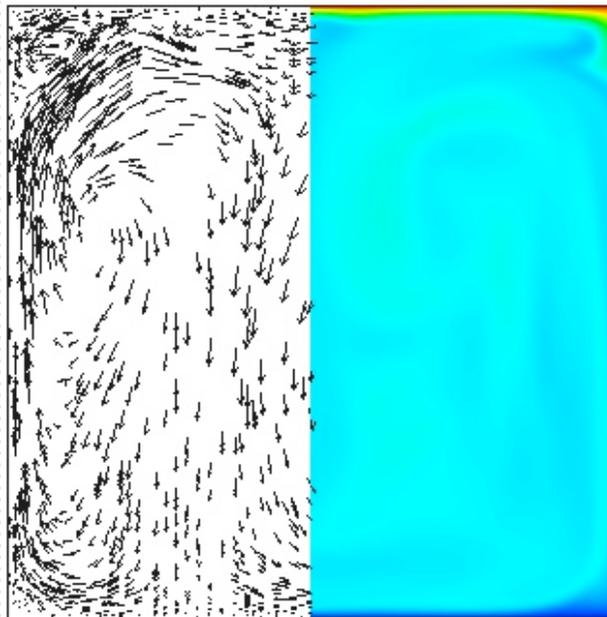
# 計算結果(Case1:外力なし)



鉛直断面

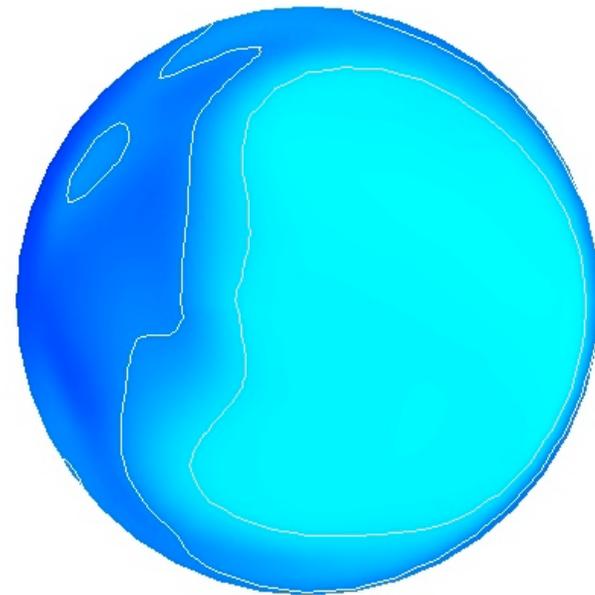


水平断面



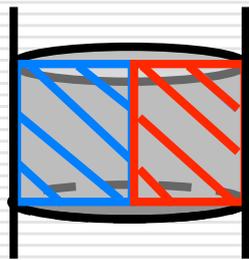
速度

Si濃度

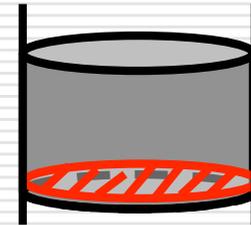


Si濃度

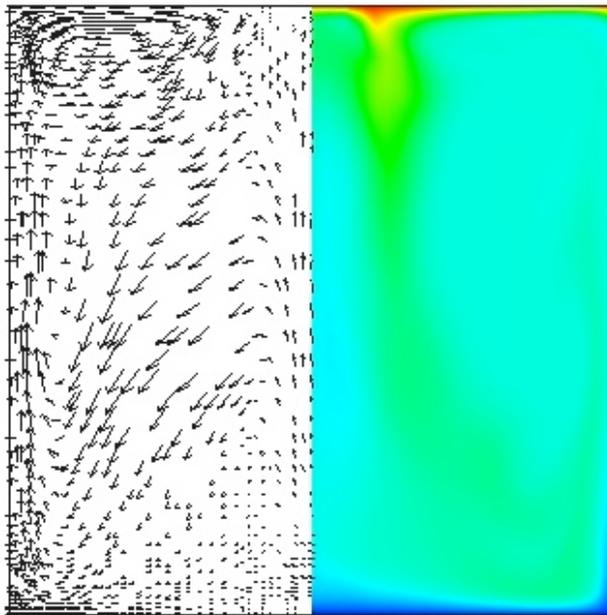
# 計算結果(Case2:回転のみ)



