

На правах рукописи

Гусев Андрей Олегович

**Разработка и исследование численных методов  
решения задачи о фазовом переходе  
в многокомпонентном растворе**

Специальность 1.1.6 – Вычислительная математика

**АВТОРЕФЕРАТ**

диссертации на соискание ученой степени  
кандидата физико-математических наук

Москва – 2023

Работа выполнена в Федеральном государственном учреждении  
«Федеральный исследовательский центр Институт прикладной математики  
им. М.В. Келдыша Российской академии наук»

**Научный руководитель:** **Щерица Ольга Владимировна**  
к.ф.–м.н., старший научный сотрудник  
ИПМ им. М.В. Келдыша РАН

**Официальные оппоненты:** **Любимова Татьяна Петровна**  
д.ф.–м.н, профессор, заведующий лабораторией  
вычислительной гидродинамики  
ИМСС УрО РАН

**Еленина Татьяна Георгиевна**  
к.ф.–м.н, младший научный сотрудник  
кафедры математического моделирования  
и информатики Физического факультета  
МГУ им. М.В. Ломоносова

**Ведущая организация:** ФГАОУ ВО «Московский физико-технический  
институт (национальный исследовательский  
университет)»

Защита состоится 27 апреля 2023 г. в 11:00 часов на заседании  
диссертационного совета 24.1.237.01, созданного на базе

ИПМ им. М.В. Келдыша РАН, расположенного по адресу: 125047, г. Москва,  
Миусская пл., д.4

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке и на сайте

ИПМ им. М.В. Келдыша РАН

[https://www.keldysh.ru/council/3/D00202403/gusev\\_ao\\_diss.pdf](https://www.keldysh.ru/council/3/D00202403/gusev_ao_diss.pdf)

Автореферат разослан «\_\_\_\_\_» \_\_\_\_\_ 2023 г.

Ученый секретарь

диссертационного совета 24.1.237.01

кандидат физико-математических наук

Корнилина М.А.

## Общая характеристика работы

**Актуальность работы.** Математическое моделирование широкого круга физических явлений и технологических процессов приводит к необходимости решения задач с подвижными границами, положение которых определяется физико-химическими процессами, протекающими в системе. Внутренние подвижные границы, положение которых необходимо определять в ходе решения, возникают, например, в задачах металлургии и полупроводниковых технологий при моделировании процессов плавления (растворения) и кристаллизации. Наличие подвижных границ в математической модели значительно усложняет процесс ее численного исследования.

Одним из распространенных способов получения современных полупроводниковых материалов является выращивание кристаллов из жидкой фазы. Натурные эксперименты в этой области являются длительными, трудоемкими и дорогостоящими, поэтому математическое моделирование стало неотъемлемой частью исследования и оптимизации технологических режимов. В задачах полупроводниковых технологий необходимо определять положение межфазной границы с высокой точностью. При этом температура фазового перехода в многокомпонентных системах не является постоянной и определяется составами твердой и жидкой фаз. На межфазной границе температура и концентрация удовлетворяют балансным соотношениям, вытекающим из законов сохранения теплоты и массы, и фазовой диаграмме системы — как правило, нелинейным соотношениям, связывающим температуру фазового перехода и равновесные концентрации компонентов. Существует широкий круг методов решения задач с подвижными границами. Однако большинство подходов ориентировано на решение классической задачи Стефана. Методам решения задачи о фазовом переходе в многокомпонентной среде уделяется значительно меньше внимания. Вместе с тем при решении этого класса задач возникают дополнительные трудности, связанные с численной реализацией условий на границе раздела фаз.

Основу математических моделей процесса кристаллизации многокомпонентного соединения составляют уравнения Навье — Стокса, уравнения тепло-массопереноса в твердой и жидкой фазах и условия термодинамического равновесия на межфазной границе. Области, в которых рассматриваются основные уравнения, с течением времени изменяются. При этом скорость движения межфазной границы в многокомпонентных системах определяется не только балансным соотношением для внутренней энергии на фронте кристаллизации (условие Стефана), но и законами сохранения массы для каждого из компонентов, а также нелинейными соотношениями, описывающими поверхностные процессы, протекающие на границе раздела. Численное исследование таких моделей стандартными средствами, доступными в коммерческих программных комплексах, сопряжено со значительными трудностями. Поэтому возникает потребность в разработке и исследовании вычислительных алгоритмов, сконструированных с учетом конкретных особенностей задачи о кристаллизации многокомпонентного раствора — изменения геометрии расчетной области, наличия процессов с существенно различающимися характерными временами, высокой длительности технологических режимов и т.д. При этом, с точки зрения практического применения, особый интерес представляют численные методы, позволяющие получать детальную информацию о процессе кристаллизации существенно быстрее, чем в случае проведения натуральных экспериментов.

