

Raport stiintific

privind implementarea proiectului in perioada ianuarie – decembrie 2013

1.3. Realizarea de modelari numerice a curgerii fluidului pentru diferite valori ale campului magnetic si curentului electric pentru o configuratie izotermala cu 4 electrozi

Închiderea circuitului electric se mai poate realiza și cu ajutorul a patru electrozi dispuși simetric la nivelul suprafeței libere, după cum este arătat în fig. 1. Electrozii sunt plasați de-a lungul diagonalelor, la distanțe egale față de centrul suprafeței libere. Curentul electric este introdus în circuit cu ajutorul a două surse de tensiune. Conectarea electrozilor la sursele de tensiune se face astfel încât pe fiecare diagonală a suprafeței libere să existe un electrod prin care curentul electric să intre în topitură și unul prin care curentul să iasă din topitură.

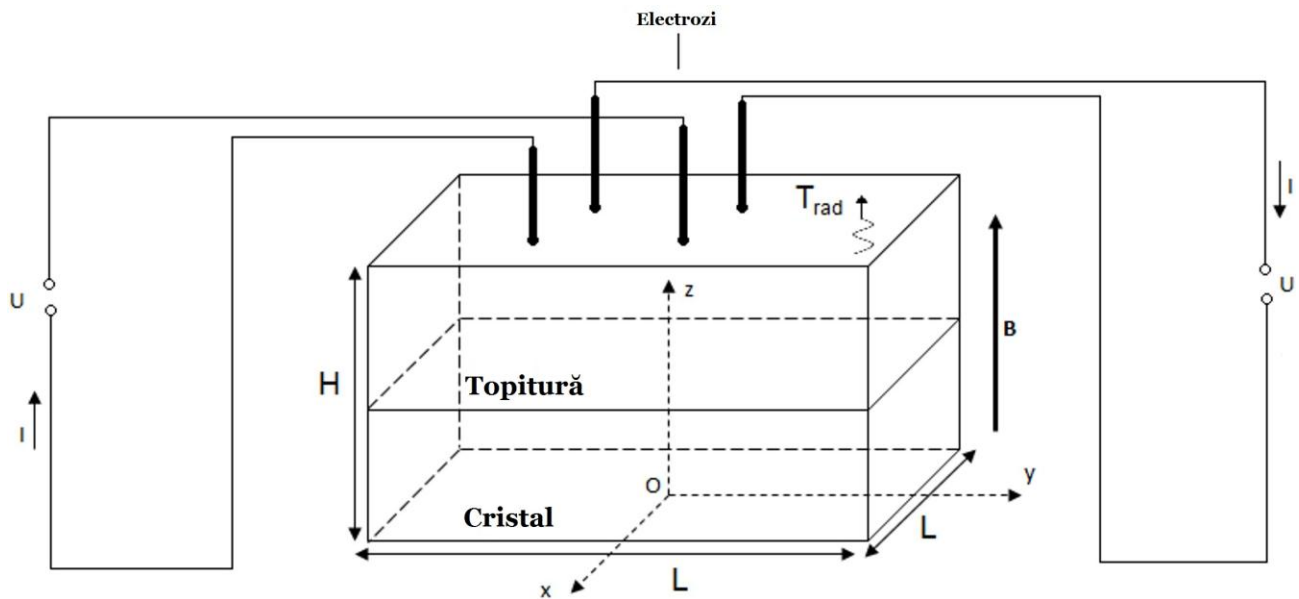


Figura 1. Schema modelului numeric cu patru electrozi utilizat la modelarea numerică a procesului de creștere a Si multicristalin prin metoda solidificării direcționale

Asemenea configurației cu doi electrozi, experimentele de modelare efectuate în aceste condiții au cuprins valorile de 2A, 5A, 10A pentru intensitatea curentului electric și 10 mT pentru inducția câmpului magnetic. Comportamentul topiturii în cele trei situații este similar cazului cu doi electrozi dispuși simetric (fig. 2). La $I = 2A$, se remarcă prezența a patru vortexuri, fiecare cu centrul în punctul de contact al electrozilor cu topitura. Pe măsură ce intensitatea

curentului crește, simetria se rupe, ducând la formarea unui singur vortex. Vitezele de rotație sunt semnificativ mai mici decât la celelalte configurații cu unu sau doi electrozi, fiind necesar un interval mult mai mare de timp pentru omogenizarea topiturii. Acestea continuă să depindă de valorile intensității curentului electric aplicat. Astfel, pentru $I = 2\text{ A}$ viteza medie de rotație din topitură atinge valoarea de 7,6 rpm, crescând la 10,7 rpm pentru $I = 5\text{ A}$ și la 12 rpm pentru $I = 10\text{ A}$.

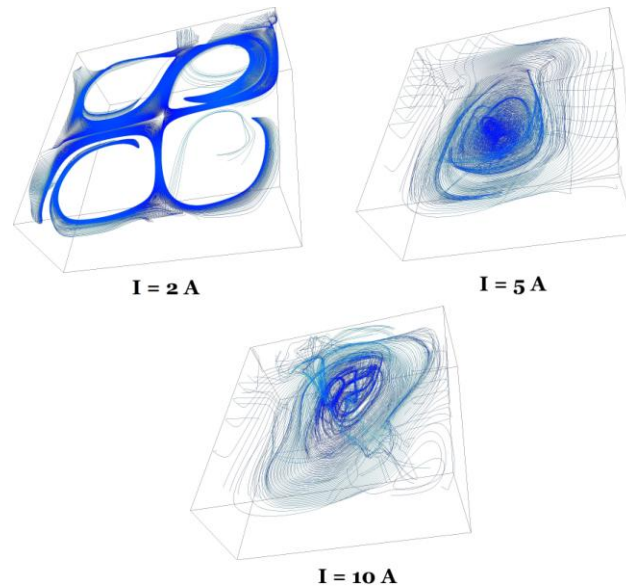


Figura 2. Orientarea curgerii din topitură în apropierea interfeței de solidificare pentru cazul configurației cu 4 electrozi, la diferite valori ale intensității câmpului electric (2, 5, 10 A). $B = 10\text{ mT}$

La valori mici ale intensității curentului electric ($I = 2\text{ A}$), zona din centru a topiturii este slab afectată de curenții de rotație din jurul electrozilor. Cu excepția cazului în care $I = 2\text{ A}$, câmpul termic și viteza de curgere la nivelul suprafeței libere a topiturii sunt asimetrice și imprevizibile (Fig. 3). Cu toate acestea este de remarcat faptul că, la valori mai mari ale intensității $I = 5\text{ A}$; 10 A , viteza din centrul topiturii crește, împiedicând formarea aglomerărilor de impurități.

