

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

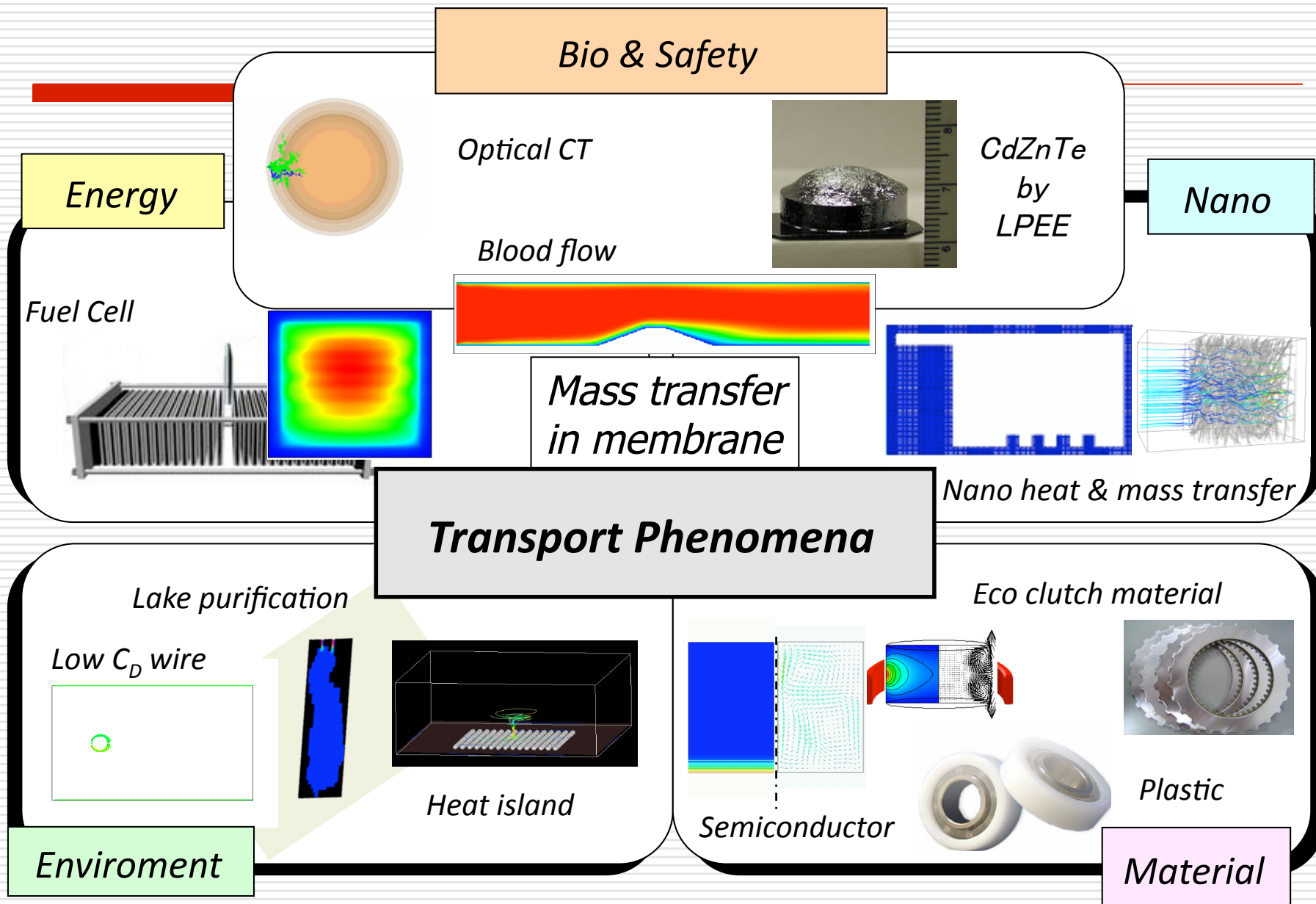
船舶海洋工学

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

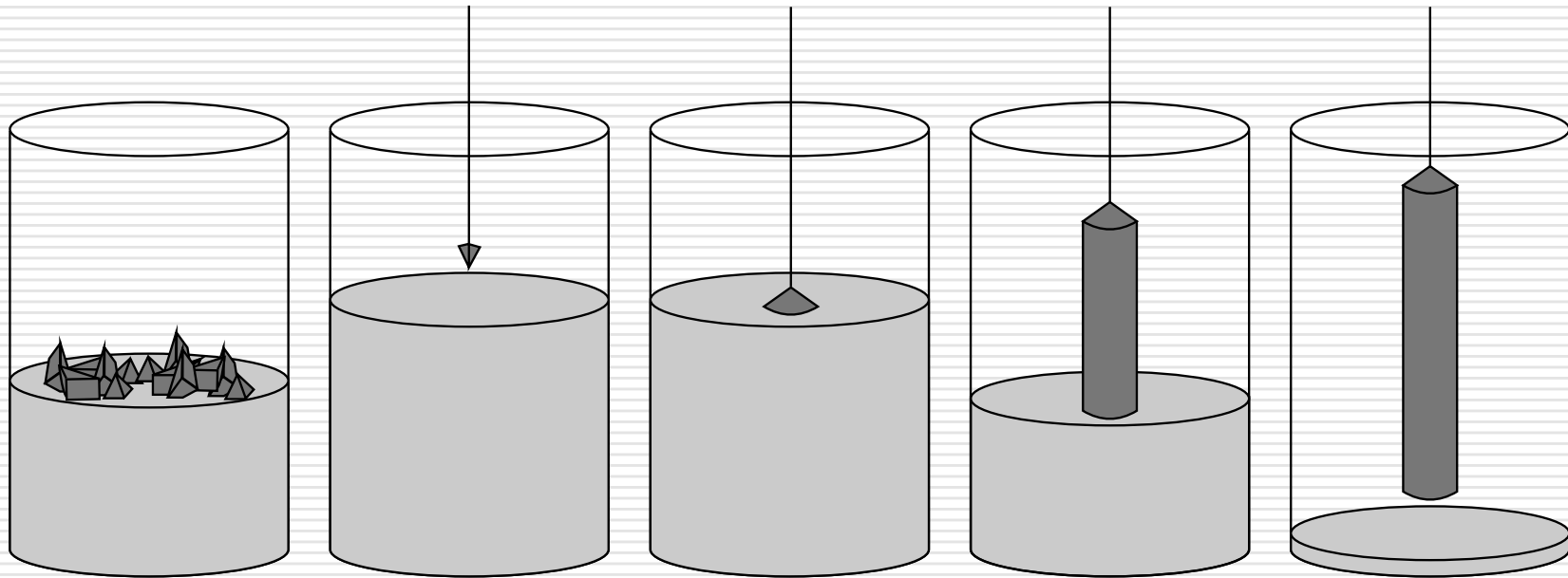
✓ 融液・溶液内に半導体結晶
を入れて成長させる



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

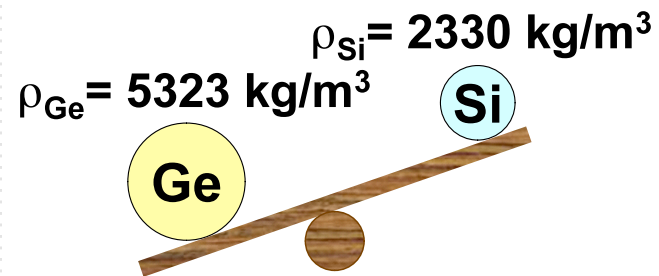
Beginning of
the crystal
growth

Crystal
pulling

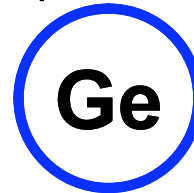
Formed crystal
with a residue
of melted silicon

