

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 Релея. 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, развиваемого сотрудниками кафедры гидроаэродинамики 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 теплообмена 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 $Ra = (g\beta\Delta TH^3)/(va)$; здесь g – ускорение свободного падения, β – температурный коэффициент расширения, ΔT – характерный перепад температуры, H – характерный линейный масштаб задачи, ν – кинематический коэффициент вязкости; a – 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 :

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

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

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

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

В соотношении (2) l – характерный линейный масштаб турбулентности, y – расстояние до ближайшей стенки. Турбулентная 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:

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

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, модель с одним уравнением RANS/LES фактически выступила в качестве альтернати-

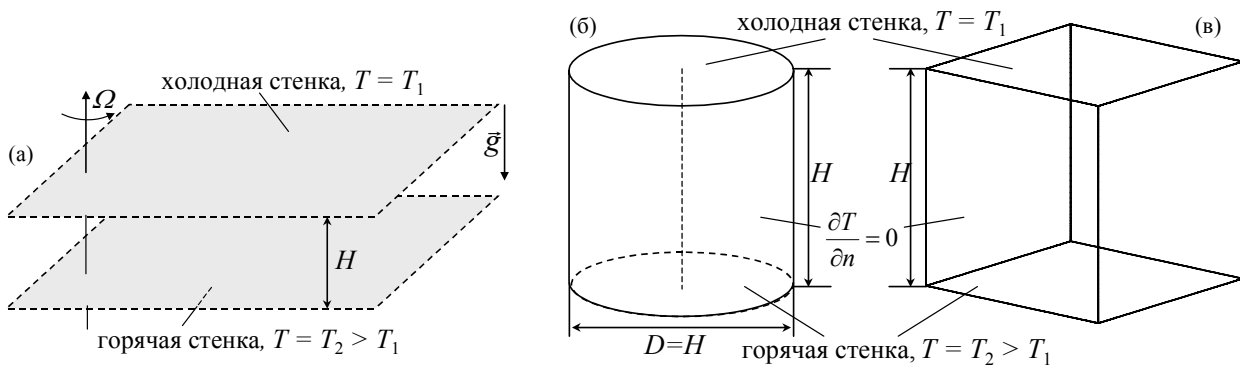


Рис. 1. Геометрия расчетных областей при моделировании турбулентной конвекции Релея-Бенара: (а) – горизонтальный слой; (б) – цилиндрическая полость; (в) – кубическая полость.

вы 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 ощущающийся 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 горизонтальных направлениях. Область ограничена снизу и сверху твердыми стенками и вращается вокруг вертикальной оси

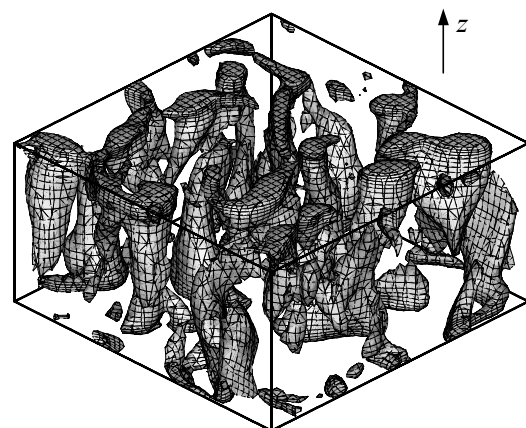


Рис. 2. Вращающийся горизонтальный слой, подогреваемый снизу: изоповерхность вертикальной компоненты завихренности.

