

САНКТ-ПЕТЕРБУРГСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ
ПОЛИТЕХНИЧЕСКИЙ УНИВЕРСИТЕТ

Физико-механический факультет

Кафедра гидроаэродинамики

Работа допущена к защите

Зав. кафедрой, проф., д.ф.-м.н.

_____ Е.М. Смирнов

" ____ " _____ 2007 г.

Выпускная работа БАКАЛАВРА

Тема: **Моделирование истечения вязкого газа из сопла Лавалья**

Направление: 010600 – Прикладные математика и физика

Выполнил студент гр. 4054/2

Д.А. Демидов

Руководитель, к.ф.-м.н., доцент

А.В. Гарбарук

Санкт-Петербург

2007

Содержание

Введение.....	3
Глава 1. Постановка задачи	6
Глава 2. Численная реализация	9
Глава 3. Методические исследования	11
Глава 4. Анализ полученных результатов.....	13
4.1. Особенности рассматриваемого течения	13
4.2 Влияние гладкости поверхности в критическом сечении	17
4.3 Оценка применимости модели	18
Заключение.....	20
Литература	21

Введение

Компьютеризация все больше и больше проникает в жизнь человека, и это в свою очередь приводит к возрастанию требований к производительности компьютеров. Поэтому по всему миру ведутся разработки новых технологических решений, которые направлены на создание более мощных и быстрых процессоров.

В частности, в лаборатории микроэлектроники ФТИ им. Иоффе РАН идут работы по созданию прототипа установки для нанесения на кремниевые пластины рисунка внутренних структур микросхем с разрешением в 20-30 нм (вместо 65 нм в лучших промышленных установках в настоящее время). Для достижения столь высокого разрешения необходимо использовать источник света в EUV (extreme ultra violet) диапазоне длин волн (единицы-десятки нанометров); такое излучение очень сильно поглощается практически любой средой, поэтому оптическая система описываемой установки является не линзовой, а зеркальной.

Очевидно, что источником EUV излучения, энергия квантов которого по порядку величины близка к 100 эВ, может быть только плазма с температурой в десятки эВ и выше. Одним из эффективных способов создания такой плазмы является плазма, получаемая на плотной материальной мишени воздействием на нее мощным коротким импульсом лазерного излучения. Этот способ применяется в установке ФТИ.

Следует отметить, что по ряду причин (одна из них – сильное поглощение излучения) источник EUV излучения должен быть расположен в вакууме.

Считается, что наиболее перспективным методом создания мишени является импульсная сверхзвуковая струя ксенона, вытекающая из сопла Лаваля. Использование ксенона обусловлено двумя причинами. С одной стороны, ксенон является инертным газом, а использование других материалов может привести (в результате химических реакций) к повреждению технологических элементов установки, в частности оптики и самой кремниевой пластины. С другой стороны, ксенон является самым тяжелым из инертных газов (если не считать радона), что позволяет достичь наибольшего поглощения лазерного излучения при той же концентрации атомов. Фотография генератора струи ксенона, использующегося в установке ФТИ, приведена на рисунке 1.

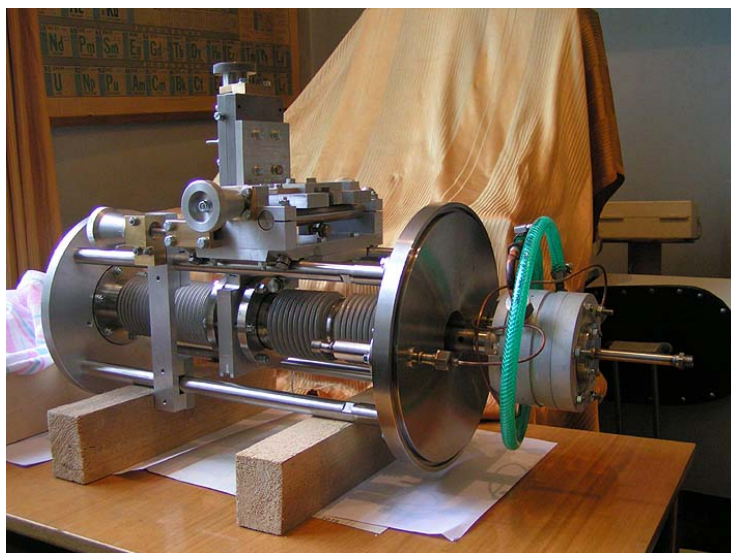


Рисунок 1. Фотография генератора ксеноновой струи.

Лазерная искра возбуждается вблизи среза сопла на расстоянии 1-2 диаметра выходного сечения. Если возбуждать искру слишком близко от среза сопла, это приведет к его скорому разрушению, а осколки сопла могут, в свою очередь, повредить оптику. Далеко от среза плотность ксенона может оказаться недостаточной для получения необходимой мощности излучения. Кроме того, окружающий плазму ксенон, находящийся на пути EUV излучения, будет его (излучение) поглощать, следовательно, наиболее хорошей мишенью является узкая направленная струя ксенона с резкой границей.

Именно моделирование струи ксенона, необходимое для оптимизации параметров установки (формы сопла и давления на входе в него) и является основной задачей данного исследования. Важность, актуальность и практическая значимость этой задачи не вызывает сомнений.

