



ΕΘΝΙΚΟ ΜΕΤΣΟΒΙΟ ΠΟΛΥΤΕΧΝΕΙΟ
ΣΧΟΛΗ ΧΗΜΙΚΩΝ ΜΗΧΑΝΙΚΩΝ

ΤΟΜΕΑΣ II:
ΑΝΑΛΥΣΗΣ, ΣΧΕΔΙΑΣΜΟΥ ΚΑΙ ΑΝΑΠΤΥΞΗΣ
ΔΙΕΡΓΑΣΙΩΝ & ΣΥΣΤΗΜΑΤΩΝ

ΔΙΠΛΩΜΑΤΙΚΗ ΕΡΓΑΣΙΑ

Χαρτογράφηση της λειτουργίας
αντιδραστήρα Χημικής Απόθεσης από Ατμό

Νηρέας Ρήγος

Επιβλέπων Καθηγητής
Ανδρέας Μπουντουβής

Αθήνα 2019

“...ψάχνετε, και θα βρείτε...”

Ευχαριστίες

Κατ' αρχάς, θα ήθελα να ευχαριστήσω τον επιβλέποντα καθηγητή της διπλωματικής μου εργασίας και νυν πρύτανη του ΕΜΠ, κ. Ανδρέα Μπουντουβή, για την ευκαιρία που μου έδωσε να μελετήσω ένα θέμα του πολύ ενδιαφέροντος τομέα της υπολογιστικής ρευστοδυναμικής. Οι συμβουλές του σε δυσκολίες και αδιέξοδα που προέκυψαν, οι υποδείξεις και η καθοδήγηση του συνέβαλλαν ουσιαστικά στην υλοποίηση της παρούσας εργασίας.

Επίσης, ένα μεγάλο ευχαριστώ στον Παύλο Γκίνη για την στήριξη και τη βοήθεια του, ιδιαίτερα σε θέματα τεχνικής φύσεως, καθώς και την πάντοτε άμεση ανταπόκριση του σε ερωτήματά μου. Τον ευχαριστώ για την διαθεσιμότητα του και τον χρόνο που διέθεσε, παρά τον ήδη αυξημένο φόρτο εργασίας του όλο αυτό το διάστημα.

Ακόμα, ένα ευχαριστώ στους φίλους και την παρέα που είχα την ευκαιρία να γνωρίσω κατά τα φοιτητικά μου χρόνια. Είμαι σίγουρος ότι η καθημερινότητα και οι στιγμές μαζί τους στα φοιτητικά έδρανα –και όχι μόνο– θα αποτελεί πάντα μια ευχάριστη ανάμνηση.

Αναμφίβολα, δεν θα μπορούσα εδώ να μην ευχαριστήσω τα παιδιά στο υπολογιστικό εργαστήριο. Οι ωραίες συζητήσεις και η παρέα τους αποτελούσε πάντα πηγή ξεκούρασης κατά τη διάρκεια της εκπόνησης της εργασίας.

Τέλος, ένα ευχαριστώ γεμάτο ευγνωμοσύνη στην οικογένεια μου, τους γονείς μου Γρηγόρη και Σοφία και τα αδέρφια μου, για την πολύτιμη και αδιάκοπη στήριξη τους. Η πορεία και η εργασία μου αυτή είναι καρπός του κόπου και της συμπαράστασης τους όλα αυτά τα χρόνια.

Περίληψη

Στην παρούσα εργασία μελετήθηκε το σύστημα ενός αξονοσυμμετρικού, κατακόρυφου αντιδραστήρα οργανομεταλλικής χημικής απόθεσης από ατμό, με θερμαινόμενο, περιστρεφόμενο, οριζόντιο υπόστρωμα και ψυχόμενα τοιχώματα. Ο αντιδραστήρας έχει θερμοκρασία υποστρώματος 1323 K, θερμοκρασία ρεύματος εισόδου και εξωτερικών τοιχωμάτων 323 K, μαζική παροχή εισόδου 9.5×10^4 kg/s, ενώ το εύρος λειτουργίας της λειτουργίας είναι 250-400 Torr και της ταχύτητας περιστροφής υποστρώματος 20-80 rad/s. Σκοπός της εργασίας είναι η χαρτογράφηση της λειτουργίας του αντιδραστήρα μέσω τρισδιάστατης μοντελοποίησης και η σύγκριση των λύσεων με τα αποτελέσματα του αντίστοιχου δισδιάστατου προβλήματος. Η επίλυση του προβλήματος στα 250 Torr οδηγεί σε πολλαπλότητα λύσεων. Για ρυθμό περιστροφής 20-80 rad/s προκύπτει ένα μόνιμο, αξονοσυμμετρικό πεδίο εμβολικής ροής, ίδιο με το δισδιάστατο πρόβλημα. Για ίδια πίεση και ταχύτητα 40-80 rad/s εμφανίζεται περιοδική, μη συμμετρική λύση. Σε πίεση 300 Torr και 350 Torr και γωνιακή ταχύτητα 40-70 rad/s η λύση προκύπτει επίσης περιοδική, μη συμμετρική. Για πίεση 300 Torr και ταχύτητα 50 rad/s ο αντιδραστήρας έχει δύο ευσταθείς περιοδικές λύσεις· η πρώτη έχει μία περιστρεφόμενη ασυμμετρία, ενώ η άλλη δύο. Ο αριθμός των μη συμμετρικών, περιστρεφόμενων θερμών περιοχών ρευστού στις περιοδικές λύσεις αυξάνεται συναρτήσει της ταχύτητας περιστροφής και της πίεσης. Η συχνότητα μιας πλήρους περιστροφής των ασυμμετριών γύρω από τον κατακόρυφο άξονα είναι ανάλογη του ρυθμού περιστροφής. Η προσομοίωση στα 300 Torr και 30 rad/s, μαζί με όλα τα ζεύγη παραμέτρων με μεγαλύτερη πίεση για ίδιο ρυθμό ή μικρότερο ρυθμό περιστροφής για ίδια πίεση δίνει μη-συμμετρική, μη-περιοδική λύση, στην οποία αναπτύσσονται ισχυρές ροές άνωσης. Όλα τα εμφανιζόμενα πεδία ροής στον αντιδραστήρα συνοψίζονται σε ένα χαρακτηριστικό διάγραμμα πίεσης-ρυθμού περιστροφής.

Λέξεις Κλειδιά: χημική απόθεση από ατμό, αντιδραστήρας περιστρεφόμενου υποστρώματος, υπολογιστική ρευστοδυναμική, τρισδιάστατη μοντελοποίηση, πολλαπλότητα λύσεων, περιοδική ροή, αξονοσυμμετρική ροή, ρήξη συμμετρίας

Abstract

Mapping of the operation of a Chemical Vapor Deposition reactor

In the present thesis, a study of an axisymmetric, vertical rotating disc MOCVD cold-wall reactor is carried out. The operation of the reactor is investigated at the following conditions: substrate temperature 1323 K, inlet and wall temperature 323 K, inlet mass flow rate 9.5×10^4 kg/s, while the pressure and wafer rotation rate operating window is 250-400 Torr and 20-80 rad/s, respectively. The purpose of this work is the reactor operation mapping based on three-dimensional modeling and the comparison of the results with those for the corresponding two-dimensional problem. For a pressure of 250 Torr flow multiplicity appears. All rotation rates between 20-80 rad/s result in a steady, axisymmetric, plug-flow regime, exactly like the 2-D case. When rotation is 40 rad/s or higher there is a second periodic, non-axisymmetric solution at the same pressure value. For pressures 300 Torr, 350 Torr and rate 40-70 rad/s the solution is also periodic, non-axisymmetric. For 300 Torr and 50 rad/s the reactor has two different stable periodic solutions; the first has one rotating asymmetry, while the other has two. The number of asymmetric, rotating hot fluid spots is increasing as pressure and rotation rate increases. The rotation frequency of these non-symmetric fluid areas is proportional to the wafer rotation rate. All parameter pairs with pressure 300 Torr and rate 30 rad/s and lower or rotation rate 30 rad/s and pressures equal to 300 Torr and higher result in a flow regime dominated by strong buoyancy effects. All flow fields are summarized and presented in a single and characteristic pressure vs rotation rate diagram.

Key words: chemical vapor deposition, rotating disc reactor, computational fluid dynamics, three-dimensional modelling, solution multiplicity, periodic flow field, axisymmetric flow, symmetry breaking

Περιεχόμενα

Ευχαριστίες.....	i
Περίληψη.....	iii
Abstract	v
1. ΕΙΣΑΓΩΓΗ.....	1
1.1. Η διεργασία: Χημική Απόθεση από Ατμό (ΧΑΑ)	1
1.2. Πλεονεκτήματα & Μειονεκτήματα	2
1.3. Αρχές της διεργασίας.....	3
1.4. Σκοπός της εργασίας.....	6
2. ΥΠΟΛΟΓΙΣΤΙΚΗ ΡΕΥΣΤΟΔΥΝΑΜΙΚΗ	9
2.1. Γενικά στοιχεία	9
2.2. Σφάλματα & Αβεβαιότητα	10
2.3. Δομή κώδικα CFD.....	11
2.4. Μέθοδος πεπερασμένων όγκων	12
2.5. Αλγόριθμοι επίλυσης.....	14
2.6. Πολλαπλότητα & Ρήξη συμμετρίας.....	15
3. ΜΑΘΗΜΑΤΙΚΗ ΜΟΝΤΕΛΟΠΟΙΗΣΗ	18
3.1. Αντιδραστήρας	18
3.2. Εξισώσεις.....	19
3.3. Συνοριακές & αρχικές συνθήκες	21
3.4. Ιδιότητες ρευστού.....	23
3.5. Επίλυση	25
3.6. Υπολογιστική Διαδικασία.....	27
3.7. Διαστατική ανάλυση και Ομοιότητα	27
4. ΠΕΡΙΟΔΙΚΟΤΗΤΑ	31
4.1. Γενικά στοιχεία	31
4.2. Φασματική Ανάλυση.....	32
4.3. Μεθοδολογία εύρεσης περιοδικότητας	35
4.4. Καταγραφή μεταβλητών	37
5. ΑΠΟΤΕΛΕΣΜΑΤΑ	39
5.1. Μόνιμες συμμετρικές λύσεις	39

5.2. Περιοδικές μη-συμμετρικές λύσεις.....	43
Πίεση 250 Torr	43
Πίεση 300 Torr	49
Πίεση 350 Torr	53
5.3. Μη περιοδικές μη-συμμετρικές (μεταβατικές) λύσεις	57
5.4. Σύνοψη	58
6. ΣΥΜΠΕΡΑΣΜΑΤΑ	61
7. ΠΡΟΤΑΣΕΙΣ	63
8. ΒΙΒΛΙΟΓΡΑΦΙΑ	65
9. ΠΑΡΑΡΤΗΜΑ	67
9.1. Κώδικες Matlab.....	67

1. ΕΙΣΑΓΩΓΗ

1.1. Η διεργασία: Χημική Απόθεση από Ατμό (ΧΑΑ)

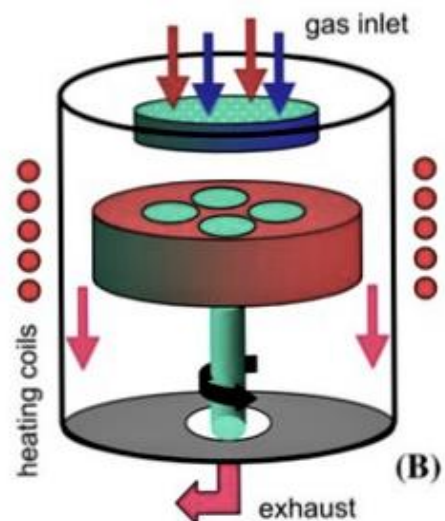
Η Χημική Απόθεση από Ατμό (Chemical Vapor Deposition - CVD) είναι μια διεργασία παραγωγής λεπτών στερεών υμενίων (films), η οποία έχει αναπτυχθεί ταχύτατα τις τελευταίες δεκαετίες και χρησιμοποιείται πλέον σε ποικίλους τεχνολογικούς τομείς, πέρα από τα εργαστηριακά όρια. Αποτελεί πια την κύρια μέθοδο παραγωγής πολλών βιομηχανικών προϊόντων, όπως ημιαγωγοί, οπτοηλεκτρονικά μέρη, εξαρτήματα υψηλής αντοχής, εργαλεία κοπής, συνθετικές ίνες, φίλτρα, επιστρώσεις, σκόνες κ.ά. [1].

Η ανάπτυξη της ΧΑΑ οφείλεται μεταξύ άλλων στην ευελιξία και προσαρμοστικότητα της, την ικανότητα της να επιστρώνει σχεδόν οποιαδήποτε γεωμετρία, την δυνατότητα που παρέχει για παραγωγή μεγάλου εύρους προϊόντων και την οικονομική ανταγωνιστικότητα της. Έτσι, η ευρεία εξάπλωση της διεργασίας σε συνδυασμό με την υψηλή αξία των προϊόντων της έχει ωθήσει στην λεπτομερή μελέτη των σύνθετων φυσικών και χημικών φαινομένων αυτής, καθώς αυτά καθορίζουν τα τελικά ποιοτικά χαρακτηριστικά του εκάστοτε αποτιθέμενου στερεού φιλμ [1].

Συνοπτικά, τα βασικά βήματα της διεργασίας είναι τα ακόλουθα: Κατ' αρχάς, τα αντιδρώντα με το πρόδρομο υλικό (precursor) εισάγονται με τη βοήθεια ενός φέροντος αερίου (carrier gas) στον αντιδραστήρα. Ακολουθεί η μεταφορά στο υπόστρωμα και η απόθεση των αντιδρώντων προς σχηματισμό του στερεού υμενίου, μέσω ετερογενών αντιδράσεων. Τελικά, τα αέρια παραπροϊόντα της αντίδρασης μαζί με ενώσεις που δεν αντέδρασαν παρασύρονται προς την έξοδο του αντιδραστήρα. Μια πιο αναλυτική και κατατοπιστική περιγραφή των σταδίων και των μηχανισμών της διεργασίας αναπτύσσεται στην παράγραφο 1.3.

Οι βασικότερες ιδιότητες που καθορίζουν την ποιότητα του αποτιθέμενου υμενίου είναι η ομοιομορφία, το πάχος, η καθαρότητα και η μορφολογία του [2]. Πολύ κρίσιμο ρόλο στις τελικές αυτές ιδιότητες των παραγόμενων φιλμ παίζει ο σχεδιασμός του αντιδραστήρα ΧΑΑ, όπου λαμβάνει χώρα η διεργασία. Ένας τυπικός αντιδραστήρας ΧΑΑ απαρτίζεται από πολυάριθμες κρίσιμες συνιστώσες [3]:

- Σύστημα εισαγωγής αερίων
- Θάλαμο αντίδρασης
- Υλικό υποστρώματος
- Πηγή ενέργειας υποστρώματος



Εικόνα 1.1 Τρισδιάστατη απεικόνιση κυλινδρικού, αξονοσυμμετρικού, κατακόρυφου αντιδραστήρα ΧΑΑ με περιστρεφόμενο, οριζόντιο, θερμαινόμενο υπόστρωμα.

- Μηχανισμό φόρτωσης/εκφόρτωσης υποστρώματος
- Σύστημα δημιουργίας κενού
- Σύστημα απαγωγής παραγόμενων αερίων
- Σύστημα επεξεργασίας παραγόμενων αερίων
- Σύστημα ελέγχου διεργασίας
- Σύστημα ελέγχου ποιότητας προϊόντος (in situ)

Μια σημαντική υποκατηγορία της ΧΑΑ είναι η οργανομεταλλική χημική απόθεση από ατμό, μέσω της οποίας παράγονται προηγμένα ημιαγώγιμα υλικά (advanced semiconductor materials). Τα υλικά αυτά είναι κράματα, τα οποία περιέχουν μέταλλα των κύριων ομάδων III-V του περιοδικού πίνακα [4].

Οι κατακόρυφοι αντιδραστήρες περιστρεφόμενου δίσκου (vertical rotating disc reactors) χρησιμοποιούνται ευρέως στην οργανομεταλλική ΧΑΑ για μεγάλης κλίμακας παραγωγή ημιαγωγών, ιδιαίτερα για δομές βασισμένες στο GaN. Κατά συνέπεια, υπάρχει σημαντικό ενδιαφέρον για την κατανόηση και τον έλεγχο της δυναμικής της ροής, αφού το πεδίο ροής που επικρατεί στην αντιδραστήρα καθορίζει και την τελική ομοιομορφία των προϊόντων ως προς τη συγκέντρωση και το πάχος.

Στους αντιδραστήρες περιστρεφόμενου δίσκου αναπτύσσονται σύνθετες ροές, οι οποίες προκαλούνται από τον συνδυασμό και την αλληλεπίδραση δυνάμεων άνωσης, περιστροφής και εξαναγκασμένης συναγωγής. Στη διεργασία είναι ιδιαίτερα επιθυμητά τα πεδία στρωτής, ομοιόμορφης ροής χωρίς ανακυκλοφορία –δηλαδή εμβολική ροή (plug-flow)– προκειμένου να αποφεύγονται αρνητικά φαινόμενα όπως αντίδραση και δημιουργία συμπυκνωμάτων στην αέρια φάση, σχηματισμός αποθέσεων στα τοιχώματα κ.ά. [5].

1.2. Πλεονεκτήματα & Μειονεκτήματα

Η ΧΑΑ διαθέτει μερικά σημαντικά χαρακτηριστικά, για τα οποία προτιμάται σε πολλές περιπτώσεις αντί άλλων μεθόδων απόθεσης. Τα βασικότερα από αυτά συνοψίζονται ακολούθως:

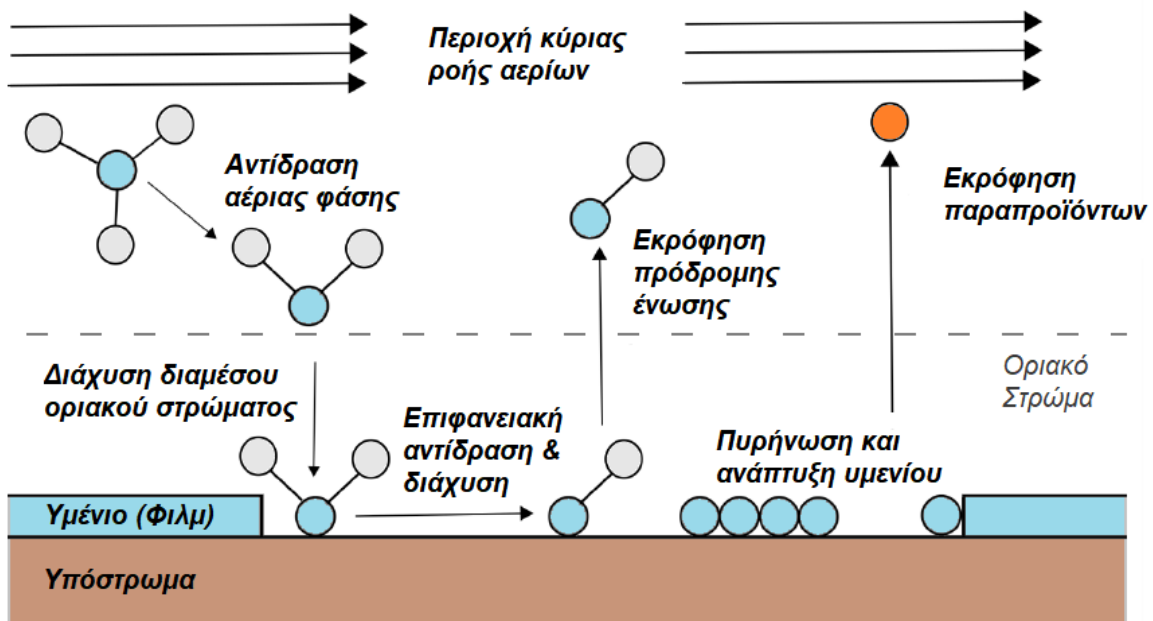
- Παράγει αποτελεσματικές επιστρώσεις (coatings) ακόμα και σε σύνθετες γεωμετρίες και τρισδιάστατες διαμορφώσεις, σε αντίθεση με διεργασίες φυσικής απόθεσης από ατμό (ΦΑΑ).
- Χαρακτηρίζεται από υψηλό ρυθμό απόθεσης και ευκολία παραγωγής παχιών στρώσεων (τάξης cm), στοιχεία που την καθιστούν ανταγωνιστική και σε ορισμένες περιπτώσεις πιο συμφέρουσα οικονομικά από άλλες διεργασίες.
- Δεν απαιτεί συνθήκες πολύ υψηλού κενού και είναι ευέλικτη και εύκολα προσαρμόσιμη στις εκάστοτε διαφοροποιήσεις της διεργασίας.