鉛直断面

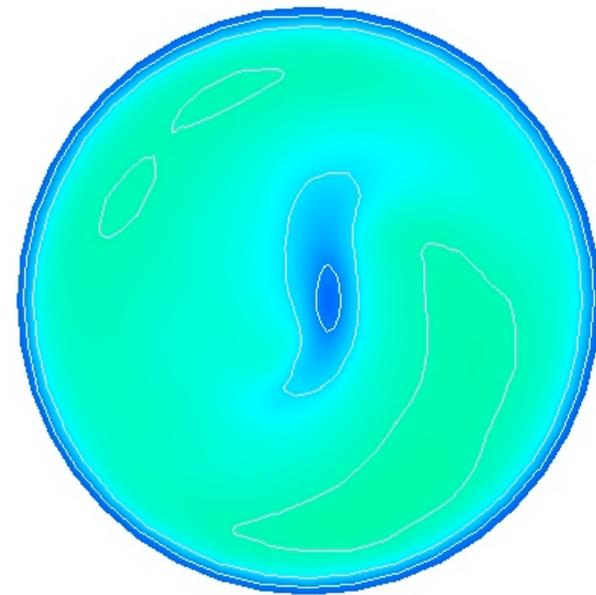


水平断面



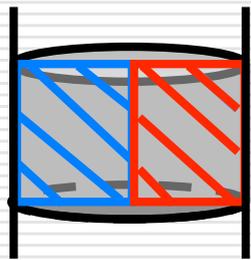
速度

Si濃度

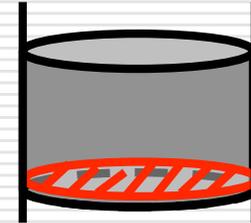


Si濃度

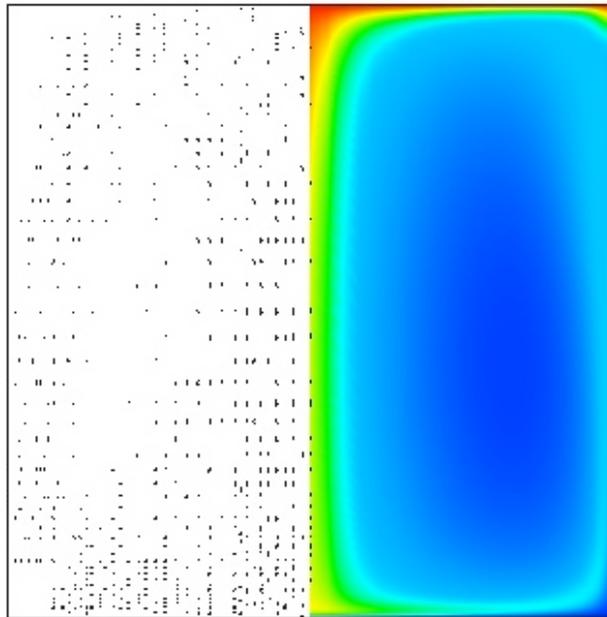
# 計算結果(Case3:磁場のみ)