Следует отметить, что условия и параметры, характерные для используемой в лаборатории микроэлектроники ФТИ им. Иоффе РАН установки таковы, что модель стационарного течения однофазного сжимаемого газа может быть не совсем справедлива. Во-первых, истечение струи происходит в вакуум, поэтому на некотором расстоянии от сопла среда перестает быть сплошной (число Кнудсена становится сравнимым с 1). Во-вторых, из-за быстрого расширения непосредственно за критическим сечением ксенон остывает ниже температуры сжижения и ниже температуры затвердевания (это происходит непосредственно за критическим сечением), что может привести к образованию кластеров и двухфазности потока. И, наконец, в-третьих, в экспериментальной установке реализовано импульсное истечение газа с целью экономии дорогостоящего ксенона и снижения фонового давления в вакуумной камере. Тем не менее, на данном этапе

работы используется модель стационарного течения однофазного сжимаемого газа, а эффекты разрежённости, конденсации и нестационарности считаются пренебрежимо малыми.

Сформулируем основные цели данной работы:

1. На основе коммерческого пакета CFX построить вычислительную модель газовой мишени.
2. Провести методические исследования влияния расчетной сетки и размеров расчетной области на результаты расчета, в первую очередь на распределение плотности в струе.
3. На основе результатов расчетов оценить применимость модели стационарного истечения однофазного сжимаемого газа.

Глава 1. Постановка задачи

В первую очередь следует отметить, что в данной работе вместо осесимметричного сопла Лавалья, используемого в установке, производились расчеты плоского сопла. Это было сделано потому, что при попытке расчета осесимметричного сопла возникли проблемы вычислительного характера. На этом этапе исследования не удалось установить ни причины этих проблем, ни пути их решения, поэтому было решено на данном этапе ограничиться плоской постановкой задачи. Несмотря на это упрощение можно считать, что выводы о применимости вычислительной модели в плоском случае будут также справедливы и в осесимметричном.

Итак, рассматривается задача о стационарном ламинарном истечении сжимаемого вязкого газа из сопла Лавалья в большой резервуар. Так как расчётная область и само течение в стационарной постановке являются симметричными, то имеет смысл рассматривать задачу в половине области.

Следует отметить, что форма и размеры сопла Лавалья (см. табл. 1) в расчете соответствуют соплу, используемому в экспериментальной установке. Сопло имеет угол полураствора сужения 45° и угол полураствора расширения 2° . Из таблицы 1 видно очень сильное сужение сопла: критическое сечение почти в 8 раз уже выходного по диаметру, поэтому ожидается очень сильное ускорение потока при выходе из сопла.

Таблица 1. Размеры сопла Лавалья.

Сечение	Диаметр, мм
Входное	3
Критическое	0,15
Выходное	1,18

На рис. 2 изображена расчётная область ABCDEFGHI для исследования рассматриваемого течения. Границы расчётной области: AI — вход, EF, FG, — выход; AB, BC, CD, DE — твёрдые стенки, GHI — нижняя граница, на которой ставится условие симметрии. Область ABCDHI является соплом Лавалья, а область DEFGH — резервуаром, в который происходит истечение. Размеры расчетной области приведены в таблице 2.



Рисунок 2. Схема расчётной области.

Таблица 2. Размеры расчётной области.

Сегмент	Длина, мм
AI	1,5
AB	10,48
BC	2,12
CD	16,88
DE	5,91
EF	18,1
FG	6,5
IH	28,8

Течение газа описывается при помощи модели сплошной среды и идеального (удовлетворяющего уравнению Менделеева-Клапейрона) газа.

Движение газа описывается уравнениями Навье-Стокса:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \vec{V}) = 0$$

$$\frac{\partial \rho \vec{V}}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \vec{V} \vec{V}) = \nabla \cdot \left(-p \delta + \mu \left(\nabla \vec{V} + (\nabla \vec{V})^T \right) \right)$$

$$\frac{\partial \rho h_i}{\partial t} - \frac{\partial p}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \vec{V} h_i) = \nabla \cdot (\lambda \nabla T) + \nabla \cdot \left(\mu \nabla \vec{V} + \nabla \vec{V}^T - \frac{2}{3} \nabla \cdot \vec{V} \delta \vec{V} \right)$$

В последнем уравнении под величиной h_i подразумевается полная энтальпия:

$$h_i = h + \frac{1}{2} (\vec{V} \cdot \vec{V})$$

Замыкает приведённую выше систему уравнений уравнение состояния идеального газа:

$$\frac{p}{\rho} = \frac{RT}{\mu},$$

где p — давление, ρ — плотность, T — температура газа; R — универсальная газовая постоянная; μ — молярная масса.

В качестве среды используется газ ксенон. Его физические свойства при $T=293\text{K}$ и $p=1$ атм приведены в таблице 3. Хотя температура среды в расчётной области очень сильно изменяется, вязкость ксенона предполагается постоянной,

поскольку нет никаких достоверных данных об изменении вязкости ксенона при столь низких температурах.

Таблица 3. Физические свойства ксенона.

Молекулярная масса (г/моль)	131,293
Теплоёмкость (Дж/моль·К)	20,786
Коэффициент теплопроводности (Вт/м·К)	0,0057
Динамический коэффициент вязкости (Па·с)	$2,33 \cdot 10^{-5}$

На входной границе расчетной области AI задаётся полное давление (давление торможения), равное 5 атм и температура торможения, равная 293К. Эти параметры также являются характерными для экспериментальной установки. На выходных сегментах EF и FG задаётся условие сверхзвукового выхода, т.е. экстраполяция всех переменных изнутри расчетной области. На стенках задаётся условие прилипания, т.е. равенство нулю всех компонент скорости и градиента давления по нормали к стенке. Стенки считаются адиабатически теплоизолированными, поэтому тепловой поток через стенку сопла считается равным нулю. На сегменте GI ставится условие симметрии, т.е. равенство нулю нормальной компоненты скорости и равенство нулю производных от остальных величин по нормали к стенке.