化合物半導体の結晶成長

□ SiGeの性質



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



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



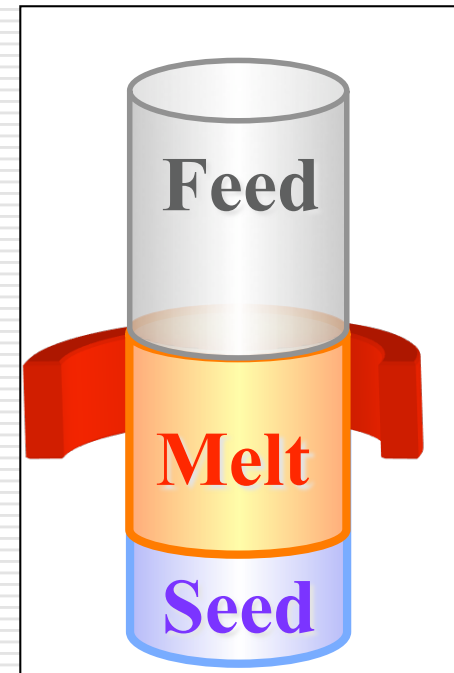
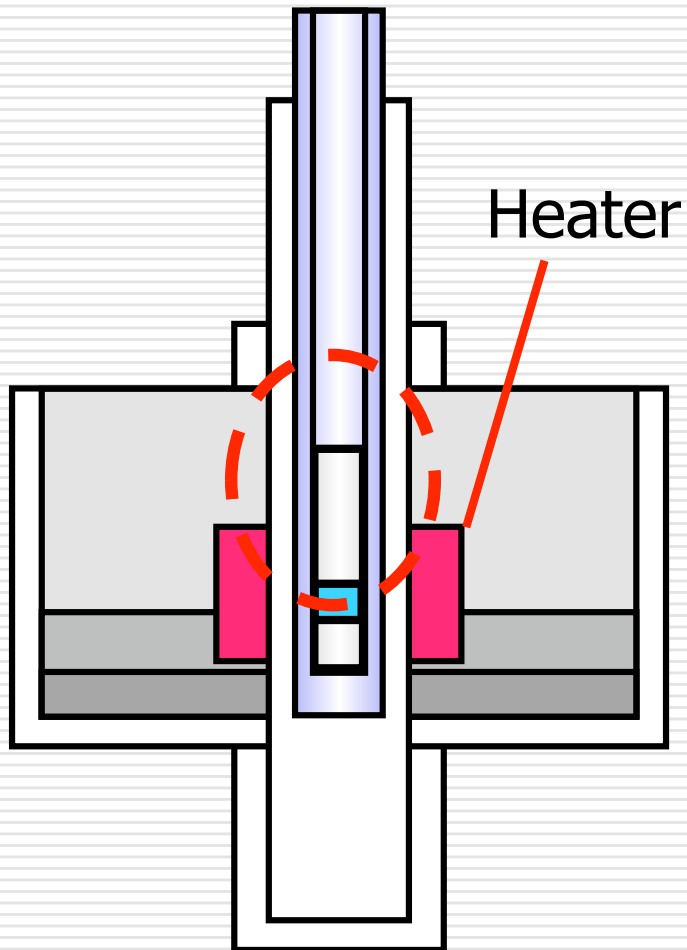
重力偏析



溶液成長法の利用



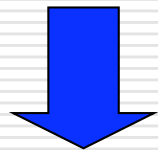
Traveling Heater Method (THM)