Αναπόφευκτα, η διεργασία έχει στην πράξη και κάποιους περιορισμούς:

- Πραγματοποιείται μόνο σε θερμοκρασίες άνω των 600 °C, λόγω των υψηλών ενεργειών ενεργοποίησης των χημικών αντιδράσεων. Σε αυτό το εύρος θερμοκρασιών πολλά υποστρώματα παύουν να είναι θερμικά σταθερά.
- Απαιτεί πρόδρομες ουσίες με υψηλή τάση ατμών, που συχνά είναι επικίνδυνες και εξαιρετικά τοξικές (η ανάπτυξη της οργανομεταλλικής και ενισχυμένης με πλάσμα ΧΑΑ αντισταθμίζει το πρόβλημα αυτό).
- Τα παραπροϊόντα των αντιδράσεων της είναι επίσης τοξικά και διαβρωτικά και χρήζουν εξουδετέρωσης, η οποία αποτελεί δαπανηρή διαδικασία.

1.3. Αρχές της διεργασίας

Η διεργασία της (οργανομεταλλικής) ΧΑΑ είναι αρκετή σύνθετη, αφού περιλαμβάνει ταυτόχρονα φαινόμενα μεταφοράς μάζας, ορμής, θερμότητας και μηχανισμούς χημικής κινητικής. Σαν αποτέλεσμα, όλοι οι φυσικοί και χημικοί μηχανισμοί είναι άρρηκτα συνδεδεμένοι μεταξύ τους.



Σχήμα 1.1 Απεικόνιση των φαινομένων σε μια τυπική διεργασία ΧΑΑ.

Τα κύρια στάδια της διεργασίας παρουσιάζονται στο παραπάνω σχήμα και είναι τα εξής [3]:

- Είσοδος αντιδρώντων και φέροντος αερίου στον αντιδραστήρα.
- Ομογενείς χημικές αντιδράσεις στον κύριο αέριο όγκο και δημιουργία ενδιάμεσων.
- Μεταφορά (μέσω συναγωγής) χημικών συστατικών από τον κύριο όγκο προς το οριακό στρώμα.
- Διάχυση χημικών συστατικών κατά μήκος του οριακού στρώματος, προς το υπόστρωμα.
- Ετερογενείς αντιδράσεις στο υπόστρωμα.
- Προσρόφηση/προσκόλληση στερεών προϊόντων στο υπόστρωμα και ανάπτυξη του υμενίου (film adhesion & growth).

Κεφάλαιο 1^ο: ΕΙΣΑΓΩΓΗ

- Εκρόφιση των παραπροϊόντων από την επιφάνεια του υποστρώματος.
- Διάχυση των παραπροϊόντων από το υπόστρωμα κατά μήκος του οριακού στρώματος.
- Απαγωγή (μέσω συναγωγής) όλων των αέριων χημικών συστατικών από τον αντιδραστήρα.

Συνήθως, το ελέγχον (ή βραδύ) στάδιο σε μια διεργασία ΧΑΑ, δηλαδή εκείνο το οποίο καθορίζει τον τελικό ρυθμό της απόθεσης, είναι είτε η διάχυση των συστατικών διαμέσου του οριακού στρώματος είτε η ετερογενής αντίδραση των συστατικών στην επιφάνεια του υποστρώματος. Ο καθοριστικός παράγοντας για τον καθορισμό του βραδέος σταδίου είναι η θερμοκρασία. Υψηλή θερμοκρασία υποστρώματος επιταχύνει την κινητική (νόμος Arrhenius) και καθιστά την διάχυση ως το ελέγχον στάδιο της όλης διεργασίας, ενώ το αντίστροφο συμβαίνει σε χαμηλότερο θερμοκρασιακό εύρος.

Η πλειοψηφία των συστημάτων ΧΑΑ λειτουργούν ως αντιδραστήρες διαλείποντος έργου, αφού για να είναι αποδοτική και βιώσιμη η συνεχής λειτουργία στη ΧΑΑ θα πρέπει η πίεση και η θερμοκρασία να μην απέχουν πολύ από τις ατμοσφαιρικές συνθήκες. Όμως, κάτω από ατμοσφαιρικές συνθήκες είναι πολύ δύσκολη η παραγωγή λεπτών, ομοιόμορφων φιλμ με ελεγχόμενο τρόπο.

Στην οργανομεταλλική ΧΑΑ υπάρχει απαίτηση για πολύ υψηλές θερμοκρασίες, λόγω των μεγάλων ποσών ενέργειας ενεργοποίησης που χρειάζονται οι αντιδράσεις, προκειμένου η παραγωγικότητα της διεργασίας να βρίσκεται σε ικανοποιητικά επίπεδα.

Οι συνθήκες κενού είναι αναγκαίες κυρίως για τους ακόλουθους λόγους:

Κατ' αρχάς, η απαίτηση για χαμηλές πιέσεις σχετίζεται με την ύπαρξη των δυνάμεων άνωσης. Είναι γεγονός ότι η ελεύθερη συναγωγή μέσα στον αντιδραστήρα οδηγεί στη δημιουργία εσωτερικών δινών, με επακόλουθο να επηρεάζεται αρνητικά η ομοιομορφία της απόθεσης. Οι αναπτυσσόμενες δυνάμεις άνωσης είναι ανάλογες του τετραγώνου της πυκνότητας και της βαθμίδας θερμοκρασίας μεταξύ εισόδου και υποστρώματος. Δυστυχώς, η μεγάλη ευαισθησία της χημείας των αντιδράσεων από τη θερμοκρασία δεν επιτρέπει ανώδυνες μεταβολές της θερμοκρασίας του δίσκου. Άρα, η μόνη δυνατή μεταβλητή παράμετρος είναι η πυκνότητα. Εξ' αιτίας του νόμου των τελείων αερίων η πυκνότητα είναι αντιστρόφως ανάλογη της πίεσης και άρα η άνωση εξαρτάται από το τετράγωνο του αντιστρόφου της πίεσης λειτουργίας. Συνεπώς, η τελευταία πρέπει να διατηρείται σε τιμές μικρότερες της ατμοσφαιρικής, ώστε η ροή να κυριαρχείται από την εξαναγκασμένη ροή και το πεδίο ροής να είναι ομοιόμορφο.

Επιπλέον, όπως προαναφέρθηκε, στις συνήθεις υψηλές θερμοκρασίες η διεργασία της απόθεσης ελέγχεται από τη μεταφορά μάζας και ειδικότερα από το στάδιο της διάχυσης των αντιδρώντων διαμέσου του οριακού στρώματος. Όμως, γνωρίζουμε από την κινητική θεωρία ότι ο ρυθμός διάχυσης στα αέρια είναι ουσιαστικά αντιστρόφως ανάλογος της πίεσης (βλ. εξ. 3.28). Γι' αυτό, η λειτουργία σε πιέσεις μικρότερες της ατμοσφαιρικής επιταχύνει την παραγωγικότητα της διεργασίας.

Τέλος, μια ακόμη πιθανή αιτία είναι ότι συχνά η χαμηλή πίεση μειώνει την έκταση των ανεπιθύμητων αντιδράσεων στην αέρια φάση.

Σαν επακόλουθο, σπανίζει η χρήση αντιδραστήρων ΧΑΑ που είναι ανοικτοί στο περιβάλλον· συνήθως βρίσκονται σε κλειστό σύστημα υπό κενό και με υψηλή θερμοκρασία υποστρώματος. Βέβαια, κατά τη διαδικασία επιλογής της πίεσης υπάρχει πάντα και ένα κάτω όριο, το οποίο είναι απόρροια του υψηλού λειτουργικού κόστους των αντλιών κενού.

Η κατηγοριοποίηση των διεργασιών ΧΑΑ είναι δυνατόν να γίνει με βάση διάφορα κριτήρια:

- Τον τρόπο παροχής της απαραίτητης ενέργειας για την ενεργοποίηση των αντιδράσεων. Γενικά, οι επιλογές είναι μέσω άμεσης θέρμανσης του δισκίου, με φωτόνια (laser) ή από ενεργά ηλεκτρόνια (πλάσμα). Στην υπό μελέτη διεργασία χρησιμοποιείται ο πρώτος τρόπος, δηλαδή ο θερμικός. Η θερμική ΧΑΑ απαιτεί υψηλή θερμοκρασία –συνήθως μεταξύ 800 °C και 2000 °C– που μπορεί να επιτευχθεί μέσω θέρμανσης με αντίσταση, επαγωγή, ακτινοβολία ή συνδυασμό των παραπάνω [1].
- Την πίεση λειτουργίας. Μια διεργασία ΧΑΑ μπορεί να χαρακτηριστεί ως ατμοσφαιρικής πίεσης (atmospheric CVD) ή χαμηλής πίεσης (Low Pressure CVD – LPCVD).
- Τον τρόπο λειτουργίας. Η διεργασία μπορεί να είναι είτε συνεχής (continuous) ή ασυνεχής (batch)· ο τρόπος λειτουργίας σχετίζεται άμεσα με την πίεση του αντιδραστήρα.
- Την ύπαρξη περιστροφής του υποστρώματος/δίσκου. Γενικά, η περιστροφή του υποστρώματος ευνοεί την ανάπτυξη ομοιόμορφου φιλμ.
- Τη θερμοκρασία των τοιχωμάτων. Ψυχρά τοιχώματα εμποδίζουν την απόθεση σε αυτά, ενώ θερμά τοιχώματα ελαττώνουν τη θερμοκρασιακή βαθμίδα, η οποία οδηγεί σε δημιουργία ανεπιθύμητων δευτερευουσών ροών.
- Τη γεωμετρία και τον προσανατολισμό του αντιδραστήρα.

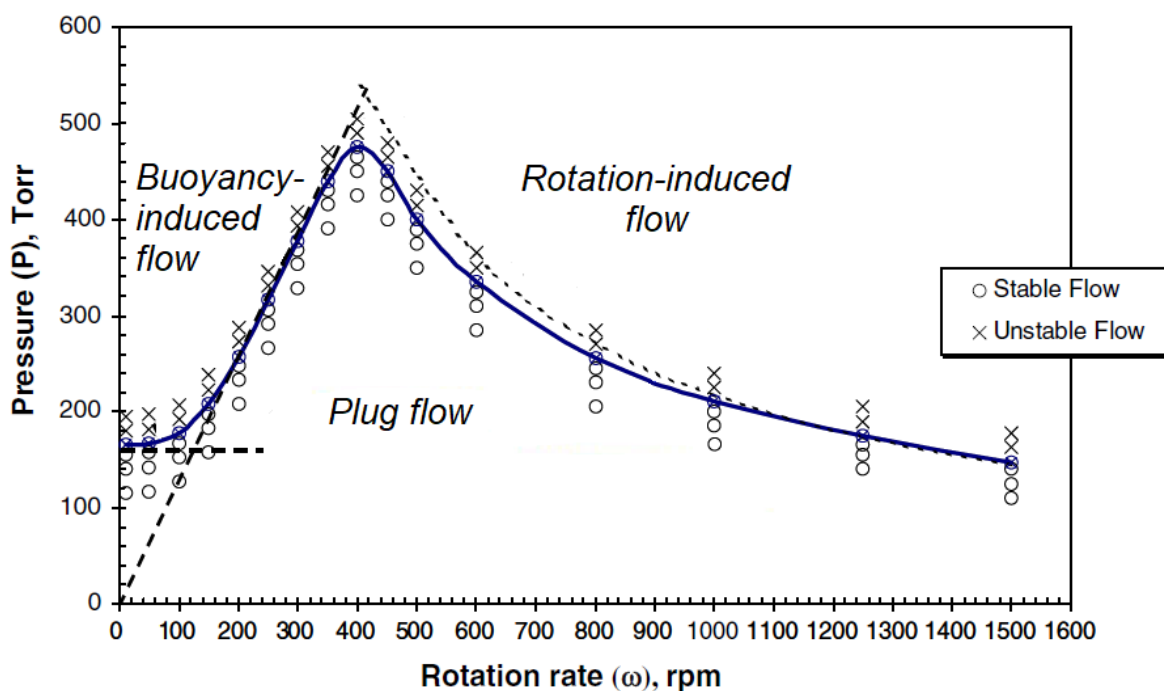
Το ενεργειακό φράγμα για την ετερογενή πυρήνωση (nucleation) είναι μικρότερο σε σχέση το αντίστοιχο για την ομογενή. Παράλληλα, η υψηλή θερμοκρασία παίζει καταλυτικό ρόλο για τη δημιουργία του υμενίου. Για τους παραπάνω λόγους, είναι θερμοδυναμικά και κινητικά ευνοϊκότερο να λάβει χώρα η πυρήνωση και απόθεση στην θερμή (δι)επιφάνεια του υποστρώματος, παρά στην κύρια αέρια φάση του αντιδραστήρα ή στα ψυχρά τοιχώματα.

Ακόμα, στη ΧΑΑ επιδιώκεται με κάθε τρόπο η αποφυγή δημιουργίας τύρβης μέσα στον αντιδραστήρα. Παρ' όλο που η τύρβη αυξάνει τοπικά τους ρυθμούς μεταφοράς μάζας, είναι ένα μη ελέγξιμο φαινόμενο και οδηγεί στην ποιοτική υποβάθμιση των ιδιοτήτων του παραγόμενου φιλμ.

1.4. Σκοπός της εργασίας

Το αντικείμενο της παρούσας ανάλυσης είναι η χαρτογράφηση ενός συγκεκριμένου κατακόρυφου, αξονοσυμμετρικού αντιδραστήρα οργανομεταλλικής ΧΑΑ περιστρεφόμενου υποστρώματος, μέσω μοντελοποίησης του στις τρεις διαστάσεις. Η γεωμετρία του αντιστοιχεί στον πρότυπο εμπορικό αντιδραστήρα οργανομεταλλικής χημικής απόθεσης από ατμό, E300GaN Veeco Turbodisc. Ο τελευταίος χρησιμοποιείται ευρέως στην βιομηχανία παραγωγής λεπτών υμενίων από τριμεθυλο-γάλλιο (GaN) μέσω της διεργασίας της ΧΑΑ.

Αφετηρία για την παρούσα μελέτη αποτελεί μια προηγούμενη συστηματική διερεύνηση της ευστάθειας της ροής για ένα μεγάλο εύρος λειτουργικών παραμέτρων, για τον ίδιο αντιδραστήρα και συνθήκες [5]. Ειδικότερα, στην παραπάνω ανάλυση καταstrώνεται ένα χαρακτηριστικό και ιδιαίτερα διαφωτιστικό διάγραμμα πίεσης λειτουργίας-γωνιακής ταχύτητας υποστρώματος, που διευρύνει σημαντικά την κατανόηση της διεργασίας και την επίπτωση των δύο αυτών κύριων παραμέτρων στο είδος της ροής:



Σχήμα 1.2 Τυπικό διάγραμμα πίεσης – ρυθμού περιστροφής, με χαρακτηρισμό της ευστάθειας της ροής. Η μπλε γραμμή οριοθετεί την μετάβαση από την εμβολική και ομοιόμορφη ροή (plug flow) σε ροές που εμφανίζουν ανακυκλοφορία [6].

Ως ευσταθής χαρακτηρίζεται η εμβολική ροή, ενώ στις ασταθείς συγκαταλέγονται η ροή επηρεαζόμενη από την άνωση και η ροή επηρεαζόμενη από την περιστροφή του δίσκου.

Επιπλέον, σε μετέπειτα έρευνα του ίδιου αξονοσυμμετρικού αντιδραστήρα με δισδιάστατη (αξονοσυμμετρική) υπολογιστική προσομοίωση πραγματοποιήθηκε συνδυαστική χρήση κώδικα ρευστοδυναμικής με τη μέθοδο βηματισμού παραμέτρου, με αποτέλεσμα την οριοθέτηση περιοχών πολλαπλότητας λύσεων σε ένα σημαντικό εύρος λειτουργίας [6].

Ο στόχος της εργασίας αυτής, λοιπόν, είναι η περαιτέρω υπολογιστική διερεύνηση του συγκεκριμένου αντιδραστήρα ΧΑΑ, μέσω μελέτης της επίδρασης της πίεσης και του ρυθμού περιστροφής στο πεδίο ροής. Η θεμελιώδης διαφορά σε σύγκριση με προηγούμενες αναλύσεις είναι πως η μοντελοποίηση της διεργασίας γίνεται στις τρεις διαστάσεις, γεγονός που αποσκοπεί στην πληρέστερη και πιο διευρυμένη κατανόηση των αναπτυσσόμενων πεδίων ροής. Με άλλα λόγια, η τρισδιάστατη προσομοίωση θα οδηγήσει είτε στην επικύρωση της επάρκειας των μοντελοποιήσεων μειωμένης διάστασης ή αντίθετα στην ανακάλυψη «κρυμμένων» 3-D λύσεων, νέων πολλαπλοτήτων και πεδίων ροής με ρήξη της αξονοσυμμετρίας .

Σε όλη την παρούσα μελέτη για την μοντελοποίηση της ροής στη διεργασία χρησιμοποιείται ο εμπορικός κώδικας υπολογιστικής ρευστοδυναμικής Ansys FLUENT (στο εξής Fluent).

2. ΥΠΟΛΟΓΙΣΤΙΚΗ ΡΕΥΣΤΟΔΥΝΑΜΙΚΗ

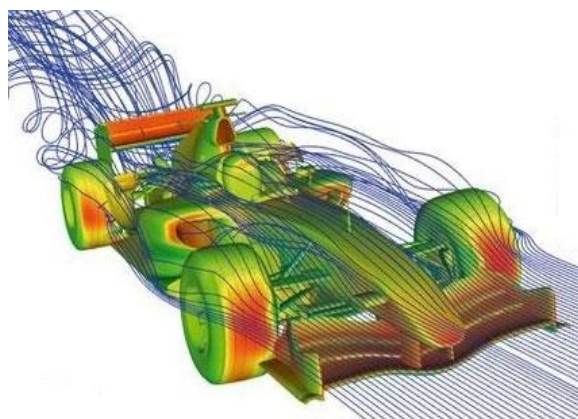
2.1. Γενικά στοιχεία

Με τον όρο υπολογιστική ρευστοδυναμική ή CFD (Computational Fluid Dynamics) εννοείται η ανάλυση συστημάτων και η επίλυση προβλημάτων που περιλαμβάνουν ροή ρευστού σε συνδυασμό με μεταφορά θερμότητας και συσχετιζόμενων φαινομένων (π.χ. χημικές αντιδράσεις), μέσω προσομοίωσης βασισμένης σε Η/Υ.

Η τεχνική αυτή είναι πολύ αποτελεσματική και καλύπτει ένα ευρύ φάσμα βιομηχανικών (και μη) εφαρμογών. Μερικά ενδεικτικά πεδία και αντίστοιχα χαρακτηριστικά παραδείγματα αυτών παρουσιάζονται παρακάτω [7]:

- Αεροδυναμική και υδροδυναμική: σχεδιασμός αεροσκαφών, οχημάτων, πλοίων.
- Μονάδες παραγωγής ισχύος: Κινητήρες εσωτερικής & εξωτερικής καύσης (αεριοστρόβιλοι).
- Ηλεκτρική και ηλεκτρονική μηχανική: ψύξη ηλεκτρονικού εξοπλισμού και μικροκυκλωμάτων.
- Διεργασίες χημικής μηχανικής: ανάμιξη, διαχωρισμός.
- Εξωτερικό και εσωτερικό περιβάλλον κτιρίων: φορτίο ανέμου, θέρμανση/αερισμός.
- Θαλάσσια μηχανική: φορτία παράκτιων κατασκευών.
- Μηχανική περιβάλλοντος: διασπορά ρύπων και λυμάτων.
- Υδρολογία και ωκεανογραφία: ροές σε ποτάμια, ωκεανούς.
- Μετεωρολογία: πρόβλεψη καιρικών συνθηκών.
- Βιοϊατρική μηχανική: ροή του αίματος στο καρδιαγγειακό σύστημα.

Πριν την ανάπτυξη του CFD, τα διαθέσιμα μέσα για την επίλυση προβλημάτων ροής ήταν: α) η διεξαγωγή πειραμάτων και β) οι αναλυτικές συσχετίσεις, που όμως είναι δυνατό να εξαχθούν μόνο σε πολύ απλές γεωμετρίες και φυσικά μοντέλα. Με αφετηρία τα μέσα του 20^{ου} αιώνα, όμως, αποτελεί ολοένα και περισσότερο καίρια συνιστώσα του σχεδιασμού βιομηχανικών προϊόντων και διεργασιών. Αναμφίβολα, η εξέλιξη και εξάπλωση του τα τελευταία χρόνια συνδέεται άρρηκτα με την πρόοδο της επιστήμης των υπολογιστών. Τόσο η διαθεσιμότητα προσιτού υλικού (hardware) όσο και η ανάπτυξη διεπαφών φιλικών στο χρήστη (user-friendly interfaces) έχουν οδηγήσει στην εισαγωγή και διάδοση του στην ευρύτερη βιομηχανική κοινότητα εδώ και τρεις περίπου δεκαετίες.



Εικόνα 2.1 Υπολογιστική προσομοίωση των ροϊκών γραμμών γύρω από ένα αγωνιστικό όχημα.