**Целью** работы является построение и исследование численных методов решения задачи о фазовом переходе в многокомпонентном растворе. Для достижения этой цели необходимо было решить следующие **задачи**:

- построить консервативную разностную схему для задачи о фазовом переходе в многокомпонентном растворе в цилиндрической системе координат в осесимметричном приближении. Исследовать методы решения сеточных уравнений, аппроксимирующих уравнения движения жидкости и тепло- и массопереноса в многокомпонентной среде с фазовым переходом;

- построить консервативную разностную схему для двухфазной задачи Стефана на движущейся сетке, согласованной с формой границы раздела фаз, в исходной системе координат. Определить закон движения узлов сетки, обеспечивающий алгебраическую эквивалентность разностных схем, построенных на подвижной сетке и методом выпрямления фронта;
- продемонстрировать возможности разработанных алгоритмов. Провести численное моделирование процесса получения многокомпонентного соединения методом вертикальной направленной кристаллизации.

**Научная новизна.** Разработаны методы численного исследования двумерной модели процесса кристаллизации бинарного соединения, учитывающей тепломассоперенос в твердой и жидкой фазах, движение фронта кристаллизации и зависимость температуры фазового перехода от состава фаз. С помощью методов, основанных на явном выделении границы фазового перехода, построены разностные схемы, обеспечивающие выполнение дискретных аналогов законов сохранения массы, внутренней и кинетической энергии. Выделен класс схем, для которых метод выпрямления фронта и метод, основанный на использовании подвижных сеток, согласованных с формой фронта кристаллизации, алгебраически эквивалентны. Проведен анализ устойчивости различных методов численной реализации нелинейных условий на границе раздела фаз. Получены и доказаны условия сходимости итерационных методов, основанных на последовательном и совместном определении полей температуры и концентрации. Показано, что совместный алгоритм решения задачи обладает значительным запасом устойчивости и позволяет численно исследовать фазовые переходы в широком диапазоне физических параметров.

**Теоретическая и практическая значимость диссертационной работы.** Для задачи о фазовом переходе в многокомпонентном растворе построен вычислительный метод, позволяющий проводить исследования промышленных режимов выращивания монокристаллов. Результаты расчетов, полученные в

работе, согласуются с имеющимися теоретическими и экспериментальными данными, и отражают качественные особенности рассмотренных методов выращивания полупроводниковых материалов из жидкой фазы.

Экспериментальный подбор оптимальных параметров технологического режима является крайне дорогостоящим. Длительность эксперимента может достигать нескольких недель, при этом отсутствует возможность следить за ходом процесса, так как рост кристалла протекает в непрозрачном тигле, температура в котором составляет несколько тысяч градусов. О характере процессов внутри ростовой камеры можно судить лишь косвенно, проанализировав распределения состава в различных сечениях монокристалла по окончании эксперимента. Предложенный вычислительный алгоритм позволяет проводить многопараметрические исследования технологических режимов и получать детальную информацию о физико-химических процессах, сопровождающих рост кристалла. В работе показано, что даже в случае проведения расчетов на персональном компьютере, результаты моделирования удается получить за время существенно меньшее длительности реального физического процесса.

**Методы исследования научной проблемы.** В работе рассматривается математическая модель процесса кристаллизации многокомпонентного раствора, основу которой составляют уравнения Навье — Стокса, уравнения тепло-массопереноса в твердой и жидкой фазах и условия термодинамического равновесия на границе раздела фаз. Для отслеживания положения фронта кристаллизации применяются методы, основанные на явном выделении границы фазового перехода. Разностные схемы строятся с помощью интегро-интерполяционного метода (метода конечных объемов). Для анализа устойчивости методов решения системы нелинейных сеточных уравнений, описывающих тепло-массо-перенос в многокомпонентной среде, рассматривается упрощенная разностная модель, отражающая характерные особенности задачи и поддающаяся исследованию аналитическими методами.

**Степень достоверности и апробация результатов.** Результаты рабо-

ты были представлены на следующих научных конференциях и семинарах

- Всероссийская научная конференция «Теоретические основы конструирования численных алгоритмов и решение задач математической физики», посвященная памяти К.И. Бабенко, Пущино, Россия (2022);
- Международная научная конференция «Фундаментальные и прикладные задачи механики (FAPM-2021)», Москва, Россия (2021);
- International symposium «Non-equilibrium processes in continuous media», Пермь, Россия (2021);
- VIII Международная конференция «Кристаллизация: компьютерные модели, эксперимент, технологии», Ижевск, Россия (2019);
- FDM'18: Seventh conference of finite difference methods: theory and applications, Лозенец, Болгария (2018);
- Международная научная конференция «Фундаментальные и прикладные задачи механики (FAPM-2017)», Москва, Россия (2017);
- Международная научная конференция «Современные проблемы математической физики и вычислительной математики», Москва, Россия (2016);
- XIV International seminar «Mathematical models and modeling in laser plasma processes and advanced science technologies», Москва, Россия (2016).