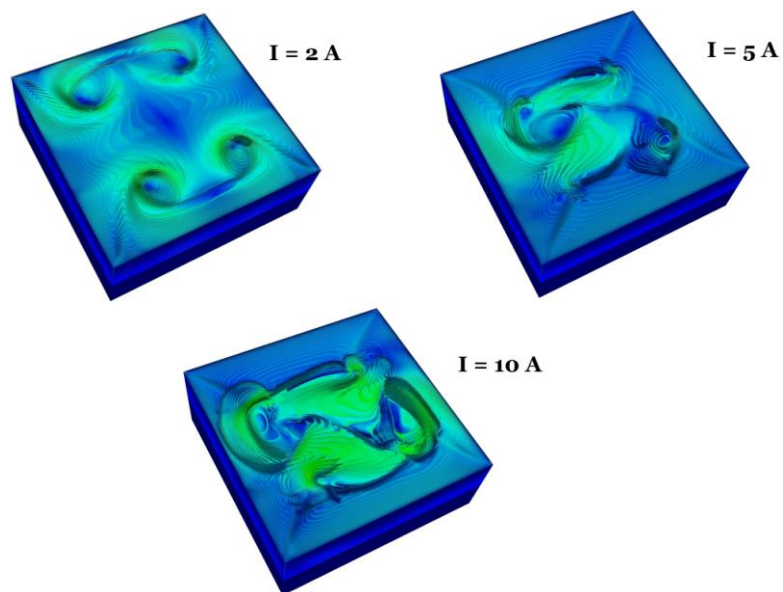


Figura 3. Reprezentarea vitezelor de curgere la nivelul suprafeței libere a topiturii

În fig. 4 este evidențiată forma interfețelor de solidificare pentru cazurile 2A, 5A și 10A, în raport cu interfața determinată în cazul convecției libere. Deflecția interfeței este mai mică decât în cazul convecției libere, înălțimea acesteia nedeășind 0,2cm. Spre deosebire de celelalte configurații cu unul sau doi electrozi, în cazul de față deflecția interfeței nu crește proporțional cu intensitatea curentului electric aplicat. Pentru $I = 2A$, deflecția atinge două maxime în zona contactului electrozilor cu topitura, echilibru care se rupe la 5A și la 10A. Prin urmare, se poate concluziona că aplicarea unui câmp electromagnetic folosind configurația cu patru electrozi nu oferă un control precis asupra interfeței de solidificare.

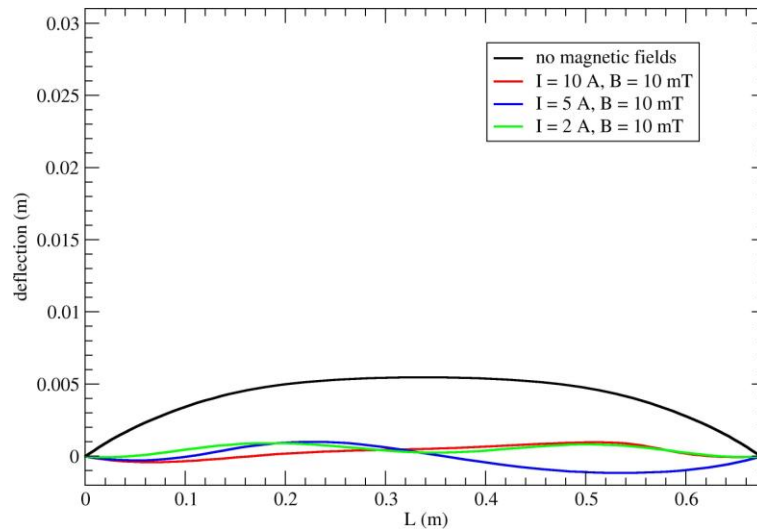


Figura 4. Forma interfeței de solidificare pentru cazul convecției sub influența unui câmp electromagnetic format dintr-un câmp magnetic staționar vertical de inducție $B = 10 \text{ mT}$ și un curent electric continuu la diferite valori ale intensității, aplicat cu ajutorul a patru electrozi

1.4 Dezvoltarea programului STHAMAS3D pentru a rula pe supercomputerul IBM Blue Gene

Pentru obținerea unei soluții reale pornind de la o soluție arbitrară folosind STHAMAS3D sunt necesare cel puțin 800 de secunde în timp real cu un pas de timp de 0.1 secunde. Ceea ce înseamnă un efort de calcul foarte mare pentru efectuarea de studii parametrice. De aceea, programul de simulare STHAMAS3D a fost modificat pentru a fi rulat pe unul dintre cele mai performante supercomputere BlueGene/P pus la dispoziție de Universitatea de Vest din Timișoara pentru efectuarea calculelor de înaltă performanță.

Supercomputerul BlueGene/P aflat la UVT are următoarele caracteristici:

- putere de calcul
 - 1x BG/P Rack
 - CPU: 1024x Quad-Core PowerPC-450 850Mhz;
 - RAM: 4GB/CPU
 - inter-connect: 3D-Torus network
- sistem de stocare
 - 2x I/O Nodes

- 2x IBM DS3524 SAN's
 - HDD: 48x 320GB SAS
 - connectivity: 10GbE Ethernet

Rezultatele obținute în urma rulării au fost comparate cu cele obținute în urma rulării programului de simulare, în aceleași condiții, pe clusterul Nanosim al Facultății de Fizică din cadrul Universității de Vest din Timișoara. Nanosim este un cluster HP-AMD-Opteron 2.2 GHz (1 Gbit/s switched) cu 12 noduri de calcul.

Geometria pe care am utilizat-o constă din topitură și cristal de siliciu și are dimensiunile de $38 \times 38 \times 40 \text{ cm}^3$. Calculele tridimensionale dependente de timp au fost realizate cu programul software STHAMAS3D ale cărui librării și subrutine au fost adaptate pentru a rula atât pe Nanosim cât și pe supercomputerul BlueGene/P.

Domeniul de calcul este subîmpărțit în două blocuri, unul corespunzător topiturii și unul corespunzător cristalului. Pentru fiecare bloc avem 50 de noduri pe direcțiile x și y și 70 de noduri pe direcția z, însemnând că rețea de calcul constă din 350.000 de volume de control.