研究目的

□ THMにおける対流制御

- 磁場の印加
- るつぼの回転

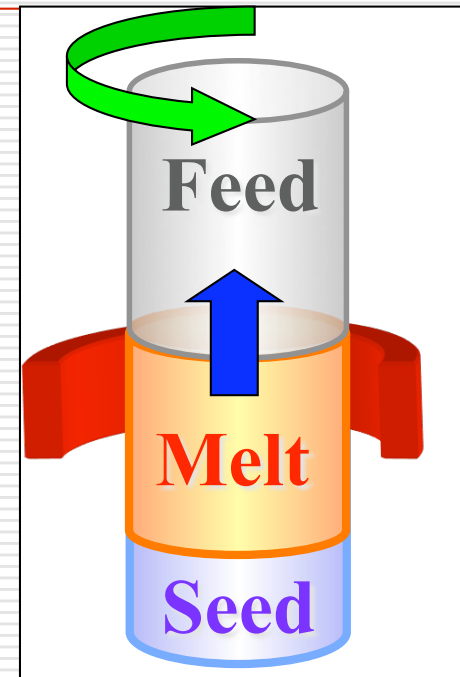


OpenFOAM

□ 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

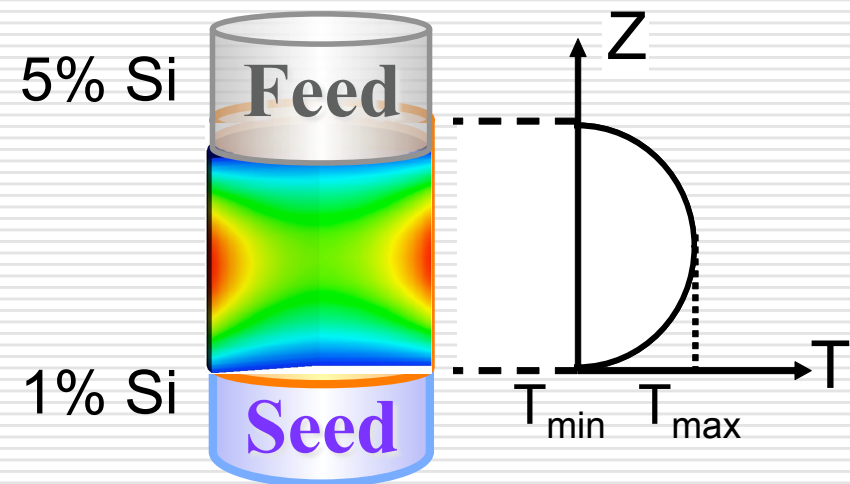
$$\frac{\partial T}{\partial t} + \mathbf{U} \cdot \nabla T = \alpha \nabla^2 T$$