Результаты работы также обсуждались в Институте прикладной математики им. М.В. Келдыша на семинарах «Вычислительные методы и математическое моделирование» им. Ю.П. Попова под руководством проф. М.П. Галанина и проф. В.М. Чечёткина.

**Публикации.** По теме диссертации опубликованы двенадцать работ [1—12]. Из них десять [1—3; 5; 6; 8—12] опубликованы в журналах из перечня рецензируемых научных изданий, рекомендованных Высшей аттестационной комис-

сией, шесть [3–5; 7; 9; 10] — в журналах, индексируемых в базе данных Scopus, четыре [5; 7; 9; 10] в журналах, индексируемых в базе данных Web of Science.

**Личный вклад автора.** Автором самостоятельно построены разностные схемы, представленные в работе, доказаны утверждения о свойствах рассмотренных численных методов, разработан параллельный программный комплекс для численного исследования процессов тепло- и массопереноса в среде с фазовым переходом, получены все численные результаты. Постановка задачи и обсуждение результатов работы осуществлены совместно с научным руководителем О.В. Щерицей и соавтором публикаций О.С. Мажоровой. Из совместных публикаций в диссертацию включен лишь тот материал, который непосредственно принадлежит соискателю, заимствованный материал обозначен в работе ссылками.

**Структура и объем диссертации** Диссертация состоит из введения, 4 глав, заключения и библиографии. Общий объем диссертации 160 страниц, включая 42 рисунка. Библиография включает 120 наименований.

## Содержание работы

Во **Введении** содержится обзор литературы, посвященной численным методам решения задачи о фазовом переходе; обоснована актуальность работы, сформулированы цели и задачи исследования, кратко изложено содержание диссертационной работы.

**Первая глава** посвящена построению и исследованию консервативной разностной схемы для задачи о фазовом переходе в двухкомпонентном растворе в цилиндрической ампуле. Задача рассмотрена в цилиндрической системе координат  $Oxz$  в осесимметричном приближении (Рис. 1).



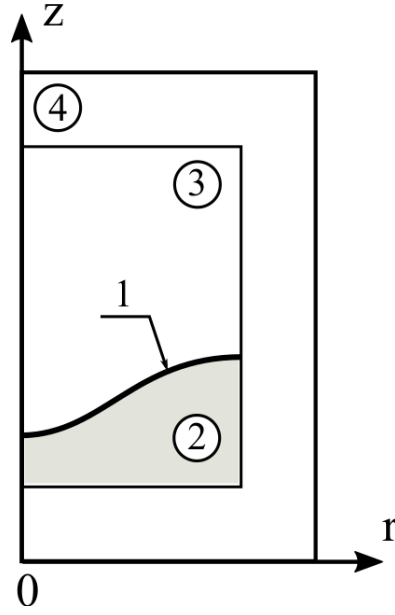


Рис. 1. Цилиндрическая ампула: 1 — фронт кристаллизации  $z = \zeta(t, r)$ , 2 — твердая фаза, 3 — жидкая фаза, 4 — стенки ампулы.

Процесс описывается следующей системой уравнений:

- уравнения Навье — Стокса в переменных “функция тока — завихренность”:

$$\frac{\partial \omega}{\partial t} + \frac{1}{r} \mathcal{K}(\omega, \psi) = \frac{1}{r} \left[ \frac{\partial}{\partial r} \left( \frac{\nu}{r} \frac{\partial}{\partial r} (r^2 \omega) \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left( \frac{\nu}{r} \frac{\partial}{\partial z} (r^2 \omega) \right) \right] + g \left[ \frac{\beta_T}{r} \frac{\partial T}{\partial r} + \frac{\beta_C}{r} \frac{\partial C^{lq}}{\partial r} \right], \quad (1)$$

$$-\omega = \frac{1}{r} \left[ \frac{\partial}{\partial r} \left( \frac{1}{r} \frac{\partial \psi}{\partial r} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left( \frac{1}{r} \frac{\partial \psi}{\partial z} \right) \right]. \quad (2)$$

Здесь  $\psi(t, r, z)$  — функция тока,  $\omega(t, r, z)$  — завихренность,  $T(t, r, z)$  — температура,  $C^{lq}(t, r, z)$  — концентрация в жидкой фазе,  $\mathcal{K}(\omega, \psi)/r$  — оператор, описывающий конвективный перенос:

$$\mathcal{K}(\omega, \psi) = \frac{\partial}{\partial r} \left( \frac{\partial \psi}{\partial z} \omega \right) - \frac{\partial}{\partial z} \left( \frac{\partial \psi}{\partial r} \omega \right),$$

$\nu$  — кинематическая вязкость,  $\beta_T, \beta_C$  — коэффициенты температурного и концентрационного расширения.