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 приложенному 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

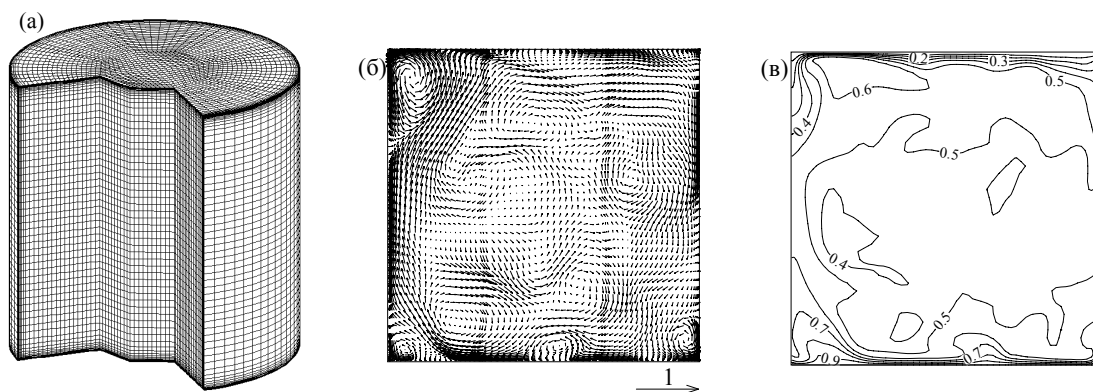


Рис. 3. Конвекция ртути в цилиндрической полости: двухблочная расчетная сетка (а); мгновенные поля скорости (б) и температуры (в) в меридиональном сечении, $Ra = 10^8$.

размерностью 168640 ячеек (рис. 3а) при варьировании числа Релея в диапазоне

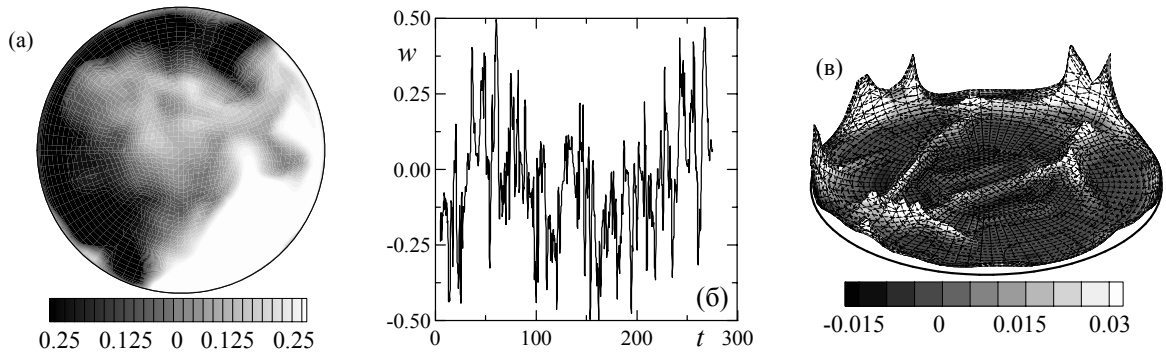


Рис. 4. Мгновенное поле вертикальной скорости в центральном горизонтальном сечении полости; колебания вертикальной скорости в точке $r = 0.96, z = 0.5$; изоповерхность температуры ($T = 0.9$), окрашенная в соответствии с величиной вертикальной скорости на ней.

$10^5 \leq Ra \leq 5 \times 10^9$ (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 $Ra \geq 10^8$ (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,

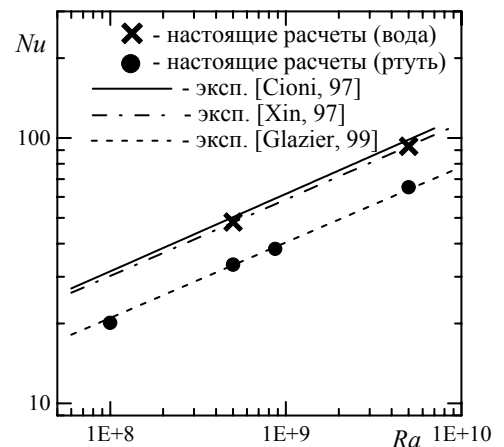


Рис. 5. Зависимость $Nu(Ra)$: сравнение с данными экспериментов.