Рассматриваемому течению соответствуют следующие критерии подобия: число Рейнольдса, построенное по входному сечению, $Re=162$, а число Прандтля $Pr=0,64$.

Глава 2. Численная реализация

Построение исходной геометрии и расчётной сетки осуществлялось в программе ANSYS ICEM CFD 10. Задача решалась в коммерческом пакете ANSYS CFX 10. Данный пакет входит в состав комплекса конечно-элементного анализа и вычислительной гидродинамики ANSYS Workbench.

В программе ICEM CFD генерировалась структурированная гексаэдрическая сетка, состоящая из шести блоков. Однако пакет CFX требует использование неструктурированной сетки, поэтому использовалась предварительная автоматическая конвертация. Также, солвер CFX может решать задачи только в трёхмерной постановке, поэтому в действительности расчётная область (рис. 1) является трёхмерной, имеет 1 ячейку в толщину (толщина ячейки составляет 0,05 мм). На "передней" и "задней" поверхностях задаётся условие симметрии (общепринятый способ решения двумерных задач в пакете CFX).

Параметры дискретизации расчётной области указаны в таблице 4. Расчётная область в окрестности критического сечения изображена на рис. 3

Таблица 4. Параметры дискретизации расчётной области.

Сегмент	Количество узлов	Сгущение
AI	30	1,1 (в сторону стенки)
DE	75	1,1 (в сторону стенки)
FG	105	равномерное
AB'	60	1,2 (в сторону критического сечения)
B'B''	5	равномерное
B''C'	40	1,1 (в сторону критического сечения)
C'C''	25	равномерное
C''D	90	1,1 в сторону критического сечения и 1,2 в сторону выхода из сопла
GH	100	1,1 в сторону выхода из сопла

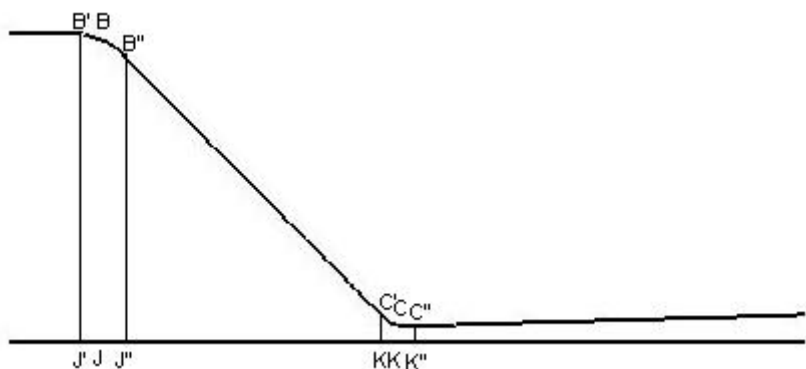


Рисунок 3. Расчётная область в окрестности критического сечения.

Поскольку в данной задаче рассматривается расчётный режим истечения сжимаемого газа через сопло Лавая, очень важным является разрешение течения в критическом сечении. Расчетная сетка в окрестности критического сечения представлена на рис. 4

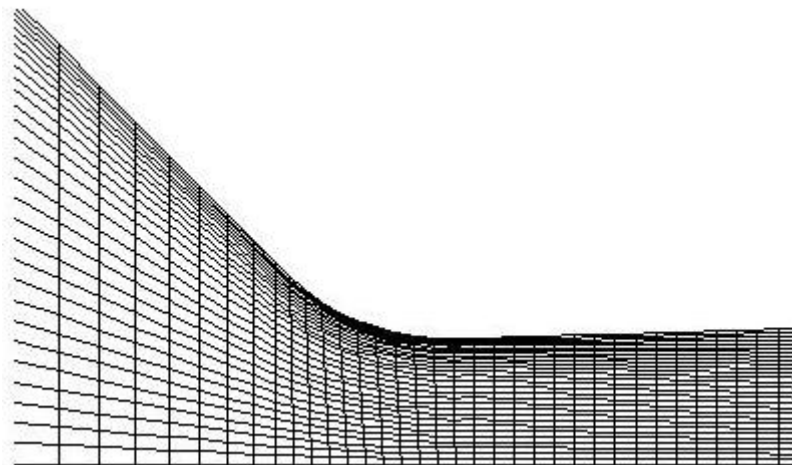


Рисунок 4. Расчетная сетка в окрестности критического сечения.

Уравнения с соответствующими граничными условиями, приведённые в главе 1, решаются методом конечных объёмов. При этом использовалась схема, обеспечивающая второй порядок аппроксимации по пространству (эта схема носит в пакете наименование High Resolution).

Во избежание вычислительных проблем при старте от начального приближения, сначала выполнялось 50 итераций с изменёнными граничными условиями: на выходных границах (задавалось условие дозвукового выхода с уровнем давления 10^{-3} атм). От полученного решения расчёт продолжался с условиями сверхзвукового выхода на выходных границах.

Что касается вычислительных затрат, расчетная сетка состоит из 34720 узлов, на ней решается 4 уравнения, общее время расчета составляет около 5 часов на компьютере с процессором AMD Athlon 1 GHz (при выполнении 2500 итераций достигался уровень невязок порядка 10^{-4}).

Глава 3. Методические исследования

В первую очередь необходимо ответить на вопрос, является ли построенная сетка достаточной для получения сошедшегося по сетке решения. Для ответа на этот вопрос были проведены расчеты на трех сетках: той, которая была описана в предыдущей главе, а также на более грубой и более мелкой (заглубление и измельчение осуществлялось 2 раза по каждому направлению). Также производился расчёт с резервуаром, линейные размеры которого в два раза меньше исходного.

