

На правах рукописи

АБРАМОВ Алексей Геннадьевич

МЕТОД МОДЕЛИРОВАНИЯ КРУПНЫХ ВИХРЕЙ
В ПРИЛОЖЕНИИ К ЗАДАЧАМ ТУРБУЛЕНТНОЙ КОНВЕКЦИИ
В ПОДОГРЕВАЕМЫХ СНИЗУ ЕМКОСТЯХ:
ВАРИАНТЫ И ВОЗМОЖНОСТИ

Специальность 01.02.05 – Механика жидкости, газа и плазмы

Автореферат
диссертации на соискание ученой степени
кандидата физико-математических наук

Санкт-Петербург 2003

Работа выполнена на кафедре гидроаэродинамики Санкт-Петербургского государственного политехнического университета.

Научный руководитель: доктор физико-математических наук,
профессор Смирнов Е.М.

Официальные оппоненты: доктор физико-математических наук,
профессор Стрелец М.Х.

кандидат технических наук,
ст. научный сотрудник Затевахин М.А.

Ведущая организация: Институт проблем механики РАН.

Защита состоится « _____ » 2003 года в _____ часов на заседании диссертационного совета Д 212.229.07 в Санкт-Петербургском государственном политехническом университете (195251, Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29, корпус 1, кафедра гидроаэродинамики).

С диссертацией можно ознакомиться в фундаментальной библиотеке Санкт-Петербургского государственного политехнического университета.

Автореферат разослан « _____ » 2003 года.

Ученый секретарь диссертационного совета,
кандидат физико-математических наук,
доцент

Зайцев Д.К.

Общая характеристика работы

Актуальность проблемы

Изучение конвективных движений жидкости в полях массовых сил, вызванных плавучестью и вращением, имеет глубокое фундаментальное и важное практическое значение для самых разнообразных областей науки и техники. По-прежнему, весьма актуальной остается проблема расчетного предсказания характеристик турбулентных режимов конвекции, представляющих наибольший практический интерес. В ряду высокотехнологичных отраслей промышленности, в которых особенно востребованы углубленные знания о турбулентной конвекции, важное место занимает процесс выращивания кристаллов полупроводников из расплава по методу Чохральского. На сегодняшний день весьма остро ощущается нехватка сведений, в том числе фундаментального характера, о свойствах возможных режимов течения расплавов. В силу объективных трудностей экспериментального подхода к изучению конвекции расплава в приближенных к практике условиях, особая роль отводится разработке надежных численных моделей, способных дать необходимую информацию для оптимизации ростового процесса.

При отработке методов численного моделирования сложных конвективных движений, имеющих место в реальных установках, целесообразно опираться на опыт, приобретенный в работе с модельными задачами, предполагающими использование упрощенной геометрии и идеализированных граничных условий. Привлекательной для указанных целей является задача о свободноконвективном движении жидкости в подогреваемых снизу областях (конвекция Релея-Бенара), которая и сама по себе имеет широкое прикладное значение.

Возможности метода прямого численного моделирования турбулентной конвекции (Direct Numerical Simulation, DNS) на сегодняшний день ограничены расчетами модельных задач в упрощенной геометрии при относительно невысоких числах Рейлея. Результаты широко используемого в прикладных расчетах метода решения осредненных по Рейнольдсу уравнений Навье-Стокса (Reynolds-Averaged Navier-Stokes, RANS) очень чувствительны к выбору той или иной модели турбулентности, а иногда и принципиально неспособны отразить характерные особенности, присущие термоконвективным течениям. В связи с этим большие надежды связываются с методом моделирования крупных вихрей (Large Eddy Simulation, LES) в его различных вариантах.

Цели работы

Представляемая диссертационная работа направлена на

- реализацию ряда замыкающих моделей метода LES и гибридных подходов RANS/LES для численных расчетов турбулентных течений на основе базового программного комплекса SINF, развивающегося сотрудниками кафедры гидроаэrodинамики СПбГПУ;
- численное моделирование на основе LES и RANS/LES турбулентных режимов конвекции жидкостей, характеризующихся различными значениями числа Прандтля, в безграничном слое и в замкнутых подогреваемых снизу полостях простой формы при числах Релея $Ra \geq 10^8$;
- численное исследование с использованием методов DNS, LES и RANS/LES турбулентной конвекции расплава кремния в емкости, геометрия которой типична для тиглей метода Чохральского, включая вопросы транспорта выделяющегося на стенках тигля кислорода.

Научная новизна работы

В диссертационной работе впервые:

- 1) гибридный метод RANS/LES, сформулированный на основе специально адаптированной к нему модели турбулентности с одним дифференциальным уравнением, применен к расчетам турбулентной термоконвекции;
- 2) проведены систематические численные исследования турбулентной конвекции Релея-Бенара (Р-Б) в наполненной водой кубической полости и в заполненном ртутью круговом цилиндре при высоких числах Релея; проанализированы осредненные и пульсационные свойства пристенных слоев при существенно различающихся числах Прандтля; выявлена роль квазистационарной глобальной циркуляции и локальных нестационарных образований в виде термиков;
- 3) на основе методов LES и RANS/LES проведены расчеты турбулентной конвекции расплава кремния в тигле аппарата метода Чохральского в постановках, соответствующих реальным условиям роста кристаллов; получен большой объем данных по осредненным и пульсационным составляющим полей скорости, температуры и концентрации кислорода; выполнен анализ влияния основных определяющих параметров на трехмерную структуру конвекции и тепломассоперенос.

Достоверность полученных результатов

Результаты проведенного в настоящей работе прямого численного моделирования турбулентной конвекции Р-Б при умеренных числах Релея совпадают с аналогичными данными других авторов. Результаты расчетов развитой турбулентной конвекции Р-Б ($Ra \geq 10^8$) в замкнутых полостях согласуются по интегральным характеристикам с известными экспериментальными данными. Рассчитанное тепловое состояние расплава и характеристики локальных колебаний температуры в тигле ростовой системы метода Чохральского находятся в хорошем согласии с доступными данными измерений.

Практическая ценность работы

Практическая значимость диссертационной работы состоит в следующем:

- 1) накопленная методическая информация по использованию различных методов моделирования термоконвективных течений может использоваться при решении сложных, возникающих в инженерной деятельности задач;
- 2) выявленные свойства турбулентной конвекции Релея-Бенара в областях простой формы могут быть полезными для глубокого понимания физических процессов, имеющих место и в приближенных к практике условиях;
- 3) проведенный анализ влияния ряда определяющих параметров на свойства турбулентной конвекции расплава кремния дополняет весьма ограниченный объем имеющейся экспериментальной информации; результаты выполненных расчетов могут способствовать оптимизации установок выращивания кристаллов по методу Чохральского.

