

Е.М. Смирнов, А.Г. Абрамов, Н.Г. Иванов, А.Б. Корсаков

Прямое численное моделирование и метод моделирования крупных вихрей в нестационарных задачах турбулентной термоконвекции

Введение

Изучение конвективного движения жидкости, возникающего вследствие пространственной неоднородности плотности в полях массовых сил, имеет важное практическое значение для различных областей науки и техники, таких как геофизика, астрофизика, энергетика, микроэлектроника, вентиляция и кондиционирование, химические технологии. Достижения в этой области отражены в ряде монографий и большом числе отдельных научных публикаций. Вместе с тем проблема расчетного предсказания характеристик турбулентных режимов конвекции, представляющих наибольший практический интерес, далека от решения и остается чрезвычайно актуальной.

Среди трех подходов к численному описанию турбулентной конвекции все возрастающей привлекательностью обладает метод прямого численного моделирования турбулентности – ПЧМ (в англоязычной литературе Direct Numerical Simulation, DNS). Однако метод ПЧМ обеспечивает надежность результатов расчетов только при полном разрешении всех составляющих движения. Выполнение данного условия налагает жесткие требования к вычислительным ресурсам, быстро возрастающие при желании продвинуться вверх по числу Релея. Как правило, применение метода ПЧМ с полным разрешением ограничивается модельными задачами в упрощенной геометрии при относительно невысоких значениях числа Релея [1].

Традиционный подход, основанный на решении уравнений, возникающих вследствие применения рейнольдсова осреднения уравнений Навье-Стокса – РОУНС (Reynolds-Averaged Navier-Stokes, RANS), требует значительно меньших вычислительных затрат, чем ПЧМ. До сих пор метод РОУНС остается наиболее распространенным подходом к моделированию турбулентных

течений, в том числе и течений с определяющей ролью эффектов плавучести [2]. Вместе с тем, результаты расчетов по методу РОУНС очень чувствительны к выбору той или иной замыкающей полуэмпирической модели турбулентности, а иногда и просто не способны отразить характерные особенности, присущие термоконвективным течениям. Опыт трехмерных расчетов турбулентной температурной конвекции на основе ряда моделей РОУНС показал, что свойственная этим моделям генерация высокого уровня турбулентной вязкости препятствует развитию крупномасштабных трехмерных пульсаций, которые в действительности определяют структуру осредненного движения и конвекции в целом [3].

Метод моделирования крупных вихрей – МКВ (Large Eddy Simulation, LES) предполагает аккуратный расчет переноса импульса и тепла лишь крупными, энергетически важными структурами, что позволяет рассчитывать термоконвективные течения при значительно более высоких значениях числа Релея, в сравнении с ПЧМ, с привлечением сравнительно простых замыкающих моделей. Особая привлекательность метода МКВ применительно к расчетам термоконвективных задач объясняется способностью адекватно воспроизводить эволюцию во времени определяющих конвекцию крупномасштабных вихревых структур. Однако моделирование турбулентных течений в присутствии твердых границ на основе метода МКВ в чистом виде сопровождается сопоставимыми с налагаемыми в расчетах по методу ПЧМ требованиями по сеточному разрешению пристенных областей, в которых присутствуют относительно мелкие вихри [4]. Стремление преодолеть данное ограничение обусловило появление ряда гибридных подходов, сочетающих в себе те или иные элементы методов РОУНС, МКВ и ПЧМ. Среди них наиболее многообещающим является гибридный РОУНС/МКВ подход, известный как метод моделирования отсоединенных вихрей – МОВ (Detached Eddy Simulation, DES) [4]. Этот метод успешно применяется в расчетах сложных отрывных течений в задачах внешней аэродинамики. Возможности приложения

гибридного РОУНС/МКВ подхода к расчетам термоконвективных течений обсуждаются в [3].

За прошедшее десятилетие силами научной группы, в которую входят авторы, рассмотрен широкий спектр методических и практических задач моделирования термоконвективных течений, включая вопросы выращивания полупроводниковых кристаллов из расплава по методу Чохральского [5]. С учетом отмеченных выше обстоятельств, расчеты турбулентной конвекции при умеренных значениях числа Релея проводились на основе метода ПЧМ, а для больших значений числа Релея применялся гибридный РОУНС/МКВ подход.

Постановка задач

Апробация методов ПЧМ и РОУНС/МКВ при расчетах турбулентных термоконвективных течений проводилась при решении задачи турбулентной конвекции во вращающемся бесконечном слое, подогреваемом снизу [6]. Расчетная область представляет собой параллелепипед с наложенными условиями периодичности в горизонтальных направлениях (см. рис. 1а). Область снизу и сверху ограничена твердыми стенками и вращается вокруг вертикальной оси с угловой скоростью Ω . Верхняя стенка слоя считается холодной, нижняя – горячей; разность $\Delta T = T_1 - T_2$ определяет характерный перепад температуры. Размер расчетной области составляет $2N \times 2N \times N$, где N – глубина слоя, выбранная в качестве характерной длины.

Турбулентные режимы конвекции в подогреваемых емкостях исследовалась в следующих четырех постановках.

Первая задача состоит в расчете конвекции во вращающейся кольцевой полости в условиях экспериментов [7, 8]. На рис. 1б показана кольцевая полость, вращающаяся вокруг вертикальной оси с постоянной угловой скоростью Ω . Кольцо образовано двумя концентрическими цилиндрами высотой H , радиус внутреннего цилиндра равен R_i , радиус внешнего – R_o . Снизу и сверху кольцо ограничено горизонтальными твердыми стенками.

Осесимметричные тепловые граничные условия в полости определены следующим образом: внутренний цилиндр считается холодным с заданной температурой T_i , внешний цилиндр – горячим с заданной температурой T_o , дно и верхняя стенка считаются адиабатическими. В качестве характерной длины принято расстояние между внешним и внутренним цилиндрами ΔR , характерного перепада температуры – перепад температуры между внешней и внутренней стенками ΔT . Основные геометрические соотношения следующие: $R_i : \Delta R = 1.37 : 1$, $H : \Delta R = 1.97 : 1$.

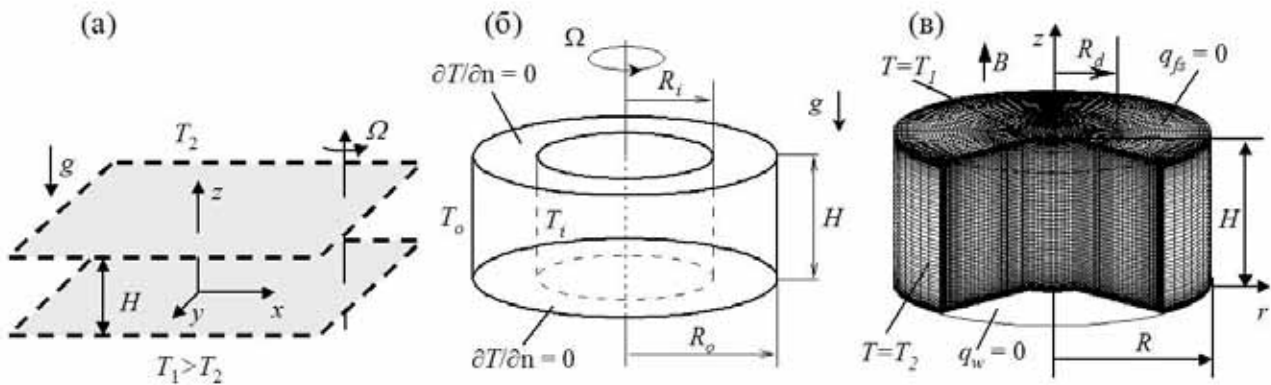


Рис.1. Геометрия и граничные условия для вращающегося горизонтального слоя (а), вращающейся кольцевой полости (б), модели тигля в системах выращивания кристаллов по методу Чохральского (в).

Во второй задаче, посвященной изучению турбулентной конвекции ртути в неподвижной замкнутой цилиндрической емкости, подогреваемой снизу, $R : H = 0.5$. Верхнее и нижнее основания цилиндра поддерживаются при температурах T_1 и T_2 соответственно ($T_1 < T_2$), боковая поверхность полагается теплоизолированной. Данная постановка соответствует условиям экспериментов [9].

Третья задача состоит в исследовании конвекции в неподвижной емкости, моделирующей тигель в системах выращивания кристаллов по методу

Чохральского. Схематически емкость представлена на рис. 1в, здесь же показана расчетная сетка. Верхнее основание емкости представляет собой свободную поверхность, частично закрытую в центральной части твердым диском радиуса R_d . Следуя экспериментальному исследованию [10], принято: $R : H = 1$, $R_d : H = 0.4$. Емкость помещена в однородное аксиальное магнитное поле с индукцией B . Все граничные поверхности считаются электроизолированными. Диск и боковые стенки емкости поддерживаются при температурах T_1 и T_2 соответственно ($T_1 < T_2$). Дно и свободная поверхность полагаются теплоизолированными.

В четвертой задаче рассматривается конвекция во вращающейся емкости, форма которой типична для тиглей метода Чохральского, при типичных же для технологии тепловых граничных условиях. Конвекция исследуется в двух различных постановках. В первом случае рассчитывается только течения расплава в тигле радиуса R_c с задаваемыми осесимметричными распределениями температуры и/или тепловых потоков на его стенке и свободной поверхности (рис. 2а). Во втором случае решается задача сопряженного теплообмена системы, состоящей из твердых графитовой опоры и кварцевого тигля и жидкого расплава (рис. 2б). Свободная поверхность расплава при $r > R_{men}$ полагается плоской, а при $R_s \leq r \leq R_{men}$ – искривленной в соответствии с типичными параметрами мениска. Центральная часть верхней границы ($r < R_s$) интерпретируется как поверхность раздела кристалл/расплав, поддерживаемая при постоянной температуре кристаллизации. При решении задачи сопряженного теплообмена толщина кварцевого тигля δ предполагается постоянной, отношение теплопроводностей $\lambda_c/\lambda_m = 0.08$, $\lambda_{sup}/\lambda_m = 0.7$, здесь и далее индексами “s”, “m”, “c” и “sup” помечены величины, относящиеся к кристаллу, расплаву, тиглю и опоре соответственно. В качестве характерной длины принимается высота емкости H , определяемая как расстояние от нижней точки дна до плоскости, проходящей через неискривленную часть свободной

поверхности. Основные геометрические соотношения следующие: $R_c:H = 1.7$, $R_m:H = 0.6$, $R_s:H = 0.5$, $\delta:H = 0.08$, $R_{sup}:H = 2.0$, $H_{sup}:H = 1.5$.