În STHAMAS3D pentru rezolvarea ecuațiilor dependente de timp sunt necesare mai multe iterații la fiecare pas de timp. În fișierul de input al parametrilor se poate seta numărul maxim de iterații ce se efectuează la fiecare pas de timp. Dacă criteriul de convergență este atins înainte de efectuarea numărului maxim de iterații programul trece la următorul pas timp. Pentru testele efectuate, timpul de rulare s-a măsurat după 1000 de iterații și s-au luat în considerare 10 și 25 de pași intermediari.

Rezultatele înregistrate pentru timpul de rulare pe cele două sisteme de calcul sunt prezentate în Figura 1.

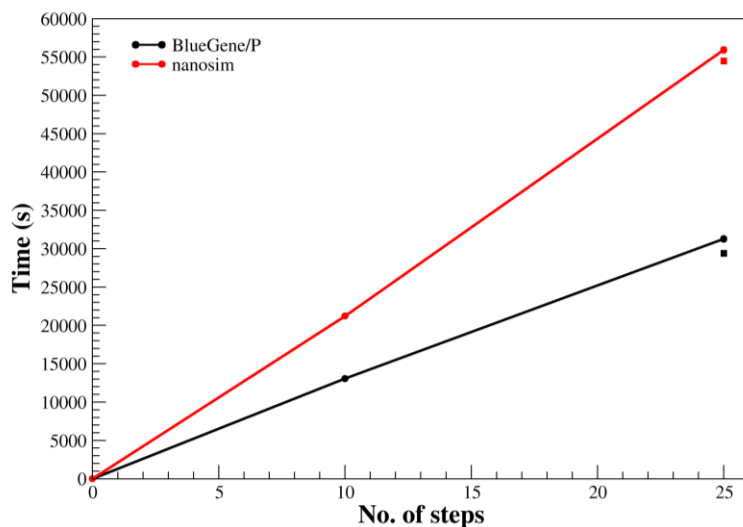


Figura 1. Timpul de rulare al programului STHAMAS3D pe diferite sisteme de calcul și în diferite condiții

Din Figura 1 se observă că dacă la fiecare pas de timp se efectuează 10 iterații intermediare, timpul de rulare pe Nanosim este de 21207,672 s, iar pe BlueGene/P este de 13048,5 s. Ceea ce înseamnă că, prin adaptarea codului pentru a fi rulat pe BlueGene/P, se obține o scădere a timpului total de rulare de aproape 40%.

Dacă, însă, la fiecare pas de timp se efectuează 25 de pași intermediari, așa cum este de așteptat timpul de calcul crește, dar și diferența dintre timpul total de rulare înregistrat pe BlueGene/P și cel înregistrat pe Nanosim este mai mare. În acest caz diferența, după 1000 de iterații efectuate pe supercomputerul BlueGene/P codul este mai rapid cu 44% față de rularea, cu aceiași parametri, a programului de simulare STHAMAS3D pe clusterul Nanosim.

În cazurile prezentate mai sus, rezultatele simulărilor sunt scrise la fiecare 100 de iterații. Este cunoscut faptul că scrierea datelor în fișierele de output ar putea să consume mult timp de calcul, de aceea s-a studiat și un caz în care rezultatele simulărilor au fost scrise o singură dată, la sfârșitul celor 1000 de iterații. Valorile înregistrate în acest caz sunt marcate cu pătrate în Figura 1. Se observă că, atât pe BlueGene cât și pe Nanosim, timpul de rulare, după 1000 de iterații scade față de cazul în care datele se scriu și la pași de timp intermediari. Această scădere nu este, însă, foarte semnificativă și de aceea proporția dintre timpul de rulare înregistrat pe cele două sisteme se păstrează aproape la fel ca în cazurile precedente.

2.4 Efectuarea de masuratori pentru viteza fluidului la diferite valori ale campului magnetic si curentului electric.

Cu ajutorul Velocimetrului cu ultrasunete DOP3010 achizitionat și comisionat în cadrul activității 2.3 au fost realizate măsuratori de viteză de curgere în interiorul configurației experimentale obținute din activitatea 2.2. Astfel într-un creuzet de plexiglas ce emulează forma creuzetelor industriale de obținere a siliciului multicristalin prin solidificare direcțională a fost turnată o topitura de GaInSn lichidă la temperatura camerei. Topitura este pusă în contact cu un curent electric prin intermediul a doi electrozi plasați într-un capac al creuzetului. Au fost alese doua configurații ale electrozilor: una simetrică, cu electrozii plasați la o treime, respectiv două treimi pe lungimea diagonalei și alta asimetrică, cu un electrod plasat în centrul creuzetului și altul la o treime de marginea exterioară. Acestea sunt ilustrate în *Figura I*

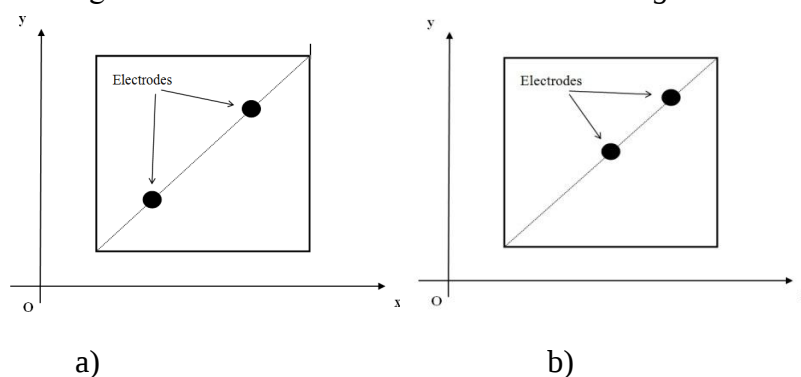


Figura I. a) configurația simetrică b) configurația asimetrică a electrozilor

Creuzetul a fost plasat în întrefiereul electromagnetului (**realizat în activitatea 2.1**), după cum se observă în *Figura II*, unde i s-a aplicat un camp magnetic vertical de 10mT (pentru ambele configurații), respectiv de 3 mT (doar pentru configurația simetrică).