Апробация работы

Основные результаты работы докладывались на российских и международных конференциях и семинарах: Международной конференции E-MRS – IUMRS (Страсбург, Франция, 2000), 12^{ой} Американской конференции по выращиванию кристаллов и эпитаксии (Колорадо, США, 2000), XIII Школе-семинаре молодых ученых и специалистов под руководством акад. РАН А.И. Леонтьева “Физические основы экспериментального и математического моделирования процессов газодинамики и тепломассообмена в энергетических установках” (С.-Петербург, 2001), 7^{ой} Международной конференции по современным вычислительным методам в теплообмене (Халкидики, Греция, 2002), III Российской национальной конференции по теплообмену (Москва, 2002), Семинаре кафедры гидроаэродинамики СПбГПУ под

руководством Ю.В. Лапина (С.-Петербург, 2002), Международной конференции Eurotherm 74 (Эйндховен, Нидерланды, 2003), Международной конференции Parallel CFD 2003 (Москва, 2003).

Публикации по теме диссертации

Основные результаты работы изложены в восьми научных публикациях.

Структура и объем работы

Диссертация состоит из введения, четырех глав, заключения, списка литературы из 243 наименований и приложения. Работа изложена на 219 страницах машинописного текста, включая 17 таблиц и 106 рисунков.

Содержание работы

Во введении обосновывается актуальность выбранной темы исследования, ее научное и практическое значение, сформулированы основные задачи работы.

В первой главе приведен обзор трех подходов к численному моделированию турбулентных течений: прямого численного моделирования (DNS), метода решения осредненных по Рейнольдсу уравнений Навье-Стокса (RANS) и метода моделирования крупных вихрей (LES). На основе литературных данных проанализированы достоинства и недостатки каждого из указанных подходов применительно к расчетам турбулентной термоконвекции при высоких числах Релея $Ra = (g\beta\Delta TH^3)/(v\alpha)$; здесь g – ускорение свободного падения, β – температурный коэффициент расширения, ΔT – характерный перепад температуры, H – характерный линейный масштаб задачи, v – кинематический коэффициент вязкости; α – коэффициент температуропроводности.

Рассмотренный в разделе 1.2 метод DNS, обладающий наибольшей привлекательностью в силу отсутствия эмпиризма, не позволяет проводить разрешающие все составляющие движения расчеты при числах Релея, превышающих $\sim 10^8$: это связано с практически нереализуемыми на сегодняшний день требованиями по вычислительным ресурсам. Приведен обзор наиболее содержательных из известных автору работ по DNS турбулентной конвекции Релея-Бенара (Р-Б).

В разделе 1.3 рассмотрен метод RANS, который до сих пор остается наиболее распространенным подходом к моделированию турбулентности, в особенности, применительно к прикладным задачам. Приведена общепринятая классификация наиболее широко используемых в методе RANS замыкающих моделей турбулентно-

сти, проанализированы проблемы, возникающие при расчетах на их основе задач турбулентной термоконвекции, в частности конвекции Р-Б.

Раздел 1.4 посвящен рассмотрению метода LES, основанного на пространственной “фильтрации” системы трехмерных нестационарных уравнений Навье-Стокса; при этом перенос импульса и тепла крупными, энергонесущими структурами рассчитывается точно, а эффект мелких, неразрешаемых масштабов учитывается через “подсеточные” (SubGrid Scale, SGS) напряжения и тепловой поток, которые подлежат моделированию. Рассмотрены вопросы пространственной фильтрации в методе LES, дан подробный обзор моделей подсеточных масштабов. Относительная простота моделей подсеточных масштабов (в сравнении с моделями RANS) обосновывается близостью к универсализму в режимах развитой турбулентности закономерностей описываемого ими мелкомасштабного движения. Подсеточная вязкость в наиболее представительном классе моделей вихревой вязкости, основанных на гипотезе Буссинеска, вычисляется как произведение масштабов скорости и длины, соответствующих неразрешаемому движению. Линейный масштаб выбирается пропорциональным ширине фильтра. Масштаб скорости в алгебраических моделях представляется модулем тензора скоростей деформации разрешаемого движения \bar{S}_{ij} , а в дифференциальных моделях с одним уравнением – квадратным корнем из кинетической энергии подсеточного движения.

Все большую популярность в последнее время приобретают представленные в разделе 1.5 комбинированные (гибридные) подходы к моделированию турбулентности, которые нацелены на преодоление трудностей, возникающих при использовании метода LES в расчетах пристенных течений. Комбинированные подходы сочетают в себе элементы методов LES и RANS в стремлении использовать их известные преимущества в соответствующих областях течения. Отмечено, что наиболее впечатляющих результатов на сегодняшний день удалось достигнуть на основе гибридного подхода, известного как метод моделирования “отсоединенных” вихрей (Detached Eddy Simulation, DES) [Spalart P.R., *et al.* In: Advances in DNS/LES, Greyden Press, Columbus, OH, 1997; Strelets M. - AIAA Pap. 2001-0879, 18p].

Во второй главе излагаются математическая модель (раздел 2.1) и численный метод (раздел 2.2), на основе которых были проведены расчеты. Задачи турбулентной термоконвекции рассматривались в работе в рамках модели несжимаемой ньютоновской жидкости с постоянными физическими свойствами, для учета эффектов плавучести в поле силы тяжести использовалось приближение Буссинеска. Уравнения

записаны во вращающейся с постоянной угловой скоростью Ω системе координат. Эффекты плавучести в поле центробежной силы полагались пренебрежимо малыми. Расчеты проводились с использованием программного “конечно-объемного” комплекса (ПК) SINF, второго порядка точности по времени и пространству, разработанного на кафедре гидроаэродинамики СПбГПУ под руководством проф. Е.М. Смирнова. Заложенные в ПК возможности прошли предшествующую верификацию в результате численного моделирования целого ряда задач гидродинамики и теплообмена.

В разделе 2.3 изложены отдельные аспекты реализации внедренных автором в ПК замыкающих моделей (LES и RANS/LES), а также пристенных функций, использованных в расчетах по методу LES.