- уравнения тепло- и массопереноса в твердой и жидкой фазах:

$$c_p \rho \left[ \frac{\partial T}{\partial t} + \frac{1}{r} \mathcal{K}(T, \psi) \right] = \frac{1}{r} \left[ \frac{\partial}{\partial r} \left( kr \frac{\partial T}{\partial r} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left( kr \frac{\partial T}{\partial z} \right) \right], \quad (3)$$

$$\frac{\partial C}{\partial t} + \frac{1}{r}\mathcal{K}(C, \psi) = \frac{1}{r} \left[ \frac{\partial}{\partial r} \left( Dr \frac{\partial C}{\partial r} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left( Dr \frac{\partial C}{\partial z} \right) \right]. \quad (4)$$

Кристалл и раствор имеют различные удельную теплоемкость  $c_p$ , плотность  $\rho$ , коэффициент теплопроводности  $k$  и коэффициент диффузии  $D$ . Концентрация  $C(t, r, z)$  принимает значения  $C^{\text{cr}}(t, r, z)$  и  $C^{\text{liq}}(t, r, z)$  в твердой и жидкой фазах соответственно. В твердой фазе  $\mathcal{K}(f, \psi)/r \equiv 0$ ,  $f = T, C$ .

- условия термодинамического равновесия на межфазной границе  $z = \zeta(t, r)$ .

На границе раствор/кристалл составы твердой и жидкой фаз удовлетворяют фазовой диаграмме системы:

$$F_n(T, C_{\text{ph}}^{\text{cr}}, C_{\text{ph}}^{\text{liq}}) = 0, \quad n = 1, 2. \quad (5)$$

Здесь  $C_{\text{ph}}^{\text{liq}}$  и  $C_{\text{ph}}^{\text{cr}}$  — концентрации компонента  $A$  на фронте кристаллизации в твердой и жидкой фазах.

Закон сохранения энергии (условие Стефана) имеет вид

$$\llbracket (k \nabla T \cdot \mathbf{N}) \rrbracket = \lambda v_{\text{ph}}(\mathbf{e}_z \cdot \mathbf{N}). \quad (6)$$

Здесь  $\llbracket q \rrbracket = q^{\text{cr}} - q^{\text{liq}}$  — скачок величины  $q$  на фронте кристаллизации,  $\lambda$  — скрытая теплота плавления,  $v_{\text{ph}}(t, r) = d\zeta/dt$  — проекция вектора скорости движения границы раздела фаз на ось  $z$ ,  $\mathbf{N}$  — единичная нормаль к фронту кристаллизации, направленная в жидкую фазу,  $\mathbf{e}_z$  — единичный вектор в направлении оси  $z$ .

Закон сохранения массы:

$$\llbracket (D \nabla C \cdot \mathbf{N}) \rrbracket = -(C_{\text{ph}}^{\text{cr}} - C_{\text{ph}}^{\text{liq}})v_{\text{ph}}(\mathbf{e}_z \cdot \mathbf{N}). \quad (7)$$

Для решения задачи применяется метод выпрямления фронта. В результате замены переменных типа Ландау в новой системе координат положение границы раздела фаз на протяжении всего процесса остается неизменным и совпадает с некоторой координатной линией (Рис. 2).

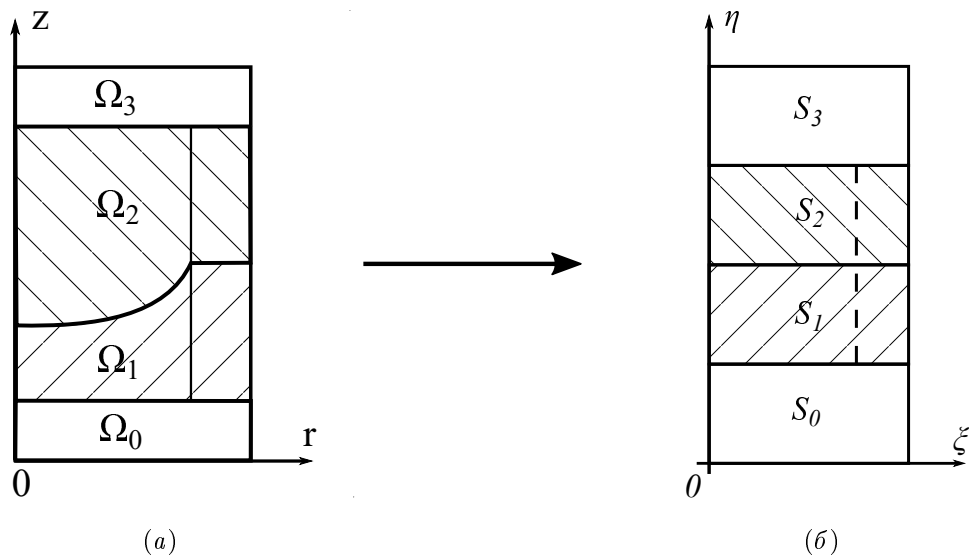


Рис. 2. Преобразование системы координат: (а) физическая область; (б) расчетная область. Области  $\Omega_\gamma$ ,  $\gamma = \overline{0, 3}$  отображаются на прямоугольники  $S_\gamma$  в расчетной системе координат.