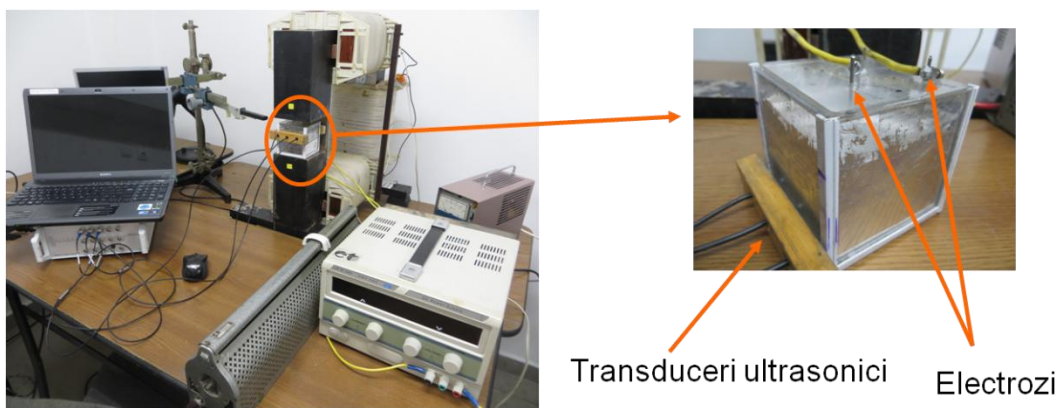


Figura II. Configurație experimentală cu electromagnet, velocimetru cu transducere ultrasonici, creuzet cu topitură de GaInSn pus în contact electric de electrozi alimentați de la sursă de curent continuu

Perpendicular pe creuzet a fost aplicat un montaj cu senzori (transducere) ultrasonici la trei nivele (5 mm, 25 mm și 40 mm) măsurându-se concomitent profilele de viteză în adâncime (proiecția vitezei pe axa ce trece prin centrul fiecărui transducer) pentru trei poziții (9 mm, 35 mm și 61 mm). Aceste măsurători au fost efectuate la valorile de câmp magnetic alese pentru cele două configurații de electrozi și la valori ale curentului de 2 A, 5 A și respectiv de 10 A.

Configurația asimetrică

Pentru toate măsurătorile, independent de forma profilului corespunzător unei structuri de curgere, se observă că, pe măsură ce valoarea intensității curentului electric este crescută, curgerea (profilul) rămâne similară, cu valori crescătoare ale vitezei.

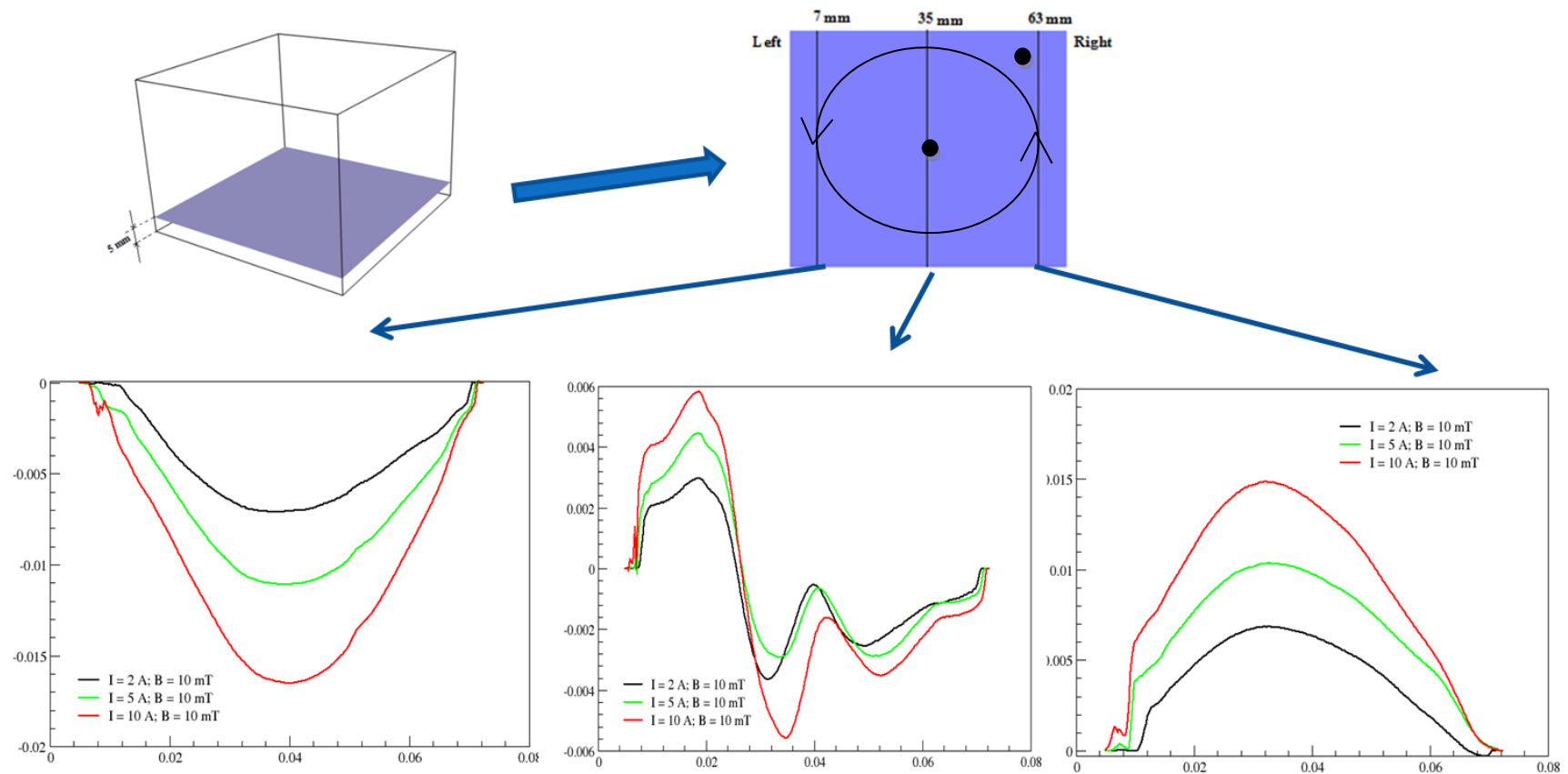


Figura III. Componenta vitezei de curgere de-a lungul axei celor 3 transducere plasate la 9 mm, 35 mm și 61 mm față de peretele din stânga al creuzetului, în planul aflat la înălțimea 5 mm față de bază pentru $I = 2\text{ A}$, 5 A și 10 A la $B = 10\text{ mT}$, în cazul unei configurații asimetrice a electrozilor

În Figura III se observă profilele de viteză de-a lungul axei celor 3 transducere, în planul aflat la înălțimea de 5 mm. Structura de curgere pare complet dominată de electrodul din mijloc, profilele de la 9 mm, respectiv 61 mm indicând o valoare negativă cu un maxim la mijloc, respectiv una pozitivă cu un maxim poziționat la fel, corespunzătoare unei mișcări de rotație în jurul centrului. Profilul de la 35 mm arată o trecere de la curgerea înspre senzor în prima jumătate și dinspre el în a doua jumătate, maximum din centru putând fi explicat prin proeminența unei structuri centrale de vortex ce se prelungește în jos pe axa ce conține electrodul. De altfel, aici se și înregistrează cele mai mari valori ale vitezei dintre toate profilele asimetrice, fapt coerent cu contactul dintre structura de vortex și fundul creuzetului, ce ar determina o recirculare în plan orizontal a componentei curgerii ce cobora pe verticală prin vortex.