Большая часть расчетов проведена на основе гибридной RANS/LES модели, предполагающей решение единого уравнения во всей расчетной области; при этом в качестве рассчитываемой характеристики выступает кинетическая энергия неразрешаемой составляющей турбулентного движения k :

$$\frac{dk}{dt} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[(\nu + \nu_t) \frac{\partial k}{\partial x_j} \right] + 2\nu_t \bar{S}_{ij} \bar{S}_{ij} - \bar{\varepsilon}, \quad \bar{\varepsilon} = \max\{\varepsilon^{RANS}, \varepsilon^{LES}\}. \quad (1)$$

Переключение между областями RANS и LES основано на сравнении рассчитанной двумя способами скорости диссипации кинетической энергии неразрешаемого движения:

$$\varepsilon^{RANS} = k^{3/2} / (l \cdot F_\varepsilon), \quad l = \kappa C_\mu^{-3/4} y, \quad F_\varepsilon = f(Re_y), \quad Re_y = \sqrt{k} y / \nu; \quad (2)$$

$$\varepsilon^{LES} = C_\varepsilon k^{3/2} / \bar{\Delta}, \quad C_\varepsilon = 0.09, \quad C_\mu = 0.75, \quad \kappa = 0.41. \quad (3)$$

В соотношении (2) l – характерный линейный масштаб турбулентности, y – расстояние до ближайшей стенки. Тurbулентная вязкость вычисляется по формуле: $\nu_t = C_\mu f_\mu k^2 / \bar{\varepsilon}$. Конкретизация функций F_ε , f_μ выполнена на основе модели RANS Вольфштейна [Wolfshtein M. - Int. J. Heat and Mass Transfer. - 1969. - Vol. 12. P.301-318]: $F_\varepsilon = 1 - \exp(-Re_y/A_\varepsilon)$, $A_\varepsilon = 5.1$; $f_\mu = 1 - \exp(-Re_y/A_\mu)$, $A_\mu = 70$. Для обеспечения непрерывного изменения турбулентной вязкости в области перехода между областями LES и RANS, демпфирующая функция f_μ в области LES записывается в виде:

$$f_\mu = 1 - \exp \left[-Re_t / A_\mu \cdot \left(\kappa C_\mu^{-3/4} F_\varepsilon (Re_y) \right)^{-1} \right], \quad l_t = \min \left\{ l \cdot F_\varepsilon, \bar{\Delta} / C_\varepsilon \right\}, \quad Re_t = \sqrt{k} l_t / \nu. \quad (4)$$

Типично, выраженная в пристеночных масштабах, координата места переключения в расчетах турбулентной термоконвекции находилась в пределах $7 < y_s^+ < 30$, а для центров ближайших к стенкам ячеек выполнялось условие $y^+ \leq 1$. Таким образом,

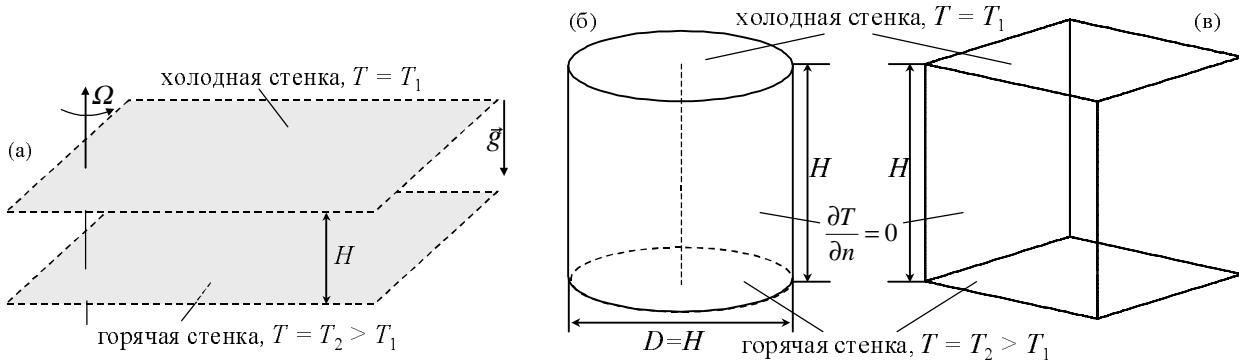


Рис. 1. Геометрия расчетных областей при моделировании турбулентной конвекции Релея-Бенара: (а) – горизонтальный слой; (б) – цилиндрическая полость; (в) – кубическая полость.

модель с одним уравнением RANS/LES фактически выступила в качестве альтернативы пристенным функциям: зона RANS покрывает слой, в котором использование пристенных функций ненадежно.

В третьей главе представлены результаты расчетов турбулентной конвекции Релея-Бенара, развивающейся в областях простой формы. Проведена дополнительная верификация программного комплекса SINF для расчетов турбулентной конвекции по методу DNS при умеренных числах Релея ($10^5 \leq Ra \leq 10^6$).

В разделе 3.1 приведен обзор наиболее содержательных аналитических и экспериментальных работ по изучению турбулентной конвекции Релея-Бенара в областях простой формы. Дано сложившееся представление о структуре турбулентной конвекции Р-Б, характеризующейся наличием крупномасштабных когерентных образований (конвективных ячеек, термиков). Отмечен недостаток экспериментальных сведений о локальной структуре турбулентной конвекции, наиболее остро ощущающейся для жидкостей с малыми значениями числа Прандтля.

В разделе 3.2, с целью начальной отработки реализованных моделей LES и RANS/LES, рассмотрено течение модельной жидкости ($Pr = 1$) во вращающемся подогреваемом снизу горизонтальном слое при $Ra = 1.13 \times 10^8$ и числе Россби $Ro = V_b / \Omega H = 0.75$, где $V_b = (g\beta\Delta TH)^{1/2}$ – скорость плавучести. Безграничный слой представлялся расчетной областью в форме параллелепипеда ($A = L/H = 2$) с наложением условий периодичности в

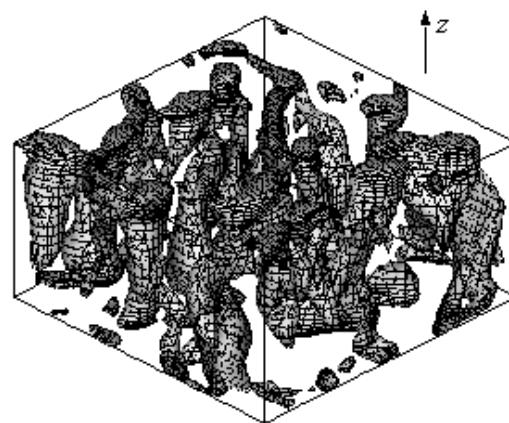


Рис. 2. Вращающийся горизонтальный слой, подогреваемый снизу: изоповерхность вертикальной компоненты завихренности.

горизонтальных направлениях. Область ограничена снизу и сверху твердыми стенками и вращается вокруг вертикальной оси с угловой скоростью Ω (рис. 1а). Расчеты проводились с признанным по результатам проведенного анализа оптимальным шагом по безразмерному времени $\Delta t = 0.05$ на сетках $48 \times 48 \times 28$ (метод LES с пристенными функциями) и $48 \times 48 \times 40$ (метод RANS/LES).