Η υπολογιστική ρευστοδυναμική, λοιπόν, δεν έρχεται να αντικαταστήσει το ρεαλισμό του πειράματος ή την κατανόηση που προσφέρουν οι αναλυτικές μέθοδοι, αλλά στην ιδανική περίπτωση δρα συμπληρωματικά. Αναμφίβολα, όμως, υπάρχουν μερικά μοναδικά πλεονεκτήματα του CFD σε σύγκριση με τις δύο προηγούμενες προσεγγίσεις στο σχεδιασμό συστημάτων:

- Σημαντική μείωση στο χρόνο προετοιμασίας και στο κόστος νέων σχεδιασμών.
- Δυνατότητα μελέτης συστημάτων στα οποία η διεξαγωγή ελεγχόμενων πειραμάτων είναι από δύσκολη έως αδύνατη (π.χ. συστήματα πολύ μεγάλων διαστάσεων).
- Ικανότητα διερεύνησης ροής σε σύνθετες γεωμετρίες και για πολύπλοκα μοντέλα.
- Δυνατότητα ανάλυσης συστημάτων σε επικίνδυνες συνθήκες στα όρια της απόδοσης τους και κάτω από αυτά (π.χ. μελέτης ασφαλείας και σενάρια ατυχημάτων).
- Πρακτικά απεριόριστο επίπεδο λεπτομέρειας αποτελέσματος.

Όλοι οι προαναφερθέντες λόγοι καθιστούν την υπολογιστική ρευστοδυναμική μία αναπτυσσόμενη, ισχυρή και πολλά υποσχόμενη τεχνική για την επίλυση σύνθετων φυσικών προβλημάτων.

2.2. Σφάλματα & Αβεβαιότητα

Όπως αναφέρθηκε στην προηγούμενη ενότητα, η τεχνική του CFD συνδέεται με ποικίλα οφέλη, με την προϋπόθεση ότι τα παραγόμενα αποτελέσματα είναι ακριβή. Δυστυχώς, όμως, πιθανές ανακρίβειες ενδέχεται να έχουν σημαντικές συνέπειες, όπως σπατάλη χρόνου, χρημάτων ή –στη χειρότερη των περιπτώσεων– ακόμα και καταστροφική αστοχία μηχανών ή κατασκευών. Έτσι, με την σταδιακή ανάπτυξη του συγκεκριμένου τομέα αναδείχθηκε η επιτακτική ανάγκη για ακριβείς αναφορές των επιπέδων εμπιστοσύνης στα αποτελέσματα των προσομοιώσεων, κατά αντιστοιχία με καθιερωμένες σχετικές πρακτικές στον πειραματικό χώρο. Έτσι, με αφορμή το ζήτημα της εμπιστοσύνης και της βεβαιότητας στο CFD, γίνεται παρακάτω σύντομος απολογισμός των παραγόντων που επηρεάζουν τις προσομοιώσεις [7] [8].

Όλες οι πηγές ανακρίβειας είναι δυνατό να ενταχθούν σε 2 κύριες κατηγορίες: τα σφάλματα και την αβεβαιότητα. Αναλυτικότερα:

Μια αναγνωρίσιμη ανεπάρκεια σε ένα μοντέλο ή προσομοίωση CFD, η οποία δεν οφείλεται σε έλλειψη γνώσης, ονομάζεται σφάλμα. Μερικά χαρακτηριστικά σφάλματα σε προσομοιώσεις υπολογιστικής ρευστοδυναμικής είναι τα εξής:

i. Αριθμητικά:

Στρογγυλοποίησης Η/Υ:

Είναι αποτέλεσμα της υπολογιστικής αναπαράστασης πραγματικών αριθμών μέσω ενός πεπερασμένου αριθμού σημαντικών ψηφίων.

Επαναληπτικής σύγκλισης:

Η αριθμητική λύση ενός προβλήματος ροής απαιτεί επαναληπτικές διαδικασίες. Στην πράξη, οι διαθέσιμοι πόροι χρόνου και υπολογιστικής ισχύος υπαγορεύουν τον τερματισμό της κάθε επαναληπτικής ακολουθίας, όταν η διαφορά της τρέχουσας λύσης από την τελική γίνει αρκούντως μικρή.

Διακριτοποίησης:

Η διαδικασία της διακριτοποίησης, δηλαδή της επίλυσης των συνεχών, διαφορικών εξισώσεων ροής σε πεπερασμένο αριθμό διακριτών κόμβων –τόσο στο χώρο όσο και στο χρόνο– συνεισφέρει στην ύπαρξη επιπλέον πηγής σφάλματος.

- ii. Προγραμματισμού/Λάθη λογισμικού
- iii. Χρήστη

Μια πιθανή ανεπάρκεια σε ένα μοντέλο ή προσομοίωση CFD, η οποία οφείλεται σε έλλειψη γνώσης, ονομάζεται αβεβαιότητα. Οι κύριες πηγές αβεβαιότητας είναι οι ακόλουθες:

i. Φυσικού μοντέλου

Είναι αποτέλεσμα ανεπαρκούς αναπαράστασης φυσικών ή χημικών διαδικασιών (π.χ. τύρβη, καύση) ή λόγω απλοποιητικών παραδοχών κατά τη μοντελοποίηση (π.χ. ασυμπίεστη ροή, μόνιμη ροή).

ii. Εισόδου δεδομένων

Αποτελούν συνέπεια των ανακρίβειών λόγω περιορισμένων πληροφοριών ή της προσεγγιστικής αναπαράστασης της γεωμετρίας, των οριακών συνθηκών, των ιδιοτήτων των υλικών κ.λπ.

2.3. Δομή κώδικα CFD

Οι περισσότεροι σύγχρονοι κώδικες CFD περιλαμβάνουν τα ακόλουθα τρία κύρια στοιχεία [7]:

- i. Προ-επεξεργαστή (pre-processor)
- ii. Επιλύτη (solver)
- iii. Μετα-επεξεργαστή (post-processor)

Αρχικά, η φάση της προεπεξεργασίας περιλαμβάνει τις προκαταρκτικές ενέργειες του χρήστη: ορισμό της γεωμετρίας, υποδιαίρεση του χώρου σε κελιά και παραγωγή του πλέγματος, επιλογή των φυσικών και χημικών φαινομένων προς μοντελοποίηση, ορισμό των ιδιοτήτων των ρευστών και προσδιορισμό των απαραίτητων λειτουργικών οριακών (και αρχικών) συνθηκών.

Έπειτα, ακολουθεί η επίλυση με βάση την αριθμητική τεχνική που υλοποιεί το εκάστοτε πρόγραμμα: πεπερασμένων διαφορών, πεπερασμένων στοιχείων ή πεπερασμένων όγκων. Για την τελευταία ακολουθεί αναλυτικότερη περιγραφή του κάθε σταδίου στην επόμενη ενότητα.

Το τελικό στάδιο είναι η επεξεργασία των αποτελεσμάτων και η παρουσίαση τους με εύληπτο και σαφή τρόπο. Για το σκοπό αυτό διατίθενται πλέον εξαιρετικές γραφικές δυνατότητες από την πλειοψηφία των λογισμικών CFD, όπως: διανυσματικά γραφήματα, διαγράμματα ισοϋψών, προσομοίωση τροχιών σωματιδίων κ.ά.

2.4. Μέθοδος πεπερασμένων όγκων

Μια ευρέως χρησιμοποιούμενη μέθοδος για την επίλυση των μακροσκοπικών εξισώσεων ροής ρευστού, την οποία εφαρμόζει και ο Fluent, είναι αυτή των πεπερασμένων όγκων. Τα βήματα που συνιστούν την μέθοδο είναι τα εξής:

- i. Ολοκλήρωση των εξισώσεων που διέπουν τη ροή του ρευστού σε όλους τους πεπερασμένους όγκους ελέγχου.
- ii. Διακριτοποίηση - μετατροπή των προκυπτουσών ολοκληρωτικών εξισώσεων σε σύστημα αλγεβρικών εξισώσεων.
- iii. Επίλυση των αλγεβρικών εξισώσεων μέσω επαναληπτικών μεθόδων.

Η συντηρητική μορφή της γενικής εξίσωσης διατήρησης (ή μεταφοράς) τυχαίας εκτατικής ιδιότητας φαίνεται παρακάτω:

$$\frac{\partial(\rho\varphi)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho\varphi\mathbf{u}) = \nabla \cdot (\Gamma_\varphi \nabla\varphi) + S_\varphi \quad (2.1)$$

όπου φ είναι η εκάστοτε ιδιότητα, t είναι ο χρόνος, ρ η πυκνότητα, \mathbf{u} η ταχύτητα, Γ_φ ο (μακροσκοπικός) συντελεστής μεταφοράς και S_φ η παραγωγή/κατανάλωση της ιδιότητας. Στο αριστερό μέλος ο πρώτος όρος είναι ο μεταβατικός, ο δεύτερος ο όρος συναγωγής, ενώ στο δεξί μέλος βρίσκονται οι όροι διάχυσης και πηγής. Η ολοκλήρωση της εξίσωσης 2.1 σε κάθε όγκο ελέγχου δίνει:

$$\int_V \frac{\partial(\rho\varphi)}{\partial t} dV + \int_V \nabla \cdot (\rho\varphi\mathbf{u}) dV = \int_V \nabla \cdot (\Gamma_\varphi \nabla\varphi) dV + \int_V S_\varphi dV \quad (2.2)$$

Το θεώρημα απόκλισης (του Gauss) αποδεικνύει ότι:

$$\int_V \nabla \cdot \mathbf{F} dV = \oint_A \mathbf{F} \cdot \mathbf{n} dA \quad (2.3)$$

όπου \mathbf{F} ένα συνεχές (διαφορίσιμο) διανυσματικό πεδίο, A το σύνορο του όγκου ελέγχου V ($A=\partial V$) και \mathbf{n} το μοναδιαίο διάνυσμα κατά τη διεύθυνση της εξωτερικής καθέτου στην επιφάνεια S . Έτσι, η εξίσωση 2.2 μέσω της 2.3 γίνεται:

$$\int_V \frac{\partial(\rho\varphi)}{\partial t} dV + \oint_A \rho\varphi\mathbf{u} \cdot \mathbf{n} dA = \oint_A \Gamma_\varphi \nabla\varphi \cdot \mathbf{n} dA + \int_V S_\varphi dV \quad (2.4)$$

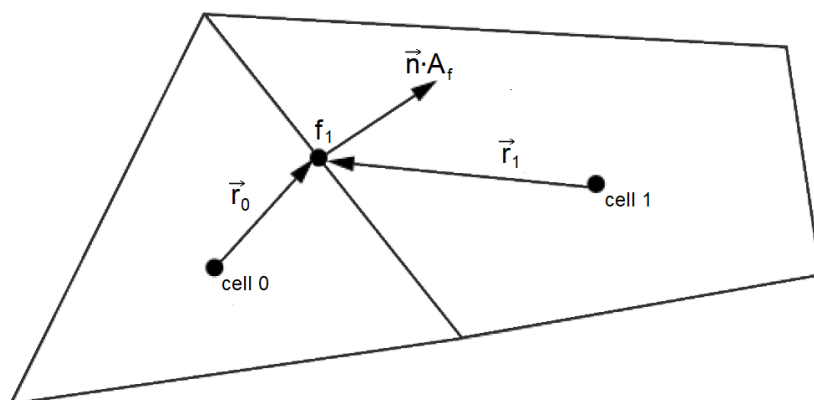
Ολοκληρώνεται ο πρώτος και ο τελευταίος όρος:

$$\frac{\partial(\rho\varphi)}{\partial t} V_c + \oint_A \rho\varphi\mathbf{u} \cdot \mathbf{n} dA = \oint_A \Gamma_\varphi \nabla\varphi \cdot \mathbf{n} dA + S_\varphi V_c \quad (2.5)$$

όπου V_c ο όγκος του κελιού. Η διακριτοποίηση της τελευταίας εξίσωσης σε ένα τυχαίο κελί δίνει:

$$\frac{\partial(\rho\varphi)}{\partial t} V + \sum_{f=1}^{N_f} \rho_f \varphi_f \mathbf{u}_f \cdot \mathbf{n}_f A_f = \sum_{f=1}^{N_f} \Gamma_\varphi \nabla\varphi_f \cdot \mathbf{n}_f A_f + S_\varphi V \quad (2.6)$$

όπου f οι πλευρές (faces) και N_f το πλήθος αυτών στο εκάστοτε κελί.



Εικόνα 2.2 Όγκος ελέγχου (κελί) στις 2 διαστάσεις, με απεικόνιση της διαδικασίας διακριτοποίησης.

Η μέθοδος των πεπερασμένων όγκων αποθηκεύει την τιμή των μεταβλητών στα κέντρα των κελιών. Όμως, ο δύο μεσαίοι της εξίσωσης 2.6 απαιτούν την εύρεση των τιμών στα σύνορα/πλευρές του κάθε κελιού. Για τον λόγο αυτό έχουν αναπτυχθεί ποικίλες μέθοδοι χωρικής διακριτοποίησης, τόσο για τον υπολογισμό του όρου συναγωγής (2^{ος} όρος) όσο και των βαθμίδων των μεταβλητών (3^{ος} όρος), οι οποίες αναπτύσσονται διεξοδικά στη βιβλιογραφία [9].

Τέλος, για τη διακριτοποίηση του χρόνου, δηλαδή του μεταβατικού όρου, υπάρχουν επίσης διάφορες επιλογές. Μια γενική έκφραση για την εξέλιξη της μεταβλητής φ είναι:

$$\frac{\partial\varphi}{\partial t} = G(\varphi) \quad (2.7)$$

όπου η συνάρτηση G ενσωματώνει οποιαδήποτε χωρική διακριτοποίηση.

Συνήθως, η διακριτοποίηση είναι 1^{ης} ή 2^{ης} τάξης, με βάση τον αριθμό των περασμένων χρονικών στιγμών που λαμβάνονται υπ' όψη για την εύρεση της τρέχουσας τιμής της μεταβλητής. Επίσης, χαρακτηρίζεται έμμεση (implicit) ή άμεση (explicit), ανάλογα με το αν η G εκτιμάται στην παρούσα ή την προηγούμενη στιγμή, αντίστοιχα. Παραδείγματος χάριν, η περίπτωση της έμμεσης διακριτοποίησης πρώτης τάξης περιγράφεται από την έκφραση:

$$\frac{\partial \varphi}{\partial t} = \frac{\varphi^n - \varphi^{n-1}}{\Delta t} = G(\varphi^n) \quad (2.8)$$

όπου φ^n η ζητούμενη τιμή της ιδιότητας την τρέχουσα χρονική στιγμή, φ^{n-1} η τιμή την προηγούμενη χρονική στιγμή και Δt το χρονικό βήμα.

2.5. Αλγόριθμοι επίλυσης

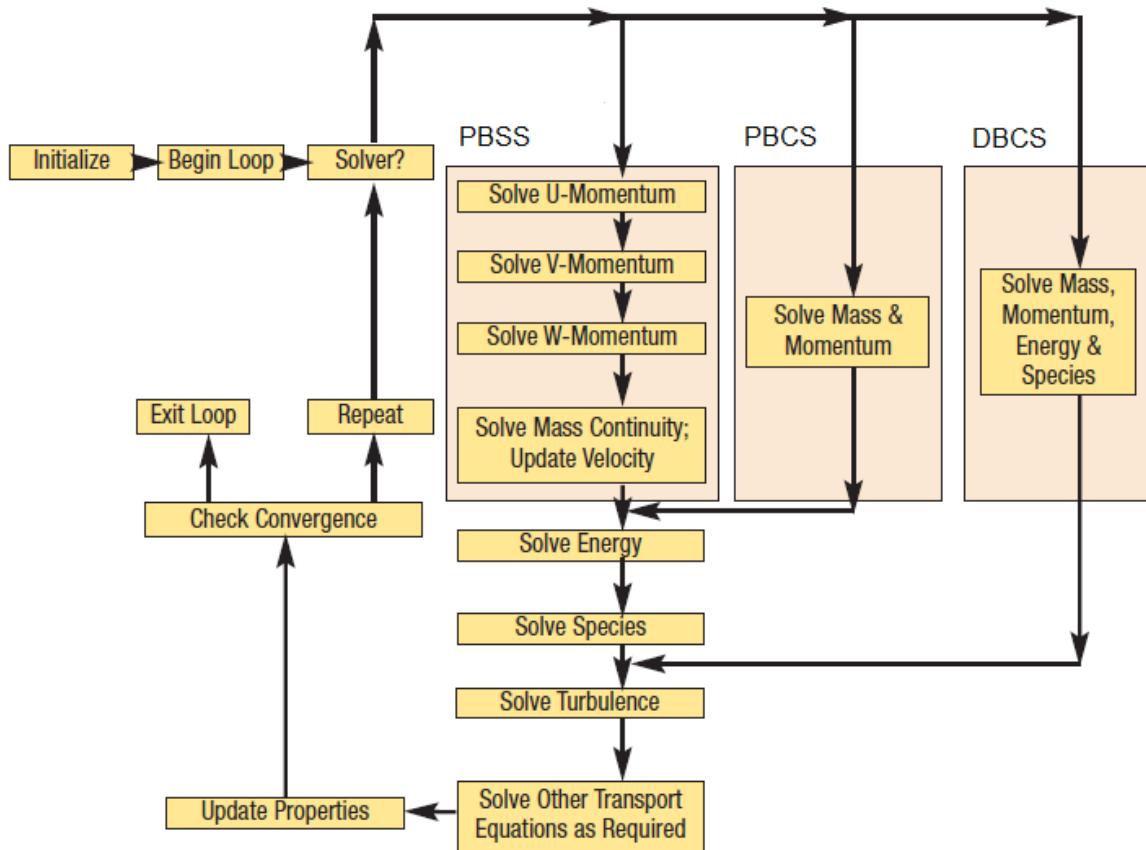
Οι εξισώσεις μεταφοράς (εξ 3.1-3.10) αφού διακριτοποιηθούν στο χώρο και το χρόνο, καταλήγουν σε ένα σύστημα μη γραμμικών, πολυωνυμικών εξισώσεων πολλών μεταβλητών, οπότε απαιτείται μια μέθοδος αριθμητικής επίλυσης. Ο Fluent διαθέτει 3 βασικούς αλγορίθμους επίλυσης προβλημάτων υπολογιστικής ρευστοδυναμικής [10]:

- Διαχωρισμένο επιλύτη βάσει της πίεσης (pressure-based segregated solver – PBSS).
- Συζευγμένο επιλύτη βάσει της πίεσης (pressure-based coupled solver – PBCS).
- Συζευγμένο επιλύτη βάσει της πυκνότητας (density-based coupled solver – DBCS).

Ο διαχωρισμένος επιλύτης χαρακτηρίζεται από την ξεχωριστή, διαδοχική επίλυση όλων των εξισώσεων μεταφοράς. Γενικά, έχει αποδειχθεί εύρωστος και ευέλικτος στην εφαρμογή και έχει υλοποιηθεί επιτυχώς σε μια ευρεία γκάμα απαιτητικών φυσικών μοντέλων, όπως περιπτώσεις πολυφασικής ροής, σύνθετα προβλήματα μεταφοράς θερμότητας και θαλάμους καύσης. Παρ' όλα αυτά, υπάρχουν εφαρμογές στις οποίες ο ρυθμός σύγκλισης του συγκεκριμένου αλγορίθμου δεν είναι ικανοποιητικός, π.χ. ροές με περιστρεφόμενα μέρη ή στο εσωτερικό σύνθετων γεωμετριών, όπου η αλληλεξάρτηση μεταξύ πίεσης και ταχύτητας είναι ισχυρή.

Σε τέτοιες περιπτώσεις προτιμάται ο συζευγμένος επιλύτης βάσει της πίεσης, που λύνει ταυτόχρονα τις εξισώσεις Navier–Stokes (εξ. 3.1-3.2) και εν συνεχεία τις υπόλοιπες με διαδοχικό τρόπο. Είναι γεγονός ότι ο συζευγμένος επιλύτης απαιτεί αρκετά περισσότερους υπολογιστικούς πόρους από τον διαχωρισμένο, αφού γενικά δεσμεύει 50-100 % παραπάνω μνήμη ανά υπολογιστικό κελί. Από την άλλη πλευρά, παρουσιάζει ταχύτερη σύγκλιση χωρίς ταλαντώσεις καθώς και βελτιωμένη ευρωστία και για αυτό χρησιμοποιείται σε μεγάλο εύρος φυσικών μοντέλων. Τυπικά παραδείγματα αποτελούν ασυμπίεστες ή συμπιεστές ροές χαμηλής ταχύτητας με αντιδράσεις, πορώδη υλικά, πολυφασικά μοντέλα κ.ά.

Ο τρίτος διαθέσιμος αλγόριθμος είναι του συζευγμένου επιλύτη βάσει της πυκνότητας Αυτός λύνει ταυτόχρονα ταχύτητα, πίεση, θερμοκρασία και συγκέντρωση χημικών ειδών (εξ. 3.1-3.7) και έπειτα την τύρβη (εάν υπάρχει) και τις υπόλοιπες εξισώσεις μεταφοράς. Όπως είναι λογικό, η σύζευξη επιπλέον εξισώσεων οδηγεί σε ακόμα μεγαλύτερες ανάγκες μνήμης ανά αριθμητική επανάληψη συγκριτικά με τον PBCS. Ο συγκεκριμένος αλγόριθμος επιλέγεται σε συμπιεστές ροές υψηλών ταχυτήτων, όπου είναι απαραίτητη η σύζευξη της εξίσωσης ενέργειας με τις αντίστοιχες διατήρησης και ορμής προκειμένου οι λύσεις να είναι ρεαλιστικές και ακριβείς.