В расчетной системе координат на прямоугольной сетке с помощью интегро-интерполяционного метода (метода конечных объемов) построена разностная схема, наследующая основные свойства исходной дифференциальной задачи. Получены дивергентная и недивергентная формы записи разностной схемы, аппроксимирующие соответствующие формы записи исходной дифференциальной задачи. В Главе 1 доказаны утверждения, согласно которым в дискретной среде

- конвективные члены в уравнении переноса завихренности не вносят вклад в производство кинетической энергии;
- члены переноса в уравнениях тепло- и массообмена не влияют на балансы теплоты и массы, а также на средние по области значения квадратов температуры и концентрации;
- оператор, аппроксимирующий диссипативные члены в уравнениях движения жидкости и тепломассопереноса в расчетной системе координат, самосопряжён и отрицательно определён;
- выполнены законы сохранения массы, внутренней и кинетической энергии,

завихренности, балансные соотношения для квадратов температуры и концентрации.

Во **второй главе** рассмотрены методы решения сеточных уравнений, аппроксимирующих уравнения движения жидкости, тепло- и массопереноса в многокомпонентной среде с фазовым переходом. В основе метода решения соответствующей системы нелинейных алгебраических уравнений лежит расщепление по физическим процессам: сначала из сеточных уравнений, аппроксимирующих уравнения Навье — Стокса, определяется поле скоростей жидкости; затем из уравнений тепломассопереноса вычисляются распределение температуры в области, состав кристалла и раствора, скорость движения границы раздела фаз.

Изучено влияние способа аппроксимации нелинейных условий (5)–(7) на межфазной границе на сходимость итерационного процесса решения соответствующей системы разностных уравнений. Для этого рассмотрена упрощенная одномерная разностная модель процесса кристаллизации многокомпонентного раствора, отражающая характерные особенности задачи и поддающаяся исследованию классическими методами (модель учитывает диффузионный тепло- и массоперенос в твердой и жидкой фазах, условия термодинамического равновесия на межфазной границе). Получены условия сходимости для методов, основанных на последовательном определении полей температуры и концентрации. Доказано, что область применимости соответствующих методов определяется физическими свойствами рассматриваемых веществ, а также параметрами технологического режима. Для некоторых веществ последовательные алгоритмы оказываются неустойчивыми при любых значениях шага по времени. Проведен анализ сходимости алгоритма, в котором соответствующая система нелинейных уравнений решается совместно с помощью метода Ньютона относительно вектора неизвестных, компонентами которого являются концентрация в твердой и жидкой фазах, температура во всей расчетной области и скорость движения фронта. Показано, что несмотря на бóльшую, по сравнению с последователь-

ными методами, вычислительную сложность, совместный алгоритм является существенно более надежным и гибким инструментом исследования процессов кристаллизации.

Для решения уравнений Навье — Стокса применен практически безусловно устойчивый алгоритм. Соответствующая система сеточных уравнений решается совместно, относительно вектора неизвестных, компонентами которого являются функция тока и завихренность.

Разработанный вычислительный алгоритм применялся для решения модельной задачи о кристаллизации двухкомпонентного раствора в цилиндрической ампуле. Результаты моделирования отражают качественные особенности рассматриваемого процесса (эволюцию структуры течения в растворе, изменение формы фронта кристаллизации, характер распределения компонентов в твердой фазе) и согласуются с имеющимися теоретическими данными. Расчеты показывают, что разностные аналоги законов сохранения выполняются с высокой точностью, вклад конвективного переноса в балансы теплоты, массы и кинетической энергии на протяжении всего процесса остается на уровне машинной погрешности. Достоверность полученных результатов подтверждается расчетами, проведенными на серии сгущающихся пространственных сеток.

В **третьей главе** представлены разностные схемы для задачи о кристаллизации чистого вещества в декартовой системе координат в прямоугольной области (Рис. 3). Основу математической модели составляют уравнения На-

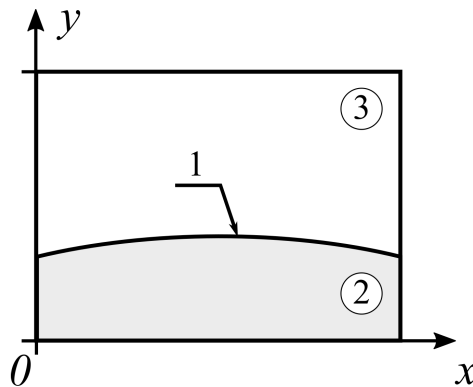


Рис. 3. Прямоугольная область: 1 — граница раздела, 2 — твердая фаза, 3 — жидкая фаза.