Рассмотренное турбулентное течение обнаружило ряд характерных особенностей, присущих геофизическим явлениям: на фоне мелкомасштабного движения отчетливо заметны циклонические когерентные вихри, вращающиеся сонаправленно друг другу и внешне приложеному вращению (рис. 2). Путем сопоставления с высокоточными данными DNS [Julien K., et al. J. Fluid Mech. – 1996. - Vol. 322. - P.243-273] выявлены некоторые слабые и сильные стороны апробированных моделей LES и RANS/LES применительно к термоконвективным задачам, а также дан ряд рекомендаций по их дальнейшему использованию в расчетах. Обоснована необходимость применения пристенного демпфирования подсеточной вязкости для получения адекватных значений интегральных тепловых потоков через стенки в методе LES. Наилучшее согласие с данными DNS по числу Нуссельта и ряду статистических характеристик конвекции удалось получить в расчетах на основе модели с одним уравнением RANS/LES при задании модельной постоянной $A_\mu = 10$ (это значение использовалось и при всех последующих расчетах на основе данной модели). Проведенный методом LES расчет турбулентной конвекции в неподвижном слое указал на слабое влияние вращения на эффективность теплопереноса, несмотря на существенные различия в структуре конвекции.

В разделе 3.3 представлены результаты расчетов на основе методов DNS и RANS/LES турбулентной конвекции ртути ($Pr = 0.025$) в подогреваемой снизу замкнутой цилиндрической полости (рис. 1б). Расчеты проводились на двухблочной сетке

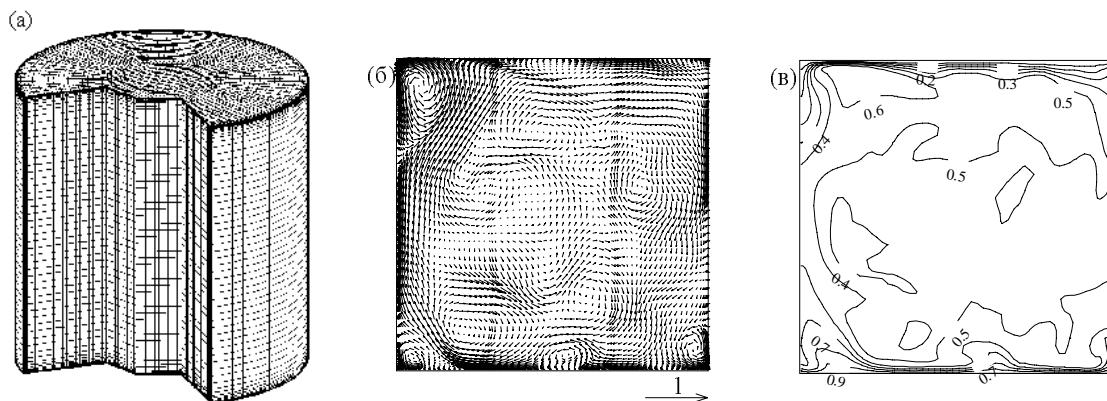


Рис. 3. Конвекция ртути в цилиндрической полости: двухблочная расчетная сетка (а); мгновенные поля скорости (б) и температуры (в) в меридиональном сечении, $Ra = 10^8$.

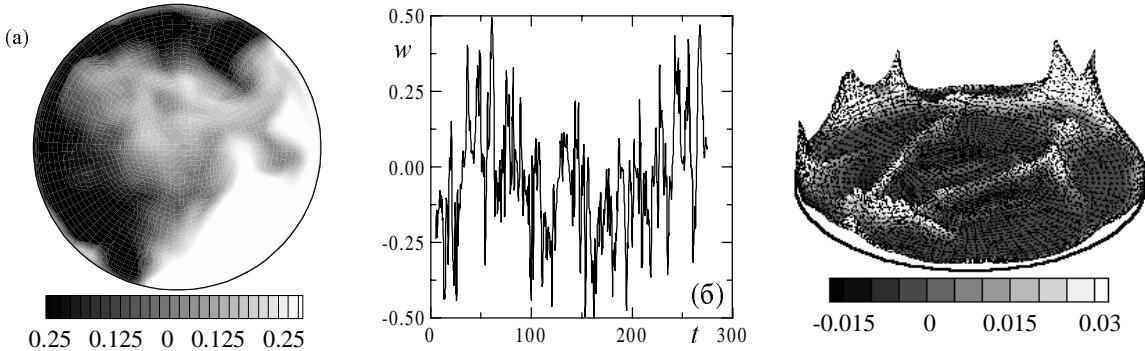


Рис. 4. Мгновенное поле вертикальной скорости в центральном горизонтальном сечении полости; колебания вертикальной скорости в точке $r = 0.96, z = 0.5$; изоповерхность температуры ($T = 0.9$), окрашенная в соответствие с величиной вертикальной скорости на ней.

размерностью 168640 ячеек (рис. 3а) при варьировании числа Релея в диапазоне $10^5 \leq Ra \leq 5 \times 10^9$ (режимы с $Ra = 10^5$ и 10^6 рассчитаны по методу DNS, а с $Ra \geq 10^8$ – методом RANS/LES на основе модели с одним уравнением, с шагом $\Delta t = 0.1$). Проанализирована эволюция структуры конвекции с ростом числа Релея. Выявлено, что интенсифицирующиеся с ростом Ra процессы турбулентного перемешивания (рис. 3б) способствуют формированию все более тонких температурных пограничных слоев у горизонтальных стенок полости (рис. 3в). Во всех режимах в течении отчетливо проявляется крупномасштабная конвективная ячейка, состоящая из циркулирующей жидкости, что подтверждается видом мгновенного поля вертикальной скорости при $Ra = 10^8$ (рис. 4а). Низкочастотная модуляция колебаний вертикальной скорости вблизи боковой стенки полости (рис. 4б) связана с надежно регистрируемым при $Ra \geq 10^8$ медленным азимутальным перемещением конвективной ячейки. Проведены оценки характерной скорости глобальной циркуляции, а также толщин температурного и индуцированного ячейкой скоростного пограничных слоев, показавшие хорошее количественное согласие с известными из литературы данными. Установлено, что в рассмотренных режимах конвекции ртути скоростной пограничный слой располагается внутри температурного.