□ 拡散方程式

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

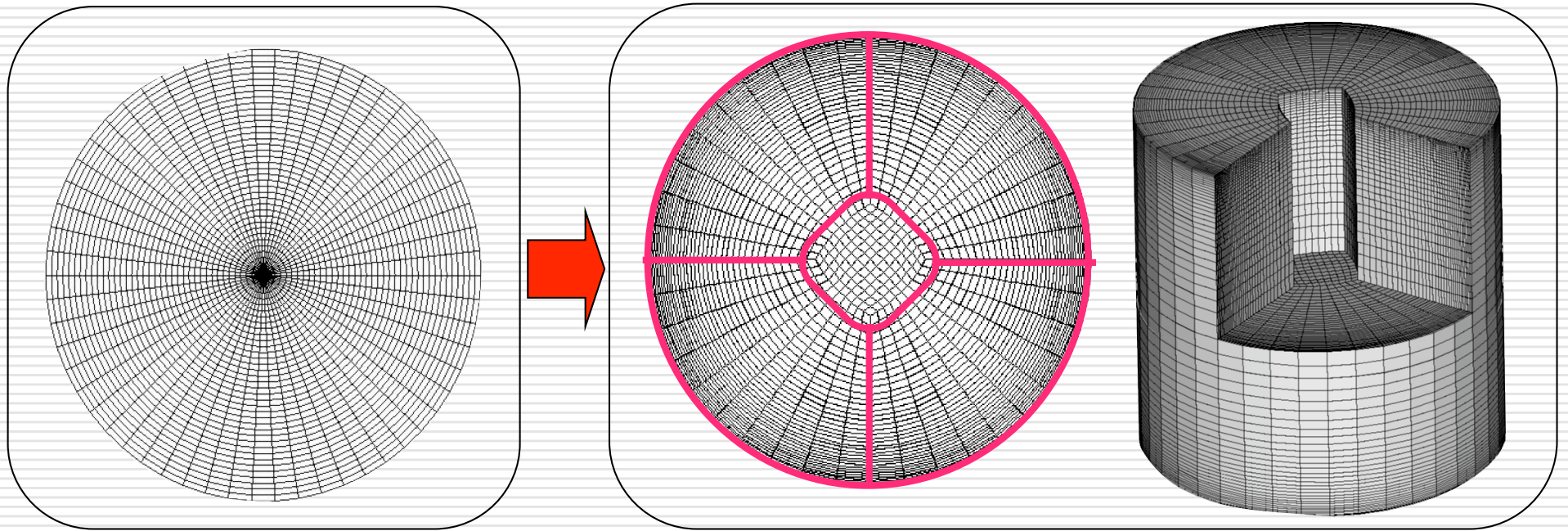
使用ソルバー・境界条件

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

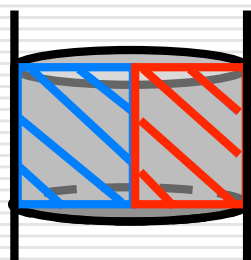


計算格子

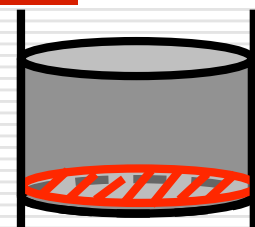
- blockMeshを使用
- 円筒座標系→マルチブロック格子



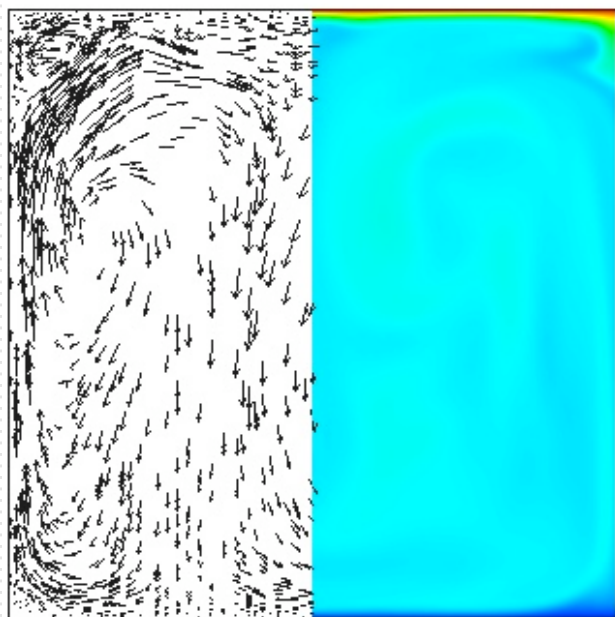
計算結果(Case1:外力なし)