Σχήμα 2.1 Διάγραμμα ροής των κύριων επαναληπτικών αλγορίθμων αλγεβρικής επίλυσης του Fluent.

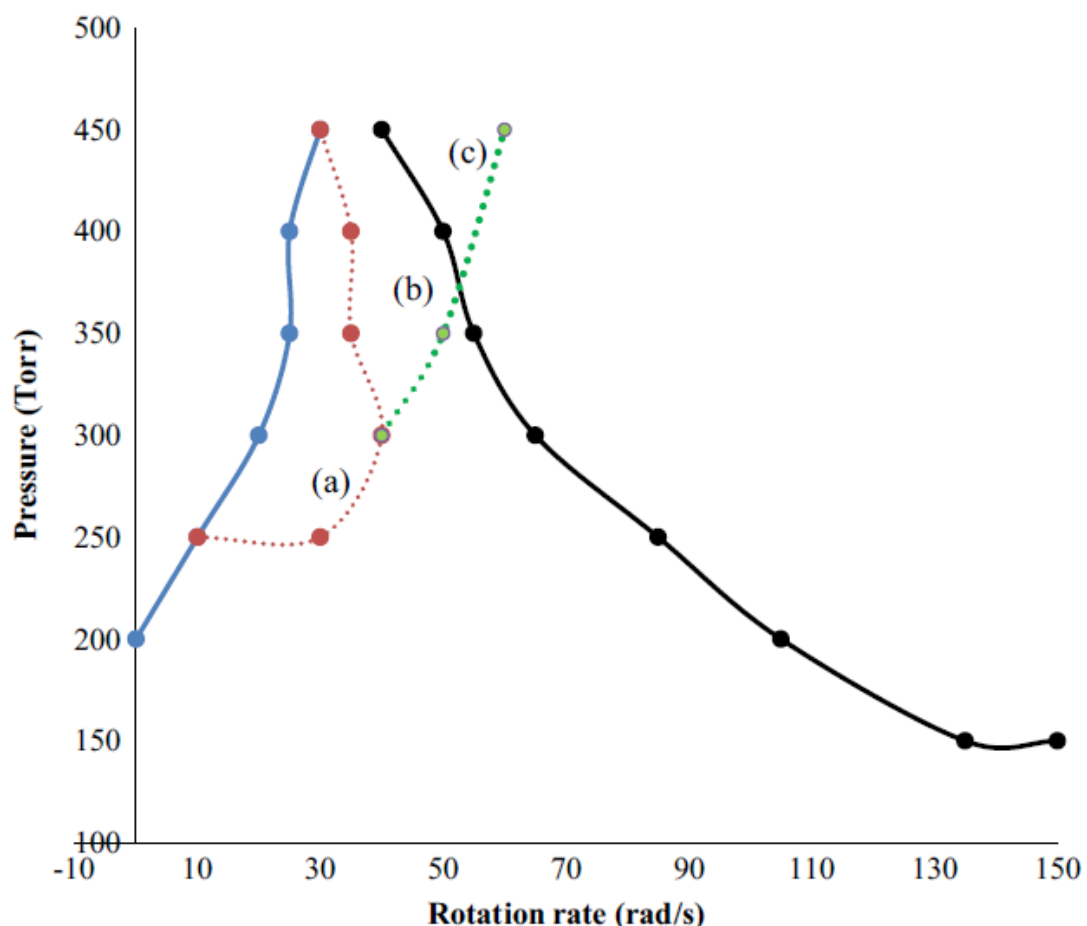
2.6. Πολλαπλότητα & Ρήξη συμμετρίας

Λόγω της μη γραμμικής φύσης των εξισώσεων ροής, είναι αδύνατη –βάσει των υπάρχοντων μαθηματικών εργαλείων και τεχνικών– η εκ των προτέρων εξαγωγή βέβαιων συμπερασμάτων σχετικά με την μοναδικότητα ή πολυπλοκότητα της λύσης σε προβλήματα ρευστοδυναμικής. Δηλαδή, για ακριβώς τις ίδιες συνθήκες λειτουργίες μπορεί να προκύπτουν λύσεις με εντελώς διαφορετικά πεδία ροής μέσα στον αντιδραστήρα, τα οποία μάλιστα είναι πειραματικά παρατηρήσιμα.

Ένα χαρακτηριστικό παράδειγμα όπου συνυπάρχουν πολλαπλές ευσταθείς (και ασταθείς) λύσεις είναι οι ροές συνδυασμένης φυσικής και εξαναγκασμένης συναγωγής, όπως ακριβώς συμβαίνει στον παρόντα αντιδραστήρα ΧΑΑ. Σε αυτές τις περιπτώσεις, τόσο το πεδίο ροής όσο και το παραγόμενο φιλμ μπορεί να διαφέρουν δραματικά, ανάλογα με το ποιος από τους παραπάνω δύο μηχανισμούς επικρατεί [11].

Για τον ίδιο λόγο, δηλαδή ότι η φύση των αλληλοεπιδρώντων μηχανισμών σε ένα πρόβλημα ροής είναι μη γραμμική, ενδέχεται να υπάρχουν πολλαπλές ευσταθείς λύσεις σε αξονοσυμμετρικές γεωμετρίες. Με άλλα λόγια, σε τέτοια συστήματα δεν είναι δυνατή η εκ των προτέρων γνώση του εάν η ροή θα είναι συμμετρική ή τρισδιάστατη (μη συμμετρική).

Αξιόλογη χαρτογράφηση και ανάλυση της πολλαπλότητας του πεδίου ροής για το αντίστοιχο αξονοσυμμετρικό δισδιάστατο πρόβλημα (στον ίδιο αντιδραστήρα και συνθήκες) παρήγαγε το ακόλουθο ενδιαφέρον διάγραμμα [6]:



Σχήμα 2.2 Διάγραμμα πίεσης-ρυθμού περιστροφής, με τη μέθοδο βηματισμού παραμέτρου. Μπλε γραμμή: σύνορο μεταξύ περιοδικής ροής άνωσης και εμβολικής ροής. Μαύρη γραμμή: σύνορο μεταξύ εμβολικής ροής και ροής επηρεαζόμενης από την περιστροφή. Περιοχή: (a) Συνύπαρξη εμβολικής ροής με ροές περιοδικές (b) Συνύπαρξη εμβολικής ροής με μόνιμη ροή επηρεαζόμενη από την άνωση (c) Συνύπαρξη ροής επηρεαζόμενης από την περιστροφή με συνδυασμένη ροή άνωσης & περιστροφής [6].

Δυστυχώς, η συχνή αυτή πρακτική της μοντελοποίησης αξονοσυμμετρικών συστημάτων στις δύο διαστάσεις με επίλυση των συμμετρικών εξισώσεων ροής περιορίζει εξ' ορισμού τα

αποτελέσματα, ώστε δεν είναι δυνατή απόκλιση από την απόλυτη συμμετρία. Συνεπώς, η μεταφορά του προβλήματος στις τρεις διαστάσεις είναι μονόδρομος προκειμένου να καθίσταται δυνατή η ενδεχόμενη ανάπτυξη ασύμμετρων πεδίων ροής, με το όποιο υπολογιστικό κόστος αυτή η ενέργεια συνεπάγεται.

Στην πράξη, μια αξονοσυμμετρική γεωμετρία με αντίστοιχες συνοριακές συνθήκες δεν εξασφαλίζει τη συμμετρία της ροής. Δηλαδή, σε συμμετρικό αντιδραστήρα είναι δυνατή η ύπαρξη τόσο ευσταθούς συμμετρικού όσο και μη-συμμετρικού πεδίου ροής, για τις ίδιες λειτουργικές συνθήκες. Μάλιστα, η μετάβαση από το πρώτο στο δεύτερο –ή αλλιώς η ρήξη της συμμετρίας– απαιτεί μόνο μια προσωρινή επιβολή μη-συμμετρικών συνοριακών συνθηκών [12]. Ακόμα, σε υπάρχουσες μελέτες συμμετρικών αντιδραστήρων εικάζεται ότι μια μόνιμη ευσταθής μη-αξονοσυμμετρική λύση συνοδεύεται πάντα από αντίστοιχη αξονοσυμμετρική [13].

Ανάλογα με το επιθυμητό αποτέλεσμα, υπάρχουν διάφοροι παράγοντες που ενισχύουν ή αποδυναμώνουν την ύπαρξη αξονικής συμμετρίας στη ροή. Όσον αφορά στον μελετώμενο αντιδραστήρα ΧΑΑ, η ανάπτυξη μη-συμμετρικών ροών αποδίδεται στους φυσικούς μηχανισμούς άνωσης. Για την αντιμετώπιση του φαινομένου αυτού εφαρμόζεται περιστροφή του υποστρώματος, η οποία αναμένεται να έχει σταθεροποιητικό ρόλο. Παρ' όλα αυτά, εάν η περιστροφή δεν είναι επαρκώς γρήγορη ώστε να κατασταλεί η τρισδιάστατη ροή, δεν είναι εγγυημένη η συμμετρία. Μάλιστα, έχει βρεθεί πως το αποτέλεσμα της περιστροφής του υποστρώματος σε χαμηλές ταχύτητες είναι η περιφορά της ασυμμετρίας με σταθερή συχνότητα γύρω από τον κατακόρυφο άξονα [13].

Τέλος, γεννάται το ακόλουθο κρίσιμο ερώτημα: είναι μια «λίγο-πολύ» συμμετρική εκκίνηση του αντιδραστήρα ικανή συνθήκη για την διατήρηση της συμμετρίας ή μικρές διαταραχές μπορούν να οδηγήσουν σε ρήξη αυτής; Το ερώτημα αυτό χρήζει προχωρημένων υπολογιστικών τεχνικών ανάλυσης ευστάθειας μη γραμμικών συστημάτων για να απαντηθεί, οι οποίες είναι πέραν των βλέψεων της παρούσας εργασίας. Πάντως, υποστηρίζεται πως εφ' όσον η ροή χάσει τη συμμετρία της, η επαναφορά της σε αξονοσυμμετρική είναι αδύνατη χωρίς αλλαγή των λειτουργικών συνθηκών [13].

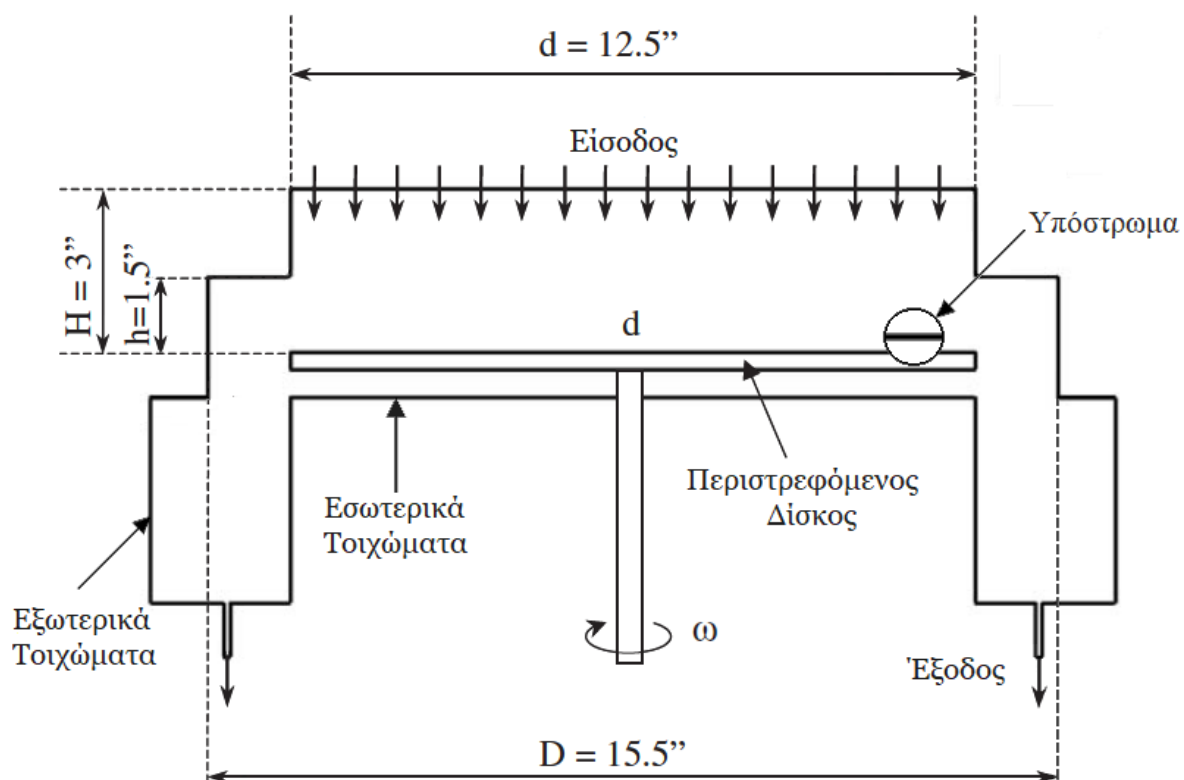
3. ΜΑΘΗΜΑΤΙΚΗ ΜΟΝΤΕΛΟΠΟΙΗΣΗ

3.1. Αντιδραστήρας

Στην εργασία αυτή μοντελοποιείται ένας αξονοσυμμετρικός και κατακόρυφος αντιδραστήρας, με περιστρεφόμενο υπόστρωμα. Όπως έχει ήδη αναφερθεί, η συνολική μοντελοποίηση του βασίζεται στον πρότυπο εμπορικό αντιδραστήρα οργανομεταλλικής χημικής απόθεσης από ατμό, E300GaN Veeco Turbodisc, ο οποίος χρησιμοποιείται συχνά στην βιομηχανία για παραγωγή υμενίων από τριμεθυλο-γάλλιο (GaN).

Γεωμετρία

Το αέριο μίγμα εισέρχεται αξονικά από ένα κυλινδρικό στόμιο με διάμετρο 12.5'' (31.75 cm). Σε απόσταση 1.5'' (3.81 cm) από την είσοδο η διάμετρος του αντιδραστήρα αυξάνεται και γίνεται ίση με 15.5'' (39.37 cm). Το οριζόντιο υπόστρωμα, δηλαδή η άνω επιφάνεια του δισκίου, απέχει 3'' (7.62 cm) από την είσοδο και έχει διάμετρο ίση με αυτή. Μετά το περιστρεφόμενο δισκίο το αέριο διέρχεται από ένα πλατύτερο πλευρικό τμήμα και τελικά εξέρχεται με ταχύτητα από το στενό δακτύλιο εξόδου.



Σχήμα 3.1: Κάθετη διατομή του υπό μελέτη αντιδραστήρα XAA, με σημειωμένες τις σημαντικές διαστάσεις.

Συνθήκες λειτουργίας

Οι συνθήκες λειτουργίας του αντιδραστήρα καθορίζονται με βάση τη βιβλιογραφία [5].

Συγκεκριμένα, η μαζική παροχή είναι 140 slm ($T_{st}=20$ °C, μετά από επικοινωνία με τους συγγραφείς) και αποτελείται από τα αέρια GaMe₃, H₂, N₂ και NH₃, με σύσταση 1×10^{-4} % κατά μάζα τριμεθυλο-γάλλιο και λόγο ογκομετρικών τροφοδοσιών των υπολοίπων $Q_{H_2}/Q_{N_2}/Q_{NH_3} = 4/1/2$. Η θερμοκρασία του υποστρώματος και του δίσκου είναι 1323 K. Το εισερχόμενο αέριο μίγμα καθώς και τα ψυχόμενα τοιχώματα βρίσκονται σταθερά στη θερμοκρασία των 323 K. Στην παρούσα ανάλυση ο αντιδραστήρας προσομοιώνεται σε πίεση λειτουργίας 250-400 Torr και γωνιακή ταχύτητα του δίσκου 20-80 rad/s.

Παραδοχές Μοντέλου

Για τις συνθήκες λειτουργίας του αντιδραστήρα προκύπτει ότι η διεργασία ελέγχεται από τα φαινόμενα μεταφοράς μάζας, ενώ εικάζεται ότι η παρουσία αντιδράσεων πρακτικά δεν επηρεάζει τη ροή, δηλαδή τα πεδία ταχύτητας και θερμοκρασίας με ή χωρίς παρουσία αντιδράσεων διαφέρουν ελάχιστα μεταξύ τους [6]. Στα πλαίσια της παρούσας ανάλυσης μοντελοποιείται μόνο η ροή της διεργασίας, ενώ παραβλέπεται εξ' ολοκλήρου η χημεία των αντιδράσεων. Επίσης, σε όλες τις προσομοιώσεις θεωρείται πως η ροή είναι στρωτή και δεν αναπτύσσεται τύρβη. Η εγκυρότητα αυτής της υπόθεσης ελέγχεται στην παράγραφο 3.7. Ακόμα, η θερμική ακτινοβολία θεωρείται αμελητέα και δε λαμβάνεται υπ' όψη.

3.2. Εξισώσεις

Με βάση τις προαναφερθείσες παραδοχές καταστρώνονται οι ισχύουσες διαφορικές εξισώσεις στον αντιδραστήρα, οι οποίες και παρουσιάζονται αναλυτικά παρακάτω [7] [9]:

a) Εξίσωση διατήρησης μάζας (ή εξίσωση συνέχειας):

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u}) = 0 \quad (3.1)$$

όπου t είναι ο χρόνος, ρ η πυκνότητα και \mathbf{u} η ταχύτητα.

b) Εξίσωση διατήρησης ορμής:

$$\frac{\partial (\rho \mathbf{u})}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u} \mathbf{u}) = -\nabla p + \nabla \cdot \bar{\bar{\tau}} + \rho \mathbf{g} \quad (3.2)$$

όπου p η πίεση, $\bar{\bar{\tau}}$ ο τανυστής ιξώδους τάσης και \mathbf{g} η επιτάχυνση της βαρύτητας. Ο δυαδικός τανυστής τάσεων είναι:

$$\bar{\bar{\tau}} = \mu \left[(\nabla \mathbf{u} + \nabla \mathbf{u}^T) - \frac{2}{3} \nabla \cdot \mathbf{u} \bar{\bar{I}} \right] \quad (3.3)$$

όπου μ το ιξώδες και $\bar{\bar{I}}$ ο μοναδιαίος τανυστής.

c) Εξίσωση διατήρησης ενέργειας:

$$\frac{\partial (\rho e)}{\partial t} + \nabla \cdot ((\rho e + p) \mathbf{u}) = \nabla \cdot \left(k \nabla T - \sum_i h_i \mathbf{J}_i \right) + S_e \quad (3.4)$$

όπου e η ανηγμένη εσωτερική ενέργεια, k η θερμική αγωγιμότητα, T η απόλυτη θερμοκρασία, h_i η ανηγμένη ενθαλπία του συστατικού i , J_i η ροή μάζας λόγω διάχυσης (diffusion flux) και S_e ο όρος πηγής. Για την ανηγμένη ενθαλπία ισχύουν οι σχέσεις:

$$h_i = \int_{T_{\text{ref}}}^T c_{p,i} dT \quad \text{και} \quad h = \sum_i Y_i h_i \quad (3.5)$$

όπου c_p είναι η ειδική θερμοχωρητικότητα υπό σταθερή πίεση, T_{ref} η θερμοκρασία αναφοράς και Y_i το κλάσμα μάζας του εκάστοτε συστατικού.

Για την ανηγμένη εσωτερική ενέργεια ισχύει η εξίσωση:

$$e = h - \frac{p}{\rho} + \frac{|\mathbf{u}|^2}{2} \quad (3.6)$$

d) Εξίσωση μεταφοράς χημικών συστατικών:

$$\frac{\partial(\rho Y_i)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u} Y_i) = -\nabla \cdot \mathbf{J}_i + R_i \quad (3.7)$$

όπου R_i ο καθαρός ρυθμός παραγωγής/κατανάλωσης λόγω αντίδρασης. Στην παρούσα εργασία αγνοείται η χημεία των αντιδράσεων, οπότε ο τελευταίος όρος είναι παντού μηδενικός.

Για τη μοντελοποίηση της διάχυσης μάζας χρησιμοποιείται η προσέγγιση αραιού μίγματος – δηλαδή ο νόμος του Fick– με ενσωματωμένη την επίδραση του φαινομένου Soret. Επομένως, η ροή λόγω διάχυσης προκύπτει εξ' αιτίας της παρουσίας τόσο βαθμίδων συγκέντρωσης όσο και θερμοκρασίας και γράφεται ως:

$$\mathbf{J}_i = -\rho D_{i,m} \nabla Y_i - D_{i,T} \frac{\nabla T}{T} \quad (3.8)$$

όπου $D_{i,m}$ ο μαζικός συντελεστής διάχυσης μάζας και $D_{i,T}$ ο θερμικός συντελεστής διάχυσης μάζας (Soret coefficient) του συστατικού i .