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 меньше, 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 конвекции жидкостей с малыми и большими числами Прандтля.

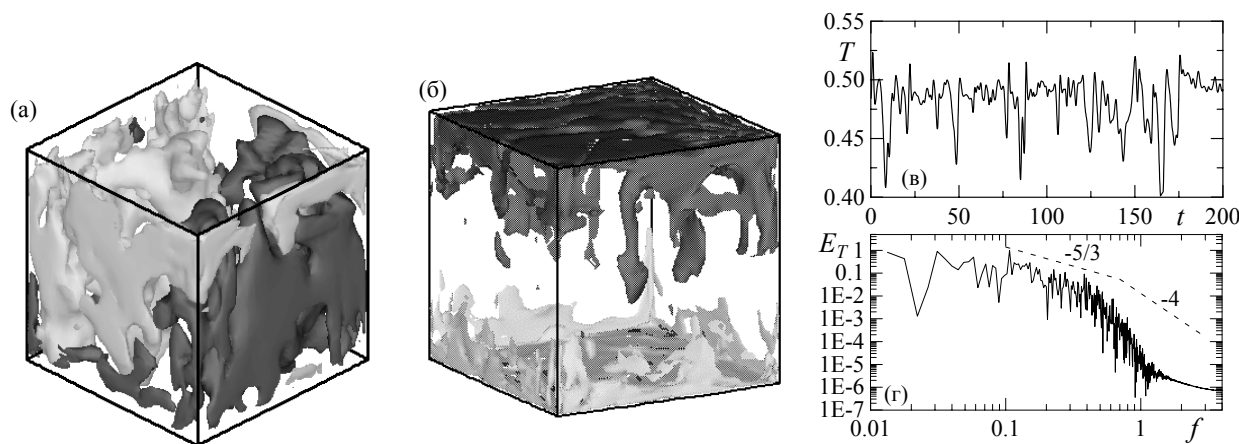


Рис. 6. Конвекция воды в кубической полости: (а) изоповерхности вертикальной компоненты скорости $w = \pm 0.05$; (б) изоповерхности температуры $T = 0.45$ (черная) и 0.55 (серая); (в) эволюция температуры и (г) соответствующие энергетический спектр в точке мониторинга вблизи верхней стенки полости ($z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

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,

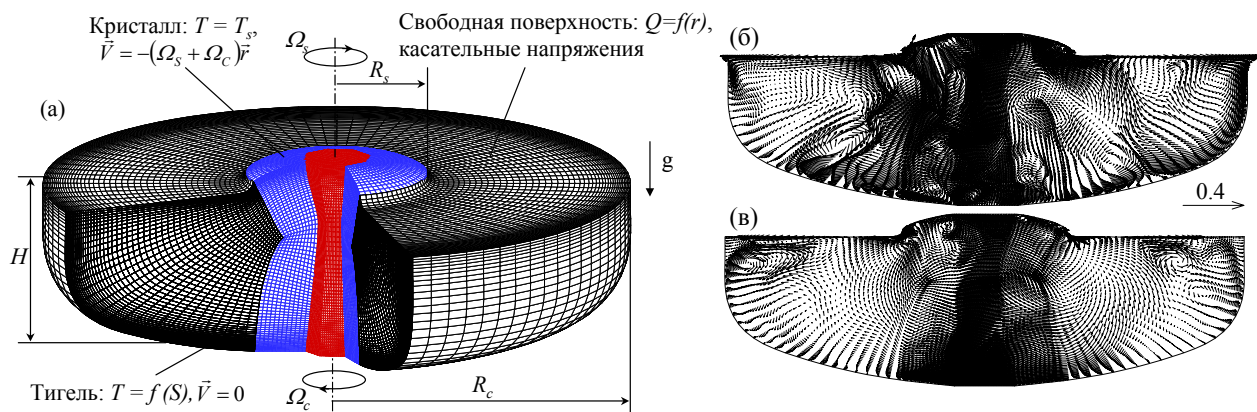


Рис. 7. Геометрия емкости, граничные условия и трехблочная сетка (а). Мгновенные поля скорости в вертикальном сечении емкости: $Ra = 5 \times 10^5$, $Ro = 9.5$ (б) и 1.9 (в).