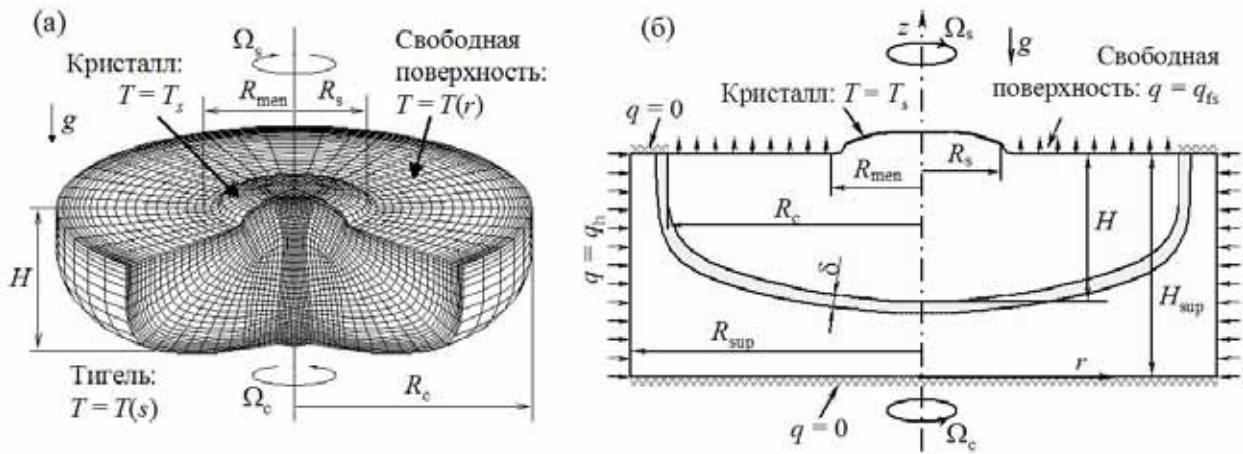


Рис.2. Геометрия емкости, форма которой типична для тиглей метода Чохральского (а), и расширенная расчетная область для решения задачи сопряженного теплообмена (б).

Основные уравнения

Для описания свободной и смешанной турбулентной конвекции несжимаемой ньютоновской жидкости с постоянными физическими свойствами используется система нестационарных трехмерных уравнений неразрывности, движения и энергии. В общем случае уравнения движения записываются во вращающейся с постоянной угловой скоростью системе координат. Эффекты плавучести в поле силы тяжести учитываются в приближении Буссинеска, эффекты плавучести в поле центробежной силы полагаются пренебрежимо малыми. Магнитогидродинамические эффекты моделируются в безындукционном приближении. С учетом перечисленных предположений система уравнений, описывающих тепловую конвекцию, может быть представлена в виде

$$\frac{\partial \mathbf{V}}{\partial t} + \text{Div}(\mathbf{V}\mathbf{V}) = -\frac{1}{\rho} \nabla p^* + \text{Div}(2\nu_{\text{eff}} \mathbf{S}) + \beta_T (T_{\text{ref}} - T) \mathbf{g} - 2\boldsymbol{\Omega} \times \mathbf{V} + \frac{1}{\rho} \mathbf{j} \times \mathbf{B} \quad (1)$$

$$\frac{\partial T}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{V}T) = \nabla \cdot (\mathbf{a}_{\text{eff}} \nabla T) \quad (2)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{V} = 0 \quad (3)$$

$$\Delta\Phi = \mathbf{V} \cdot (\nabla \times \mathbf{V}) \quad (4)$$

$$\mathbf{j} = \sigma[-\nabla\Phi + \mathbf{V} \times \mathbf{B}] \quad (5)$$

Здесь \mathbf{V} – вектор относительной скорости во вращающейся системе координат; $p^* = p - p_h$, – модифицированное давление; p – истинное давление; p_h – давление в состоянии гидростатического равновесия; $v_{\text{eff}} = v + v_t$ – эффективный кинематический коэффициент вязкости; \mathbf{S} – тензор скоростей деформации разрешаемого движения; v_t – вихревая вязкость, определяемая на основе той или иной замыкающей модели турбулентности; β_T – температурный коэффициент расширения; T_{ref} – уровень температуры; Ω – угловая скорость вращающейся системы отсчета; a_{eff} – эффективный коэффициент температуропроводности; Φ – потенциал электрического поля; \mathbf{B} – индукция магнитного поля; \mathbf{j} – плотность электрического тока, σ – электрическая проводимость.

При моделировании течений на основе метода ПЧМ величина вихревой вязкости полагается равной нулю. В рамках метода РОУНС/МКВ вихревая вязкость определяется на основе подсеточной модели турбулентности: алгебраической модели или дифференциальной модели с уравнением переноса кинетической энергии неразрешаемого движения.

Для заданной геометрии тепловая конвекция определяется двумя безразмерными параметрами: числом Прандтля $Pr = \frac{\nu}{a}$, числом Релея

$$Ra = \frac{V_b^2 L^2}{\nu a}. \text{ Влияние вращения отражает число Россби } Ro = \frac{V_b}{\Omega L}, \text{ а эффекты}$$

магнитного поля характеризуются числом Стюарта $N = \frac{\sigma B^2 L}{\rho V_b}$. Здесь L –

характерный линейный масштаб задачи, а скорость плавучести $V_b = \sqrt{g\beta_T \Delta T L}$ – характерный масштаб скорости.

Для каждой из рассматриваемых задач граничные условия формулируются в соответствии с приведенными выше постановками. В качестве начальных условий, как правило, задаются нулевые значения скоростей и некоторое постоянное значение безразмерной температуры. В отдельных случаях в качестве начальных используются поля, полученные при расчетах задачи в той же постановке для других значений определяющих параметров.

Вычислительные аспекты

Расчеты выполнялись с использованием развиваемого на протяжении десяти лет группой сотрудников кафедры гидроаэродинамики СПбГПУ программного комплекса (ПК) SINF (Supersonic to INcompressible Flows). Описание первой версии ПК содержится в [11], а подробная информация о его сегодняшних возможностях содержится в статье Е.М. Смирнова и Д.К. Зайцева, публикуемой в настоящем сборнике [12]. К настоящему моменту ПК SINF позволяет проводить расчеты стационарных и нестационарных до- и сверхзвуковых течений жидкости или газа, развивающихся в общем случае в областях сложной геометрии. Численный метод основан на использовании многоблочных структурированных неравномерных сеток, согласованных с границами области течения. Уравнения движения записаны относительно декартовых компонент скорости. Дискретизация пространственных операторов уравнений сохранения выполнена по методу конечных объемов со вторым порядком точности. Значения искоемых величин определяются в центрах контрольных объемов. Для получения нестационарных решений в ПК SINF реализована неявная трехслойная схема второго порядка по физическому времени. В случае течений несжимаемой жидкости и низкоскоростных течений газа на каждом временном слое итерации осуществляются по методу искусственной сжимаемости. Продвижение по фиктивному времени осуществляется с помощью неявного метода первого порядка, основанного на линеаризации определяемого исходными уравнениями дифференциального оператора и на методе приближенной факторизации. Система алгебраических

уравнений, полученная в результате использования неявного метода приближенной факторизации, решается методом матричной прогонки для нахождения компонент вектора скорости и скалярной прогонки для остальных переменных.

Характеристики расчетных сеток и величины шага по времени.

Задача	Число блоков	Общее число ячеек	Шаг по времени
Вращающийся слой	1	64 512 (48×48×28)	0.05
Кольцевая полость	1	288 000 (40×120×60)	0.025 и 0.1
Цилиндр	2	168 640	0.1
Модельная установка метода Чохральского	2	206 765	0.1
Установка метода Чохральского в условиях реальной геометрии	3	35 712 (Сетка А) 285 696 (Сетка В) 179 456 (Сетка С)	0.125 (Сетка А) 0.1 (Сетка В) 0.25 (Сетка С)
Установка метода Чохральского в условиях реальной геометрии (задача сопряженного теплообмена)	9	79 872 (3 “жидких” блока) + 29 952 (6 “твердых” блоков)	0.25

Заложенные в комплекс возможности были верифицированы, в том числе, при решении ряда тестовых задач тепловой конвекции [13]. В частности, были рассмотрены стационарная и нестационарная свободная конвекция в квадратной полости с разнонагретыми вертикальными стенками в сопоставлении с эталонными данными [14], стационарная конвекция воздуха в кубической полости с двумя боковыми стенками, поддерживаемыми при разных температурах, для набора определяющих параметров, рассмотренного ранее в [15], а также конвекция в подогреваемой сбоку цилиндрической емкости с закрывающим часть свободной поверхности холодным диском для условий, сформулированных в [16]. Выполненное сопоставление с данными

расчетов других авторов показало хорошее согласие по локальным и интегральным характеристикам течения и теплообмена.

При проведении расчетов исследовательского характера использовались расчетные сетки, характеристики которых приведены в таблице 1. Все сетки были сгущены к твердым стенкам так, что типичные значения нормированного расстояния от центра первой пристенной ячейки до стенки (ныне традиционно обозначаемого как Y^+) находились в диапазоне $0.5 \div 1.5$. Для каждой из рассмотренных задач было проведено исследование влияния величины шага по времени на получаемое решение [13, 17]. В ходе предварительных расчетов были найдены значения временных шагов, отвечающие приемлемому компромиссу между точностью получаемого решения и временем, затрачиваемым на расчет представительной выборки (в зависимости от задачи продолжительность участка выборки с установившимися автоколебаниями составляет от 100 до 400 временных единиц). Используемые в данной работе величины временных шагов также приведены в таблице.

Конвекция в подогреваемом снизу вращающемся слое

Прямое численное моделирование конвекции модельной жидкости (число Прандтля $Pr = 1$) во вращающемся слое было проведено для набора значений определяющих параметров $Ra = 5.9 \times 10^5$, $Ro = 0.75$, который соответствует одному из режимов эталонного численного исследования [6]. Анализ моментальных полей скорости и температуры (см. подробнее [17]) позволил выделить ряд характерных особенностей, присущих геофизическим явлениям, а именно: существование областей со струйным характером движения, областей с сильной горизонтальной циркуляцией (вихревых структур) и, наконец, застойных зон вблизи центров таких вихревых структур. Построенные по результатам проведенного расчета профили осредненной в пространстве и во времени температуры удовлетворительно согласуются с данными работы [6]. Несмотря на применение существенно более грубой расчетной сетки по сравнению с использованной в [6], удалось получить хорошее согласие по

числу Нуссельта (расхождение менее 1.5%). Таким образом, расчеты по методу ПЧМ даже на сетках умеренной размерности позволили предсказать теплопроводящие свойства конвекции с достаточной для практических применений точностью.