вье — Стокса в переменных функция тока-вихрь, уравнения теплопереноса в твердой и жидкой фазах, условия баланса внутренней энергии на межфазной границе.

С помощью методов, основанных на явном выделении границы фазового перехода, построены две разностные схемы — на подвижной сетке, согласованной с формой границы раздела фаз (Рис. 4, а), и на фиксированной сетке, полученной с помощью метода выпрямления фронта (Рис. 4, б).

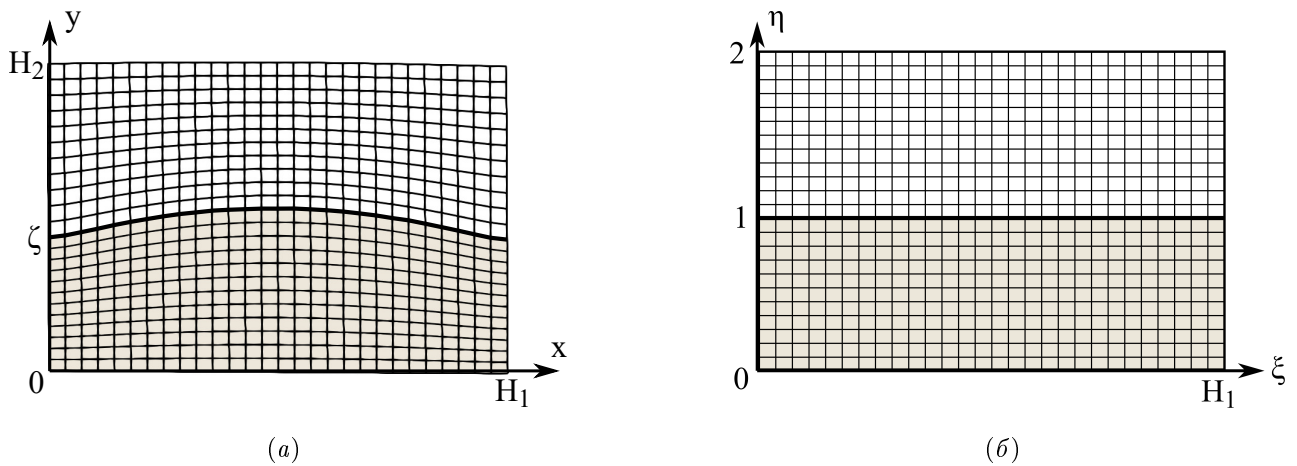


Рис. 4. (а) Подвижная сетка, согласованная с формой границы раздела фаз; (б) фиксированная сетка метода выпрямления фронта.

Указан закон движения узлов сетки, обеспечивающий алгебраическую эквивалентность разностных схем, построенных на подвижной и фиксированной сетках. Доказано, что преобразование одной схемы в другую осуществляется с помощью замены переменных, аналогично тому, как это делается в дифференциальной задаче. В силу алгебраической эквивалентности методов, разностная схема, построенная на подвижной сетке, также является консервативной. Таким образом в Главе 3 для двухфазной задачи Стефана выделен класс схем, наследующих основные свойства исходной дифференциальной модели.

В основу методов решения задачи о фазовом переходе в многокомпонентном растворе, построенных в Главах 1–3, положены следующие принципы:

- применение алгоритмов, основанных на явном выделении границы раздела фаз;

- использование консервативных разностных схем, наследующие основные свойства исходной дифференциальной задачи;
- использование совместного алгоритма решения системы нелинейных разностных уравнений, описывающих тепломассоперенос в системе.

В **четвертой главе** показано, что предложенная вычислительная стратегия является гибким инструментом исследования фазовых переходов и допускает внесение существенных изменений в математическую модель процесса кристаллизации. Методы, разработанные на основе изложенных принципов, могут быть использованы для численного моделирования промышленных способов получения полупроводниковых материалов из жидкой фазы.

Проведено численное исследование основных этапов выращивания двухкомпонентного соединения методом Бриджмена: растворение загрузки, смена растворения ростом, кристаллизация полупроводникового материала. Математическая модель, рассмотренная в Главе 1, дополнена соотношениями, описывающими кинетические процессы на межфазной границе, теплообмен излучением между нагревателем и ростовой камерой. В расчетах используются реальные параметры установки и материалов, а так же внешние температурные режимы.

Для анализа влияния поверхностных процессов, протекающих на межфазной границе, на ход кристаллизации математическая модель дополнена уравнением

$$C_{\text{int}}^{\text{lq}} = C_{\text{ph}}^{\text{lq}} + \frac{D^{\text{lq}}}{k_{\text{kin}}} (\nabla C^{\text{lq}} \cdot \mathbf{N}) \Big|_{z=\zeta(t,r)+}.$$

Здесь  $C_{\text{ph}}^{\text{lq}}$  — равновесная концентрация на фронте в жидкой фазе,  $C_{\text{int}}^{\text{lq}}$  — концентрация на фронте в жидкой фазе,  $k_{\text{kin}}$  — скорость кинетических процессов (обобщенный параметр, описывающий процессы протекающие на фронте кристаллизации). Расчеты показали, что поверхностные эффекты играют существенную роль на ранней стадии процесса кристаллизации, когда скорость фронта велика. Данный результат согласуется с имеющимися теоретическими и экспериментальными данными. В главе 4 показано, что модификация условий

на границе раздела не влияет на сходимость итерационного процесса решения соответствующей системы разностных уравнений.