Исследование сходимости производилось по анализу значения плотности газа на расстоянии одного и двух выходных сечений от среза на оси сопла. Результаты представлены на рисунке 5.

Основываясь на полученных результатах можно сделать вывод о достаточности расчётной сетки, так как максимальное отличие для плотности на рабочей сетке от значений на измельчённой сетке составило 1,9% на расстоянии двух выходных сечений сопла от среза. Для грубой сетки наибольшее отличие также наблюдается на расстоянии двух калибров от среза: разница между результатами, полученными на грубой и средней сетках составляет 3,3%. Предположив сохранение скорости падения погрешности при измельчении сетки, можно сказать, что выбранная сетка обеспечивает точность не менее 5%. Отличие решения с малым резервуаром от результатов, полученных на основной сетке, составляет 0,6% и 0,9% на расстояниях одного и двух радиусов выходного сечения соответственно. Таким образом, можно сказать о незначительности влияния размеров расчётной области.

Расчёт на наиболее подробной из использовавшихся сеток занимает около 20 часов на компьютере с процессором AMD Athlon 1 GHz, поэтому использование более мелких сеток в рамках данной работы было затруднительно.

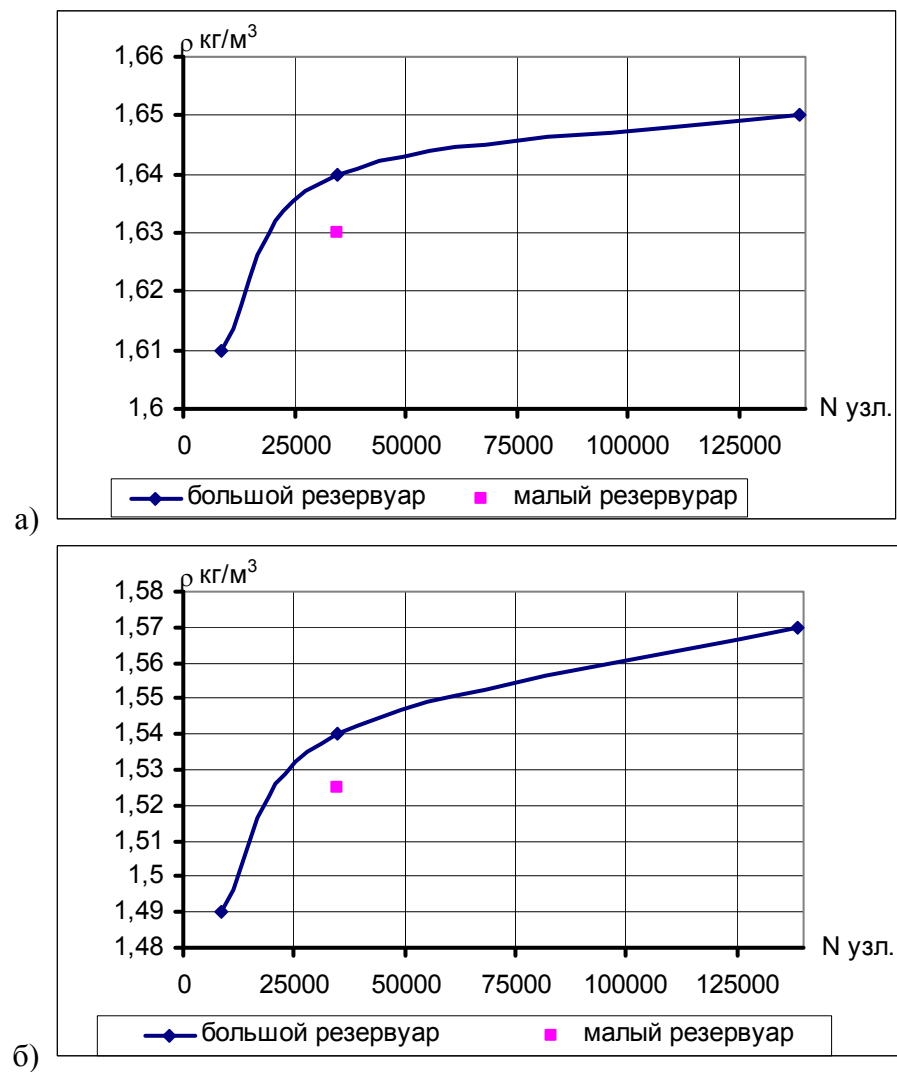


Рисунок 5. Зависимость значения плотности на оси сопла от числа узлов и размеров расчётной области на расстоянии а) 1 калибра от среза, б) 2 калибра от среза сопла.

Глава 4. Анализ полученных результатов

4.1. Особенности рассматриваемого течения

Поскольку число Рейнольдса в рассматриваемой задаче очень низкое, вязкие эффекты имеют существенное значение. Это, в первую очередь, проявляется в появлении на стенках сопла пограничных слоев, толщина которых соизмерима с шириной сопла (см. рис. 6) и составляет около 40% ширины сопла на срезе. Роль вязких эффектов подтверждается низким значением коэффициента расхода, т.е. отношение расхода к расходу, рассчитанному по одномерной теории (см., например,[4])

$$Q = \frac{\rho_0 a_0 F_{кр}}{\left(\frac{k+1}{2}\right)^{\frac{1+k}{2(k-1)}}}$$

где величины ρ_0 и a_0 — соответственно плотность и скорость звука адиабатически изэнтропически заторможенного газа; $F_{кр}$ — площадь критического сечения. В рассматриваемом расчёте коэффициент расхода $Q=0,56$.