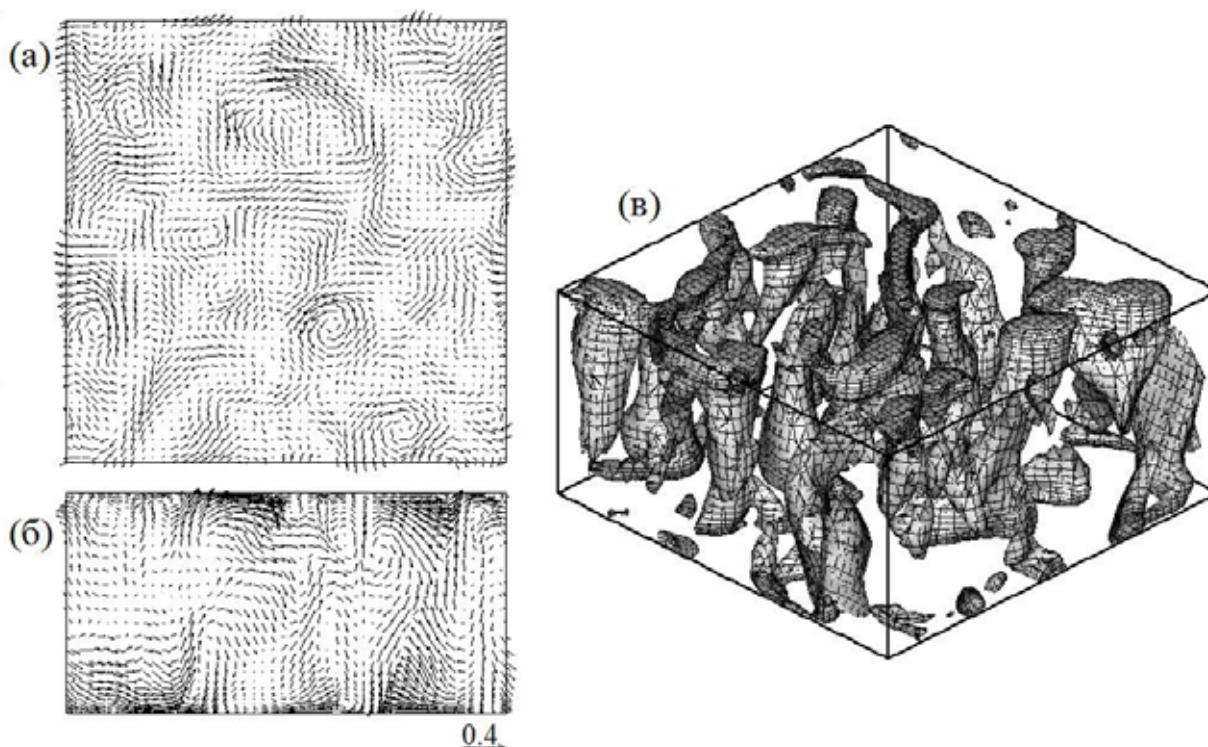


Рис.3. Моментальные поля скорости в среднем горизонтальном (а) и вертикальном (б) сечениях и трехмерная картина изоповерхности вертикальной компоненты завихренности (в) во вращающемся слое при $Ra = 1.13 \times 10^8$.

Расчет турбулентной конвекции во вращающемся слое на основе метода РОУНС/МКВ производился при числе Релея $Ra = 1.13 \times 10^8$. Важно отметить, что с ростом числа Релея проявляется тенденция к хаотизации течения, уменьшению линейных размеров вихрей с одновременным увеличением их численности, а также ослабление относительной интенсивности конвективного движения. Тем не менее, несмотря на турбулентный режим конвекции, на фоне мелкомасштабного движения отчетливо заметны когерентные вихревые структуры, вращающиеся сонаправленно друг другу и внешне приложенному вращению (рис. 3а). Размеры и интенсивность структур соответствуют картинам, представленным в работе [6] при тех же значениях определяющих

параметров. В вертикальном сечении (рис. 3б) видны образующиеся у стенок струйки жидкости – термики, которые, двигаясь в направлении противоположной стенки, постепенно остывают (нагреваются) при обмене теплом с окружающей более холодной (горячей) жидкостью. Термики играют важную роль в конвекции Релея-Бенара жидкостей с умеренными и высокими значениями числа Прандтля. Дополнительное представление о характере турбулентной конвекции во вращающемся слое дает приведенная на рис. 3в трехмерная картина изоповерхности вертикальной компоненты завихренности.

Расчеты по методу РОУНС/МКВ позволили получить очень хорошее согласие с эталонными данными ПЧМ по числу Нуссельта и ряду статистических характеристик конвекции. Так, в [6] приведено значение числа Нуссельта $Nu = 31.1$. При расчетах по методу РОУНС/МКВ получено значение $Nu = 31.3$, таким образом, погрешность не превышает 1%.

Более подробные сведения о результатах расчетов течения во вращающемся слое и о проведенной на их основе настройке реализованной в ПК SINF гибридной модели РОУНС/МКВ даны в [17, 18].

Бароклинная неустойчивость в кольцевой полости

Численное исследование бароклинной неустойчивости в кольцевой полости проводилось с использованием метода ПЧМ [13, 19, 20]. Расчет конвекции воды в кольцевой полости ($Pr = 7.16$) выполнен при $Ra = 6.8 \times 10^6$, $Ro = 0.97$. После завершения переходных процессов, во время которых проявлялось влияние начальных условий, установился автоколебательный режим течения с регулярной трехвихревой структурой, медленно прецессирующей в направлении основного вращения при наблюдении во вращающейся системе координат, жестко связанной с кольцевой емкостью. Этот результат полностью соответствует данным экспериментальных исследований [7]. Формирование трех вихрей наглядно иллюстрируют приведенные на рис. 4а распределения моментальной скорости в горизонтальном сечении, расположенном посередине емкости. Энергетический спектр колебаний температуры в неподвижной точке

мониторинга с координатами $r = 1.84$, $z = 0.94$, построенный по выборке, относящейся к периодическому режиму течения, приведен на рис. 4б (пунктиром отмечена частота $F = 0.492$, соответствующая времени поворота полости на 120°). На кривой можно выделить только одну характерную частоту $f = 0.496$, то есть основной максимум энергетического спектра несколько смещен в сторону высоких частот, что соответствует прецессии волновой структуры в направлении основного вращения.

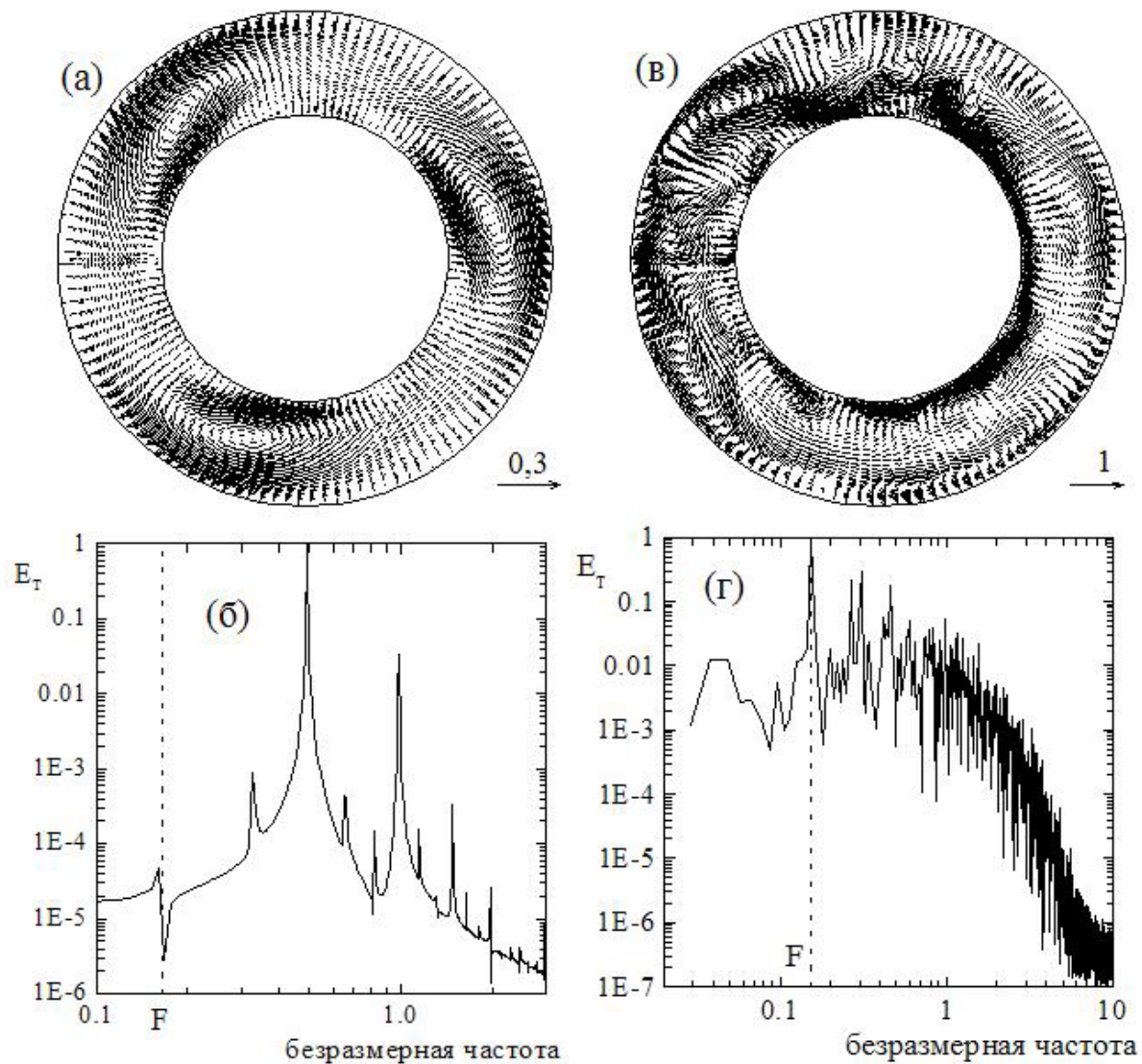


Рис.4. Моментальные распределения скорости в среднем сечении вращающейся кольцевой полости для воды (а) и ртути (в); энергетические спектры колебаний температуры в точке мониторинга для воды (б) и ртути (г).

Для моделирования развития бароклинной неустойчивости в конвекции ртути ($Pr = 0.025$) были выбраны значения параметров $Ra = 6.9 \times 10^4$, $Ro = 1.04$. На полученной экспериментально [8] диаграмме режимов эти значения определяющих параметров относятся к режиму, в котором регулярные волны со значениями волнового числа в диапазоне от 3 до 7 сосуществуют с неупорядоченными трехмерными пульсациями. Рассчитанное распределение скорости в горизонтальном сечении показано на рис. 4в. Вид векторного поля скорости не позволяет выявить какие-либо упорядоченные структуры: присутствуют вихри разных масштабов. Таким образом, рассматриваемое течение действительно следует отнести к режиму негеострофической турбулентности. В этом случае имеют место неупорядоченные колебания, характеризующиеся присутствием многих частот, это относится как к эволюции поля скорости, так и к эволюции поля температуры. На рис. 4г приведен энергетический спектр колебаний в неподвижной точке мониторинга с координатами $r = 2.0$, $z = 0.5$; пунктиром отмечена частота $F = 0.153$, соответствующая времени поворота полости на один оборот вокруг оси. Основной максимум энергетического спектра немного смещен относительно F в область низких частот, что означает слабую прецессию волновых структур в сторону, противоположную вращению кольцевой полости.

Конвекция ртути в цилиндрической емкости

Обстоятельному анализу была подвергнута турбулентная конвекция ртути ($Pr = 0.025$) в подогреваемой снизу цилиндрической полости [17]. Прямое численное моделирование для этой конфигурации проводилось при $Ra = 10^5$ и 10^6 [21].