Έστω ένα αέριο μίγμα αποτελούμενο από N συστατικά, το οποίο κινείται στις τρεις διαστάσεις (3-D). Η κίνηση του περιγράφεται από ένα σύστημα $4+N$ μερικών διαφορικών εξισώσεων: εξίσωση διατήρηση μάζας, x -, y -, z -ορμής, ενέργειας, συν $N-1$ εξισώσεις χημικών ειδών (αφού το άθροισμα των κλασμάτων τους ισούται με τη μονάδα). Από την άλλη μεριά, οι άγνωστοι αποτελούνται από $6+N$ μεταβλητές στο σύνολο. Εκτός από τις τρεις συνιστώσες της ταχύτητας \mathbf{u} και τα $N-1$ άγνωστα χημικά συστατικά, στους αγνώστους ανήκουν και οι εξής τέσσερις θερμοδυναμικές μεταβλητές: η πυκνότητα ρ , η πίεση p , η εσωτερική ενέργεια e και η θερμοκρασία T . Προφανώς, ένα τέτοιο πρόβλημα δεν είναι δυνατό να επιλυθεί, αφού δεν είναι επαρκώς ορισμένο· απαιτούνται ακόμα 2 εξισώσεις.

Οι αναγκαίες επιπρόσθετες σχέσεις μεταξύ των παραπάνω μεταβλητών μπορούν να εξαχθούν μέσω της υπόθεσης ότι επικρατεί θερμοδυναμική ισορροπία. Συγκεκριμένα, ακόμα και για μεγάλες ταχύτητες ρευστού ή απότομες μεταβολές των ιδιοτήτων των

σωματιδίων κατά μήκος της ροής, το ρευστό προσαρμόζεται θερμοδυναμικά στις νέες συνθήκες ουσιαστικά ακαριαία. Συνεπώς, με εξαίρεση κάποιες ροές όπου αναπτύσσονται ισχυρά ωστικά κύματα (shock waves), είναι πολύ ικανοποιητική η παραδοχή πως το ρευστό παραμένει πάντα σε θερμοδυναμική ισορροπία [7].

Στην θερμοδυναμική ισορροπία είναι δυνατή η καθολική περιγραφή της κατάστασης ενός ρευστού συναρτήσει μόνο 2 μεταβλητών κατάστασης. Τέτοιες εξισώσεις, οι οποίες συσχετίζουν τις μεταβλητές του ρευστού σε ισορροπία, ονομάζονται καταστατικές.

Στις συνθήκες κενού και υψηλών θερμοκρασιών όπου λειτουργεί ο αντιδραστήρας είναι πολύ ικανοποιητική η θεώρηση του ρευστού ως τέλειο αέριο και για αυτό χρησιμοποιούνται οι αντίστοιχες καταστατικές εξισώσεις.

e) Καταστατικές εξισώσεις ιδανικού αερίου:

$$\rho = \frac{pM}{RT} \quad (3.9)$$

όπου p η πίεση λειτουργίας του αντιδραστήρα, M το μοριακό βάρος του αερίου, R η παγκόσμια σταθερά των αερίων και:

$$e = c_V T \quad (3.10)$$

όπου c_V η ειδική θερμοχωρητικότητα υπό σταθερό όγκο.

3.3. Συνοριακές & αρχικές συνθήκες

Οι χρησιμοποιούμενες συνοριακές συνθήκες για την επίλυση των παραπάνω διαφορικών εξισώσεων είναι οι εξής [5] [14]:

a) Είσοδος

Το αέριο μείγμα εισέρχεται στον αντιδραστήρα με μαζική παροχή ίση με 140 slm. Η ταχύτητα έχει ομοιόμορφο προφίλ και μοναδική συνιστώσα κατά την αξονική διεύθυνση:

$$u_{in} = \frac{4\dot{m}}{\pi D^2 \rho_{in}} \quad (3.11)$$

όπου \dot{m} η μαζική παροχή, π η σταθερά του Αρχιμήδη, D η διάμετρος εισόδου και ρ_{in} η πυκνότητα εισόδου. Η θερμοκρασία εισόδου είναι:

$$T_{in} = 323 \text{ K} \quad (3.12)$$

Η κατά μάζα σύσταση του μίγματος είναι $x_{H_2} = 11.50 \%$, $x_{N_2} = 39.94 \%$, $x_{NH_3} = 48.56 \%$. Επίσης, υπάρχει μια ελάχιστη ποσότητα τριμεθυλο-γαλλίου, το οποίο αποτελεί την πρόδρομη ουσία (precursor), με κλάσμα $x_{GAMe_3} = 1 \times 10^{-6}$.

Μετά τους απαραίτητους υπολογισμούς προκύπτει ότι η μαζική παροχή σε μονάδες S.I. ισούται με $9.5 \times 10^{-4} \text{ kg/s}$.

b) Έξοδος

Στην έξοδο του αντιδραστήρα θεωρείται πως η ροή είναι πλήρως ανεπτυγμένη (outflow), δηλαδή το προφίλ όλων των μεταβλητών είναι αμετάβλητο στην κατεύθυνση της ροής:

$$\nabla\varphi \cdot \mathbf{n} = 0 \quad (3.13)$$

ή αναλυτικά

$$\nabla\mathbf{u} \cdot \mathbf{n} = \mathbf{0} \quad (3.14)$$

$$\nabla T \cdot \mathbf{n} = 0 \quad (3.15)$$

$$\nabla c \cdot \mathbf{n} = 0 \quad (3.16)$$

όπου \mathbf{n} το μοναδιαίο, κάθετο στην επιφάνεια διάνυσμα και c η συγκέντρωση του εκάστοτε χημικού συστατικού. Η παραπάνω συνθήκη προτιμάται σε σχέση με την αντίστοιχη μηδενικής πίεσης αναφοράς, καθώς για την συγκεκριμένη γεωμετρία δίνει πρακτικά ίδια αποτελέσματα (στην περιοχή ενδιαφέροντος), ενώ παράλληλα δε δημιουργεί προβλήματα απόκλισης στον επιλύτη.

c) Υπόστρωμα – Δίσκος

Στην επιφάνεια του περιστρεφόμενου δίσκου η ταχύτητα είναι μη μηδενική μόνο κατά την εφαπτομενική διεύθυνση. Συγκεκριμένα, ισχύει:

$$u_\theta = \omega r \quad (3.17)$$

όπου ω η γωνιακή ταχύτητα και r η ακτινική απόσταση από τον άξονα περιστροφής. Η θερμοκρασία σε όλο τον δίσκο λαμβάνεται ίση με:

$$T_s = 1323 \text{ K} \quad (3.18)$$

Επίσης, η βαθμίδα συγκέντρωσης των χημικών συστατικών λόγω διάχυσης είναι παντού μηδενική:

$$\nabla c \cdot \mathbf{n} = 0 \quad (3.19)$$

d) Τοιχώματα

Σε όλα τα τοιχώματα του αντιδραστήρα επιβάλλεται η συνθήκη μη ολίσθησης (no-slip condition):

$$\mathbf{u} = \mathbf{0} \quad (3.20)$$

Τα εξωτερικά τοιχώματα είναι ψυχόμενα, με θερμοκρασία:

$$T_c = 323 \text{ K} \quad (3.21)$$

Τα εσωτερικά τοιχώματα –εκτός του δίσκου– θεωρούνται θερμικά μονωμένα, με μηδενική βαθμίδα θερμοκρασίας κάθετα σε αυτά:

$$\nabla T \cdot \mathbf{n} = 0 \quad (3.22)$$

Η βαθμίδα συγκέντρωσης των χημικών συστατικών σε όλα τα τοιχώματα ισούται με μηδέν, όπως ακριβώς συμβαίνει στην επιφάνεια του δίσκου και στο ακροφύσιο εξόδου.

Για την επίλυση των μη μόνιμων εξισώσεων 3.1–3.10 απαιτούνται και αρχικές συνθήκες, ώστε να είναι δυνατή η εκκίνηση της υπολογιστικής διαδικασίας τη χρονική στιγμή $t = 0$. Η απαραίτητη αρχικοποίηση πραγματοποιείται είτε με επίλυση του προβλήματος αρχικά σε μόνιμη κατάσταση ή σε πολλές περιπτώσεις με χρήση των κατανομών που προκύπτουν από τη λύση του προβλήματος σε παρεμφερείς συνθήκες πίεσης και ρυθμού περιστροφής δίσκου (βλ. παράγραφο 3.6) .

3.4. Ιδιότητες ρευστού

Οι ιδιότητες μεταφοράς (transport properties) της ροής, δηλαδή το ιξώδες, η ειδική θερμοχωρητικότητα, η θερμική αγωγιμότητα και οι συντελεστές διάχυσης μάζας, μοντελοποιούνται βάσει της κινητικής θεωρίας των τελείων αερίων. Η κινητική θεωρία βασίζεται σε τρεις παραδοχές [15]:

1. Το αέριο αποτελείται από μόρια μάζας m σε αδιάκοπη τυχαία κίνηση.
2. Το μέγεθος των μορίων είναι αμελητέο, υπό την έννοια ότι οι διάμετροι τους είναι πολύ μικρότερες από τη μέση απόσταση που διανύουν μεταξύ των κρούσεων.
3. Τα μόρια αλληλεπιδρούν μόνο μέσω σύντομων, όχι συχνών, ελαστικών κρούσεων.

Ουσιαστικά, η κινητική θεωρία των αερίων συσχετίζει τους μακροσκοπικούς συντελεστές στις φαινομενολογικές εξισώσεις ροής (1^{ος} όρος στο δεξί μέλος της εξ. 2.1) με τη συνάρτηση διαμοριακού δυναμικού μεταξύ των μορίων στο μικροσκοπικό επίπεδο [16].

Το λογισμικό του Fluent βασίζεται στην εξελιγμένη κινητική θεωρία των Chapman–Enskog. Η τελευταία ενσωματώνει το δυναμικό Lennard–Jones για την περιγραφή των διαμοριακών δυνάμεων:

$$V(r) = 4\varepsilon \left[\left(\frac{\sigma}{r} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r} \right)^6 \right] \quad (3.23)$$

όπου r η διαμοριακή απόσταση, ε η ενεργειακή παράμετρος και σ το χαρακτηριστικό μήκος.

Έτσι, με βάση τα παραπάνω προκύπτει ότι το ιξώδες υπολογίζεται από την εξίσωση:

$$\mu = \frac{5}{16\sigma^2} \left(\frac{k_B M T}{\pi N_A} \right)^{\frac{1}{2}} \frac{1}{\Omega_\mu(T^*)} \quad (3.24)$$

και

$$T^* = \frac{T}{\varepsilon/k_B} \quad (3.25)$$

όπου k_B η σταθερά του Boltzmann, N_A η σταθερά του Avogadro και Ω_μ το ολοκλήρωμα κρούσης (collision integral) για το ιξώδες. Η ειδική θερμοχωρητικότητα (υπό σταθερή πίεση) υπολογίζεται από την σχέση:

$$c_p = \frac{1}{2} \frac{R}{M} (f + 2) \quad (3.26)$$

όπου f οι βαθμοί ελευθερίας του χημικού μορίου. Για τον υπολογισμό της θερμικής αγωγιμότητας χρησιμοποιείται η ημιεμπειρική εξίσωση του Eucken [17]:

$$k = \mu \left(c_p + \frac{5R}{4M} \right) \quad (3.27)$$

Τέλος, οι δυαδικοί συντελεστές διάχυσης μάζας του μίγματος υπολογίζονται μέσω της εξίσωσης Charman-Enskog:

$$D_{ij} = A \frac{\sqrt{T^3 \left(\frac{1}{M_i} + \frac{1}{M_j} \right)}}{p \sigma_{ij}^2 \Omega_D(T^*)} \quad (3.28)$$

και

$$T^* = \frac{T}{\varepsilon_{ij}/k_B} \quad (3.29)$$

όπου A μια ημιεμπειρική σταθερά ίση με $1.88 \times 10^{-3} \text{ atm} \text{Å}^2 \text{cm}^2 \text{g}^{1/2} / (\text{mol}^{1/2} \text{K}^{3/2} \text{s})$ και Ω_D το ολοκλήρωμα κρούσης για το συντελεστή διάχυσης. Οι δυαδικές παράμετροι L-J για κάθε ζεύγος ενώσεων του αέριου μίγματος υπολογίζονται με βάση τον αριθμητικό και γεωμετρικό μέσο:

$$\sigma_{ij} = \frac{\sigma_i + \sigma_j}{2} \quad (3.30)$$

και

$$\varepsilon_{ij} = \sqrt{\varepsilon_i \varepsilon_j} \quad (3.31)$$

Οι χαρακτηριστικές παράμετροι Lennard-Jones για καθένα από τα χημικά συστατικά του μίγματος λήφθηκαν από τη βιβλιογραφία [18] και φαίνονται παρακάτω.

Πίνακας 3.1 Χαρακτηριστικές παράμετροι Lennard-Jones και μοριακά βάρη για τις χημικές ενώσεις του αέριου μίγματος

Χημική Ένωση	Μοριακός τύπος	M (g/mol)	σ (Å)	ε/k_B (K)
Άζωτο	N ₂	28.013	3.621	97.53
Υδρογόνο	H ₂	2.016	2.92	38.0
Αμμωνία	NH _{3(g)}	17.031	2.92	481.0
Τριμεθυλο-γάλλιο	GaMe _{3(g)}	114.825	5.52	378.2

Τέλος, χρειάζεται να καθοριστεί ο τρόπος υπολογισμού των ιδιοτήτων του συνολικού μίγματος, συναρτήσει εκείνων του κάθε συστατικού. Για τον υπολογισμό του ιξώδους, της ειδικής θερμοχωρητικότητας και της θερμικής αγωγιμότητας χρησιμοποιείται ο σταθμισμένος κατά μάζα νόμος ανάμειξης. Για το μαζικό συντελεστή διάχυσης χρησιμοποιείται ο εξής τύπος:

$$D_{i,m} = \frac{1 - X_i}{\sum_{j,i \neq j} \frac{X_j}{D_{ij}}} \quad (3.32)$$

όπου X_i το μολαρικό κλάσμα μάζας του συστατικού. Ο θερμικός συντελεστής μάζας υπολογίζεται από την ακόλουθη εμπειρική έκφραση:

$$D_{i,T} = -2.59 \times 10^{-7} T^{0.659} \left[\frac{M_i^{0.511}}{\sum_{i=1}^N M_i^{0.511} X_i} - Y_i \right] \cdot \left[\frac{\sum_{i=1}^N M_i^{0.511} X_i}{\sum_{i=1}^N M_i^{0.489} X_i} \right] \quad (3.33)$$

Ουσιαστικά, η εξίσωση αυτή προκαλεί τη διάχυση των μορίων προς θερμότερες περιοχές και υποδηλώνει πως ο συντελεστής παρουσιάζει αύξηση καθώς μειώνεται το μοριακό βάρος του συστατικού και αυξάνεται η θερμοκρασία.

3.5. Επίλυση

Η επίλυση του τρισδιάστατου προβλήματος (εξ. 3.1-3.10) γίνεται με χρήση του εμπορικού λογισμικού Fluent, που εφαρμόζει τη μέθοδο των πεπερασμένων όγκων. Τόσο για τη μόνιμη όσο και για τη μεταβατική ροή επιλέγεται ο συζευγμένος επιλύτης βάσει της πίεσης (PBCS).

Χωρική διακριτοποίηση

Για την εύρεση των βαθμίδων στα σύνορα των κελιών χρησιμοποιείται η μέθοδος του Fluent με ονομασία Green-Gauss node based.

Η διακριτοποίηση της πίεσης πραγματοποιείται σε όλες τις περιπτώσεις με τη μέθοδο PRESTO, που είναι η καταλληλότερη για περιστρεφόμενες ροές, καμπύλες γεωμετρίες και περιπτώσεις με σημαντικές δυνάμεις άνωσης.

Όλες οι εξισώσεις μεταφοράς διακριτοποιούνται αρχικά με τη μέθοδο 1^{ης} τάξης για βοήθεια/επιτάχυνση της σύγκλισης της λύσης. Στη συνέχεια, επιλέγεται η μέθοδος MUSCL 3^{ης} τάξης, η οποία συνδυάζει τη μέθοδο κεντρικών διαφορών (central differentiating scheme) με την ανάντη 2^{ης} τάξης (second order upwind) διακριτοποίηση. Η παραπάνω μέθοδος είναι ιδιαίτερα κατάλληλη για τη μείωση της αριθμητικής διάχυσης (numerical diffusion) σε σύνθετες τρισδιάστατες ροές [9].

Χρονική διακριτοποίηση

Όπως αναφέρθηκε ήδη, η προσομοίωση είναι μεταβατική (transient). Σε όλες τις περιπτώσεις το χρονικό βήμα επιλέχθηκε σταθερό, με τιμή $\Delta t = 0.01$ s. Η διακριτοποίηση στο χρόνο επιλέχθηκε να είναι έμμεση και 2^{ου} βαθμού (implicit second-order).

Ο καθορισμός του χρονικού βήματος αποτελεί επίσης ένα κρίσιμο σημείο της προσομοίωσης. Η επιλογή του έγινε με δεδομένο ότι το χρονικό βήμα πρέπει να είναι αρκετά μικρό, ώστε:

- οι υπολογιζόμενες λύσεις στο χρόνο να είναι ακριβείς και
- η συχνότητα δειγματοληψίας ικανοποιητική (βλ. Κεφ. 4).

Ταυτόχρονα, το βήμα πρέπει να είναι επαρκώς μεγάλο με στόχο:

- να αποφεύγεται σπατάλη υπολογιστικών πόρων και

- να τηρείται η συνθήκη CFL.

Για την μη μόνιμη ροή ο κώδικας επιλέγεται να κάνει 20 επαναλήψεις ανά χρονικό βήμα, μέσα στις οποίες τα residuals της εξίσωσης συνέχειας μειώνονται κατά περίπου 10^{-4} και άρα η σύγκλιση θεωρείται ικανοποιητική [9].

Πλέγμα

Κατά την φάση της προεπεξεργασίας πραγματοποιήθηκε η απαραίτητη ανάλυση για την επιλογή του κατάλληλου πλέγματος. Αρχικά, δημιουργήθηκε μη δομημένο πλέγμα αποτελούμενο από τετράπλευρα (tetrahedrons), με σύνολο περίπου 1.6×10^6 κελιά. Στη συνέχεια, παράχθηκε ένα νέο, δομημένο πλέγμα, αποτελούμενο από περίπου 8.3×10^5 τριγωνικά πρίσματα. Το τελευταίο αυτό πλέγμα έχει πυκνωθεί ομοιόμορφα στο χώρο ανάμεσα στην είσοδο και το υπόστρωμα (συγκεκριμένα μέχρι το ύψος των εσωτερικών τοιχωμάτων ακριβώς κάτω από το δισκίο), όπου απαιτείται ακριβής επίλυση, ενώ παράλληλα έχει αραιωθεί αρκετά στο τμήμα του αντιδραστήρα κατόπιν του δισκίου. Έτσι, συνδυάζει την βελτιωμένη ακρίβεια της λύσης στην περιοχή ενδιαφέροντος με την εξοικονόμηση πιθανώς περιττών κελιών στον όγκο από το υπόστρωμα μέχρι την έξοδο, που δεν είναι σημαντικός για το πρόβλημα.

Για την αξιολόγηση του καθενός πλέγματος υπολογίζονται κάποια τυπικά ποσοτικά κριτήρια ποιότητας, όπως η μέγιστη αναλογία απεικόνισης (maximum aspect ratio - AR), η μέγιστη ορθογώνια παραμόρφωση (maximum ortho skewness - OS) και η ελάχιστη ορθογώνια ποιότητα (minimum orthogonal quality - OQ) των κελιών [9]. Με δεδομένο ότι αποτελεί καλή πρακτική οι τιμές των δύο πρώτων κριτηρίων να είναι χαμηλές και η τελευταία υψηλή, προκύπτει ότι σε όλα τα κριτήρια το δεύτερο πλέγμα υπερτερεί του αρχικού.

Τα βασικά χαρακτηριστικά των δύο συγκρινόμενων πλεγμάτων, μαζί τα κριτήρια ποιότητας αυτών, φαίνονται συνοπτικά παρακάτω:

Πίνακας 3.2 Σύνοψη και σύγκριση κύριων χαρακτηριστικών και ποιοτικών κριτηρίων των δύο διαθέσιμων πλεγμάτων

Πλέγμα	Πλήθος κελιών	Δομημένο	Γεωμετρία κελιών	AR	OS	OQ
1 ^ο	1.61×10^6	Όχι	Τετράεδρα	19.4	0.77	0.12
2 ^ο	8.32×10^5	Ναι	Τριγωνικά πρίσματα	4.9	0.22	0.56

Ακόμα, ελέγχθηκε η ευαισθησία της λύσης συναρτήσει του πλέγματος, λύνοντας το ίδιο πρόβλημα μόνιμης ροής (για $p=250$ Torr, $\omega=40$ rad/s) και με τα δύο πλέγματα. Προκύπτει ότι το μέσο ποσοστιαίο σφάλμα της θερμοκρασίας είναι μικρότερο από 4 %.

Για όλους τους προαναφερθέντες λόγους γίνεται χρήση του δομημένου, βελτιστοποιημένου πλέγματος σε όλες τις υπολογιστικές προσομοιώσεις της παρούσας ανάλυσης. Το σφάλμα μεταξύ των δύο πλεγμάτων θεωρείται πως είναι επαρκώς μικρό και δεν επηρεάζει τα αποτελέσματα.