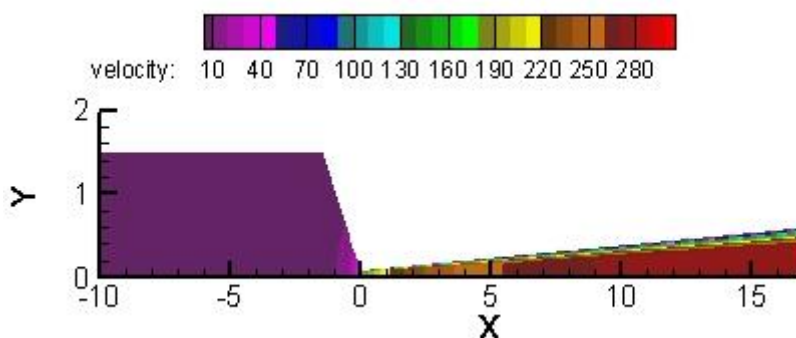


Рисунок 6. Поле модуля скорости (в м/с)

Векторное поле скорости в окрестности среза сопла приведено на рисунке 7.

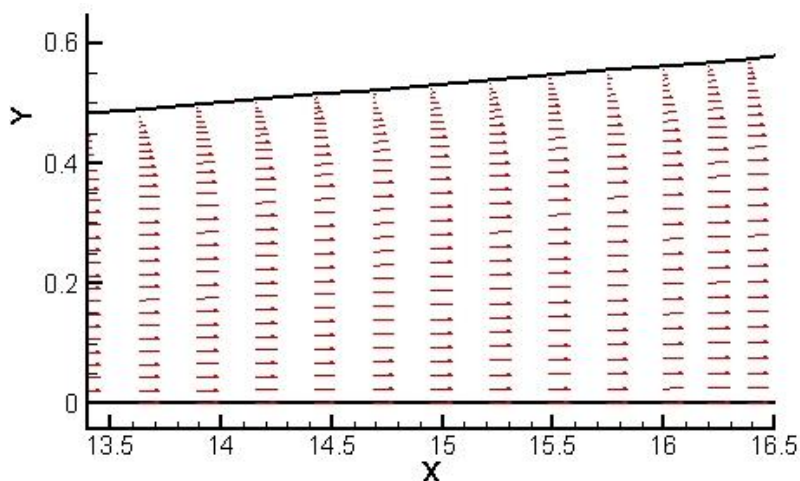


Рисунок 7. Векторное поле скорости в окрестности среза сопла (в м/с).

На рис. 8 представлено распределение числа Маха в окрестности критического сечения. Из рисунка ясно виден двумерный характер течения, в особенности в окрестности перехода звуковой скорости. Заметим, что число Маха становится равным 1 на расстоянии примерно 0,08 мм от минимального сечения, что можно объяснить влиянием пограничного слоя, развивающегося на стенке и вытесняющего эффективное критическое сечение вниз по потоку.

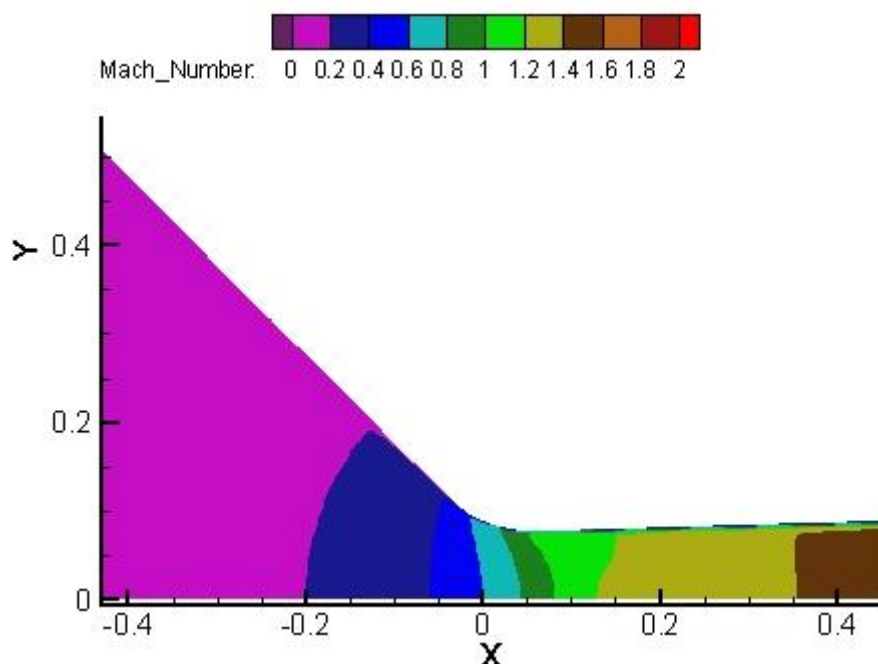


Рисунок 8. Поле числа Маха в окрестности критического сечения.

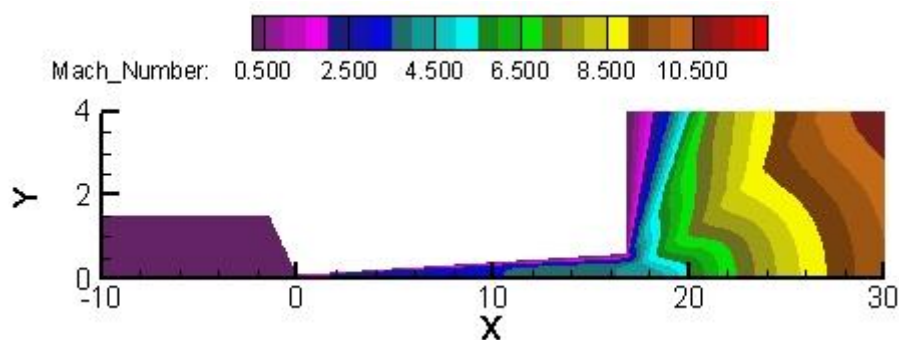


Рисунок 9. Распределение числа Маха.