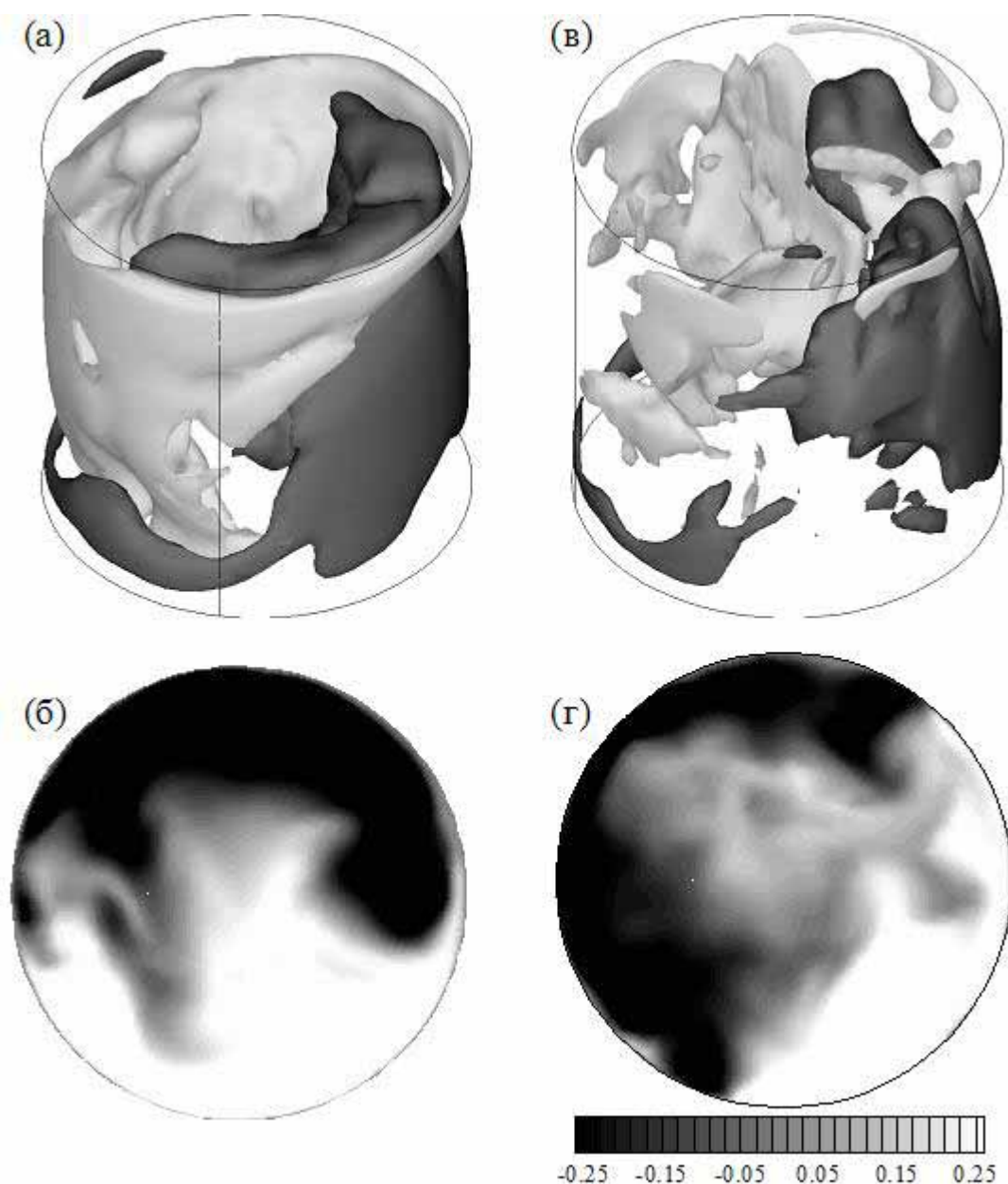


Рис.5. Визуализация термоконвективного течения ртути в цилиндрической полости при $Ra = 10^6$ (а, б) и $Ra = 10^8$ (в, г): сверху изоповерхности вертикальной компоненты скорости $w = 0.25$ (черная) и $w = -0.25$ (серая); внизу моментальные поля вертикальной компоненты скорости в центральном горизонтальном сечении полости.

На рис. 5а,б показана отчетливо проявляющаяся при этих значениях числа Релея крупномасштабная конвективная ячейка с линейным размером порядка высоты полости. Цилиндр приблизительно поровну поделен на области с противоположным знаком вертикальной скорости. Данный результат согласуется с экспериментальными наблюдениями [9]. В хорошем

количественном согласии с экспериментальными зависимостями [22] и эталонными численными данными [23] находятся и рассчитанные значения числа Нуссельта (рис. 6).

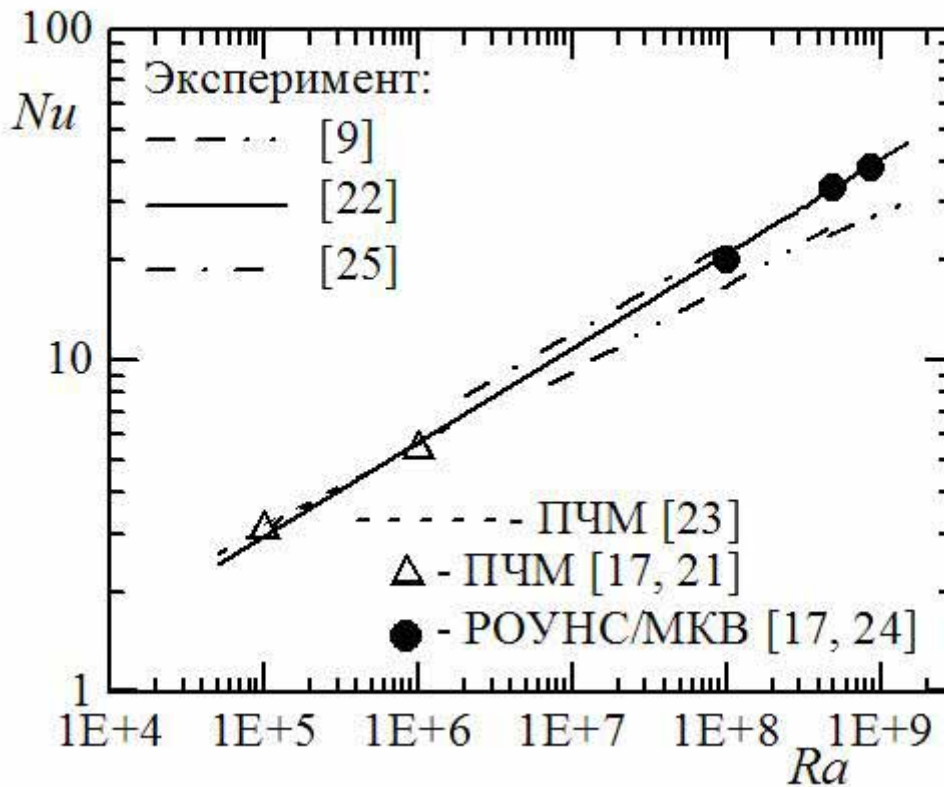


Рис.6. Зависимость Nu (Ra): сравнение данных ПЧМ и экспериментальных результатов.

Расчеты по методу РОУНС/МКВ были проведены в диапазоне чисел Релея от 10^8 до 5×10^9 [17, 24]. С ростом числа Релея происходит хаотизация течения, и возникают мелкомасштабные вихревые образования. Тем не менее, и в этих режимах можно наблюдать крупномасштабную конвективную ячейку (рис. 5в,г). Однако, в отличие от случая $Ra = 10^6$, изоповерхности вертикальной скорости теряют цельность (рис. 5в), а граница раздела, соответствующая нулевой скорости вертикального движения, становится сильно размытой (рис. 5г).

В целом, с ростом числа Релея область вовлеченной в циркуляционное движение жидкости с относительно высокими скоростями становится уже, конвективная ячейка прижимается к стенкам полости, а характерная скорость

движения в центральной части полости уменьшается. Этот процесс сопровождается формированием практически однородного поля температуры за пределами тонких пристенных областей. Таким образом, вся область движения жидкости может быть условно разделена на внутреннее ядро и пограничные слои. В пограничных слоях зарождаются специфические структуры – термики (рис. 7), которые время от времени отрываются от стенок и движутся навстречу друг другу, сталкиваясь и разрушаясь в центральной части области.

В ходе анализа профилей осредненной температуры и горизонтальной скорости по методике [25] определены толщины температурного, δ_T , и индуцированного конвективной ячейкой скоростного, δ_V , пограничных слоев. Расчетные зависимости δ_T и δ_V от числа Релея представлены на рис. 8. Там же приведена экстраполяция на диапазон $10^8 < Ra < 5 \times 10^9$ результатов ПЧМ [23] и экспериментов [25]. Видно, что отмеченные символами результаты расчетов по методу РОУНС/МКВ находятся в хорошем количественном согласии с литературными данными.

Расчитанные по методу РОУНС/МКВ значения числа Нуссельта (рис. 6) также находятся в хорошем количественном согласии с известными экспериментальными зависимостями [9, 22, 25]. При этом расчетные данные лучше всего согласуются с зависимостью $Nu \propto Ra^{0.285}$, полученной в наиболее представительном по диапазону чисел Релея эксперименте [22].

Конвекция в модельной установке метода Чохральского

Конвекция в модельной установке метода Чохральского при $Pr = 0.025$, $Ra = 8.45 \times 10^6$ рассчитывалась методом ПЧМ [21, 26]. В начале моделировалось течение в условиях отсутствия магнитного поля. Затем, следуя сценарию эксперимента [10], жидкость была подвергнута воздействию аксиального

магнитного поля с индукцией $B = 363$ Гс, что соответствует значению числа Стюарта $N = 0.3$, и расчеты были продолжены.