Определяющая роль молекулярной теплопроводности, характерная для жидкостей с малыми Pr , не позволяет термикам развиваться в пограничных слоях у горизонтальных стенок полости при умеренных числах Релея: их образование удавалось наблюдать лишь при

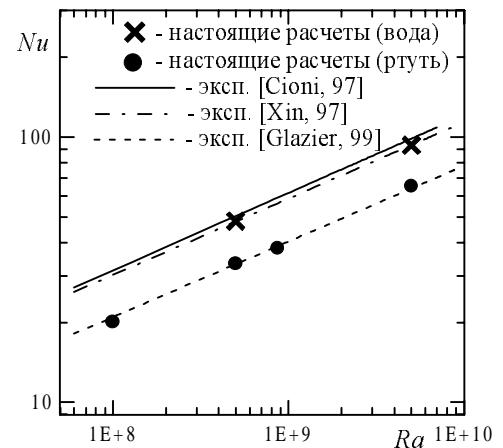


Рис. 5. Зависимость Nu (Ra): сравнение с данными экспериментов.

$Ra \geq 10^8$ (рис. 4в). Результаты настоящих расчетов по методу DNS находятся в хорошем количественном согласии по числу Нуссельта с зависимостью, аппроксимирующей данные DNS [Verzicco R., Camussi R. J. Fluid. Mech. – 1999. – Vol. 383. – P.55-73]. Числа Нуссельта, рассчитанные методом RANS/LES, наилучшим образом согласуются с зависимостью, полученной в наиболее представительном по диапазону чисел Релея эксперименте [Glazier J.A., et al. Nature. – 1999. – Vol. 398. – P.307-310] (рис. 5).

В разделе 3.4 проведено численное моделирование турбулентной конвекции в подогреваемой снизу кубической полости, доверху наполненной водой ($Pr = 7$), при $Ra = 5 \times 10^8$ и 5×10^9 на сетке 54^3 ячеек (рис. 1в). Показано, что актуальное движение в конвекции воды менее интенсивно, чем в близких по числу Релея режимах Р-Б конвекции ртути. Глобальная конвективная ячейка заметно меньшей, чем в конвекции ртути интенсивности, ориентируется вдоль одной из диагональных плоскостей куба (рис. 6а), что согласуется с известными экспериментальными наблюдениями. Напротив, более отчетливо в сравнении с конвекцией ртути проявляются вертикально движущиеся термики (рис. 6б). Вблизи горизонтальных стенок колебания температуры имеют характер выбросов холодной жидкости в виде термиков в направлении центра полости (рис. 6в). Установлено, что в рассмотренных режимах турбулентной конвекции воды скоростной пограничный слой заметно толще температурного. Наилучшее согласие рассчитанных чисел Нуссельта получено при сопоставлении с данными эксперимента [Xin Y.-B., Xia K.-Q. Phys. Rev. E. – 1997. – Vol. 56 (3). – P.3010-3015] (рис. 5). График на рис. 5 демонстрирует различия в теплопереносных свойствах конвекций жидкостей с малыми и большими числами Прандтля.

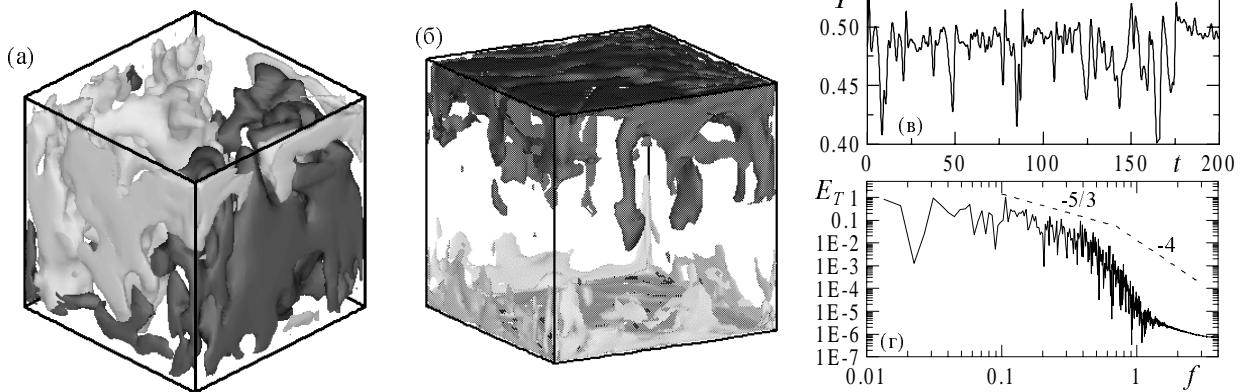


Рис. 6. Конвекция воды в кубической полости: (а) изоповерхности вертикальной компоненты скорости $w = \pm 0.05$; (б) изоповерхности температуры $T = 0.45$ (черная) и 0.55 (серая); (в) эволюция температуры и (г) соответствующий энергетический спектр в точке мониторинга вблизи верхней стенки полости ($z = 0.96$).

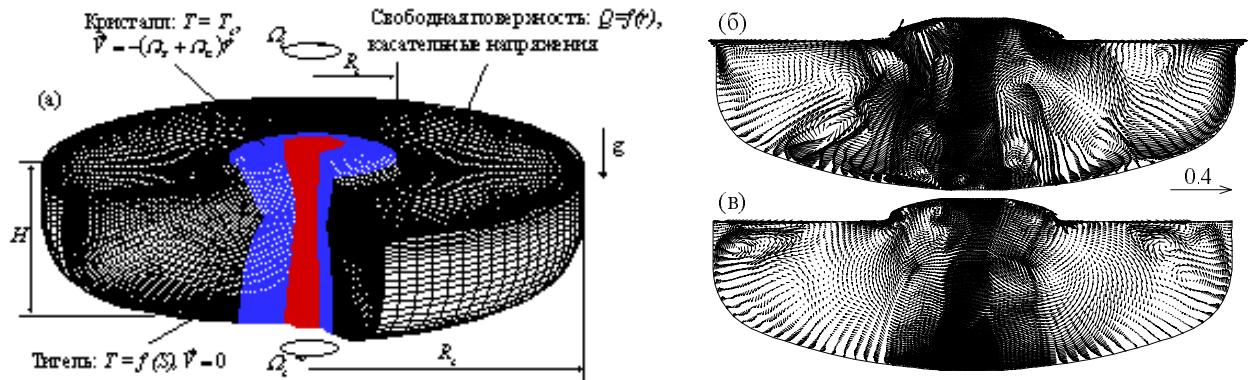


Рис. 7. Геометрия емкости, граничные условия и трехблочная сетка (а). Мгновенные поля скорости в вертикальном сечении емкости: $Ra = 5 \times 10^5$, $Ro = 9.5$ (б) и 1.9 (в).