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 вращения тигля на движение и тепловое состояние расплава, а также на распределение концентрации кислорода. Показано, что вращение тигля оказывает

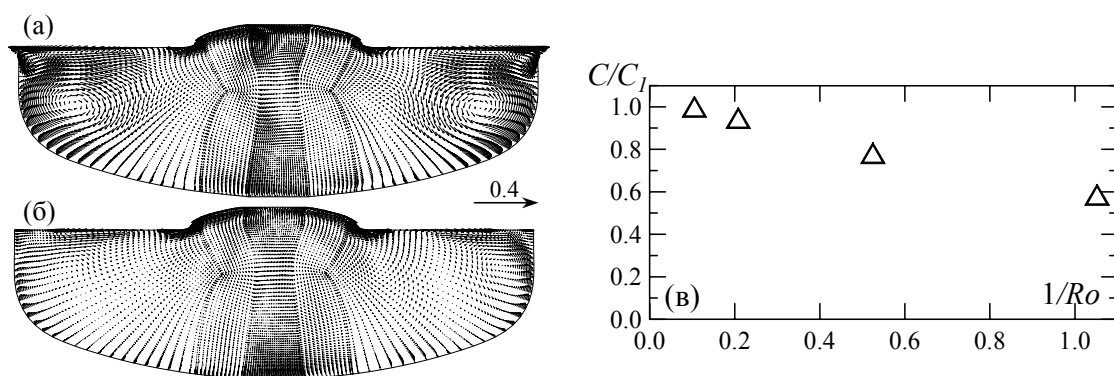


Рис. 8. Осредненные во времени поля скорости: $Ra = 5 \times 10^5$, $Ro = 9.5$ (а) и 1.9 (б). Влияние скорости вращения тигля на уровень содержания кислорода в кристалле (в).

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 подкристальной области, где в наибольшей степени проявляется сходство с конвекцией Р-Б. Здесь интенсивные

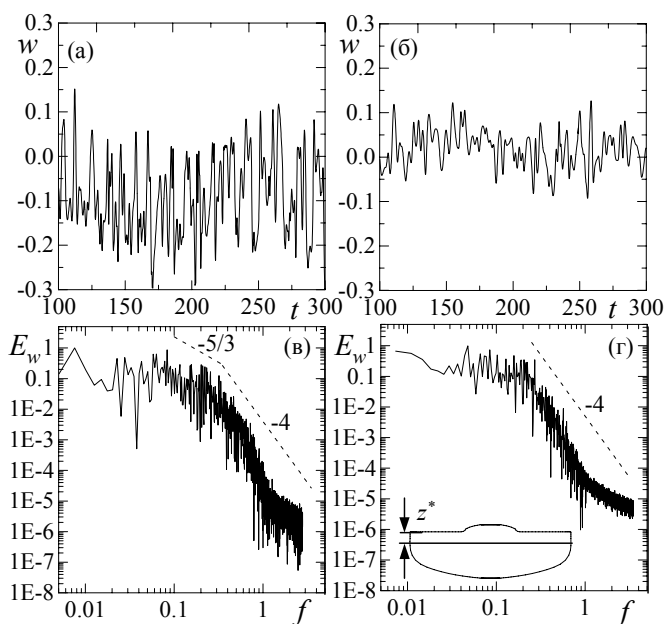


Рис. 9 Колебания вертикальной скорости и соответствующие энергетические спектры в точке $r = 1.1$, $z^* = 0.5$; $Ro = 9.5$ (а, в) и 1.9 (б, г).

“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 [Gräbner 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 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].