Из рисунка 9 видно, что при истечении в бак происходит сильное увеличение числа Маха. Так, на срезе сопла максимальное число Маха составляет 4,5, а за соплом (в пределах используемой расчетной области) — 10,8. Важным фактом также является сильное охлаждение потока газа при его расширении. Поле температур изображено на рисунке 10.

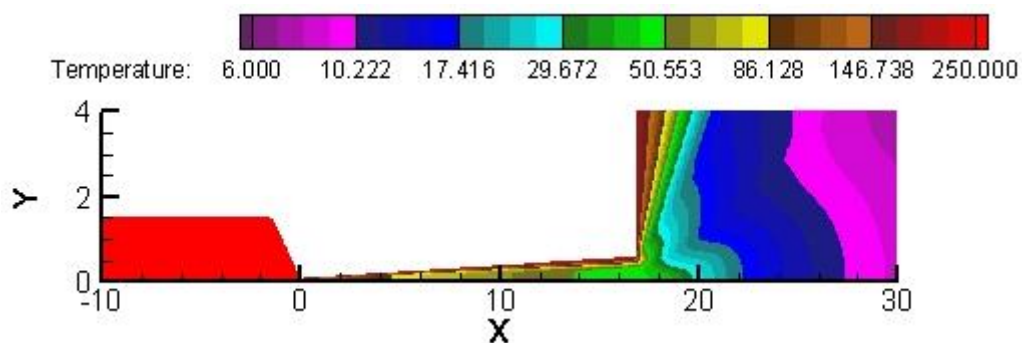


Рисунок 10. Распределение температуры (K) в расчётной области.

Наибольший практический интерес представляет распределения плотности ксенона в резервуаре за соплом (см. рис. 11).

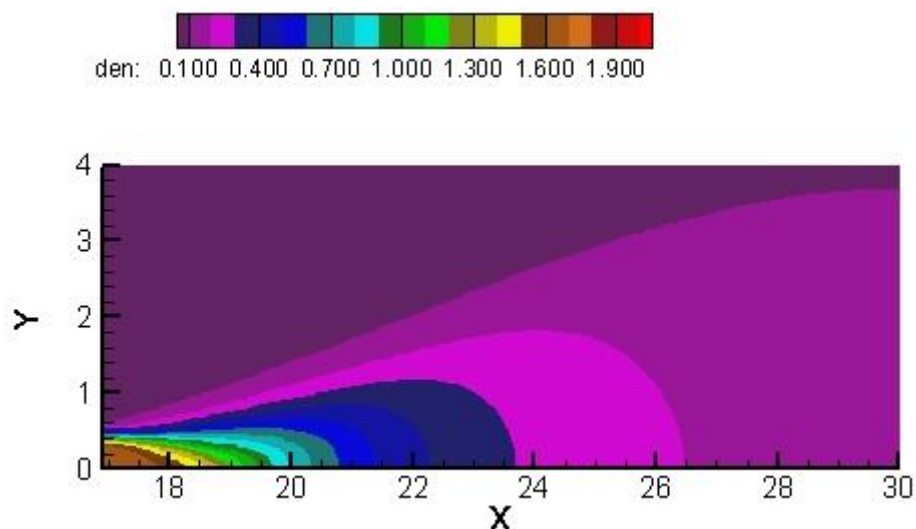


Рисунок 11. Поле плотности (кг/м^3) в резервуаре.

Видно, что из-за быстрого расширения струи в бак происходит резкое падение плотности по оси сопла (см. таблицу 5). Видно, что происходит сильное уменьшение плотности газа: на расстоянии двух радиусов плотность падает на 10%, трёх радиусов — на 20%, а на расстоянии пяти радиусов почти в два раза.

Таблица 5. Значения плотности ксенона на оси струи в резервуаре.

Расстояние от среза сопла отнесенное к радиусу выходного сечения	Плотность (кг/см^3)
0	1,69
1	1,64
2	1,53
3	1,35
4	1,08
5	0,85

Кроме того, видно, что при этом происходит существенное размывание границы струи (см. рис12).

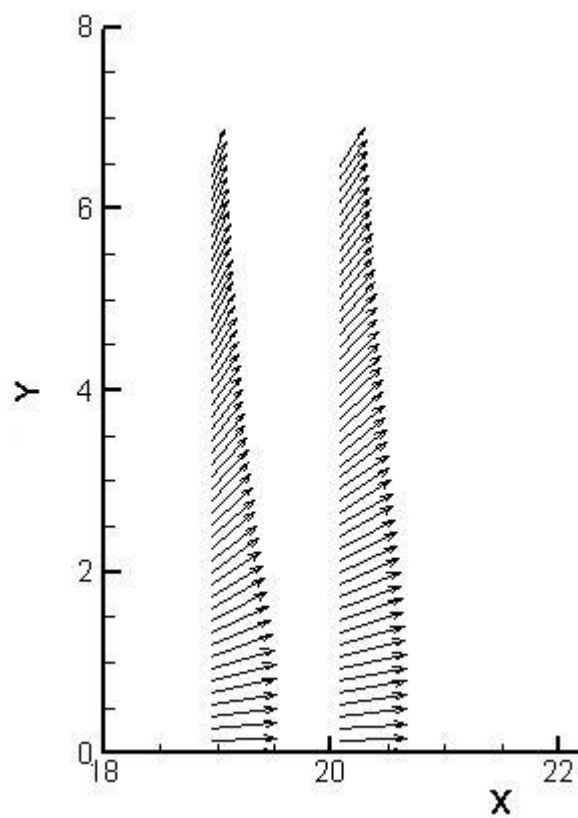


Рисунок 12. Профили скорости на расстоянии одного и двух диаметров выходного сечения сопла от среза.