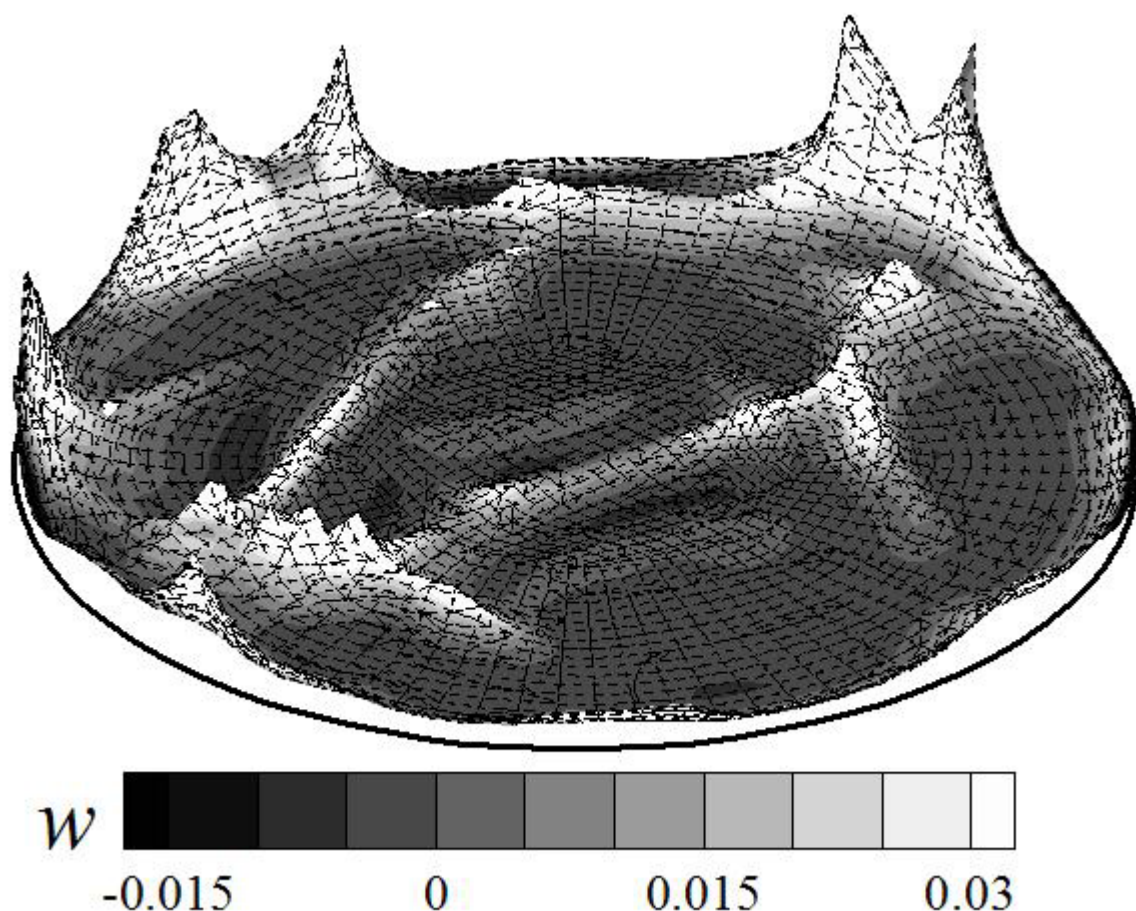


Рис.7. Термики в конвекции Релея-Бенара: изоповерхность температуры ($T = 0.9$), окрашенная в соответствии с величиной вертикальной скорости.

Мгновенное распределение скорости в вертикальном сечении емкости представлено на рис. 9а,б. В отсутствие магнитного поля (рис. 9а) в течении видны отчетливо выраженные отклонения от осевой симметрии. Нисходящая струя жидкости, охлажденной в результате взаимодействия с диском, существенно отклоняется от вертикальной оси в различные моменты времени, а восходящие струи соседствуют с рециркуляционными зонами в угловых областях емкости. При наложении магнитного поля характер конвекции заметно изменяется, и образуются отчетливо разграниченные зоны течения: устойчиво стратифицированное ядро; интенсивная нисходящая струя в

подкристальной области, которая растекается по радиальному направлению, образуя придонный пограничный слой; менее интенсивные восходящие струи около горячих стенок. Картина течения выглядит более упорядоченно, и отклонения от осевой симметрии сравнительно малы.

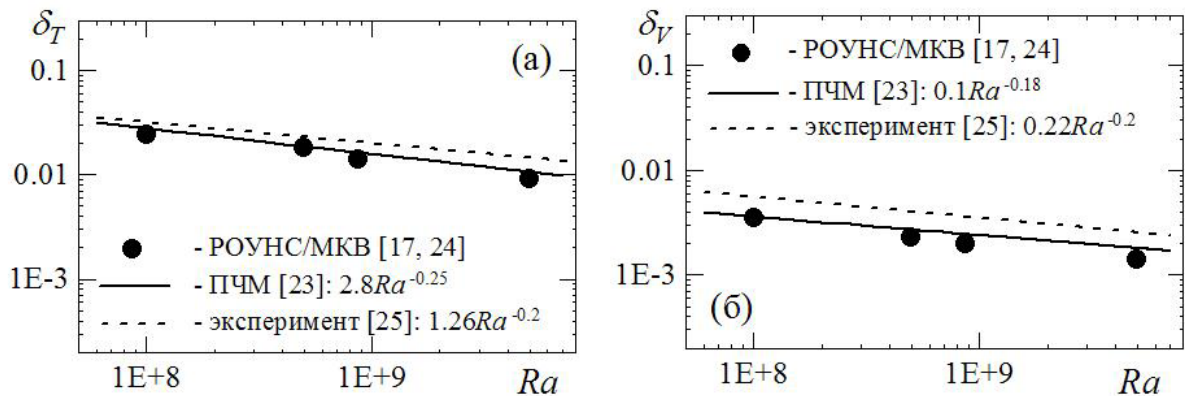


Рис.8. Толщины температурного (а) и скоростного (б) пограничных слоев, формирующихся на горизонтальных стенках цилиндрической полости.

Существенное изменение характера конвекции под воздействием магнитного поля сказывается и на поле температуры (рис. 9в,г). Распределение температуры в центре основной циркуляции при наличии магнитного поля близко к режиму теплопроводности с практически вертикальным градиентом температуры (рис. 5г), в то время как при отсутствии магнитного поля (рис. 5в) вклад конвекции в этой области играет существенную роль.

На рис. 10а представлены расчетные пульсации температуры в двух точках мониторинга. После наложения магнитного поля амплитуда пульсаций в точке 1 уменьшается примерно в 2.5 раза, а в точке 2 практически исчезает. На рис. 10б воспроизведены из работы [10] экспериментальные кривые пульсаций в тех же точках, из сопоставления с которыми можно заключить, что расчетные колебания температуры по спектральному составу близки к экспериментальным данным. Различия в величинах амплитуды пульсаций могут быть отнесены на счет идеализации принятой при расчетах постановки.

Конвекция в тигле метода Чохральского

На протяжении ряда лет авторами настоящей статьи проводились численные исследования конвекции расплава кремния ($Pr = 0.015$) при выращивании кристаллов по методу Чохральского в условиях реальной геометрии тигля [27-33]. Накопленный опыт позволил заключить, что расчеты конвекции в осесимметричной постановке принципиально неспособны адекватно воспроизводить общую структуру течения и распределение температуры в расплаве уже при числах Релея порядка 10^5 [13]. Первые результаты параметрических расчетов трехмерных квазипериодических и стохастических режимов конвекции расплава в тигле с геометрией, типичной для установок метода Чохральского, были получены с привлечением подхода ПЧМ для установок малого масштаба, характеризующимися числами Релея в диапазоне $1.5 \times 10^3 - 6.6 \times 10^4$ [13, 29], в расчетах использовалась сетка А (см. таблицу). Несмотря на умеренные значения числа Релея, во всех рассмотренных режимах конвекция расплава существенно нестационарна, осевая симметрия нарушена. Так, уже при $Ra = 1.5 \times 10^3$ ($Ro = 1.38$) конвекция носит автоколебательный характер, а при $Ra = 5.9 \times 10^3$ режим течения в тигле является хаотическим.

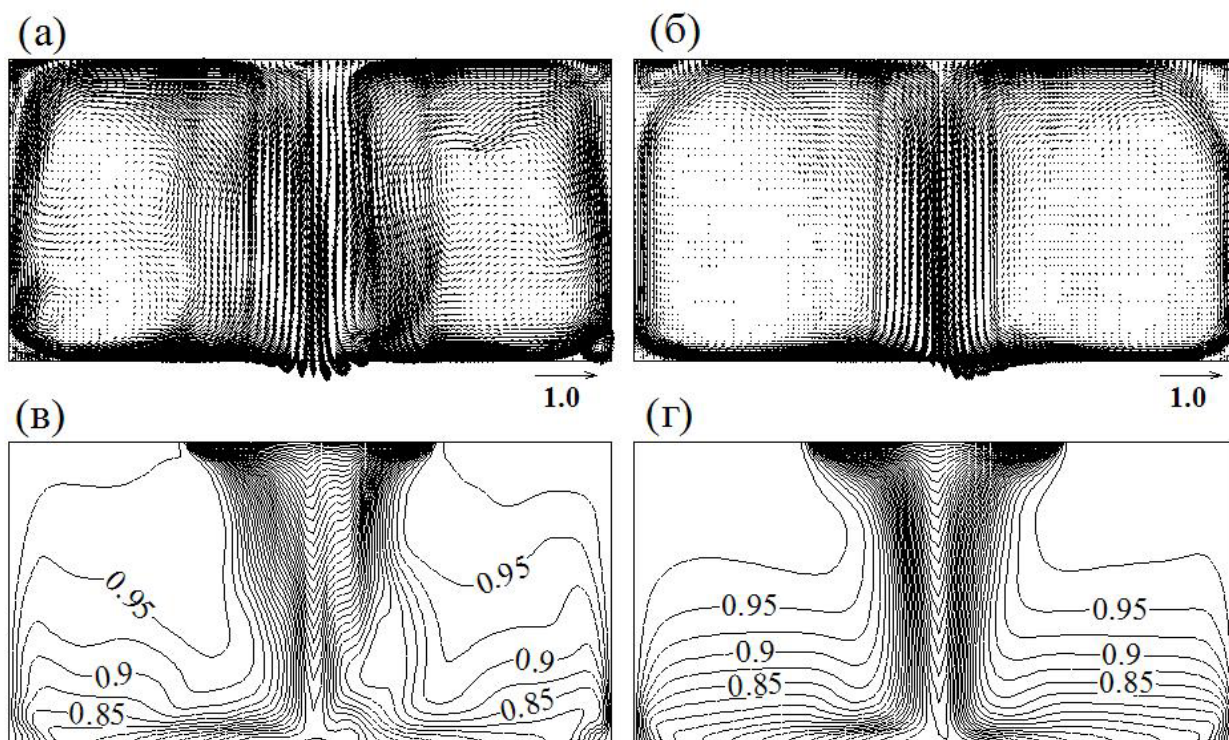


Рис.9. Моментальные распределения скорости и температуры в вертикальном сечении емкости в условиях отсутствия магнитного поля (а, в) и при $B = 363$ Гс (б, г).

При этом за счет влияния вращения тигля течение разделяется на две подобласти – подкристальную область, характеризующуюся интенсивным движением непосредственно под центральным телом и нисходящим центральным вихрем, и периферийную область, где течение сильно подавлено вращением (рис. 11а, б). В то же время непосредственно под центральным телом существенно проявляется влияние вращения кристалла: жидкость разбрасывается от оси к периферии, и формируется подкристальное тороидальное течение (рис. 11а).