Четвертая глава посвящена численному исследованию с использованием методов DNS, LES и RANS/LES турбулентной конвекции расплава кремния ($Pr = 0.015$) во вращающейся емкости, геометрия которой типична для тиглей метода Чохральского, при типичных же для технологии тепловых граничных условиях (рис. 7а), включая вопросы транспорта выделяющегося на стенках тигля кислорода ($Sc = 6$).

Введение в проблему и текущее состояние численного моделирования конвекции расплава дано в разделе 4.1. Число Россби ($Ro = V_b / \Omega_c H$) в представляемых расчетах варьировалось в диапазоне от 0.95 до 9.5, отношение угловых скоростей вращения тигля и кристалла, Ω_c / Ω_s - от 1/(-20) до 10/(-20). Расчеты проводились на трехблочных сетках со степенью сгущения к стенкам и свободной поверхности, определяемой требованиями использованных численных подходов (шаг по времени находился в диапазоне $0.1 \div 0.5$).

В разделе 4.2 представлены данные численных расчетов при $Ra = 5 \times 10^5$, выполненных без привлечения моделей турбулентности. Структура расчетной сетки размерностью 285696 ячеек показана на рис. 7а. Исследовалось влияние скорости

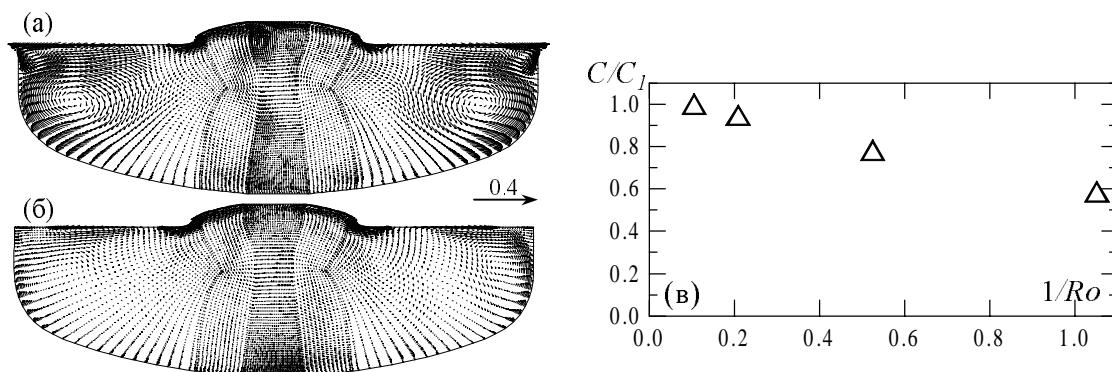


Рис. 8. Осредненные во времени поля скорости: $Ra = 5 \times 10^5$, $Ro = 9.5$ (а) и 1.9 (б). Влияние скорости вращения тигля на уровень содержания кислорода в кристалле (в).

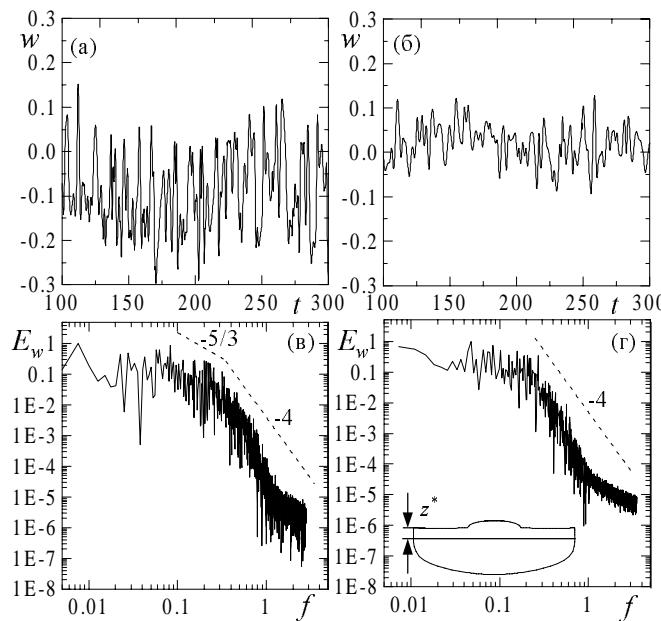


Рис. 9 Колебания вертикальной скорости и соответствующие энергетические спектры в точке $r = 1.1$, $z^* = 0.5$; $Ro = 9.5$ (а, в) и 1.9 (б, г).

турбулентные пульсации температуры вызывают сильную пространственно-временную неоднородность подводимого к границе раздела кристалл/расплав теплового потока. Интенсивные пульсации вертикальной скорости на периферии емкости (показанные на рис. 9 во вращающейся точке мониторинга) с уменьшением Ro заметно ослабевают, на спектрах пропадает “колмогоровский” участок.

Варьирование числа Россби сопровождается рядом качественных изменений в структуре полей концентрации кислорода в расплаве. В частности, меняется пространственное положение участков кварцевого тигля, служащих основным источником кислорода. Рост скорости вращения тигля приводит к уменьшению уровня содержания кислорода в прилегающем к кристаллу слое (см. рис. 8в).

Расчеты вариантов, представленных в разделе 4.3, выполнены в постановке, соответствующей реальным условиям роста кристаллов в установке метода Чохральского *EKZ-1300* (компания *Wacker Siltronic*, Германия) при числе Релея $Ra = 8.2 \times 10^6$. Расчеты по методу LES с пристенными функциями проведены на сетке размерностью 35712 ячеек. В целом сохраняются наблюдавшиеся для меньшего числа Релея общие тенденции по влиянию вращения на структуру крупномасштабной циркуляции и интенсивность актуального движения. Получено хорошее совпадение расчетных колебаний температуры в неподвижной точке мониторинга с данными измерений оптическим датчиком [Gräßner O., et al. Material Sci. and Eng. B. – 2000. – Vol. 73. – P.130-133.] (рис. 10а). Выявились существенные преимущества расчетов турбулентной конвекции в расплаве методом LES над осесимметричными расчетами

вращения тигля на движение и тепловое состояние расплава, а также на распределение концентрации кислорода. Показано, что вращение тигля оказывает упорядочивающее воздействие на расплав, заметно изменяя структуру как актуального (рис. 7б), так и осредненного (рис. 8а) движения. Значения осредненных скоростей существенно меньше актуальных, особенно в подкристалльной области, где в наибольшей степени проявляется сходство с конвекцией Р-Б. Здесь интенсивные