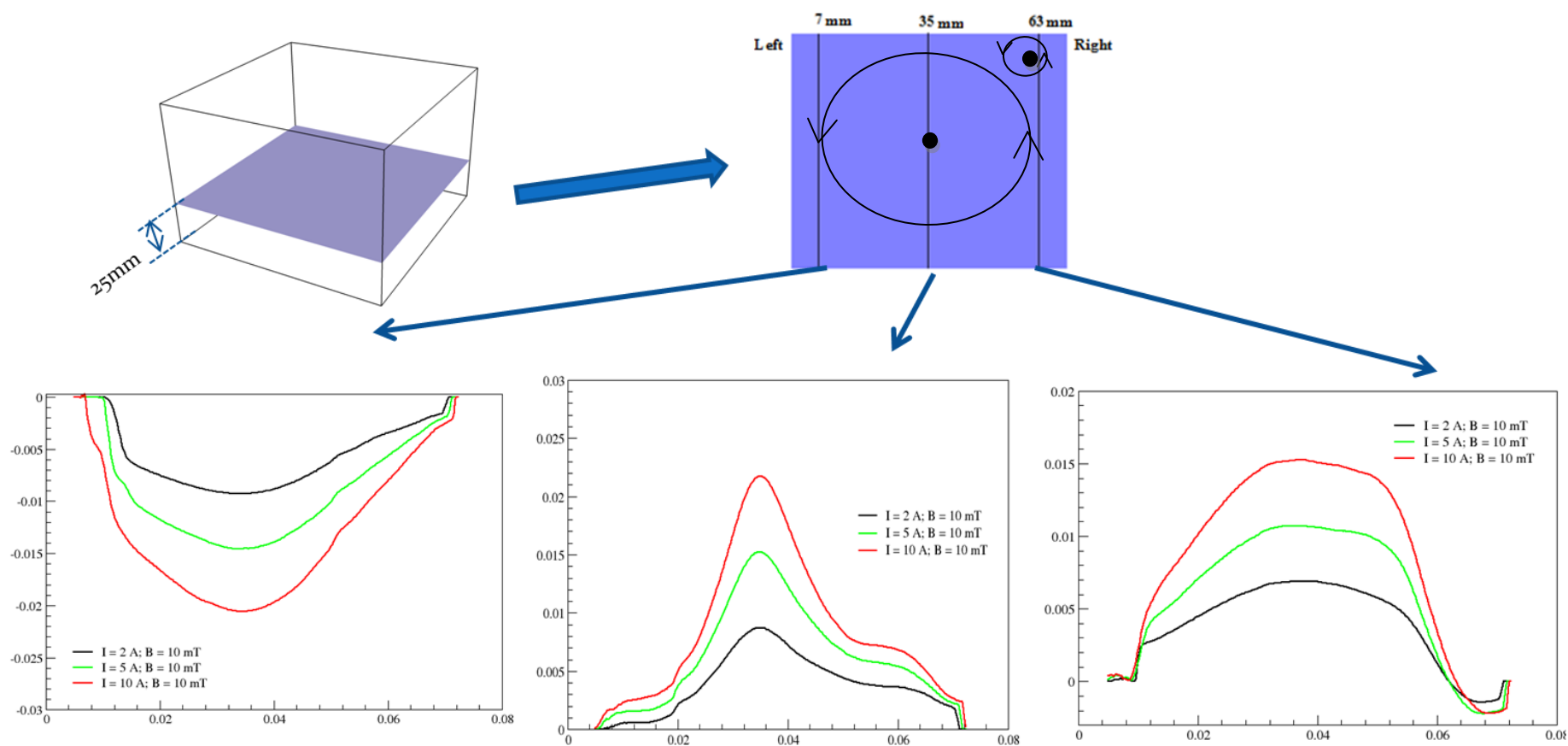


Figura IV. Componenta vitezei de curgere de-a lungul axei celor 3 transducere plasate la 9 mm, 35 mm și 61 mm față de peretele din stânga al creuzetului, în planul aflat la înălțimea 25 mm față de bază pentru $I = 2\text{ A}$, 5 A și 10 A la $B = 10\text{ mT}$, în cazul unei configurații asimetrice a electrozilor

În *Figura IV*, unde sunt reprezentate profilele de curgere corespunzătoare planului de la 25 mm față de bază, se observă aceeași tendință de dominanță a electrodului central asupra structurii de curgere. Profilul din mijloc nu surprinde o schimbare a direcției de curgere, ci doar un maxim al vitezei de rotație în centru, ceea ce indică o deplasare laterală a centrului rotației. Această asimetrie este confirmată și de o deplasare a minimumului profilului vitezei de la 9 mm dinspre zona de mijloc înspre origine. La o examinare atentă a profilului din dreapta (61 mm) se observă pe final și efectul electrodului plasat asimetric, care determină o rotație în sens opus, explicându-se astfel valorile negative de la capătul profilului.