Численно изучена стадия растворения загрузки: определены внешние температурные режимы, позволяющие растворить необходимый объем материала. Указан технологический режим, применение которого приводит к росту кристалла с выпуклым в жидкую фазу фронтом и искомым распределением состава (Рис. 5). Длительность процесса составляет 140 часов, результаты расчетов были получены на персональном компьютере за 3,5 часа

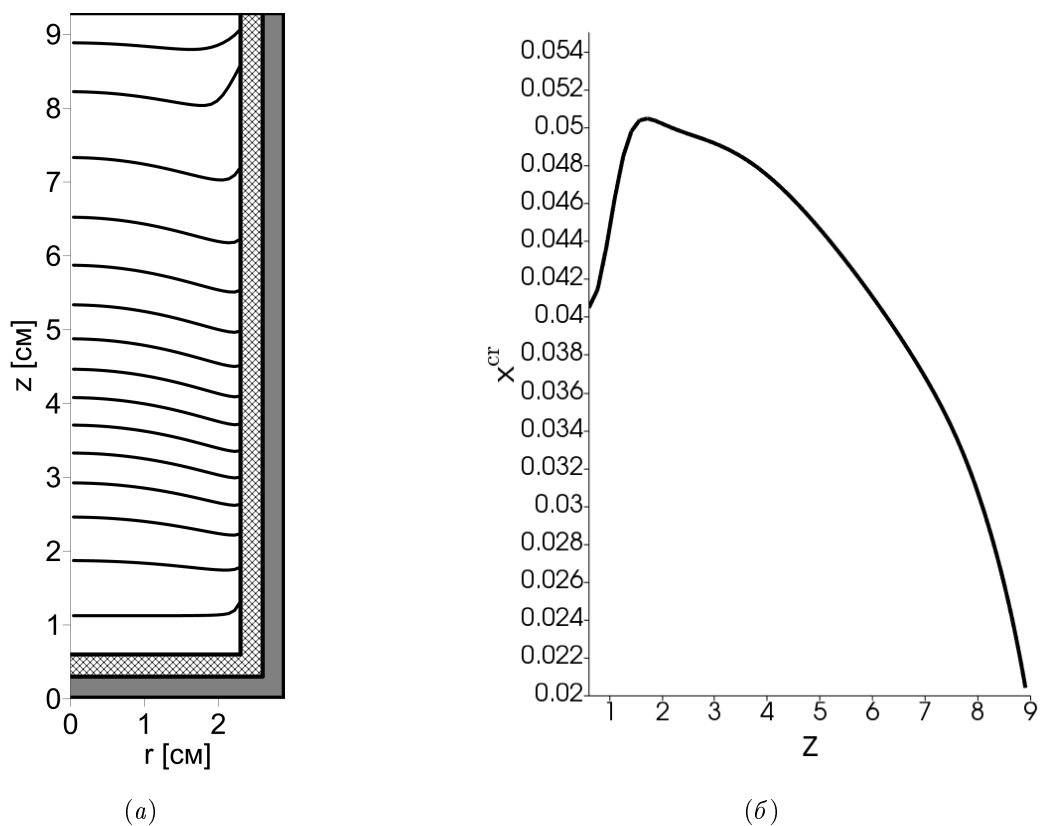


Рис. 5. Рост кристалла:(а) Положение фронта кристаллизации в различные моменты времени (контуры приведены для  $0 \leq t \leq 140$  часов с шагом 10 часов). (б) Концентрация компонента А по высоте кристалла при  $r = 0$ . (Натурные эксперименты показывают, что по длине кристалла наблюдается монотонное уменьшение содержания компонента А в диапазоне  $0,05 \div 0,015$  мол. долей).

Изложение материала в работе ведется на примере метода вертикальной направленной кристаллизации двухкомпонентного раствора. Однако предложенный вычислительный алгоритм очевидным образом обобщается на случай



кристаллизации жидкой фазы с произвольным числом растворенных компонентов и применим для моделирования выращивания тонких пленок методом жидкофазной эпитаксии, получения монокристаллов методом подвижного нагревателя и диффузии в жидкой фазе, процесса легирования элементарных полупроводников и т.д.