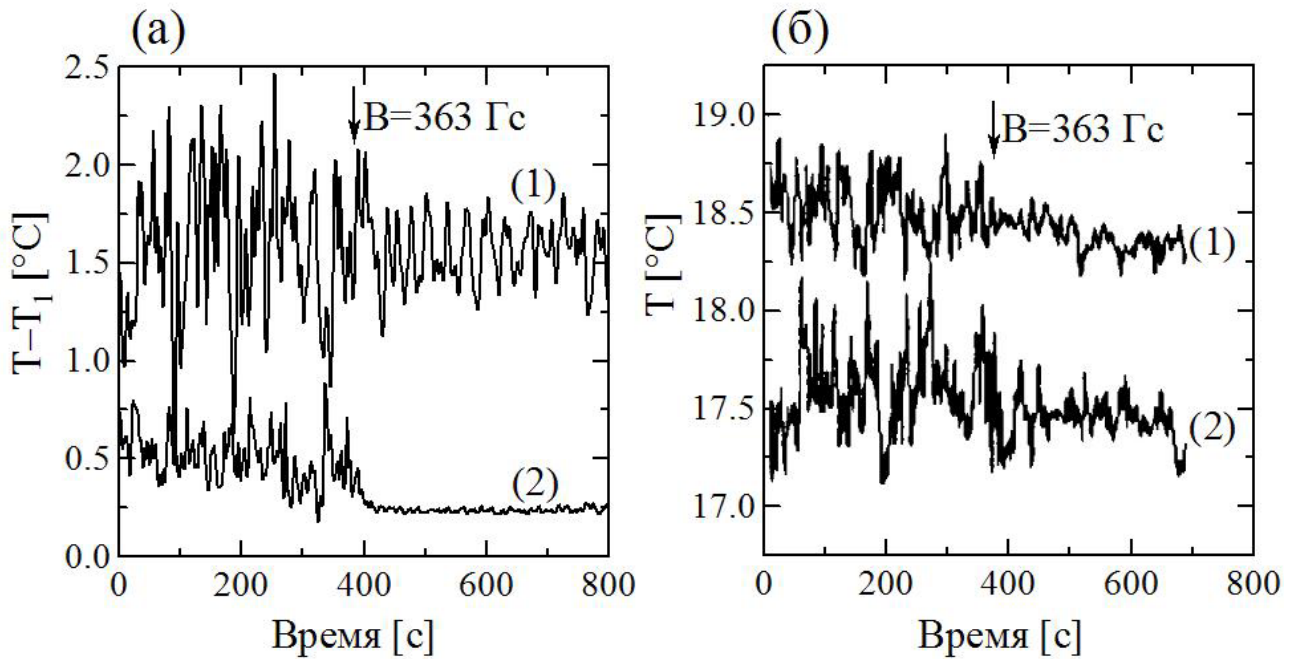


Рис.10. Расчетные (а) и экспериментальные (б) пульсации температуры в двух точках мониторинга.

Для рассмотренных режимов конвекции трехмерный характер течения расплава оказывает существенное влияние на осредненные поля. Одним из наиболее важных представляется влияние трехмерных пульсаций на распределение осредненной температуры, поскольку тепловое состояние расплава во многом определяет качество получаемого кристалла. Известно, что на полях температуры, получаемых в осесимметричной постановке, изотермы всегда имеют выраженный провал в подкристальной области [13]. В действительности трехмерные пульсации выравнивают температуру в этой части расплава. Этот эффект воспроизводится в расчетах, выполненных в трехмерной постановке, на рис. 11 в изотермы практически горизонтальны. Это свидетельствует об относительной однородности подводимого к поверхности раздела кристалл/расплав теплового потока.

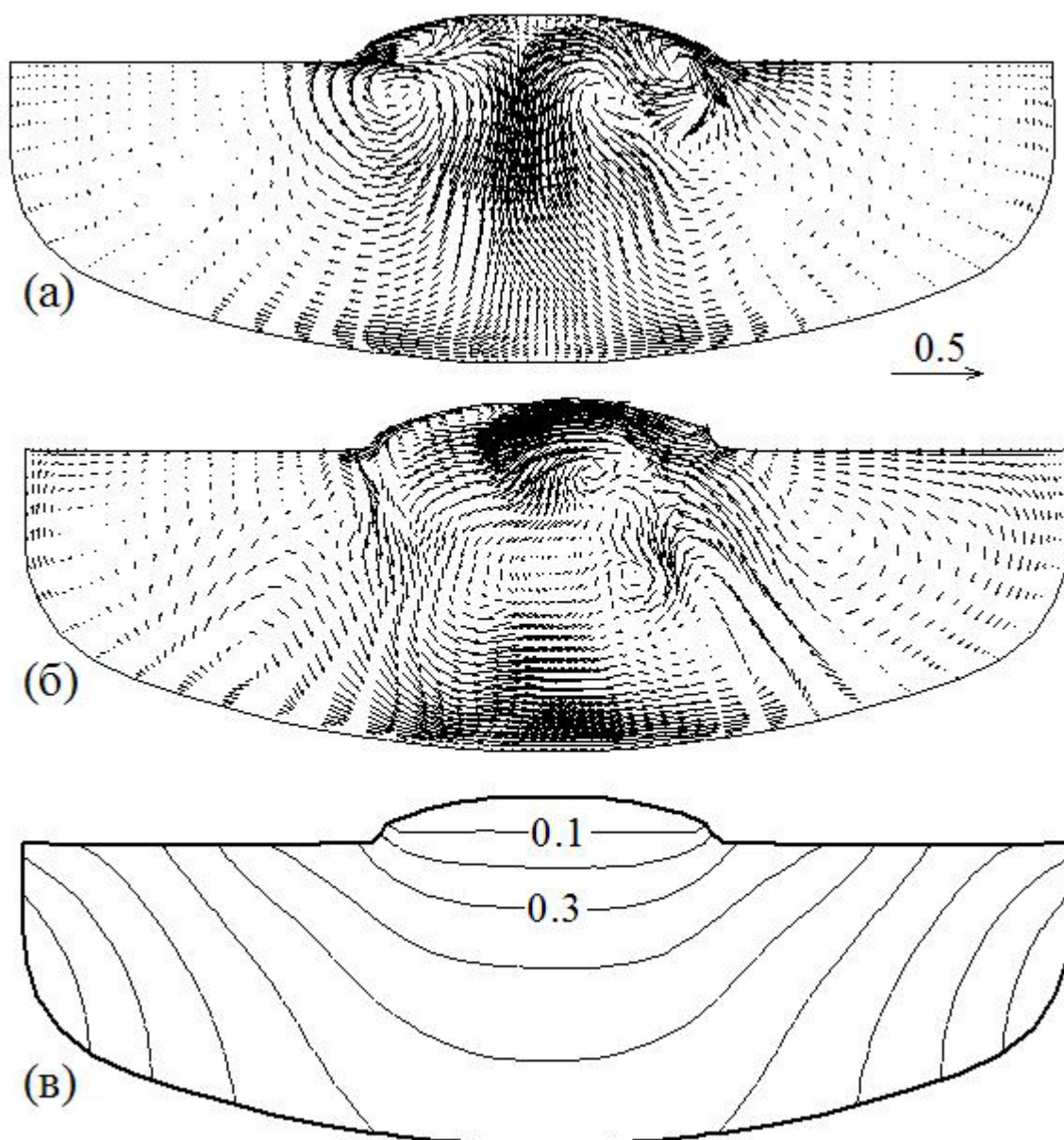


Рис.11. Моментальные распределения скорости в вертикальном сечении, $Ra = 5.9 \times 10^3$ (а) и $Ra = 6.6 \times 10^4$ (б); осредненное поле температуры, $Ra = 6.6 \times 10^4$ (в).

Методом ПЧМ исследовалось также влияние скорости вращения тигля на движение и тепловое состояние расплава при $Ra = 5 \times 10^5$ [17, 33]. Систематические расчеты на сетке В (см. таблицу) при различных значения Ro показали, что вращение тигля оказывает упорядочивающее воздействие на расплав, заметно изменяя структуру как актуального (рис. 12а,б), так и осредненного (рис. 12в,г) движения, особенно на периферии емкости. Рис. 12 свидетельствует также о том, что значения осредненных скоростей

существенно меньше актуальных, особенно в подкристальной области, где для всех Ro имеют место интенсивные пульсации скорости и температуры, и в наибольшей степени проявляется сходство с конвекцией Релея-Бенара.

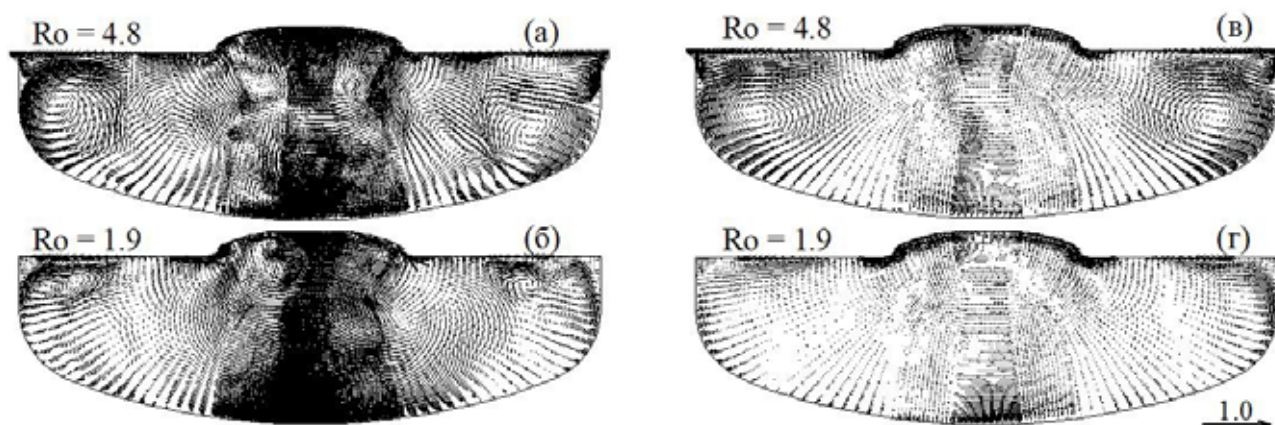


Рис.12. Моментальные (а, б) и осредненные (в, г) распределения скорости в вертикальном сечении, $Ra = 5 \times 10^5$, $Ro = 4.8$ (а, в) и 1.9 (б, г).

Для этого же значения числа Релея, $Ra = 5 \times 10^5$, была рассмотрена задача сопряженного теплообмена в системе тигель/расплав, расчет конвекции расплава при этом также проводился методом ПЧМ. Результаты решения этой задачи, подробно описанные в [30], позволили проиллюстрировать совместное влияние магнитного поля и вращения на тепловое состояние расплава. На рис. 13 приведены мгновенные распределения температуры в расплаве и в твердых блоках (тигле и опоре), рассчитанные для двух значений Ro в условиях отсутствия магнитного поля (рис. 13а,б) и для меньшего значения Ro в условиях наложенного осевого магнитного поля (рис. 13в). Видно, что при $Ro = 10$ изотермы сильно изогнуты на периферии расплава, что отражает существенный вклад конвекции в теплообмен. Увеличение скорости вращения тигля подавляет конвективное движение и, как следствие, его вклад в перенос тепла, что иллюстрируется сглаженными изотермами на рис. 13б, приближенными к режиму теплопроводности. Дополнительное наложение магнитного поля с $N = 2$ приводит к появлению вертикальной восходящей струи подогретого расплава в подкристальной области (рис. 13в). Отметим, что для всех трех случаев влияние окружной неоднородности температуры

расплава проявляется только в непосредственной окрестности стенки тигля, и поле температуры практически симметрично в тигле и опоре.