鉛直断面

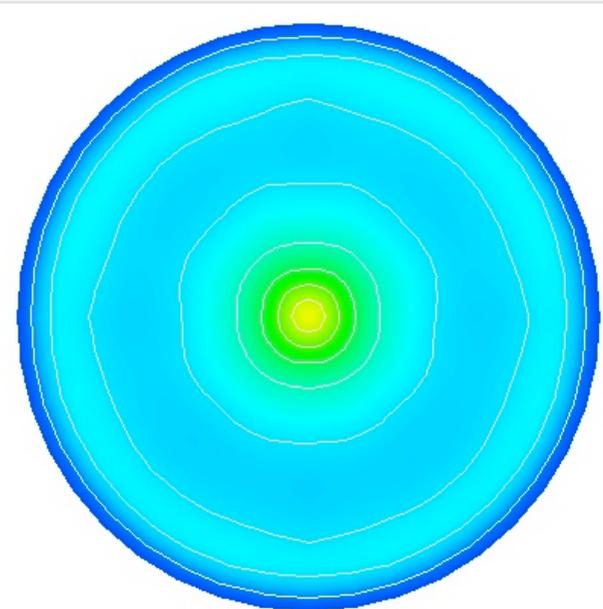


水平断面



速度

Si濃度



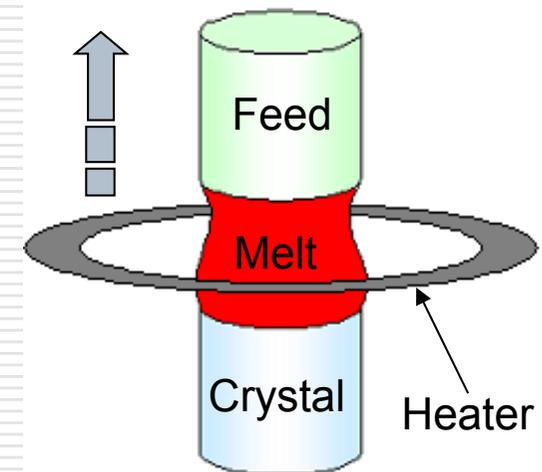
Si濃度

# 今後の課題

- 境界条件の追加
  - 自由表面の湾曲・マランゴニ対流
  - 結晶成長界面(固液界面)

$$\frac{\partial C}{\partial z} + V_g S c (1 - k_s) C = 0$$

- るつぼ部分の熱伝導
- ふく射の影響

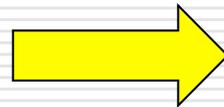
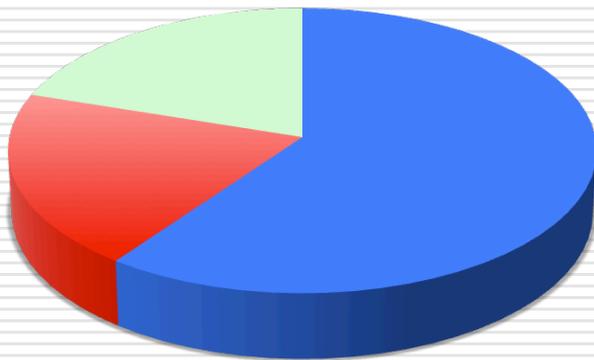


# 研究室でOpenFOAMを使う意義

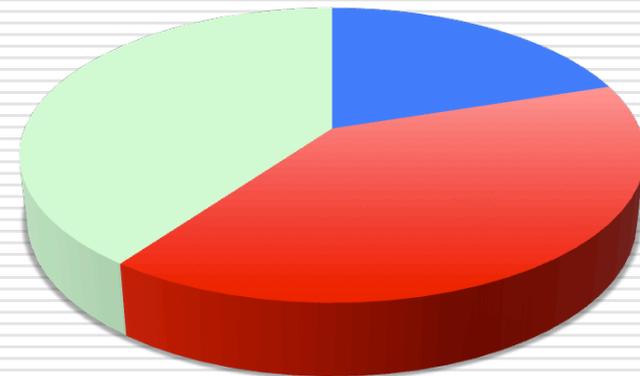
---

- モデリングや現象理解に費やす時間の増加

自作コード



OpenFOAM



■ プログラミング・バグ ■ モデリング(定式化)

■ 結果の考察

---

# 研究室でOpenFOAMを使う意義

## □ CFD・CAEの教育に使える

### 商用ソフト

- 高度なパッケージング
- 使いやすさ

Pre-processing  
(Grid generation)



Solver



Post-processing  
(Visualization)

### OpenFOAM

- オープンソース
- 学ぶことが多い

CFD Procedure

# 学会・勉強会に期待すること

---

- CFD・CAE教育に使えるテキストの編纂
    - 手順の羅列ではないもの
    - テンソルアプローチ
  - ソースコードの読み解き(code reading)
    - オブジェクト指向の科学技術計算プログラムとしては素晴らしい.
    - テキストの編纂
      - 矢川, 関東, オブジェクト指向計算力学入門—C++による数値解析プログラミング, 培風館
-