**В Заключении** приведены основные результаты диссертационной работы.

## Основные результаты диссертации

- Построен и исследован метод численного решения задачи о фазовом переходе в многокомпонентном растворе. Математическая постановка задачи учитывает движение фронта кристаллизации, конвективный и диффузионный тепло-массоперенос в растворе, процессы теплопроводности и диффузии в кристалле, зависимость температуры фазового перехода от состава фаз. Доказано, что предложенный вычислительный алгоритм гарантирует выполнение разностных аналогов законов сохранения характерных для рассматриваемого физического процесса.
- Изучено влияние способа аппроксимации нелинейных условий на межфазной границе на сходимость итерационного процесса решения соответствующей системы разностных уравнений. Указаны условия сходимости итерационных методов, основанных на последовательном и совместном определении полей температуры и концентрации.
- Для двухфазной задачи Стефана на подвижной сетке, согласованной с формой границы раздела фаз, построена разностная схема алгебраически эквивалентная схеме, построенной методом выпрямления фронта. Доказано, что, аналогично дифференциальному случаю, схемы переходят друг в друга с помощью замены переменных.

## Публикации автора по теме диссертации

1. *Щерица О.В., Гусев А.О., Мажорова О.С.* Численное исследование процесса кристаллизации трехкомпонентного раствора в цилиндрической ампуле // Препринты ИПМ им. М.В. Келдыша РАН. — 2016. — № 125. — 31 с.
2. *Гусев А.О., Щерица О.В., Мажорова О.С.* Численное исследование процесса кристаллизации чистого вещества из раствора в присутствии примеси // Препринт ИПМ им. М.В. Келдыша РАН. — 2017. — № 24. — 22 с.
3. *Щерица О.В., Гусев А.О., Мажорова О.С.* Об одном методе решения задачи кристаллизации многокомпонентного раствора в цилиндрической ампуле // Вестник МГТУ им. Н.Э. Баумана. Сер. Естественные науки. — 2017. — № 5. — С. 118–138.
4. *Gusev A.O., Shcheritsa O.V., Mazhorova O.S.* Conservative finite-difference algorithm for the thermodiffusion Stefan problem // LNCS. — 2019. — Т. 11386. — С. 256–263.
5. *Гусев А.О., Щерица О.В., Мажорова О.С.* Анализ устойчивости методов решения задачи о фазовом переходе // Дифференциальные уравнения. — 2019. — Т. 55, № 7. — С. 929–939. — Переводная версия:  
*Gusev A.O., Shcheritsa O.V., Mazhorova O.S.* Stability analysis of solution methods for a phase transition problem // Differential Equations. — 2019. — Т. 55, № 7. — С. 929–939.
6. *Гусев А.О., Щерица О.В., Мажорова О.С.* Параметрическое исследование процесса кристаллизации чистого вещества в присутствии примеси // Препринт ИПМ им. М.В. Келдыша РАН. — 2019. — № 130. — 30 с.
7. *Gusev A.O., Shcheritsa O.V., Mazhorova O.S.* Conservative finite volume strategy for investigation of solution crystal growth techniques // Computers & fluids. — 2020. — Т. 202. — С. 104501.

8. *Гусев А.О., Щерица О.В., Мажорова О.С.* Опыт применения библиотек Intel MKL и PETSc для решения задач тепломассопереноса с фазовым переходом // Препринт ИПМ им. М.В. Келдыша РАН. — 2020. — № 62. — 34 с.
9. *Гусев А.О., Щерица О.В., Мажорова О.С.* К вопросу об эквивалентности разностных методов решения задачи Стефана на подвижных и фиксированных сетках // Дифференциальные уравнения. — 2021. — Т. 57, № 7. — С. 907–921. — Переводная версия:  
Gusev A.O., Shcheritsa O.V., Mazhorova O.S. Two Equivalent finite volume schemes for Stefan problem on boundary-fitted grids: front-tracking and front-fixing techniques // Differential Equations. — 2021. — Т. 57, № 7.— С. 876–890.
10. *Гусев А.О., Щерица О.В., Мажорова О.С.* О свойствах одного разностного метода решения двухфазной задачи Стефана // Дифференциальные уравнения. — 2022. — Т. 58, № 7. — С. 930–946. — Переводная версия:  
Gusev A.O., Shcheritsa O.V., Mazhorova O.S. On the properties of conservative finite volume scheme for the two-phase Stefan problem // Differential Equations. — 2022. — Т. 58, № 7. — С. 930–946.
11. *Гусев А.О.* Сравнение трех математических моделей процесса направленной кристаллизации многокомпонентного раствора // Препринт ИПМ им. М.В. Келдыша РАН. — 2022. — № 53. — 32 с.
12. *Гусев А.О.* Численное моделирование процесса кристаллизации трехкомпонентного раствора на подвижной сетке // Препринт ИПМ им. М.В. Келдыша РАН. — 2022. — № 64. — 30 с.

Подписано в печать ?. Формат 60x84/16. Усл. печ. л. ?. Тираж ? экз. Заказ А-?.

ИПМ им.М.В.Келдыша РАН. 125047, Москва, Миусская пл., 4