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

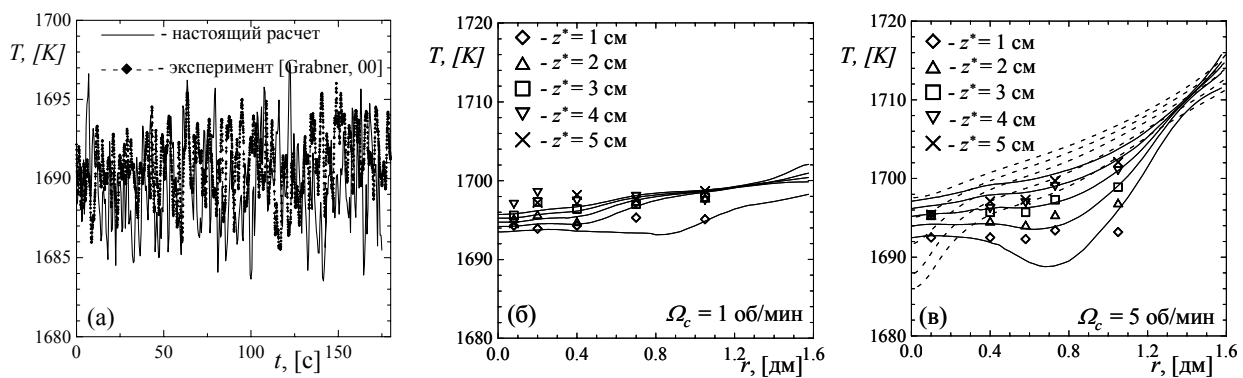


Рис. 10. Колебания температуры в точке $r = 6.5$ см, $z^* = 1$ см: $Ra = 8.2 \times 10^6$, $\Omega_c = 5$ об/мин (а). Сравнение экспериментально измеренной средней температуры в расплаве (символы) с результатами расчетов по методу LES и осесимметричных расчетов [Evstratov, 2001].

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 при-

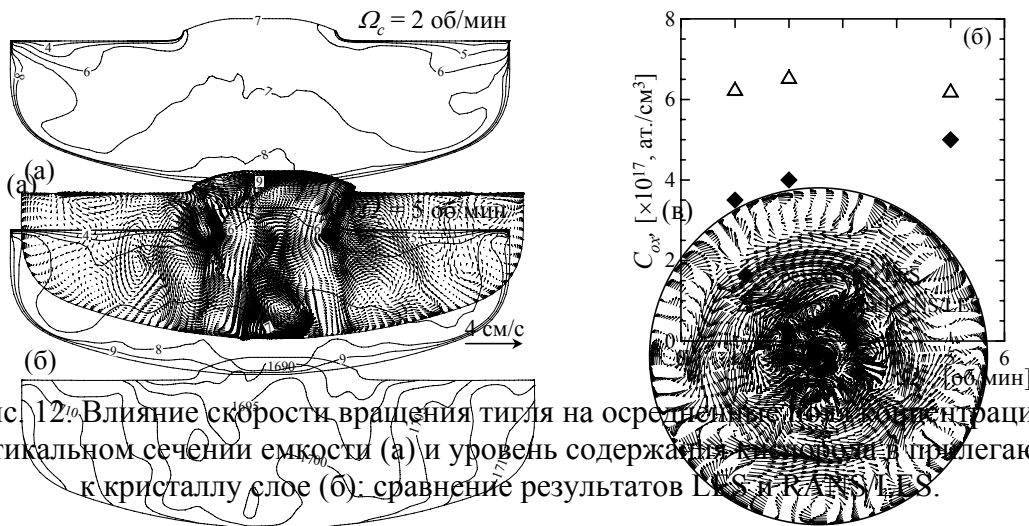


Рис. 12. Влияние скорости вращения тигля на осредненную концентрацию в вертикальном сечении емкости (а) и уровень содержания кислорода в прилегающем к кристаллу слое (б): сравнение результатов LES и RANS/LES.

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.

ближенное постоянство в результатах 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 термик 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 оказы-

вает 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.