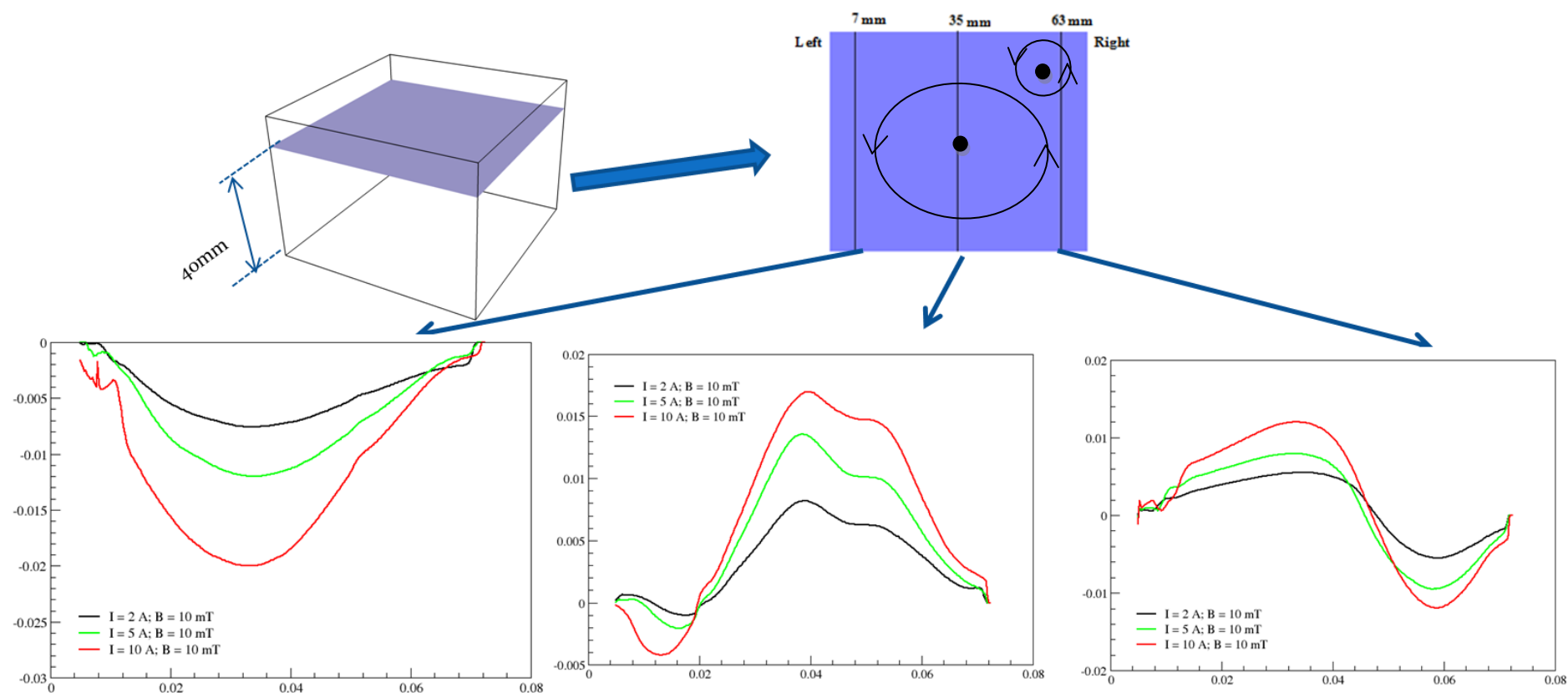


Figura V. Componenta vitezei de curgere de-a lungul axei celor 3 transducere plasate la 9 mm, 35 mm și 61 mm față de peretele din stânga al creuzetului, în planul aflat la înălțimea 40 mm față de bază pentru $I = 2$ A, 5 A și 10 A la $B = 10$ mT, în cazul unei configurații asimetrice a electrozilor

În *Figura V* se observă profilele de viteză corespunzătoare structurii de curgere din planul situat la 40 mm înălțime față de baza creuzetului. Situația pare similară cu cea din *Figura IV*, indicând o deplasare a vortexului central spre stânga și o proeminență mai mare a structurii de curgere determinată de electrodul plasat lateral (schimbarea direcției de curgere la finalul profilului de la 61 mm). În cazul profilului de la 35 mm se observă valori maxime mai mici (0.015 m/s

față de 0.02 m/s la 25 mm) dar o distribuție a acestora pe o lungime mai mare, aspect corespunzător probabil cu antrenarea unei porțiuni mai mari din topitura de la suprafață înspre baza, asemenea unui lichid ce se scurge spre gura unei pâlnii (vortex vertical).

Configurația simetrică

Pentru toate măsurătorile, la 10 mT, independent de forma profilului corespunzător unei structuri de curgere, se observă că, pe măsură ce valoarea intensității curentului electric este crescută, curgerea (profilul) rămâne similară, cu valori crescătoare ale vitezei. Acest lucru nu este însă valabil dacă se aplică un câmp magnetic mai mic (3mT și un curent de 10 A). Schimbarea intensității curentului electric influențează valoarea termenului sursă a curgerii (forța Lorentz care este produsul densității de curent cu câmpul magnetic), pe când modificarea valorii câmpului magnetic are și un alt efect pe lângă modificarea forței Lorentz, probabil legat de o amortizare a recirculației topiturii în plan vertical (direcția câmpului magnetic), diferită pentru diferite valori ale câmpului magnetic [1].

Pentru a înțelege structura de curgere în cazul poziționării simetrice a celor doi electrozi, care este mai complexă, față de cazul asimetric, este necesară o primă analiză mai aproape de suprafață. În *Figura VI* sunt reprezentate profilele de viteză pentru curgerea în planul de la 40 de mm față de bază. Profilul de la 9 mm indică o curgere mai puternică în sensul dinspre senzor (pozitiv), aproape de electrod și una mai slabă, în sens opus, mai departe de origine. Profilul de la 61 mm indică o curgere mai slabă înspre senzor (valori negative ale vitezei) aproape de origine și una puternică, în jurul poziției electrodului, de sens opus (valori pozitive ale vitezei) mai departe. Acest fapt poate fi explicat prin existența a două bucle de convecție a topiturii în jurul electrozilor, ce se învârt în sens opus, fapt confirmat și de observațiile vizuale de la suprafața topiturii. Privind profilul de la 35 mm, avem o confirmare a curgerii înspre senzor provenind de la ambii electrozi, dar și o indicație că maximum vitezei de curgere este deplasat în afara liniei mediane, spre diagonala secundară (cea care nu conține electrozii). Observații vizuale pe o configurație similiară cu o soluție apoasă de NaOH au indică posibilitatea unei curgeri înspre colțul de jos al diagonalei mici a creuzetului (din *Figura VI*) care atinge pereții și apoi este recirculată în jos, în planul vertical.