3.6. Υπολογιστική Διαδικασία

Κατ' αρχάς, αποφασίστηκε η περιοχή της χαρτογράφησης, δηλαδή το εύρος τιμών της πίεσης και της ταχύτητας περιστροφής. Το κριτήριο για την επιλογή τους είναι το εύρος λειτουργίας παρόμοιων αντιδραστήρων οργανομεταλλικής ΧΑΑ στη βιομηχανία. Οι υπολογισμοί ξεκινούν από τη χαμηλότερη τιμή του υπό διερεύνηση εύρους, δηλαδή τα 250 Torr. Επίσης, επιλέγεται μια μικρή τιμή ρυθμού περιστροφής, όπως, 20 rad/s.

Έπειτα, αρχικοποιείται το πεδίο ροής και επιλέγεται η επίλυση των μεταβατικών εξισώσεων. Εάν η λύση φαίνεται να συγκλίνει σε μόνιμη κατάσταση, το τρέχον πεδίο ροής εισάγεται στον επιλύτη μόνιμης ροής για επιτάχυνση της σύγκλισης. Διαφορετικά, το μεταβατικό σύστημα αφήνεται να τρέξει για ένα σημαντικό διάστημα χρόνου της προσομοίωσης (30-40s), ενώ ταυτόχρονα καταγράφεται η χρονική εξέλιξη διάφορων μεταβλητών του αντιδραστήρα.

Μετά το τέλος της υπολογιστικής διαδικασίας αυξάνεται η τιμή της γωνιακής ταχύτητας κατά 10 rad/s και επιλύεται ξανά το πεδίο ροής. Ως αρχική εκτίμηση χρησιμοποιείται το τελευταίο στιγμιότυπο της λύσης του προβλήματος στις προηγούμενες, παρόμοιες συνθήκες. Αυτή η διαδικασία επαναλαμβάνεται μέχρι την υψηλότερη τιμή γωνιακής ταχύτητας του δίσκου, που είναι 80 rad/s.

Στη συνέχεια, αυξάνεται η πίεση κατά 50 Torr και ξεκινώντας από τη χαμηλότερη τιμή επαναλαμβάνονται τα ίδια ακριβώς παραπάνω βήματα. Όσο αυξάνεται η πίεση λειτουργίας περιορίζονται οι τιμές ρυθμού περιστροφής που προσομοιώνονται, αφού απομακρυνόμαστε από τις συνθήκες λειτουργίας του αντιδραστήρα που είναι ευνοϊκές για την παραγωγή ποιοτικών υμενίων.

Να σημειωθεί ότι σε πολλές περιπτώσεις το χρονικά εξαρτώμενο πρόβλημα επιλύεται και δεύτερη φορά, με άλλη αρχικοποίηση. Σε κάποιες περιπτώσεις αυτό οδηγεί στην ανακάλυψη επιπλέον ευσταθών λύσεων, που διαφορετικά δεν θα είχαν εντοπιστεί.

3.7. Διαστατική ανάλυση και Ομοιότητα

Μια καθιερωμένη μέθοδος για την ανάλυση της ευστάθειας της ροής και του σχετικού μεγέθους των διαφόρων ανταγωνιζόμενων δυνάμεων στους αντιδραστήρες περιστρεφόμενου υποστρώματος είναι η χρήση αδιάστατων αριθμών, οι οποίοι προκύπτουν από τις εξισώσεις ορμής (εξ. 3.2) για ασυμπίεστο ρευστό. Οι σημαντικότεροι αδιάστατοι αριθμοί για την παρούσα προσομοίωση παρουσιάζονται παρακάτω.

Περιστροφικός Reynolds

Ο περιστροφικός αριθμός Reynolds εκφράζει το λόγο των φυγόκεντρων δυνάμεων λόγω περιστροφής προς τις ιξώδεις δυνάμεις. Υπολογίζεται μέσω της σχέσης:

$$Re_{\omega} = \frac{\rho \omega d^2}{\mu} \quad (3.34)$$

όπου ρ η πυκνότητα του ρευστού, μ το δυναμικό ιξώδες του, ω η γωνιακή ταχύτητα περιστροφής του υποστρώματος και d η χαρακτηριστική διάσταση του προβλήματος (η διάμετρος του δίσκου). Η τιμή του περιστροφικού Reynolds υπολογίζεται στην περιοχή και θερμοκρασία του δίσκου, καθώς οι μέγιστες εφαπτομενικές ταχύτητες αναπτύσσονται στον χώρο ακριβώς πάνω από το υπόστρωμα.

Η κρίσιμη τιμή του Reynolds για την περιστροφή είναι $Re_{\omega c} \approx 10^4$. Πράγματι, επαληθεύεται και από τα προφίλ του Re_{ω} στον αντιδραστήρα ότι η τιμή του δεν ξεπερνά την κρίσιμη τιμή στην περιοχή ενδιαφέροντος, δηλαδή ανάμεσα στην είσοδο και το υπόστρωμα.

Reynolds

Ο αριθμός Reynolds αποτελεί μέτρο της σχετικής βαρύτητας των δυνάμεων αδράνειας προς τις ιξώδεις δυνάμεις. Δίνεται από τον τύπο:

$$Re = \frac{\rho dv}{\mu} \quad (3.35)$$

όπου v η χαρακτηριστική ταχύτητα του προβλήματος. Ο αριθμός Reynolds υπολογίζεται στην είσοδο του αντιδραστήρα, όπως είναι κοινή πρακτική στην μελέτη της συγκεκριμένης γεωμετρίας [5]. Δεδομένου ότι η γεωμετρία δεν μεταβάλλεται και ότι το γινόμενο της πυκνότητας με την ταχύτητα είναι ανεξάρτητο της πίεσης και ανάλογο της μαζικής παροχής, ο αριθμητής παραμένει ίδιος για κάθε ζεύγος των παραμέτρων p - ω . Όσον αφορά στο ιξώδες, είναι ανεξάρτητο της πίεσης στην περιοχή των χαμηλών πιέσεων όπου ανήκει το εύρος λειτουργίας του αντιδραστήρα. Άρα, για σταθερή μαζική παροχή ίση με 140 slm η τιμή του αριθμού Reynolds σε όλες τις προσομοιώσεις παραμένει πρακτικά σταθερή και ίση με 260.

Ο κρίσιμος Reynolds, όπου αρχίζει η μετάβαση σε τυρβώδη ροή, είναι $Re_c \approx 2000$. Επομένως, οι δυνάμεις αδράνειας πράγματι δεν επαρκούν για τη δημιουργία τύρβης.

Έχει βρεθεί ότι η περιστροφή του δίσκου δημιουργεί φυγόκεντρες δυνάμεις, οι οποίες οδηγούν στην ύπαρξη ακτινικής ροής και στην ανάπτυξη μια μέσης αξονικής ταχύτητας σε μεγαλύτερες αποστάσεις πάνω από τον δίσκο (pumping effect). Αν η ροή παραμένει στρωτή και δεν υπάρχουν φαινόμενα άνωσης, η επιπλέον αυτή ταχύτητα αντιστοιχεί σε έναν ισοδύναμο αριθμό Reynolds που δίνεται από την εξίσωση [19]:

$$Re_{eq} = 0.884 \sqrt{Re_{\omega}} \quad (3.36)$$

όπου Re_{eq} η τιμή του ισοδύναμου Reynolds της αξονικής ροής, που οφείλεται αποκλειστικά στην περιστροφή.

Grashof

Ο αριθμός Grashof (Gr) εκφράζει το λόγο των δυνάμεων άνωσης προς τις αντίστοιχες ιξώδεις, σε ένα ρευστό. Συναντάται συχνά κατά την μελέτη ροών που εμπεριέχουν σημαντικά φαινόμενα άνωσης, όπως στην παρούσα ανάλυση. Ο τύπος υπολογισμού του είναι:

$$Gr = \frac{\rho^2 g \beta (T_s - T_o) d^3}{\mu^2} \quad (3.37)$$

όπου g η επιτάχυνση της βαρύτητας, β ο συντελεστής θερμικής διαστολής του ρευστού και $T_s - T_o$ η διαφορά θερμοκρασίας της θερμής επιφάνειας από τον κύριο όγκο του ρευστού. Για τα ιδανικά αέρια, ισχύει:

$$\beta = \frac{1}{T} \quad (3.38)$$

Ο αριθμός Grashof υπολογίζεται κι αυτός πάντοτε στην θερμοκρασία εισόδου [5].

Richardson

Ο αριθμός Richardson (Ri) αποτελεί μέτρο της σχετικής βαρύτητας των δυνάμεων άνωσης σε σχέση με τις αντίστοιχες αδρανειακές. Μπορεί να εκφραστεί συναρτήσει των αριθμών Gr, Re ως εξής:

$$Ri = \frac{Gr}{Re^2} \quad (3.39)$$

Γενικά, όταν $Ri \gg 1$ η ροή κυριαρχείται από την άνωση και οι αδρανειακές δυνάμεις μπορούν να αγνοηθούν χάριν απλοποίησης. Για $Ri \ll 1$ συμβαίνει το αντίστροφο, δηλαδή η εξαναγκασμένη συναγωγή καθορίζει τη ροή, ενώ η ελεύθερη συναγωγή είναι αμελητέα. Στην περίπτωση που οι δυνάμεις άνωσης και αδράνειας είναι ίδιας τάξης μεγέθους, ο παραπάνω λόγος έχει τιμή κοντά στη μονάδα.

Το εύρος τιμών των αδιάστατων παραμέτρων της παρούσας ανάλυσης συνοψίζονται στον ακόλουθο πίνακα. Επίσης, παρουσιάζεται και το εύρος των δύο μεταβαλλόμενων παραμέτρων, δηλαδή της πίεσης και της ταχύτητας περιστροφής, για καλύτερη εποπτεία.

Πίνακας 3.3 Εύρος τιμών των χαρακτηριστικών αδιάστατων αριθμών και των κρίσιμων λειτουργικών παραμέτρων

Μεταβλητή	Μέγεθος	Εύρος	Μονάδες
Πίεση λειτουργίας	p	250 – 400	Torr
Γωνιακή ταχύτητα	ω	20 – 80	rad/s
Reynolds	Re	≈ 260	-
Περιστροφικός Reynolds	Re_ω	1400 – 6800	-
Grashof	Gr	$(1.0 - 2.5) \times 10^6$	-
Richardson	Ri	9.3 – 25.0	-

Συμπεραίνεται, λοιπόν, ότι στις εξεταζόμενες πιέσεις οι δυνάμεις άνωσης είναι πολύ σημαντικότερες αυτών της συναγωγής, γεγονός που αναδεικνύει τη χρησιμότητα της περιστροφής στην προσπάθεια επιβολής ομοιόμορφης ροής.

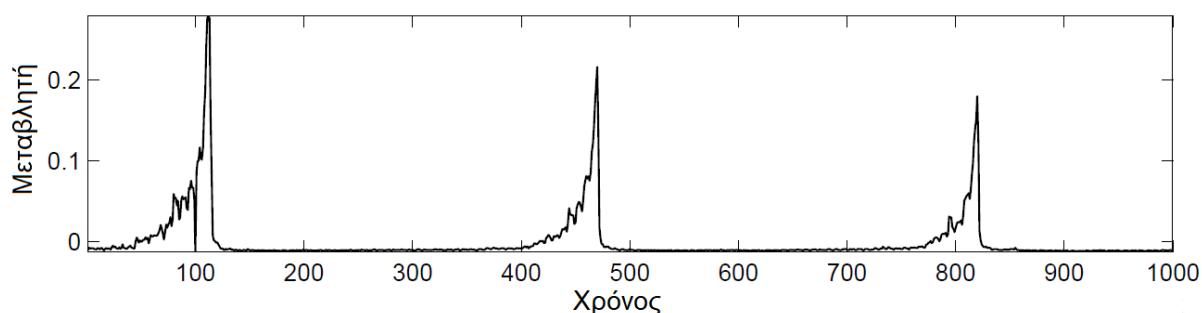
Επιπλέον, επιβεβαιώνεται η εγκυρότητα της παραδοχής της στρωτής ροής, καθώς και οι δύο αδιάστατοι αριθμοί Reynolds βρίσκονται κάτω από το αντίστοιχο κρίσιμο όριο.

4. ΠΕΡΙΟΔΙΚΟΤΗΤΑ

4.1. Γενικά στοιχεία

Η ανάλυση και εκτίμηση περιοδικότητας αποτελεί μια σημαντική πτυχή διάφορων επιστημονικών κλάδων όπως η αστρονομία, η μετεωρολογία, η ωκεανολογία, η βιοπληροφορική αλλά και τομέων όπως η βιομηχανία αυτοκινήτων, αεροσκαφών, μηχανημάτων κ.ά. [20]. Αυτή είναι και η αιτία που έχουν αναπτυχθεί διάφορες τεχνικές για τον εντοπισμό και τον χαρακτηρισμό περιοδικών φαινομένων, αφού συχνά η περιοδικότητα δεν είναι άμεσα ανιχνεύσιμη λόγω πολυπλοκότητας, θορύβου των μετρήσεων ή άλλων παραγόντων.

Μια βασική πηγή θορύβου στο παρόν φυσικό μοντέλο είναι η ανάπτυξη δευτερευουσών ροών άνωσης, οι οποίες παρουσιάζουν απρόβλεπτη συμπεριφορά. Επίσης, όλες οι πηγές σφαλμάτων που αναφέρονται στην παράγραφο 2.2 πιθανώς συνεισφέρουν στην απόκρυψη της περιοδικότητας της ροής. Ο καλύτερος τρόπος να αναδειχθεί οποιαδήποτε περιοδικότητα είναι η εφαρμογή των σχετικών διαθέσιμων μαθηματικών τεχνικών του κλάδου της φασματικής ανάλυσης (spectral analysis).



Σχήμα 4.1 Εξέλιξη μεταβλητής ενός περιοδικού φαινομένου, συναρτήσει του χρόνου.

Με στόχο την καλύτερη κατανόηση και την ικανότητα ορθής ερμηνείας των αποτελεσμάτων είναι χρήσιμη μια σύντομη παρουσίαση του θεωρητικού υποβάθρου της ανάλυσης αυτής. Για το λόγο αυτό, στην επόμενη παράγραφο πραγματοποιείται μια σύντομη εισαγωγή στον τομέα και παρουσιάζονται τα εργαλεία που αποτελούν τους δομικούς λίθους της χρησιμοποιούμενης μεθόδου.

Κατά την εφαρμογή των παρακάτω μεθόδων προϋποτίθεται ότι το φάσμα παραμένει σταθερό, δηλαδή η περιοδικότητα της ροής δεν μεταβάλλεται με το χρόνο. Ένα φαινόμενο το οποίο παρουσιάζει μικρές αυξομειώσεις στην περίοδο του συναρτήσεως του χρόνου ονομάζεται ψευδοπεριοδικό (quasiperiodic) [21]. Για την ανάλυση ενός σήματος μεταβλητής συχνότητας (δηλαδή περιόδου) απαιτούνται πιο σύνθετες μέθοδοι, οι οποίες όμως δεν κρίνονται αναγκαίες στα πλαίσια της εργασίας αυτής.

4.2. Φασματική Ανάλυση

Μετασχηματισμός Fourier

Ο Διακριτός Μετασχηματισμός Φουριέ (Discrete Fourier Transform – DFT) μιας συνάρτησης $x(n)$, $n=0,1,\dots,N$ είναι μια ακολουθία μιγαδικών αριθμών $X(f)$:

$$X(f_{k/N}) = \sum_{n=0}^{N-1} x(n)e^{-\frac{2\pi kn}{N}j}, \quad k = 0, 1, \dots, N - 1 \quad (4.1)$$

όπου ο δείκτης k/N εκφράζει τη συχνότητα που αντιστοιχεί στον κάθε συντελεστή. Ο παραπάνω μετασχηματισμός αναπαριστά το αρχικό σήμα ως ένα γραμμικό συνδυασμό (μιγαδικών) συνημιτονοειδών συναρτήσεων.

Ο μετασχηματισμός Fourier είναι αντιστρέψιμος, δηλαδή είναι δυνατή η επιστροφή στο πεδίο του χρόνου από το πεδίο της συχνότητας. Αν πριν την αντιστροφή αυτή απορριφθούν κάποιοι συντελεστές, το αποτέλεσμα θα είναι μια προσέγγιση της αρχικής χρονοσειράς. Ο μετασχηματισμός ενός σήματος και η μετέπειτα προσεκτική επιλογή των συντελεστών προς αποθήκευση είναι μια συνηθισμένη διαδικασία που χρησιμεύει σε πληθώρα εργασιών όπως συμπίεση δεδομένων, επεξεργασία εικόνων, φιλτράρισμα θορύβου κ.ά. [20].

Θεώρημα Δειγματοληψίας (Nyquist–Shannon)

Έστω ένα σήμα ή μια συνάρτηση $f(t)$, η οποία δειγματοληπτείται με σταθερό ρυθμό. Σύμφωνα με το θεώρημα του Nyquist, η μέγιστη συχνότητα που είναι δυνατό να ανιχνευθεί είναι ίση με το ήμισυ της συχνότητας δειγματοληψίας:

$$f_{max} \leq \frac{f_s}{2} \quad (4.2)$$

ή

$$T_{min} \geq 2T_s \quad (4.3)$$

Συνεπώς, το εύρος ζώνης (bandwidth) φάσματος του σήματος, δηλαδή το εύρος των ανιχνεύσιμων συχνοτήτων, εξαρτάται από την παραπάνω συχνότητα. Στην παρούσα εργασία, η περίοδος δειγματοληψίας ταυτίζεται με το χρονικό βήμα επίλυσης των μακροσκοπικών εξισώσεων $T_s = 0.01$ s κι έτσι η συχνότητα δειγματοληψίας είναι $f_s = 1/T_s = 100$ Hz. Αυτό σημαίνει ότι οι ανιχνεύσιμες συχνότητες κυμαίνονται στο εύρος 0–50 Hz και δηλαδή (λόγω της 4.3) δεν είναι δυνατή η ανίχνευση περιοδικών ρών στον αντιδραστήρα μικρότερων των 0.02 s.

Κανονικοποίηση

Προκειμένου να γίνει ουσιαστική σύγκριση του ενεργειακού περιεχομένου μεταξύ χρονοσειρών είναι αναγκαία η κανονικοποίησή τους, ώστε να περιέχουν το ίδιο ποσό συνολικής ενέργειας. Είναι δυνατός ο μετασχηματισμός οποιασδήποτε σειράς $x(n)$, ώστε η ενέργεια που περιλαμβάνει να είναι μοναδιαία, μέσω της ακόλουθης κανονικοποίησης [20]:

$$\widehat{x}_n(n) = \frac{x(n) - \frac{1}{N} \sum_{i=1}^n x(i)}{\sqrt{\sum_{i=1}^N \left(x(n) - \frac{1}{N} \sum_{i=1}^n x(i)\right)^2}}, \quad n = 1, \dots, N \quad (4.4)$$

Ο παραπάνω μετασχηματισμός δίνει μέσο όρο 0 και τυπική απόκλιση ίση με τη μονάδα.

Το θεώρημα του Parseval υπαγορεύει ότι η ενέργεια στο πεδίο του χρόνου ισούται με την ενέργεια στο πεδίο της συχνότητας· άρα και στο πεδίο της συχνότητας η συνολική ενέργεια είναι μοναδιαία:

$$\|\widehat{x}_n\|^2 = \|F(\widehat{x}_n)\|^2 = 1 \quad (4.5)$$

Επομένως, μετά από αυτή την κανονικοποίηση αποκτά νόημα η σύγκριση των ενεργειών των διάφορων χρονικά μεταβαλλόμενων μεταβλητών, όπως η θερμοκρασία και η ταχύτητα.

Παράθυρο (Window)

Το παράθυρο είναι μια συνάρτηση βάρους (weighting function) που πολλαπλασιάζεται με τα δεδομένα προκειμένου να μειώσει την φασματική διαρροή (spectral leakage). Η τελευταία σχετίζεται με τα πεπερασμένα διαστήματα παρατήρησης. Συγκεκριμένα, ο μετασχηματισμός Fourier υποθέτει ότι το διάστημα παρατήρησης επαναλαμβάνεται αυτούσιο συνεχώς. Αυτό έχει σαν να αποτέλεσμα να αναδύονται συχνότητες, που δεν υπάρχουν στο αρχικό σήμα (π.χ. εξ' αιτίας ασυνεχειών μεταξύ του δεξιού και αριστερού άκρου του διαστήματος παρατήρησης).

Ουσιαστικά, η παραθύρωση είναι μια διαδικασία που επιτρέπει την κατανομή της διαρροής στο εύρος του φάσματος, σύμφωνα με τις ανάγκες της εκάστοτε εφαρμογής. Για να επιτευχθεί αυτό πολλαπλασιάζεται η εκάστοτε μεταβλητή με μια συνάρτηση βάρους, η οποία έχει μικρότερους συντελεστές στα άκρα και μεγαλύτερους στο κέντρο. Σε κάθε παράθυρο υπάρχει ένας ανταγωνισμός (tradeoff) μεταξύ ευαισθησίας (sensitivity) και δυναμικού εύρους (dynamic range). Η ευαισθησία είναι η δυνατότητα διάκρισης παρεμφερών συχνοτήτων με συγκρίσιμη ισχύ, ενώ το δυναμικό εύρος η δυνατότητα διάκρισης διαφορετικών συχνοτήτων με ανόμοια ισχύ.