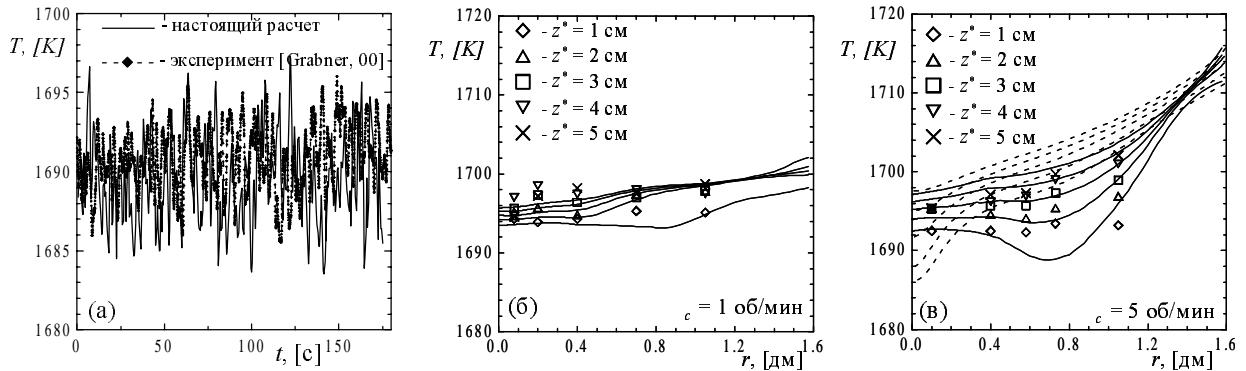


Рис. 10. Колебания температуры в точке $r = 6.5$ см, $z^* = 1$ см: $Ra = 8.2 \times 10^6$, $\Omega_c = 5$ об/мин (а). Сравнение экспериментально измеренной осредненной температуры в расплаве (символы) с результатами расчетов по методу LES и осесимметричных расчетов [Evstratov, 2001].

на основе моделей метода RANS (рис. 10в). Изучено влияние на конвекцию расплава генерируемых обтекающим свободную поверхность расплава потоком аргона касательных напряжений (см. рис. 7а). Расчеты показали рост содержания кислорода в кристалле с увеличением расхода аргона, что согласуется с данными эксперимента [Evstratov I.Yu., et al. J. Crystal Growth. – 2001. – Vol. 230. – P.22-29].

В разделе 4.4 расчеты турбулентной конвекции расплава при $Ra = 8.2 \times 10^6$ выполнены методом RANS/LES на сетке 179456 ячеек. Общая структура конвекции схожа с рассчитанной по методу DNS при $Ra = 5 \times 10^5$ (рис. 11а). Улучшение качества разрешения (рис. 11а, в) привело к пропаданию наблюдавшейся на более грубой сетке (на малых радиусах под свободной поверхностью) зоны нефизичного переохлаждения в актуальных и осредненных полях температуры (рис. 11б). Переход на более подробную сетку и метод RANS/LES привел к заметному росту концентрации в прилегающем к кристаллу слое, приблизив ее значения к известному экспериментальному уровню (рис. 12). Полученная по методу LES тенденция роста концентрации с увеличением угловой скорости вращения тигля изменилась на приближенное постоянство в результатах RANS/LES.

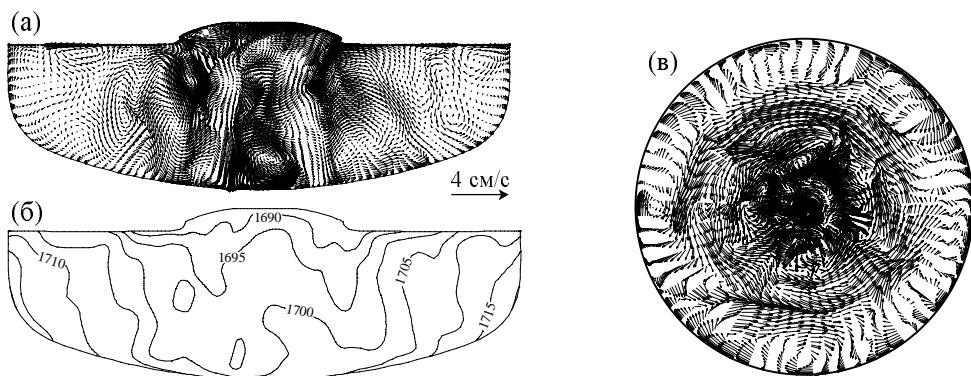


Рис. 11. Мгновенные поля скорости (а) и температуры (б) в вертикальном сечении и поле скорости в горизонтальном сечении емкости (в): $Ra = 8.2 \times 10^6$, $\Omega_c = 5$ об/мин.

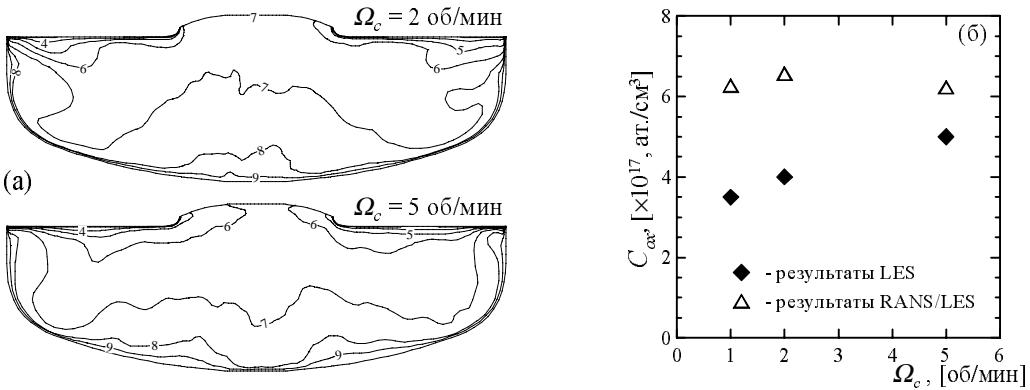


Рис. 12. Влияние скорости вращения тигля на осредненные поля концентрации в вертикальном сечении емкости (а) и уровень содержания кислорода в прилегающем к кристаллу слое (б): сравнение результатов LES и RANS/LES.