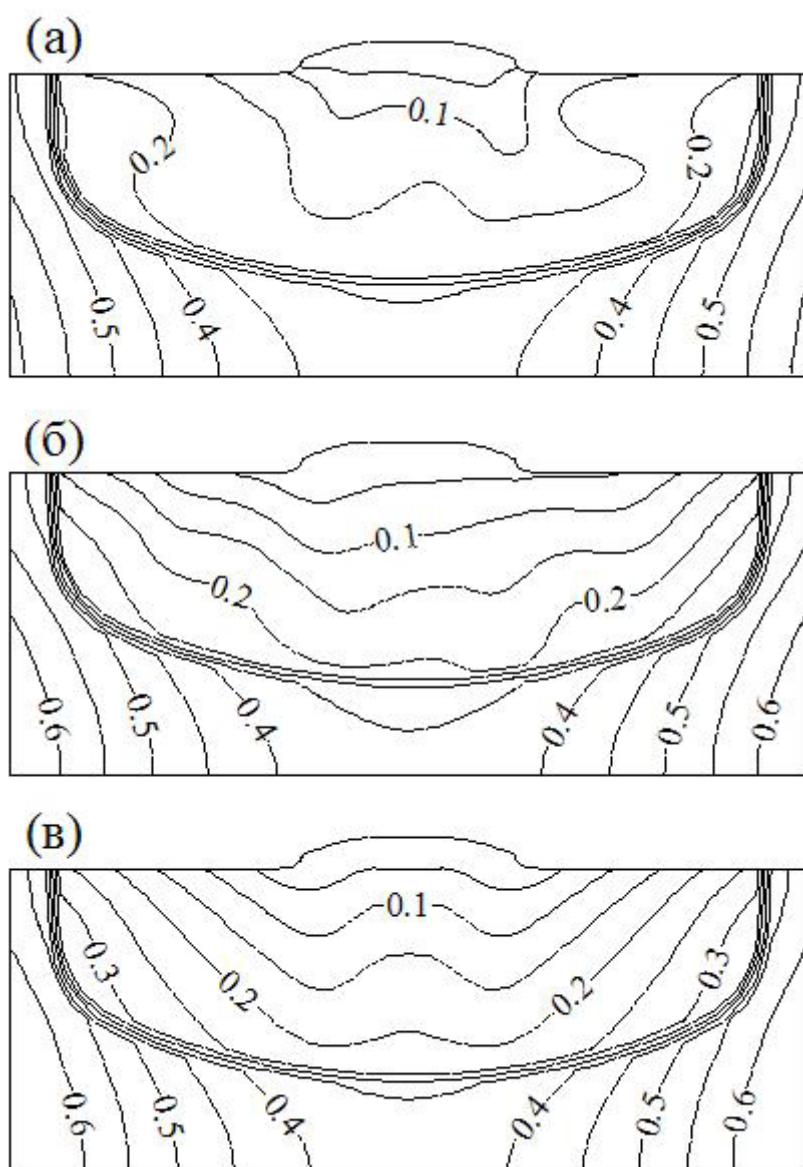


Рис.13. Моментальные распределения температуры в вертикальном сечении; $Ro = 10, N = 0$ (а), $Ro = 2, N = 0$ (б) и $Ro = 2, N = 1$ (в).

На рис. 14 приведены осредненные распределения температуры вдоль стенки тигля. Увеличение действия силы Кориолиса (соответственно, число Россби уменьшается) приводит к увеличению температуры на стенке тигля, то есть росту перепада температуры в расплаве. Дополнительное подавление вклада конвекции в теплообмен за счет действия магнитного поля приводит к дальнейшему увеличению перепада температуры.

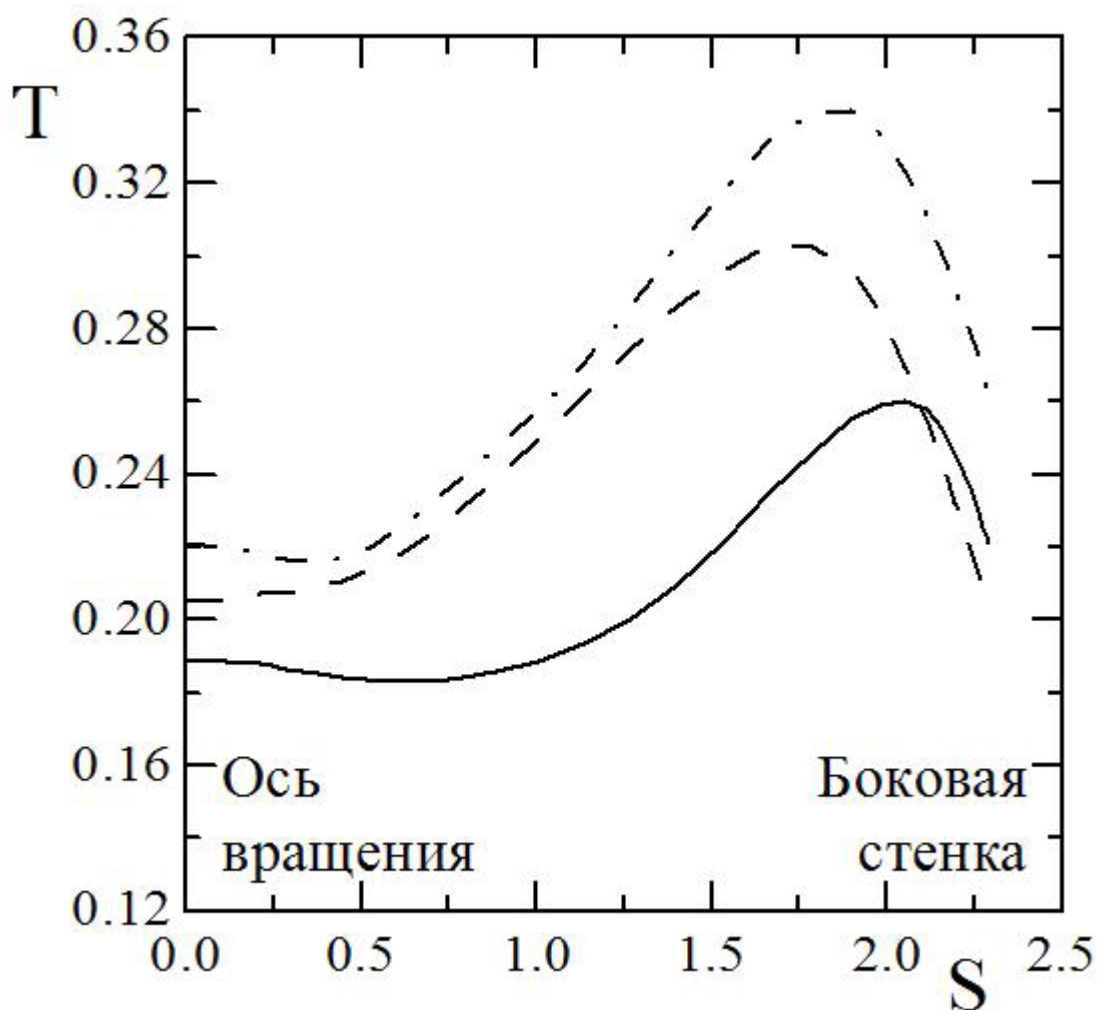


Рис.14. Осредненное распределение температуры вдоль поверхности тигля: $Ro = 10, N = 0$ (сплошная линия), $Ro = 2, N = 0$ (пунктир) и $Ro = 2, N = 1$ (штрих-пунктир).

Все представленные выше результаты, рассчитанные по методу ПЧМ, соответствуют экспериментальным установкам метода Чохральского малого масштаба. Применительно к промышленным устройствам, характеризующимся большими значениями числа Релея, определенные успехи достигнуты с применением методов МКВ или РОУНС/МКВ. Систематические расчеты выполнены для типичных условий роста кристаллов кремния диаметром 100 мм в установке метода Чохральского ЕКЗ-1300 [34], в этих условиях число Релея составляло $Ra = 8.2 \times 10^6$. Первые попытки численного моделирования нестационарной турбулентной конвекции в установке ЕКЗ-1300 были предприняты с использованием метода МКВ в комбинации с пристенными функциями, результаты этих расчетов, проведенных на сетке А (см. таблицу),

опубликованы в [17, 27, 28]. Оказалось, что даже такая сравнительно грубая вычислительная модель, благодаря введению эффектов нестационарности, позволила получить хорошее согласие с экспериментом по осредненному распределению температуры в расплаве и частотам пульсаций температуры. Улучшение качества предсказания переносных свойств расплава достигнуто с применением метода РОУНС/МКВ [17, 31, 32]. Интересно отметить вместе с тем, что расчеты, проведенные на сетке С (см. таблицу), показали, что общая структура конвекции оказывается схожей с рассчитанной по методу ПЧМ при $Ra = 5 \times 10^5$. В целом сохраняются наблюдавшиеся для меньшего числа Релея общие тенденции по влиянию вращения тигля на структуру крупномасштабной циркуляции и интенсивность актуального движения. В то же время структура течения при большем значении Ra усложняется: происходит утоньшение высокоградиентных пристенных скоростных слоев, а в ядре потока формируется большее число вихревых структур, что сопровождается ростом частоты пульсаций. На рис. 15 дано сопоставление расчетных пульсаций температуры в неподвижной точке мониторинга с данными измерений оптическим датчиком [35], получено практически полное совпадение результатов как по частотам пульсаций, так и по их амплитуде. Спектральная плотность сигнала в области высоких частот убывает со скоростью f^{-4} , что дает основания отнести сформировавшееся в тигле течение к режиму “мягкой” турбулентности.