鉛直断面

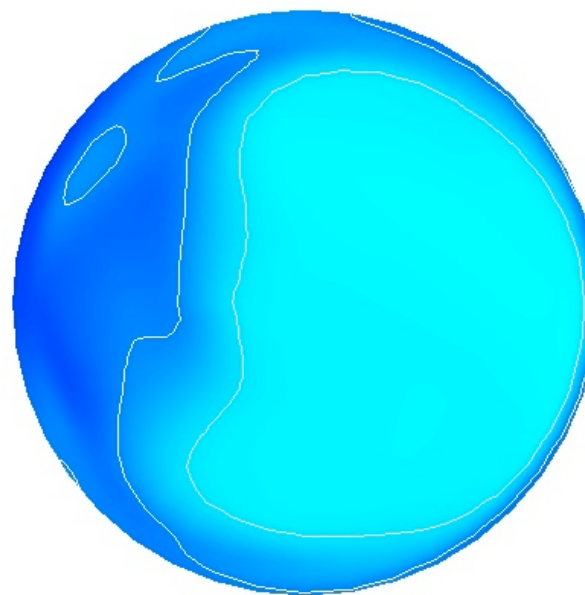


水平断面



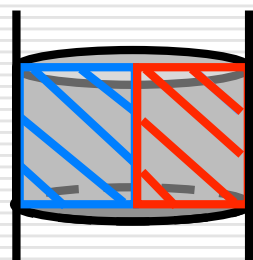
速度

Si濃度

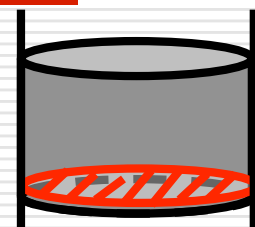


Si濃度

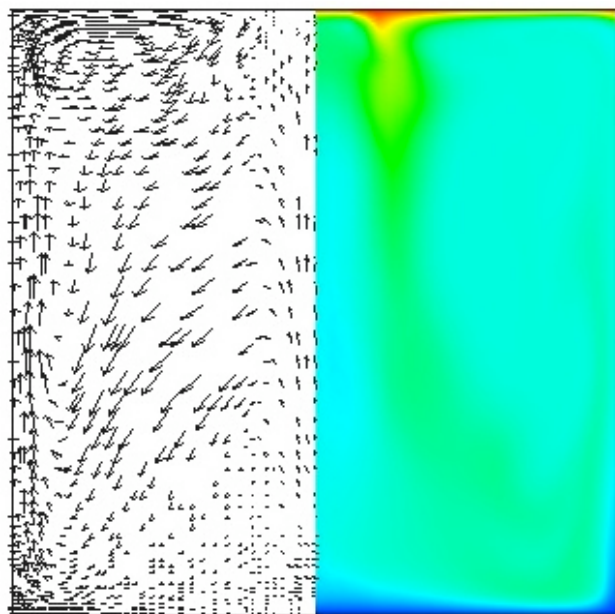
計算結果(Case2:回転のみ)



鉛直断面

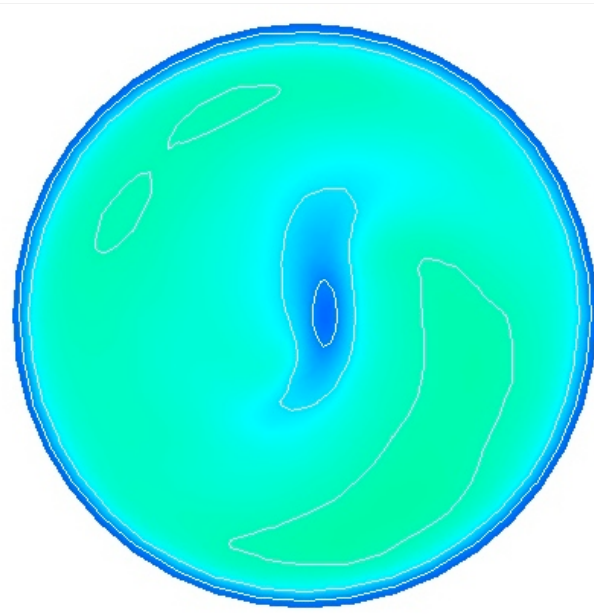


水平断面



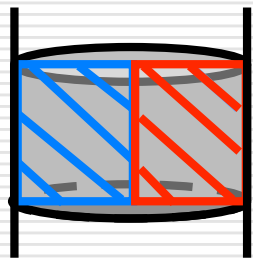
速度

Si濃度

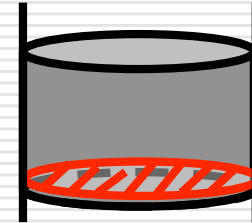


Si濃度

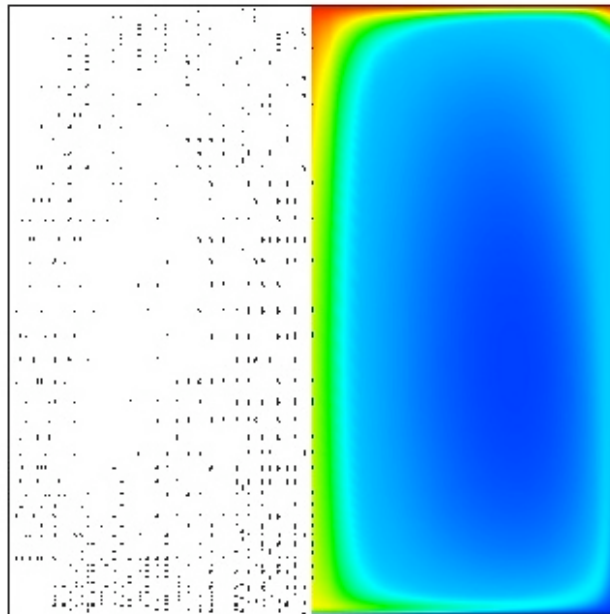
計算結果(Case3:磁場のみ)