В заключении кратко сформулированы основные результаты настоящей работы, которые сводятся к следующему:

- 1) дополнительная верификация программного комплекса SINF при расчетах турбулентной конвекции по методу DNS при умеренных числах Релея показала хорошее согласие с данными других авторов;
- 2) реализованы и прошли апробацию на задачах турбулентной термоконвекции ряд замыкающих моделей метода моделирования крупных вихрей (LES) и гибридных подходов RANS/LES, в том числе специально адаптированная к методу RANS/LES модель турбулентности с одним дифференциальным уравнением для кинетической энергии неразрешаемой составляющей турбулентного движения;
- 3) по результатам начальной отработки реализованных моделей LES и RANS/LES на задаче о турбулентном течении жидкости ($Pr = 1$) во вращающемся горизонтальном слое, подогреваемом снизу, выявлены (путем сопоставления с известными из литературы высокоточными данными DNS) некоторые слабые и сильные стороны моделей применительно к классу термоконвективных задач; обоснована необходимость применения пристенного демпфирования подсеточной вязкости для получения адекватных значений интегральных тепловых потоков через стенки в методе LES;
- 4) на основе модели с одним уравнением проведены численные исследования методом RANS/LES развитой турбулентной конвекции жидкостей в замкнутых полостях простой формы при существенно различающихся числах Прандтля; получены подробные данные о структуре конвекции, ее теплопереносных свойствах;
- 5) выявлена роль квазистационарной глобальной циркуляции и локальных нестационарных образований в виде термиков в турбулентной конвекции Р-Б; установлено, что глобальная циркуляция существенно более интенсивна в конвекции ртути, а в

конвекции воды преимущественное влияние на свойства течения оказывают термики, что подтверждает выводы по результатам известных экспериментальных наблюдений; установлено также, что в Р-Б конвекции ртути при числах Релея $Ra > 10^8$ образуются термики, которые, в силу целого ряда осложняющих обстоятельств, не удавалось наблюдать в экспериментах; получено хорошее количественное согласование рассчитанных толщин пограничных слоев и чисел Нуссельта с доступными данными экспериментов;

- 6) проведены расчеты турбулентной конвекции расплава кремния во вращающейся емкости с геометрией, типичной для тиглей в процессе Чохральского при числе Релея $Ra = 8.2 \times 10^6$, характеризующем реальные условия роста, и при уменьшенном числе Релея $Ra = 5 \times 10^5$; показано, что увеличение скорости вращения тигля оказывает в целом упорядочивающее действие на конвекцию расплава; выявлено, что значения осредненных скоростей существенно меньше актуальных, и что интенсивные турбулентные пульсации приводят к сильным изменениям во времени локального и среднего теплового потока, подводимого к границе раздела кристалл/расплав;
- 7) проведено сопоставление с доступными экспериментальными данными по средним полям и пульсациям температуры в расплаве; выявлены ощутимые преимущества расчетов турбулентной конвекции в расплаве методами LES и RANS/LES над осесимметричными расчетами на основе моделей метода RANS; последнее объясняется существенным влиянием трехмерных эффектов на осредненные поля;
- 8) установлено, что структура полей скорости и температуры, полученных в расчетах по методу DNS при $Ra = 5 \times 10^5$ и по методу RANS/LES при $Ra = 8.2 \times 10^6$ в целом схожа; данные расчетов по методу RANS/LES существенно лучше согласуются с экспериментальным уровнем кислорода в кристалле, чем данные LES; однако в обоих случаях имеются расхождения с полученной при меньшем числе Релея “тенденцией по вращению тигля”, что указывает на необходимость проведения дальнейших исследований.

В приложении более подробно освещается численный метод, используемый в программном комплексе SINF для расчетов течений несжимаемой жидкости.

Основные результаты диссертации опубликованы в работах:

- 1) Абрамов А.Г. Моделирование крупных вихрей в задаче турбулентной конвекции во вращающемся слое, подогреваемом снизу / Труды XIII Школы-семинара молодых ученых и специалистов под руководством акад. РАН А.И. Леонтьева, –М.: Изд-во. МЭИ, 2001. Т. 1. С. 177-181.
- 2) Evstratov, I.Yu., Kalaev, V.V., Nabokov, V.N., Zhmakin, A.I., Makarov, Yu.N., Abramov, A.G., Ivanov, N.G., Rudinsky, E.A., Smirnov, E.M., Lowry, S.A., Dornberger, E., Virbulis, J., Tomzig, E., Ammon, W.v. Global model of Czochralski silicon growth to predict oxygen content and thermal fluctuations at the melt-crystal interface // Microelectronic Engineering. – 2001. - Vol. 56 - P.139–142.
- 3) Evstratov, I.Yu., Kalaev, V.V., Zhmakin, A.I., Makarov, Yu.N., Abramov, A.G., Ivanov, N.G., Smirnov, E.M., Dornberger, E., Virbulis, J., Tomzig, E., Ammon, W.v. Modeling analysis of unsteady three-dimensional turbulent melt flow during Czochralski growth of Si crystals // J. Crystal Growth. – 2001. – Vol.230. – P.22-29.
- 4) Smirnov, E.M., Abramov, A.G., Ivanov, N.G., Korsakov, A.B., Zajtsev, D.K. Numerical analysis of conjugate heat transfer in a melt-crucible model of Czochralski systems: combined Coriolis and MHD effects on time-dependent 3D melt convection / In: Proc. 7th Int. Conf. on Advanced Comp. Methods in Heat Transfer, 2002, Halkidiki, Greece, WIT Press, pp. 107-116.
- 5) Абрамов А.Г., Корсаков А.Б. Прямое численное моделирование турбулентной конвекции ртути в осесимметричных емкостях, включая эффекты магнитного поля / Труды III Российской национальной конференции по теплообмену, – М.: Изд-во. МЭИ, 2002. Т. 3. С. 33-36.
- 6) Evstratov, I.Yu., Kalaev, V.V., Zhmakin, A.I., Makarov, Yu.N., Abramov, A.G., Ivanov, N.G., Korsakov, A.B., Smirnov, E.M., Dornberger, E., Virbulis, J., Tomzig, E., Ammon, W.v. Numerical study of 3D unsteady melt convection during industrial-scale CZ Si-crystal growth // J. Crystal Growth. – 2002. – Vol. 237-239. – P. 1757-1761.
- 7) Abramov, A.G., Ivanov, N.G., Smirnov, E.M. Numerical study of high-Ra Rayleigh-Bénard mercury and water convection in confined enclosures using a hybrid RANS/LES technique // In: Heat transfer in unsteady and transitional flows, Proc. Eurotherm Seminar 74, H.C. de Lange and A.A. van Steenhoven eds., Eindhoven, The Netherlands, 2003, pp. 33-38.
- 8) Smirnov, E.M., Abramov, A.G., Ivanov, N.G., Smirnov, P.E., Yakubov, S.A. DNS and RANS/LES-computations of complex geometry flows using a parallel multiblock finite-volume code / In.: Proc. 14th Int. Conf. Parallel CFD, 2003, Moscow, Russia, 4 p.