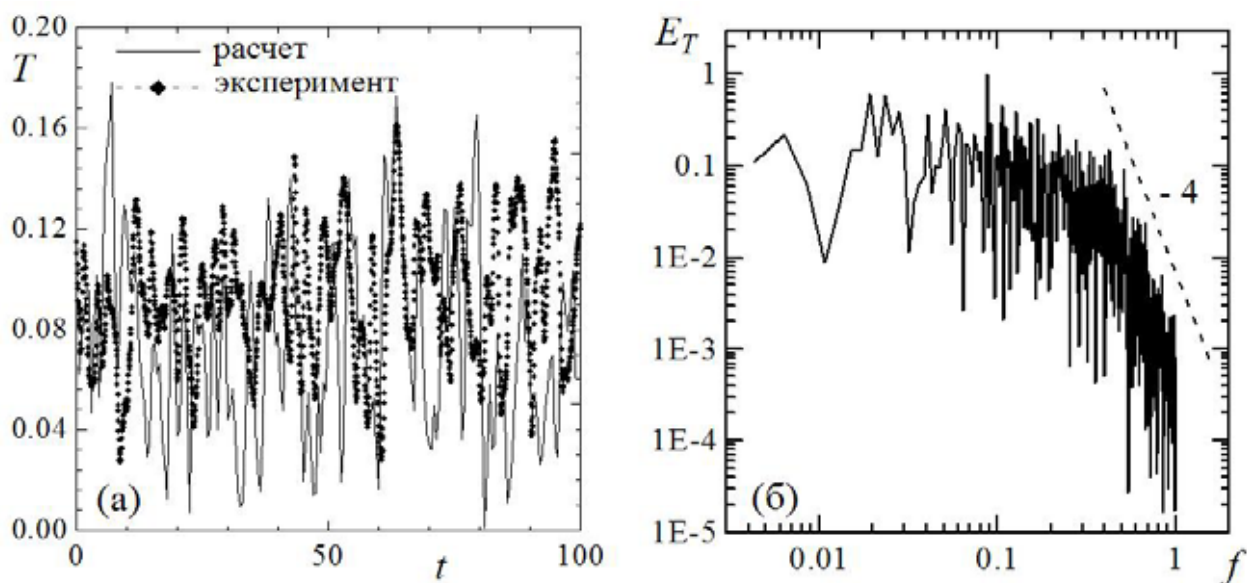


Рис.15. Колебания температуры в точке мониторинга в сопоставлении с экспериментом [35] (а) и соответствующий энергетический спектр (б).

Заключение

Рассмотренные примеры численного моделирования на основе методов ПЧМ и РОУНС/МКВ свидетельствуют о перспективности их применения к фундаментальным и прикладным расчетам турбулентных термоконвективных течений. Достигнутая высокая степень достоверности предсказания локальных и интегральных характеристик течения и теплообмена сочетается с приемлемыми временными затратами на получение представительных выборок при выполнении расчетов на персональных компьютерах. Продемонстрированы возможности метода ПЧМ турбулентной конвекции, позволившие в деталях исследовать ряд модельных задач в условиях упрощенной геометрии при умеренных числах Релея. Применение метода РОУНС/МКВ открывает более широкие перспективы, так как позволяет с достаточной для практики точностью решать прикладные задачи, характеризующиеся высокими значениями числа Релея и сложными конфигурациями расчетных областей.

Работа выполнена при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований по проектам 01-02-16697, 04-02-16531.

Список литературы

1. **Grötzbach G., Wörner M.** Direct numerical and large eddy simulations in nuclear applications // *Int. J. Heat and Fluid Flow*, 1999, Vol. 20, pp. 222-240.
2. **Hanjalić K.** One-point closure models for buoyancy-driven turbulent flows // *Ann. Rev. Fluid Mech.*, 2002, Vol. 34, pp. 321-347.
3. **Smirnov E.M.** Recent advances in numerical simulation of 3D unsteady convection controlled by buoyancy and rotation // In: *Proc. 12th International Heat Transfer Conference, Grenoble, France, 2002, CD-ROM Proceedings*, 12p.
4. **Spalart P.R.** Strategies for turbulence modelling and simulations // *Int. J. Heat and Fluid Flow*, 2000, Vol. 21, pp. 252.
5. **Мюллер Г.** Выращивание кристаллов из расплава. Конвекция и неоднородности. Пер. с англ. – М.: Мир, 1991. 143 с.
6. **Julien K., Legg S., McWilliams J., Werne J.** Rapidly rotating turbulent Rayleigh-Benard convection // *J. Fluid Mech.*, 1996, Vol. 322, pp. 243-273.
7. **Fein J.S.** An experimental study of the effects of the upper boundary condition on the thermal convection in a rotating, differentially heated cylindrical annulus of water // *Geophysical Fluid Dynamics*, 1973, Vol. 5, pp. 213-248.
8. **Fein J.S., Pfeffer R.L.** An experimental study of the effects of Prandtl number on thermal convection in a rotating, differentially heated cylindrical annulus of fluid // *J. Fluid. Mech.*, 1976, Vol. 75, pp. 81-112.
9. **Cioni S., Ciliberto S., Sommeria J.** Strongly turbulent Rayleigh-Bénard convection in mercury: comparison with results at moderate Prandtl number // *J. Fluid Mech.*, 1997, Vol. 335, pp. 111-140.
10. **Lee Y.-S., Chun Ch.-H.** Experiments on the oscillatory convection of low Prandtl number liquid in Czochralski crystal growth under an axial magnetic field // *J. Crystal Growth*, 1999, Vol. 198/199, pp.147-153.
11. **Smirnov E.M.** Numerical simulation of turbulent flow and energy loss in passages with strong curvature and rotation using a three-dimensional Navier-Stokes

solver // Report "Research in Brussels" Actions. Department of Fluid Mechanic. Vrije Universitet Brussel, 1993.

12. **Смирнов Е.М., Зайцев Д.К.** Метод конечных объемов в приложении к задачам гидрогазодинамики и теплообмена в областях сложной геометрии // Научно-технические ведомости СПбГПУ, настоящий выпуск.

13. **Иванов Н.Г.** Трехмерная нестационарная конвекция в емкостях, вращающихся вокруг вертикальной оси: численное моделирование для малых чисел Прандтля / Дисс. канд. физ.-мат. наук. СПб: СПбГТУ, 2000.

14. **Janssen R.J.A., Henkes R.A.W.M.** Influence of Prandtl number on instability mechanisms and transition in a differentially heated square cavity // J. Fluid Mech., 1995, Vol. 290, pp. 319-344.

15. **Tric E., Betrouni M., Labrosse G.** Accurate solutions of natural convection flow of air in a differentially heated cubic cavity / In: Computational Fluid Dynamics'98, K.D. Papailiou et al (Eds), John Wiley & Sons, 1998, pp. 979-982.

16. **Никитин Н.В., Полежаев В.И.** Трёхмерная конвективная неустойчивость и колебания температуры при выращивании кристаллов по методу Чохральского // Известия РАН. МЖГ, 1999, №3, с.26-39.

17. **Абрамов А.Г.** Метод моделирования крупных вихрей в приложении к задачам турбулентной конвекции в подогреваемых снизу емкостях: варианты и возможности / Дисс. канд. физ.-мат. наук. СПб: СПбГПУ, 2003.

18. **Абрамов А.Г.** Моделирование крупных вихрей в задаче турбулентной конвекции во вращающемся слое, подогреваемом снизу // В кн.: Физические основы экспериментального и математического моделирования процессов газодинамики и теплообмена в энергетических установках. Тр. XIII Школы-семинара под руководством акад. А.И. Леонтьева, С.-Петербург, 20-25 мая 2001г. – М.: Изд-во МЭИ, 2001, Т.1, 448с., с.177-181.

19. **Goriatchev V.D., Ivanov N.G., Smirnov E.M.** Postcomputational visualization of baroclinic wave drift / In: Proc. 3rd Int. Conf. on Flow Interaction of Science and

Art, Zürich, Switzerland, 2000, A. Gyr et al. (eds), Kluwer Academic Publishers, 2000, pp.211-216.

20. **Иванов Н.Г.** Регулярные волновые структуры во вращающейся кольцевой полости, заполненной водой: численное моделирование в сопоставлении с экспериментом // В кн.: Физические основы экспериментального и математического моделирования процессов газодинамики и теплообмена в энергетических установках. Тр. XIII Школы-семинара под руководством акад. А.И. Леонтьева, С.-Петербург, 20-25 мая 2001г. – М.: Изд-во МЭИ, 2001, Т.1, 448с., с.181-184.

21. **Абрамов А.Г., Корсаков А.Б.** Прямое численное моделирование турбулентной конвекции ртути в осесимметричных емкостях, включая эффекты магнитного поля // В кн.: Труды III Российской национальной конференции по теплообмену. – М.: Изд-во. МЭИ, 2002, Т. 3, 230с., с. 33-36.

22. **Glazier J.A., Segawa T., Naert A., Sano M.** Evidence against ‘ultrahard’ thermal turbulence at very high Rayleigh numbers // Nature, 1999, Vol. 398, pp. 307-310.

23. **Verzicco R., Camussi R.** Prandtl number effects in convective turbulence // J. Fluid. Mech., 1999, Vol. 383, pp. 55-73.

24. **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, March 23-26, 2003, Eindhoven, the Netherlands, ed. by H.C. de Lange and A.A. van Steenhoven, TUE, 2003, pp.33-38.

25. **Takeshita T., Segawa T., Glazier J.A., Sano M.** Thermal turbulence in mercury // Phys. Rev. Lett., 1996, Vol. 76, pp. 1465-1468.

26. **Корсаков А.Б.** Численное исследование трехмерной нестационарной конвекции в модельной установке метода Чохральского // Вестник молодых ученых 1'2002, серия прикладная математика и механика, 2002, с. 92-97.

27. **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. and Ammon W.** Global model of Czochralski silicon growth to predict oxygen content and thermal fluctuations at the melt-crystal interface // *Microelectronic Engineering*, 2001, Vol. 56, pp. 139-142.
28. **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.** Modeling analysis of unsteady three-dimensional turbulent melt flow during Czochralski growth of Si crystals // *J. Crystal Growth*, 2001, Vol. 230, pp. 22-29.
29. **Иванов Н.Г., Смирнов Е.М.** Численное моделирование трехмерной нестационарной конвекции расплава кремния в емкости, типичной для установок метода Чохральского // *Инженерно-физический журнал*. 2002, Т.75, № 3, с. 63-69.
30. **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: *Advanced Computational Methods in Heat Transfer VII. Proc. 7th Int. Conf. on Advanced Comp. Methods in Heat Transfer*, 2002, ed. by B. Sunden and C. Brebbia, WIT Press, 2002, pp. 107-116.
31. **Evstratov I.Yu., Kalaev, 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.** Numerical study of 3D unsteady melt convection during industrial-scale CZ Si-crystal growth // *J. Crystal Growth*, 2002, Vol. 237-239 (P3), pp. 1757-1761.
32. **Ivanov N.G., Korsakov A.B., Smirnov E.M., Khodosevitch K.V., Kalaev V.V., Makarov Yu.N., Dornberger E., Virbulis J., Ammon W.** Analysis of magnetic field effect on 3D melt flow in CZ Si growth // *J. Crystal Growth*, 2003, Vol. 250, pp. 183-188.
33. **Abramov A.G., Ivanov N.G., Korsakov A.B., Smirnov E.M.** Direct numerical simulation of Si-melt convection and oxygen transport in a CZ-system real geometry crucible / In: *Proc. 5th International Conference "Single Crystal Growth and Heat & Mass Transfer" (ICSC-03)*, Obninsk, 2003, pp 513-521.

34. **Dornberger E., Tomzig E., Seidl A., Schmitt S., Leister H.-J., Schmitt Ch., Müller G.** Thermal simulation of the Czochralski silicon growth process by three different models and comparison with experimental results // J. Cryst. Growth, 1997, Vol. 180, pp. 461-467.
35. **Gräbner O., Mühe A., Müller G., Tomzig E., Virbulis J, Ammon W.** Analysis of turbulent flow in silicon melts by optical temperature measurement // Material Science and Engineering B, 2000, Vol. 73, pp. 130-133.