4.2 Влияние гладкости поверхности в критическом сечении

Как указывалось в предыдущей главе, очень важным является правильное разрешение структуры течения в окрестности критического сечения сопла. Важно, чтобы волны разрежения, возникающие из-за изменения направления поверхности, правильно разрешались на расчетной сетке. В качестве негативного примера на рис.13 и 14 приведены результаты расчетов на той же сетке, но при отсутствии скругления поверхности в критическом сечении сопла. Видно, что в резервуаре происходит сильное искажение поля числа Маха, также происходит рост давления торможения вдоль оси сопла, что, может быть вызвано только погрешностью расчета.

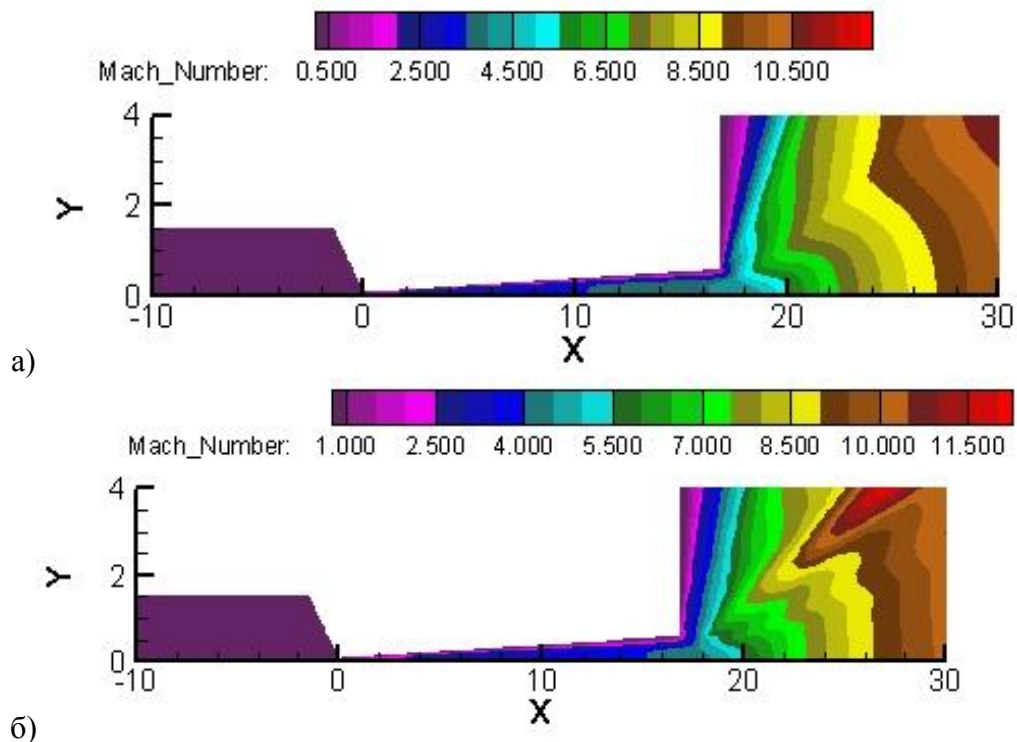


Рисунок 13. Сравнение распределения числа Маха при а)достаточном и б)недостаточном разрешении течения в критическом сечении.

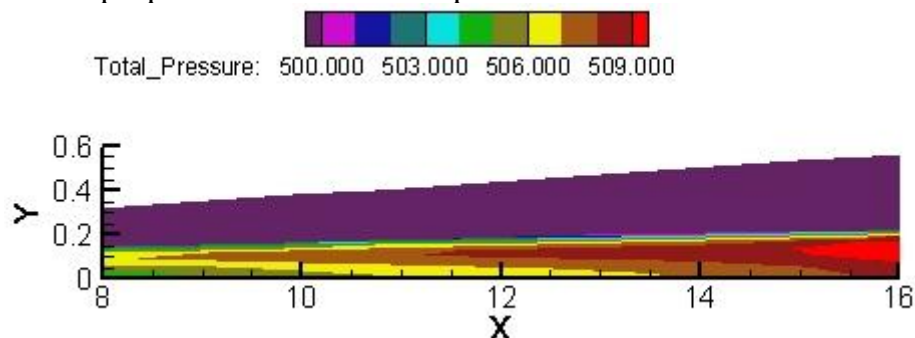


Рисунок 14. Распределение полного давления в сопле перед срезом при недостаточном разрешении течения в критическом сечении.

4.3 Оценка применимости модели

Как было сказано во введении, рассматриваемая модель не учитывает эффектов нестационарности, несплошности среды и конденсации. Для оценки применимости этой модели необходимо оценить влияние перечисленных эффектов на результаты расчетов.