Στην παρούσα εργασία χρησιμοποιείται για την παραθύρωση η συνάρτηση Hamming, η οποία αποτελεί μία συνηθισμένη και ισορροπημένη επιλογή, όσον αφορά στην ευαισθησία και στο δυναμικό εύρος. Οι συντελεστές ενός παραθύρου Hamming δίνονται από την ακόλουθη εξίσωση [22]:

$$w(n) = 0.543 - 0.457 \cos\left(2\pi \frac{n}{N}\right), \quad 0 \leq n \leq N \quad (4.6)$$

όπου $L = N + 1$ το μήκος του παραθύρου.

Φασματική Πυκνότητα Ισχύος

Η φασματική πυκνότητα ισχύος (power spectral density) μιας χρονοσειράς δείχνει ποια είναι η κατανομή ισχύος σε καθεμιά από τις συχνότητες που το συνθέτουν. Συνεπώς, η ανάλυση

φασματικής ισχύος φανερώνει ποιες είναι οι κύριες συχνότητες ενός σήματος, δηλαδή εκείνες οι συχνότητες που συμβάλλουν περισσότερο στην διαμόρφωση του. Εφ' όσον η περίοδος ενός φαινομένου είναι μέγεθος αντίστροφο της συχνότητας, ο εντοπισμός των συχνοτήτων που περιέχουν το μεγαλύτερο ποσοστό ενέργειας οδηγεί στην εύρεση των κυρίαρχων περιοδικοτήτων.

Υπάρχουν δύο πολύ γνωστοί εκτιμητές της φασματικής ισχύος, και συγκεκριμένα το περιοδόγραμμα (Periodogram) και η συνάρτηση κυκλικής αυτοσυσχέτισης (Circular Autocorrelation Function – ACF).

Περιοδόγραμμα

Το περιοδόγραμμα (periodogram) βρίσκεται υπολογίζοντας το τετράγωνο του μέτρου κάθε συντελεστή Φουριέ:

$$P(f_{k/N}) = |X(f_{k/N})|^2, \quad k = 0, 1 \dots \frac{N-1}{2}$$

Κυκλική Αυτοσυσχέτιση

Ο δεύτερος τρόπος εκτίμησης των κυρίαρχων περιόδων μια χρονοσειράς είναι η κυκλική συνάρτηση αυτοσυσχέτισης (autocorrelation function), η οποία εξετάζει την ομοιότητα της σειράς με τις προηγούμενες χρονικά τιμές της, για διαφορετικές χρονικές υστερήσεις τ :

$$ACF(\tau) = \frac{1}{N} \sum_{n=0}^{N-1} x(n) \cdot x(n + \tau) \quad (4.7)$$

Η συνάρτηση κυκλικής αυτοσυσχέτισης παρέχει τη δυνατότητα για εντοπισμό περιοδικότητας με μεγαλύτερη ακρίβεια συγκριτικά με το περιοδόγραμμα, ιδιαίτερα για μεγάλες περιόδους. Παρ' όλα αυτά, δεν επαρκεί ως μεθοδολογία για την αυτόματη ανακάλυψη περιοδικοτήτων για τους εξής λόγους:

- Η αυτόματη ανακάλυψη σημαντικών κορυφών καθίσταται δυσκολότερη σε σύγκριση με το περιοδόγραμμα, καθώς οι εδώ οι τρόποι ορισμού κατωφλιού είναι πιο σύνθετοι.
- Τα πολλαπλάσια της βασικής περιόδου εμφανίζονται επίσης ως κορυφές. Έτσι, η μέθοδος εισάγει πολλές ψευδείς υποψήφιες περιόδους, που χρειάζεται να αφαιρεθούν κατά τη φάση της τελικής επεξεργασίας.
- Γεγονότα με υψηλή συχνότητα ενδεχομένως εμφανίζονται εδώ λιγότερο σημαντικά (μικρότερες κορυφές) από ότι αντίστοιχα χαμηλής συχνότητας με ίδια ισχύ.

Εδώ πρέπει να ξεκαθαριστεί ότι ο συνδυασμός των δύο παραπάνω εργαλείων δεν περικλείει περισσότερη φασματική πληροφορία από ότι το καθένα από αυτά ξεχωριστά. Αυτό επαληθεύεται αν προσέξει κανείς πως η συνάρτηση αυτοσυσχέτισης είναι ο αντίστροφος μετασχηματισμός Laplace του περιοδογράμματος. Αγνοώντας τον αυστηρό μαθηματικό φορμαλισμό θα μπορούσε να γραφτεί ότι:

$$ACF = F^{-1}\{Periodogram\} \quad (4.8)$$

Ουσιαστικά, λοιπόν, ο στόχος είναι σε κάθε στάδιο της μεθόδου να αξιοποιηθεί το κατάλληλο πεδίο (domain)· το πεδίο της συχνότητας για την εύρεση των σημαντικών συχνοτήτων (δηλ. περιόδων) και το πεδίο του χρόνου για την ακριβή ταυτοποίηση ή απόρριψη τους.

Πίνακας 4.1 Συνοπτική σύγκριση των μεθόδων ανίχνευσης περιοδικότητας

Μέθοδος	Ορισμός Κατωφλιού	Ακρίβεια μικρών περιόδων	Ακρίβεια μεγάλων περιόδων
Περιοδόγραμμα	Εύκολος	Ναι	Όχι
Συνάρτηση Αυτοσυσχέτισης	Δύσκολος	Ναι	Ναι
Συνδυασμός	Εύκολος	Ναι	Ναι

Από την παραπάνω ανάλυση συμπεραίνεται ότι ο συνδυασμός των δύο παραπάνω εργαλείων είναι δυναμικά πολύ ισχυρός και γι' αυτό μια τέτοια προσέγγιση υιοθετείται και στην εργασία αυτή.

4.3. Μεθοδολογία εύρεσης περιοδικότητας

Όπως αναφέρθηκε παραπάνω, στην παρούσα ανάλυση εφαρμόζεται μια μεθοδολογία δύο βημάτων, που αναπτύσσεται στη βιβλιογραφία [20]. Σε αυτή την μέθοδο λαμβάνεται υπ' όψη πληροφορία τόσο από το περιοδόγραμμα όσο και από τη συνάρτηση αυτοσυσχέτισης.

Αφού η ανακάλυψη των σημαντικών περιόδων είναι ευκολότερη στο περιοδόγραμμα, χρησιμοποιείται αυτό για την εξαγωγή των υποψήφιων περιόδων. Αυτές οι υποψήφιοι ενδέχεται να είναι είτε ψευδείς (εξ' αιτίας φασματικής διαρροής) ή αληθείς, οπότε και δίνουν μια αδρή εκτίμηση της περιόδου. Επομένως, απαιτείται μια φάση επικύρωσης μέσω του διαγράμματος αυτοσυσχέτισης, το οποίο δίνει μια πιο ακριβή εκτίμηση πιθανών περιοδικοτήτων. Τελικά, η υποψήφια περίοδος μπορεί να θεωρηθεί έγκυρη εφ' όσον βρίσκεται σε κορυφή (hill) του διαγράμματος αυτοσυσχέτισης· διαφορετικά απορρίπτεται.

Αναλυτικότερα:

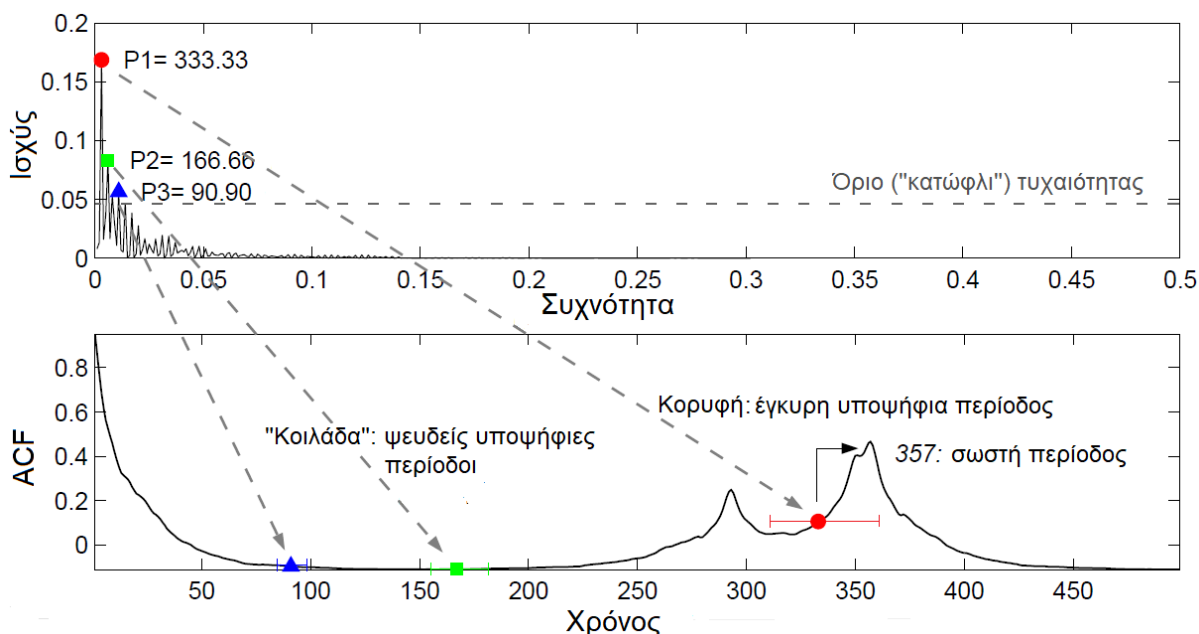
Για την εξαγωγή υποψήφιων περιόδων από το περιοδόγραμμα χρειάζεται να καθοριστεί το κατάλληλο κατώφλι (ή κατώτερο όριο) ισχύος, το οποίο θα ξεχωρίσει τις κυρίαρχες συχνότητες (ή περιόδους). Εάν καμία από τις συχνότητες του σήματος δεν υπερβαίνει το συγκεκριμένο κατώφλι, τότε το σήμα μπορεί να θεωρηθεί μη περιοδικό.

Προκειμένου να συγκεκριμενοποιηθεί το ποιες περίοδοι είναι σημαντικές, πρέπει προηγουμένως να ποσοτικοποιηθεί η ενέργεια του σήματος που οφείλεται σε τυχαίους μηχανισμούς. Με άλλα λόγια, το ενδιαφέρον συγκεντρώνει οποιοδήποτε φαινόμενο δεν θα

Κεφάλαιο 4^ο: ΠΕΡΙΟΔΙΚΟΤΗΤΑ

μπορούσε να αποδοθεί σε τυχαιότητα, για κάποιο διάστημα εμπιστοσύνης που ορίζουμε εμείς.

Έστω η το σήμα \widehat{x}_n , το οποίο περιέχει τις κανονικοποιημένες τιμές της μεταβλητής συναρτήσεως του χρόνου. Πραγματοποιείται τυχαία μετάθεση όλων των στοιχείων του διανύσματος αυτού 100 φορές και κάθε φορά προκύπτει ένα νέο διάνυσμα $\widehat{x}_{n_{perm}}$. Για κάθε διάνυσμα βρίσκεται το περιοδόγραμμα του και στη συνέχεια ο μέγιστος συντελεστής Fourier αυτού. Έπειτα, όλοι οι παραπάνω συντελεστές ταξινομούνται κατά αύξουσα σειρά σε ένα νέο διάνυσμα. Για διάστημα εμπιστοσύνης 99 %, όπως επιλέχθηκε στην ανάλυση αυτή, ο 99^{ος} συντελεστής του προηγούμενου διανύσματος παρέχει μια επαρκή εκτίμηση του κατωφλιού ισχύος που αναζητείται. Τελικά, συχνότητες στο περιοδόγραμμα με συντελεστή μεγαλύτερο από αυτό το κατώφλι λαμβάνονται υπ' όψη ως υποψήφιες.



Σχήμα 4.2 Οπτική επίδειξη της χρησιμοποιούμενης μεθόδου για ένα περιοδικό φαινόμενο. Οι υποψήφιες περίοδοι προκύπτουν από τις ισχυρότερες συχνότητες στο περιοδόγραμμα. Βάσει της συνάρτησης αυτοσυσχέτισης είτε επικυρώνονται και προσδιορίζονται με ακρίβεια, είτε απορρίπτονται.

Μετά την συλλογή των υποψήφιων συχνοτήτων από το περιοδόγραμμα προκύπτει το ερώτημα του ποιο πρέπει να είναι το εύρος αναζήτησης κορυφής στο διάγραμμα αυτοσυσχέτισης για μία υποψήφια περίοδο. Αποδεικνύεται ότι το κατάλληλο διάστημα αναζήτησης είναι:

$$R_{N/k} = \left[\frac{1}{2} \left(\frac{N}{k+1} + \frac{N}{k} \right) - 1, \dots, \frac{1}{2} \left(\frac{N}{k} + \frac{N}{k-1} \right) + 1 \right] \quad (4.9)$$

Τα βήματα του αλγορίθμου συνοψίζονται στον ακόλουθο πίνακα:

Πίνακας 4.2 Βήματα αλγορίθμου εύρεσης περιοδικότητας

Στάδιο	Περιγραφή
1	Καταγραφή μεταβλητής/σήματος
2	Κανονικοποίηση σήματος
3	Παραθύρωση σήματος
4	Εύρεση κατωφλιού ισχύος
5	Φασματική ανάλυση σήματος
6	Αυτοσυσχέτιση σήματος

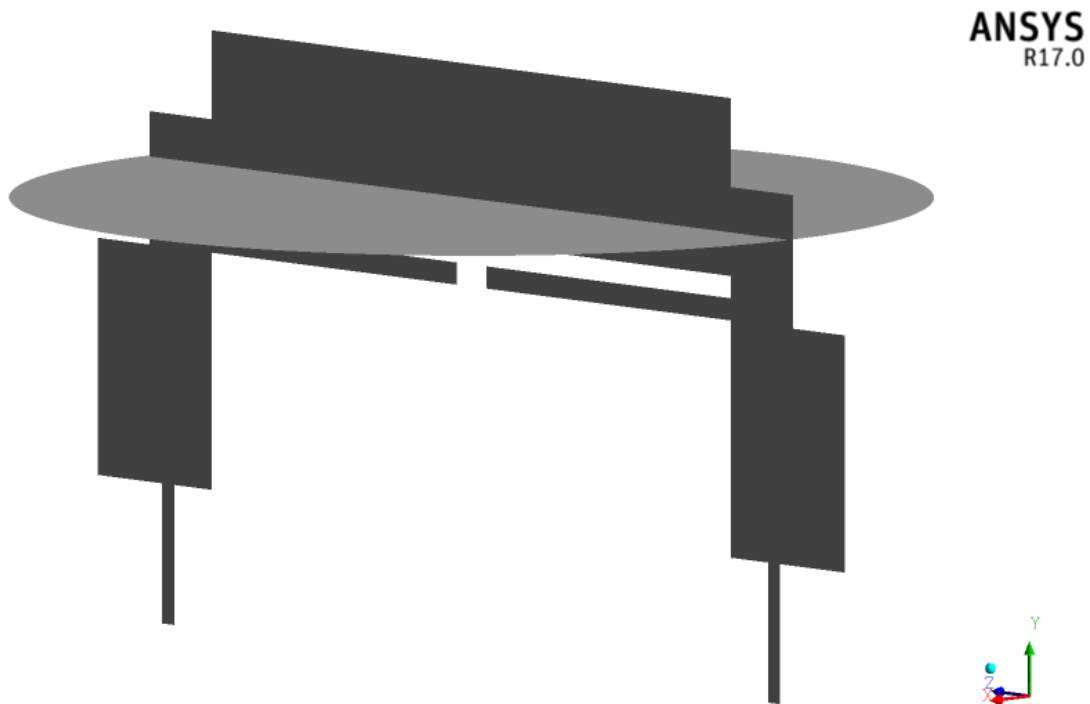
4.4. Καταγραφή μεταβλητών

Στην παρούσα μελέτη επιλύεται πάντα το μη μόνιμο πρόβλημα (time dependent problem) και στην πλειοψηφία των προσομοιώσεων η λύση δεν συγκλίνει σε μόνιμη κατάσταση (steady state). Συνεπώς, οι μεταβλητές δεν διαφέρουν μόνο συναρτήσει της θέσης στον αντιδραστήρα, αλλά παρουσιάζουν αυξομείωση και στο χρόνο. Για το λόγο αυτό, κατά τη διάρκεια των τρεξιμάτων (runs) παρακολουθούνται σε κάθε χρονικό βήμα τουλάχιστον 4 μεταβλητές: η θερμοκρασία και οι τρεις συνιστώσες της ταχύτητας σε κυλινδρικό σύστημα συντεταγμένων.

Δυστυχώς, δεν είναι εφικτή η αποθήκευση των παραπάνω μεταβλητών σε όλα τα κελιά του πλέγματος, καθώς οι απαιτήσεις σε μνήμη είναι τεράστιες και η αποθήκευση, μεταφορά και επεξεργασία τους με τους υπολογιστικούς πόρους γίνεται ιδιαίτερα επίπονη. Έτσι, δημιουργούνται καταγραφείς (monitors) για τον σταθμισμένο (βάσει του όγκου) μέσο των μεταβλητών αυτών σε όλα τα κελιά κατά μήκος συγκεκριμένων νοητών γραμμών ή επιφανειών. Ειδικότερα, επιλέγονται δύο οριζόντιες επιφάνειες και ένα πλήθος κατακόρυφων γραμμών, καθώς και μερικά σημεία στον αντιδραστήρα σε διάφορες ακτινικές αποστάσεις. Τα περισσότερα βρίσκονται στο χώρο πάνω από το υπόστρωμα, όπου επικεντρώνεται το ενδιαφέρον στη διεργασία.

5. ΑΠΟΤΕΛΕΣΜΑΤΑ

Στο κεφάλαιο αυτό παρουσιάζονται διεξοδικά τα αποτελέσματα των προσομοιώσεων, συνοδευόμενα από τα απαραίτητα γραφικά εργαλεία. Για την απεικόνιση των λύσεων γίνεται ευρεία χρήση δύο συγκεκριμένων εσωτερικών επιφανειών του τρισδιάστατου αντιδραστήρα. Η πρώτη είναι μια κάθετη διατομή, που διέρχεται από τον κατακόρυφο άξονα συμμετρίας του αντιδραστήρα. Η δεύτερη είναι μια οριζόντια τομή του αντιδραστήρα στα 3/4 της απόστασης του υποστρώματος από την είσοδο, δηλαδή 0.75'' πάνω από τον περιστρεφόμενο δίσκο (βλ. Σχήμα 3.1). Οι δύο αυτές επιφάνειες παρουσιάζονται παρακάτω:



Σχήμα 5.1 Οι δύο χρησιμοποιούμενες διατομές για την γραφική απεικόνιση των λύσεων.

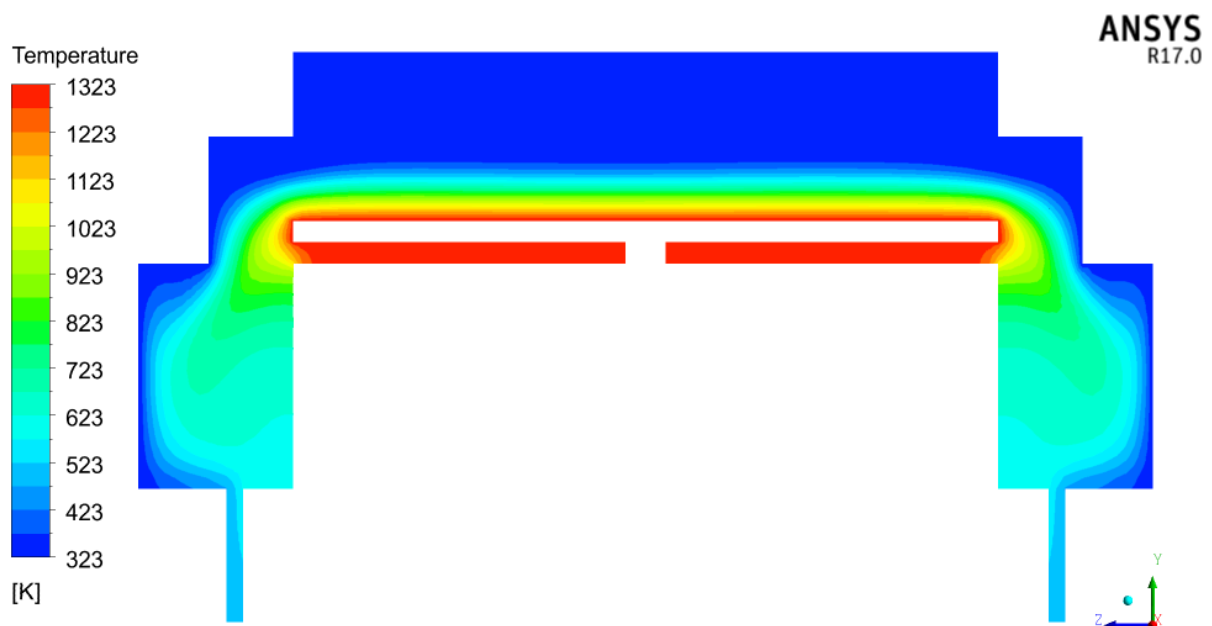
Σε αυτές απεικονίζονται οι βασικές μεταβλητές, δηλαδή η θερμοκρασία και η ταχύτητα. Για την θερμοκρασία χρησιμοποιείται το διάγραμμα ισοϋψών, όπου φαίνεται ξεκάθαρα η ύπαρξη ή όχι ομοιομορφίας. Η ταχύτητα παρουσιάζεται γραφικά κυρίως με τις ροϊκές γραμμές του διανυσματικού πεδίου της.