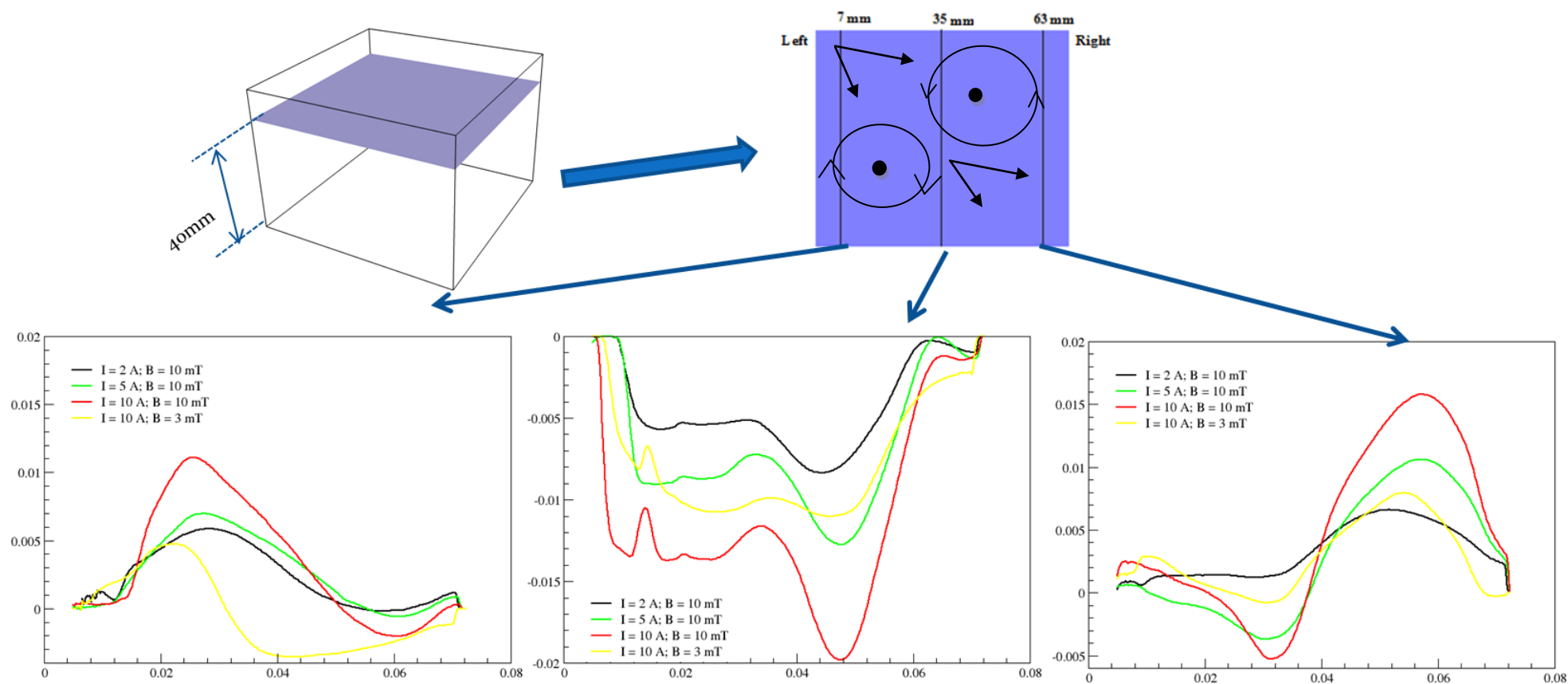


Figura VI. Componenta vitezei de curgere de-a lungul axei celor 3 transducere plasate la 9 mm, 35 mm și 61 mm față de peretele din stânga al creuzetului, în planul aflat la înălțimea 40 mm față de bază pentru $I = 2$ A, 5 A și 10 A la $B = 10$ mT, respectiv $I = 10$ A și $B = 3$ mT, pentru o configurație simetrică a electrozilor

În *Figura VII* sunt reprezentate profilele de viteză pentru curgera în planul de la 25 de mm față de bază. În mare, se păstrează caracteristicile curgerii din planul de la 40 mm, doar că structura pare mai complexă, posibil turbulentă.