Во-первых, в данной работе рассматривается стационарная задача, а в действительности установка работает в импульсном режиме, причём время импульса составляет $t_{\text{имп.}} = 4 \cdot 10^{-2}$ с. Оценка времени установления течения в сопле была сделана на основе эмпирической формулы для двухатомного газа [3]

$$t_{\text{уст.}} = \frac{0,76r_{\text{кр}}}{\text{tg}\theta \cdot a} \left[M^{\frac{1}{2}} \left(1 - \frac{1}{M} \right) + \frac{1}{15} \left(M^{\frac{3}{2}} - 1 \right) + \frac{1}{25} \left(M^{\frac{5}{2}} - 1 \right) \right], \text{ где}$$

$r_{\text{кр}}$ — радиус критического сечения сопла

θ — угол полураствора сопла

a — скорость звука в заторможенном газе перед соплом

M — число Маха на выходе из сопла

Время установления течения, рассчитанное по этой формуле, оказывается равным $t_{\text{уст.}} = 1,42 \cdot 10^{-5}$ с. Следует отметить, что приведенная формула была получена для течения невязкого двухатомного газа. Тем не менее очевидно, различие в свойствах идеального двухатомного газа и использовавшегося в настоящих расчетах ксенона не столь велико, чтобы увеличить время установления на 3 порядка. Таким образом можно считать, что основную часть времени истечения течение является стационарным и установившемся, а эффекты, вызываемые нестационарностью течения, оправданно считаются пренебрежимо малыми.

Во-вторых, при истечении в вакуум среда может перестать являться сплошной. Для оценки сплошности среды построим поле локального числа Кнудсена (рис. 15), определяемого как

$$Kn = \frac{\lambda}{D}, \text{ где}$$

λ — длина свободного пробега частицы

D — диаметр выходного сечения сопла

Здесь λ определяется в соответствии с формулой, приведённой в [2]:

$$\lambda = \frac{kT}{\sqrt{2}\pi\sigma^2 p}$$

T и p — соответственно температура и давление в данной точке, σ^2 — квадрат диаметра атома ксенона

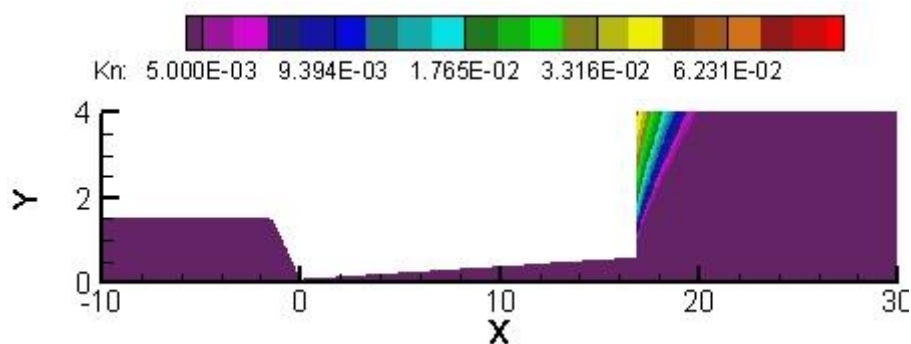


Рисунок 15. Распределение числа Кнудсена по расчётной области.

Из рисунка видно, что число Кнудсена практически во всей области (кроме участка у стенки в области за соплом) много меньше 1, соответственно использование модели сплошной среды при решении задачи вполне оправданно. Важно, зоны более высокого числа Кнудсена не пересекаются с областями возможного расположения газовой мишени (до двух диаметров выходного сечения сопла от среза).

Непосредственно за критическим сечением (на расстоянии 0,56 мм от него) ксенон переходит точку кипения и плавления (165,04K и 161,15K соответственно). Однако от точки, где достигается температура кипения до расстояния двух калибров от среза сопла (наиболее далекое от среза возможное положение газовой мишени), газ успевает расшириться в 7,56 раза (плотность падает с $11,64 \text{ кг/м}^3$ до $1,54 \text{ кг/м}^3$). При этом время нахождения в переохлаждённом состоянии составляет $6,64 \cdot 10^{-5} \text{ с}$. Можно предположить, что за столь малое время и при столь сильном расширении ксенон не успеет сконденсироваться, а возможное образование кластеров не повлияет на распределение плотности, хотя это предположение требует дополнительных доказательств.

Заключение

На базе коммерческого пакета CFX была построена вычислительная модель газовой мишени, используемой в экспериментальной установке лаборатории микроэлектроники ФТИ им. Иоффе РАН.

На основе построенной модели были проведены методические исследования влияния расчетной сетки и размеров расчетной области на результаты расчета, в первую очередь на распределение плотности в струе. Показано, что построенная вычислительная модель при допустимых временах расчета обеспечивает точность около 5%.

На основе результатов расчетов обоснована применимость модели стационарного истечения одноатомного сжимаемого газа. В частности установлено, что время установления течения много меньше длительности импульса установки. Среду можно считать сплошной почти во всей расчётной области (в том числе в интересных с практической точки зрения областях). Явлениями конденсации, по-видимому, можно пренебречь в виду чрезвычайно малого времени нахождения газа в переохлаждённом состоянии и сильного его расширения за это время.

Также результаты расчётов показали, что происходит сильное расширение струи и падение плотности в резервуаре за соплом. Таким образом, очевидно, что газовую мишень необходимо возбуждать лазером на минимальном допустимом расстоянии от среза сопла.

Литература

1. Л.Г. Лойцянский «Механика жидкости и газа». М. «Наука» 1987
2. Б.М. Яворский, А.А. Детлаф «Справочник по физике» М. «Наука» 1974
3. Р.Л. Петров «Газодинамические исследования при больших сверхзвуковых скоростях». Методические указания к лабораторным работам. Ленинград ЛПИ 1980.
4. Г.Н. Абрамович «Прикладная газовая динамика», часть 1. М. «Наука» 1991