鉛直断面

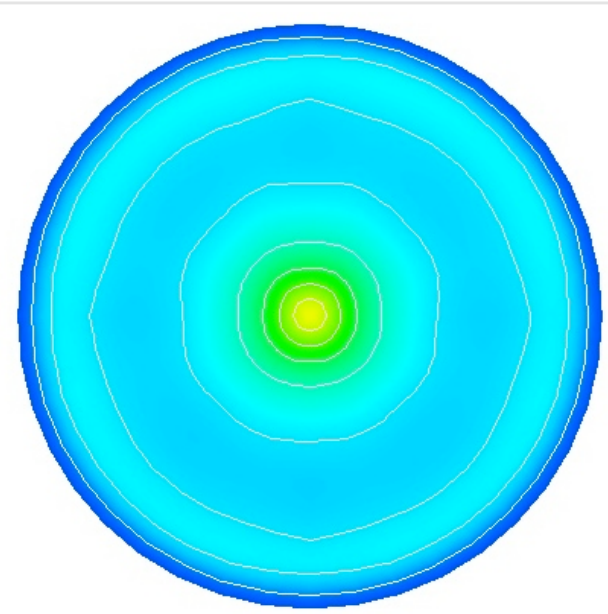


水平断面



速度

Si濃度



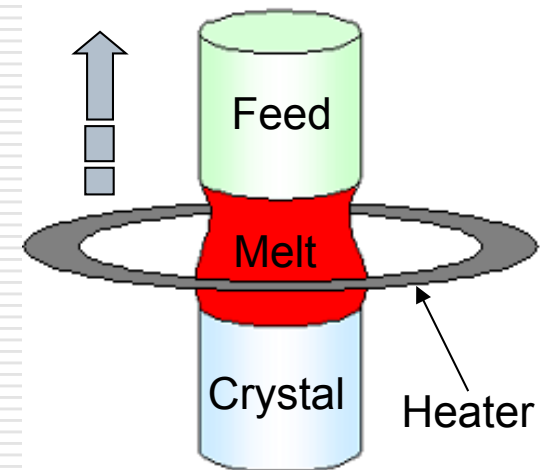
Si濃度

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)

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

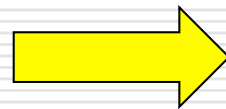
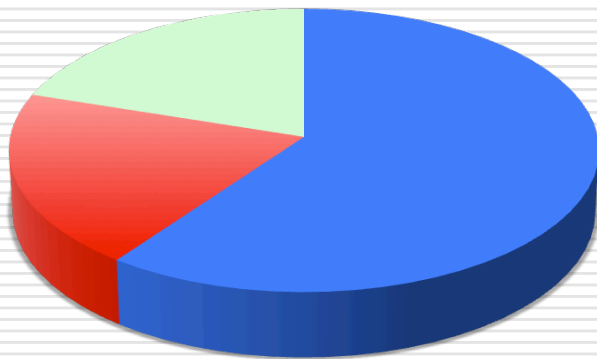
- るつぼ部分の熱伝導
- ふく射の影響



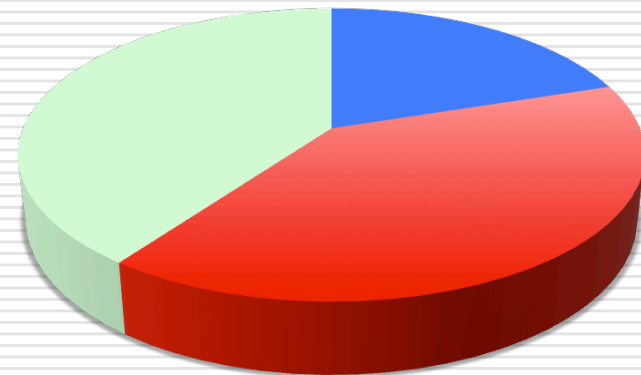
研究室でOpenFOAMを使う意義

- 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
-