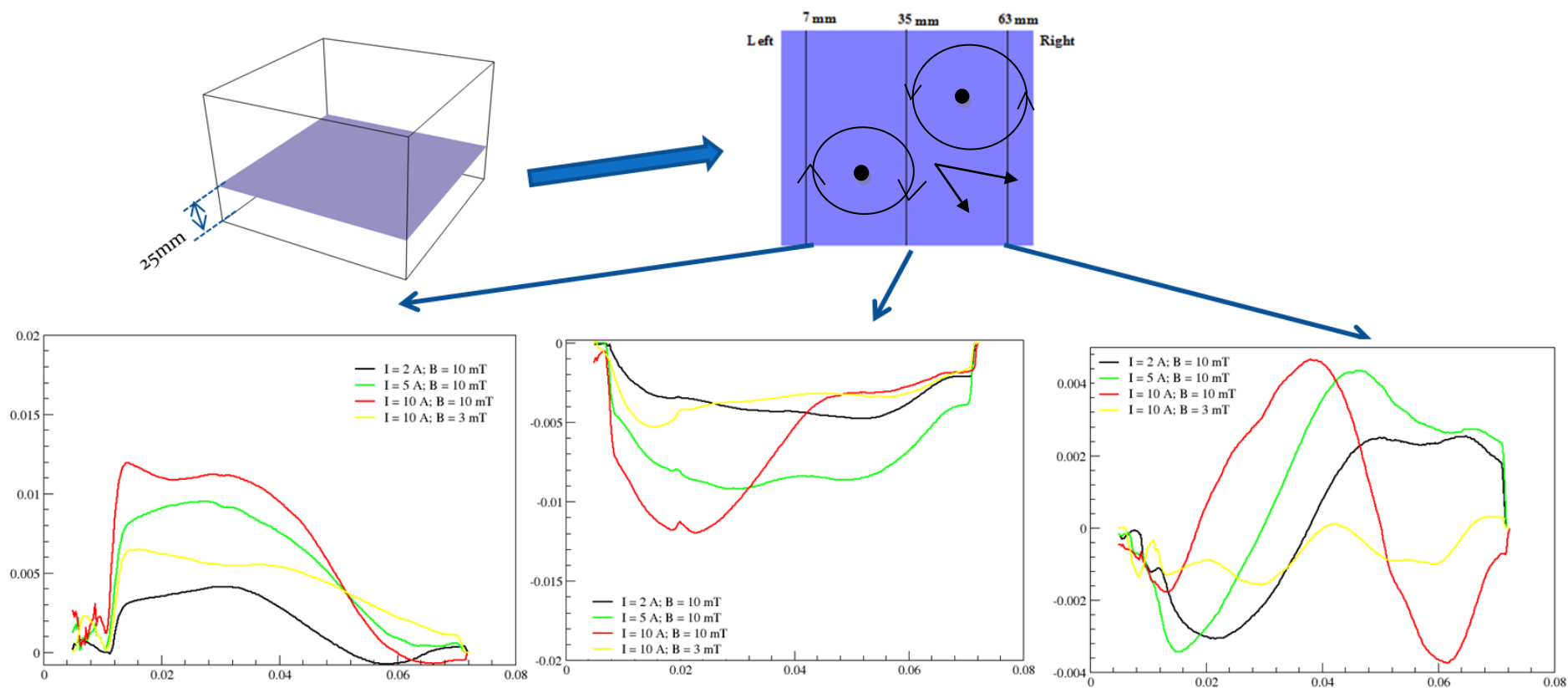


Figura VII. Componenta vitezei de curgere de-a lungul axei celor 3 transducere plasate la 9 mm, 35 mm și 61 mm față de peretele din stânga al creuzetului, în planul aflat la înălțimea 40 mm față de bază pentru $I = 2$ A, 5 A și 10 A la $B = 10$ mT, respectiv $I = 10$ A și $B = 3$ mT, pentru o configurație simetrică a electrozilor

Din *Figura VIII* sunt reprezentate profilele de viteză pentru curgerea în planul de la 5 de mm față de bază. Toate profilele de curgere, indiferent de poziție indică valori mari pozitive ale vitezei în zona apropiată de senzorii ultrasonici. Acestea rămân pozitive de-a lungul profilului, ceea ce nu corespunde unei structuri de rotație, ci ca și cum ar proveni de la o sursă. Acesta (redată în schema de la *Figura VIII*) poate proveni de la curgerea din planul vertical, care a fost observată în planurile de la 25 mm și 40 mm. Topitura, atunci când ajunge la baza creuzetului (dinspre diagonala secundară) este recirculată pe fundul acestuia, urcând în colțul opus (sau pereții opuși).

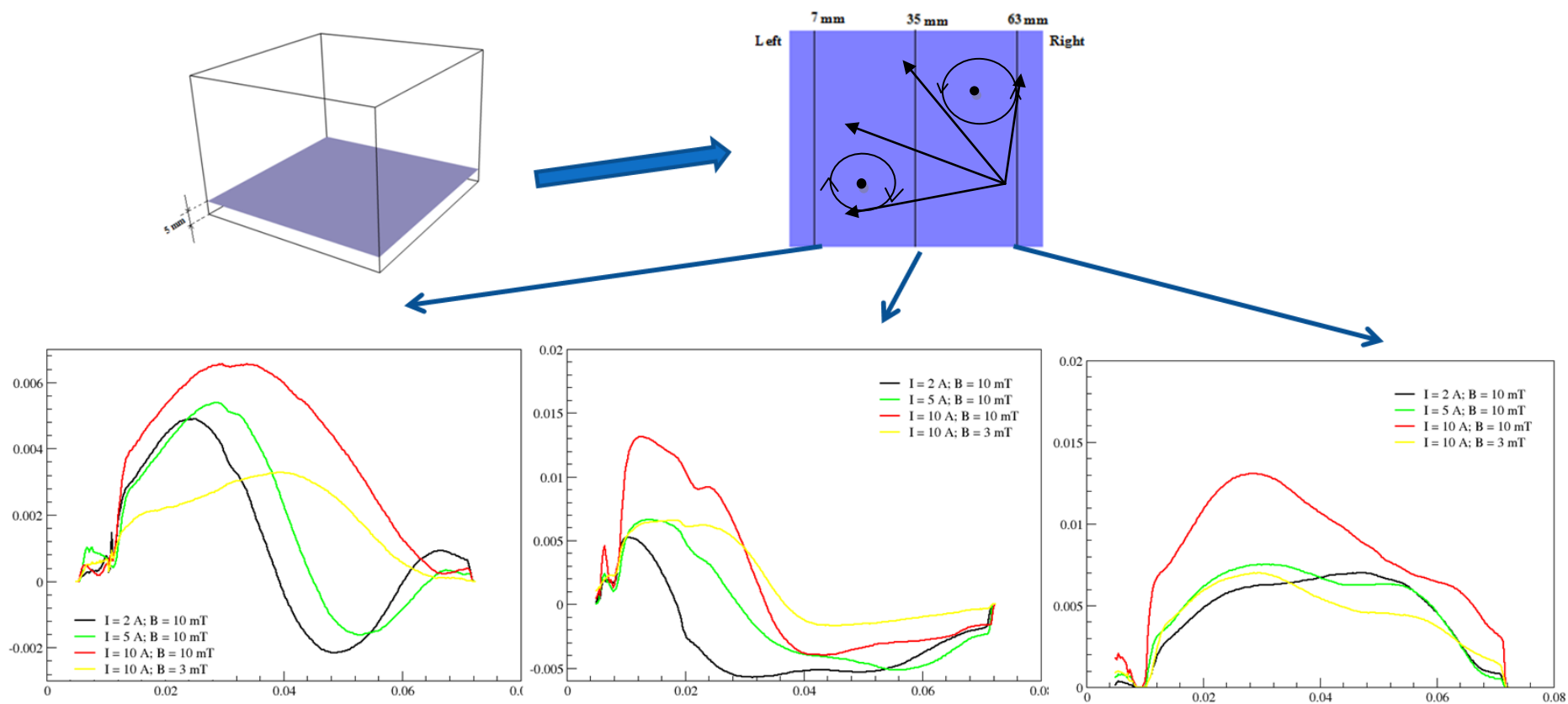


Figura VIII. Componenta vitezei de curgere de-a lungul axei celor 3 transducere plasate la 9 mm, 35 mm și 61 mm față de peretele din stânga al creuzetului, în planul aflat la înălțimea 35 mm față de bază pentru $I = 2$ A, 5 A și 10 A la $B = 10$ mT, respectiv $I = 10$ A și $B = 3$ mT, pentru o configurație simetrică a electrozilor

Bibliografie

[1] Numerical study of different types of magnetic fields on the interface shape in directional solidification of multi-crystalline silicon ingots, C. Tanasie, D.Vizman, J. Friedrich, J. Crystal Growth, 318 (2011) 293-297

Director proiect,