5.1. Μόνιμες συμμετρικές λύσεις

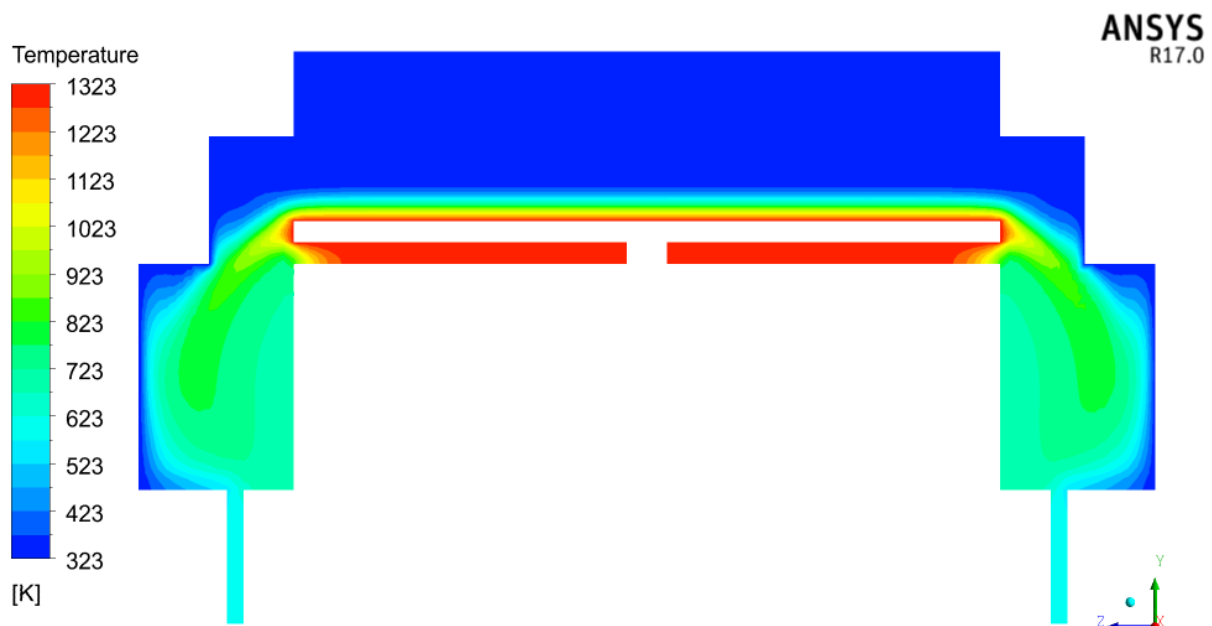
Η επίλυση του μεταβατικού προβλήματος για πίεση ίση με 250 Torr και γωνιακή ταχύτητα 20-80 rad/s καταλήγει σε μόνιμη αξονοσυμμετρική λύση, με προϋπόθεση την κατάλληλη αρχικοποίηση του πεδίου ροής.

Παρουσιάζονται παρακάτω επιλεκτικά οι θερμοκρασιακές κατανομές για τη λειτουργία με το μικρότερο και το μεγαλύτερο ρυθμό περιστροφής.

Κεφάλαιο 5^ο: ΑΠΟΤΕΛΕΣΜΑΤΑ

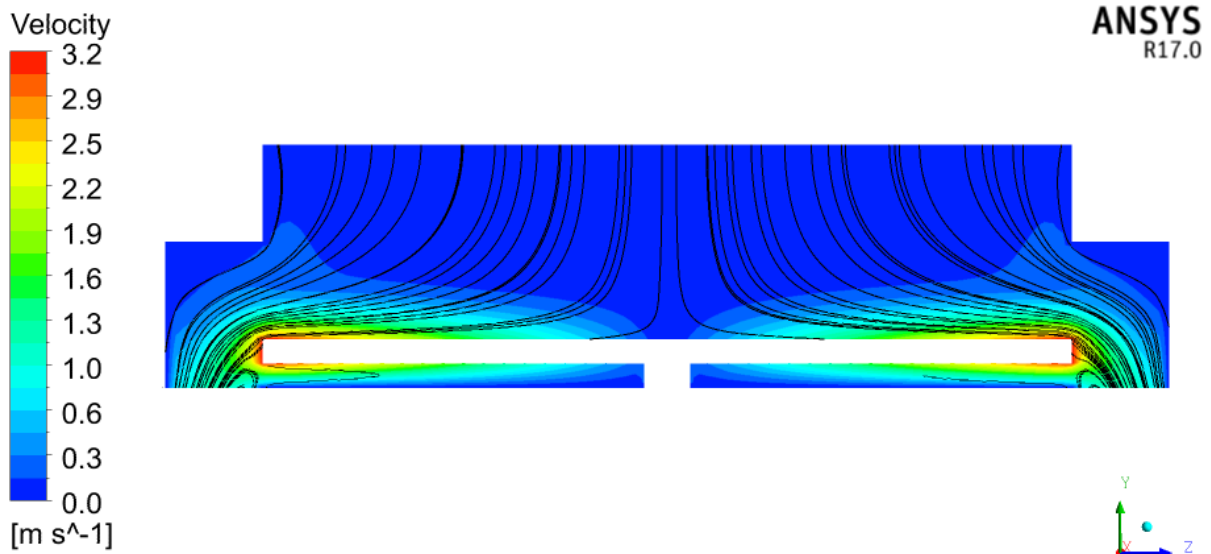


Εικόνα 5.1 Κατανομή θερμοκρασίας σε κάθετη διατομή του αντιδραστήρα για $p=250$ Torr και $\omega=20$ rad/s, όπου η λύση είναι μόνιμη και αξονοσυμμετρική.

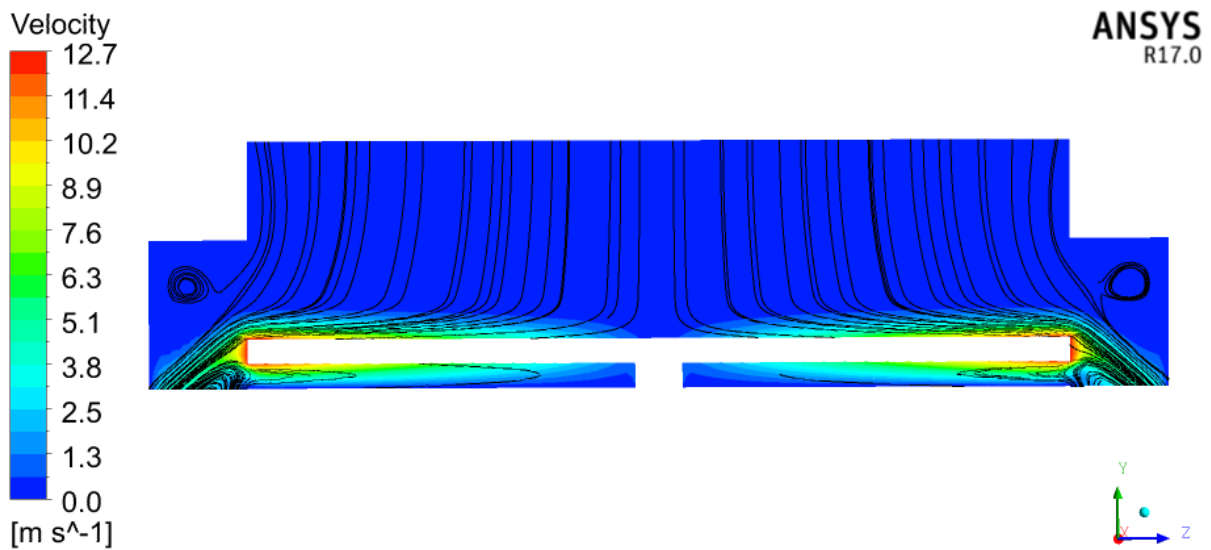


Εικόνα 5.2 Κατανομή θερμοκρασίας σε κάθετη διατομή του αντιδραστήρα για $p=250$ Torr και $\omega=80$ rad/s, όπου η λύση είναι μόνιμη και αξονοσυμμετρική.

Επίσης, δίνονται τα πεδία ταχύτητας με τις αντίστοιχες ροϊκές γραμμές για τις ίδιες περιπτώσεις, στις οποίες αναπτύσσονται οι πιο αδύναμες και οι ισχυρότερες φυγοκεντρικές δυνάμεις, αντίστοιχα.



Σχήμα 5.2 Ροϊκές γραμμές ταχύτητας σε κάθετη διατομή του αντιδραστήρα για $p=250$ Torr και $\omega=20$ rad/s, όπου η λύση είναι μόνιμη και αξονοσυμμετρική.



Σχήμα 5.3 Ροϊκές γραμμές ταχύτητας σε κάθετη διατομή του αντιδραστήρα για $p=250$ Torr και $\omega=80$ rad/s, όπου η λύση είναι μόνιμη και αξονοσυμμετρική.

Όλες τα πεδία ταχύτητας και θερμοκρασίας που προκύπτουν για $p=250$ Torr και $\omega=20-80$ rad/s είναι εμβολικής ροής (plug flow regime). Με άλλα λόγια, η ροή κινείται ομοιόμορφα και οι όποιες δευτερεύουσες ροές –όπως π.χ. οι μικρές δίνες κοντά στα τοιχώματα– δεν επηρεάζουν το χώρο πάνω από το υπόστρωμα. Κατά την βιομηχανική εφαρμογή της διεργασίας ο αντιδραστήρας ΧΑΑ πρέπει να λειτουργεί σε αυτές τις συνθήκες, καθώς μόνο τότε το παραγόμενο υμένιο θα έχει χαρακτηριστικά ποιότητας που πληρούν τις προδιαγραφές [6].

Αυτή η λύση του πεδίου ροής στον τρισδιάστατο αντιδραστήρα είναι ίδια με την αντίστοιχη του δισδιάστατου προβλήματος, δηλαδή μόνιμη, αξονοσυμμετρική και εμβολική. Επομένως,

Κεφάλαιο 5^ο: ΑΠΟΤΕΛΕΣΜΑΤΑ

η λύση που δίνει η επίλυση του προβλήματος μειωμένης διάστασης για το συγκεκριμένο εύρος συνθηκών είναι ακριβής.

Η ανάλυση ομοιότητας (similarity analysis) προβλέπει ότι για ένα απείρως μεγάλο περιστρεφόμενο δίσκο, το πάχος του οριακού στρώματος αποτελεί συνάρτηση του $Re_{\omega}^{-1/2}$ [19]. Λόγω της σχέσης 3.34 και δεδομένου ότι η μαζική παροχή, η σύσταση του αερίου μίγματος και οι θερμοκρασίες στα σύνορα δεν μεταβάλλονται στην παρούσα μελέτη, δείχνεται εύκολα ότι το πάχος του οριακού στρώματος είναι ανάλογο της ποσότητας $(p\omega)^{-1/2}$. Η θεωρητική αυτή διαπίστωση επαληθεύεται οπτικά στα παραπάνω αποτελέσματα, όπου διακρίνει κανείς την μείωση του πάχους του οριακού στρώματος όσο αυξάνεται η γωνιακή ταχύτητα του δίσκου.

5.2. Περιοδικές μη-συμμετρικές λύσεις

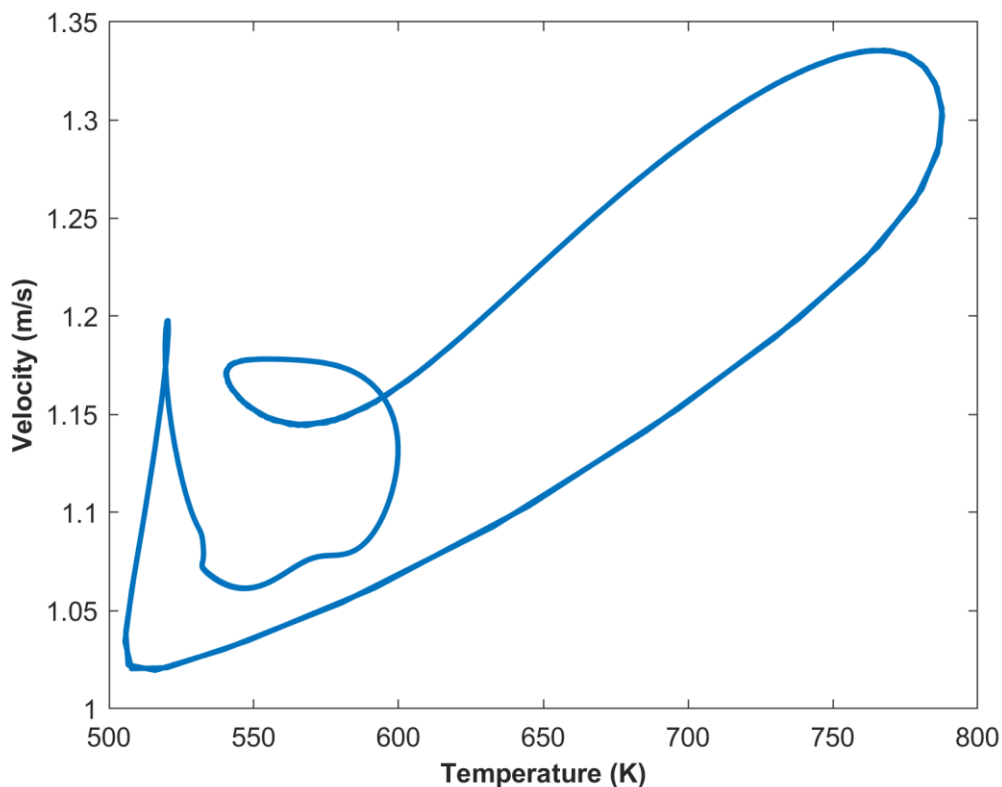
Όλα τα ζεύγη λειτουργικών παραμέτρων p - ω έχουν στο εύρος 250-350 Torr και 40-70 rad/s λύση που είναι περιοδική και μη-συμμετρική.

Ο τρόπος που αναπτύσσεται η περιοδική, ασύμμετρη ροή είναι ο ακόλουθος: Αρχικά, συμβαίνει μια αστάθεια στη ροή ανάμεσα στην είσοδο και το υπόστρωμα, η οποία δημιουργεί ταχύτατα μια θερμή ασύμμετρη περιοχή ρευστού. Αυτή εγκλωβίζεται στα τοιχώματα του αντιδραστήρα λόγω των φυγόκεντρων δυνάμεων και της συγκεκριμένης γεωμετρίας, δηλαδή λόγω της αύξησης της διαμέτρου του αντιδραστήρα λίγα εκατοστά μετά την είσοδο (βλ. Σχήμα 3.1). Τελικά, το αποτέλεσμα είναι η ύπαρξη μίας ή περισσότερων ασύμμετρων περιοχών υψηλής θερμοκρασίας και ταχύτητας, που περιφέρονται με σταθερή συχνότητα γύρω από τον κατακόρυφο άξονα.

Πίεση 250 Torr

Πρώτα παρουσιάζονται τα αποτελέσματα των περιοδικών λύσεων για 250 Torr, που είναι η μικρότερη πίεση λειτουργίας της ανάλυσης. Σε αυτή την πίεση η διεργασία συγκλίνει σε περιοδική λύση, για γωνιακή ταχύτητα από 40 έως 80 rad/s.

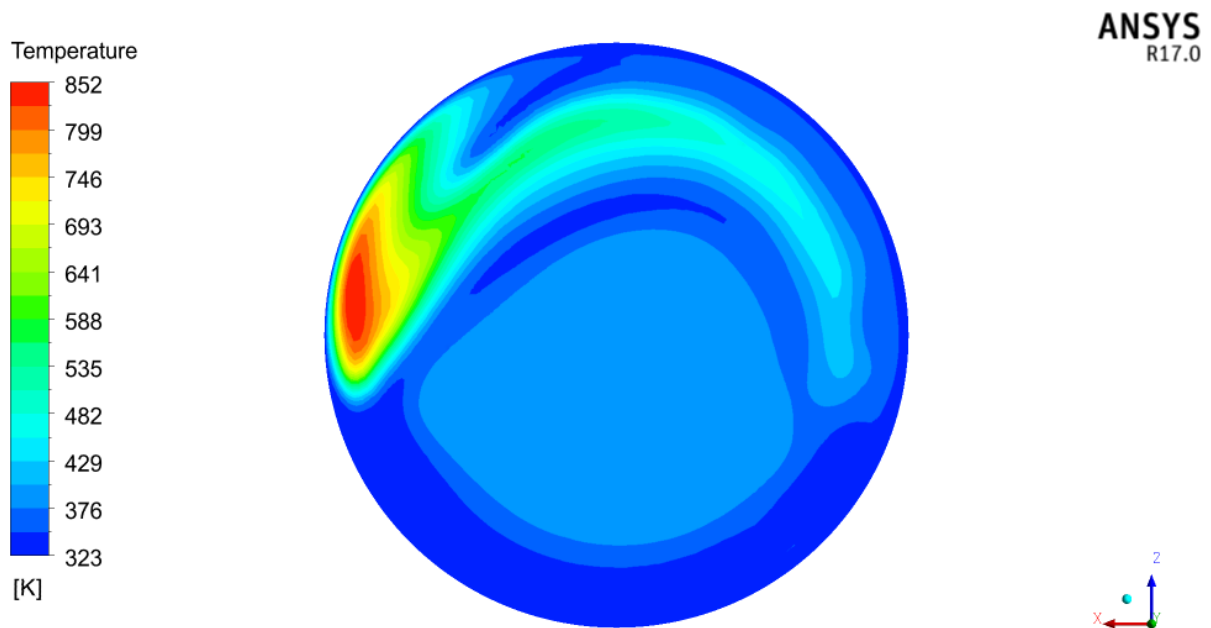
Κατ' αρχάς, δίνεται ένα διάγραμμα φάσεων (ή οριακός κύκλος) των μεταβλητών ταχύτητας και θερμοκρασίας για τον μικρότερο ρυθμό περιστροφής $\omega=40$ rad/s, σε ένα σταθερό σημείο του αντιδραστήρα.



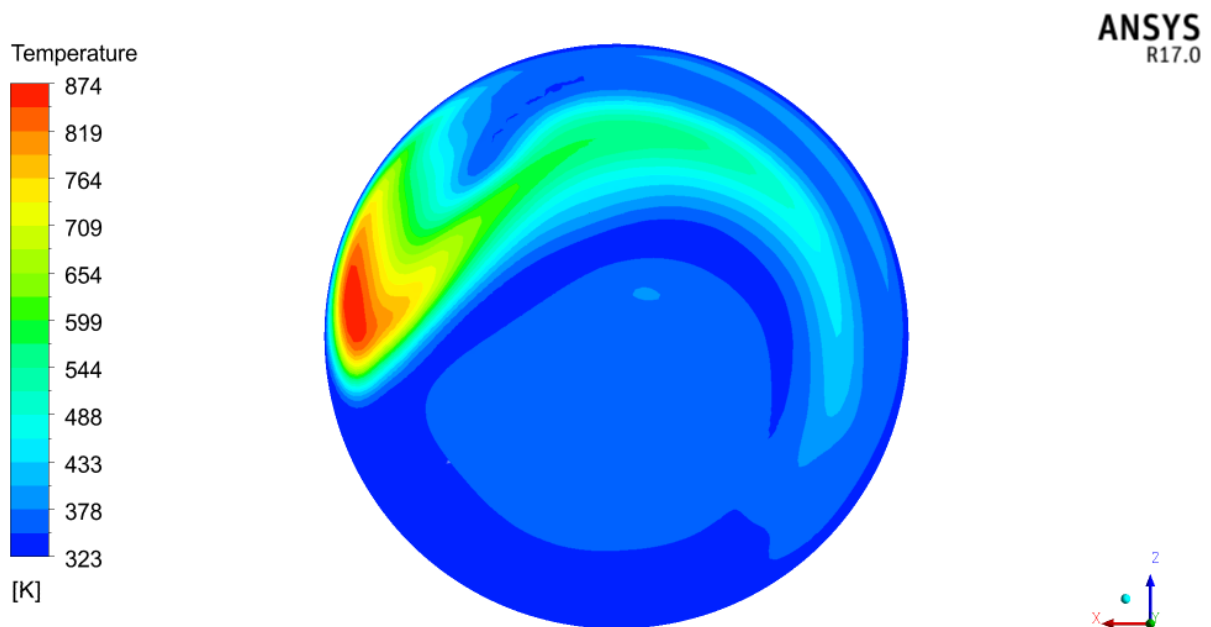
Σχήμα 5.4 Οριακός κύκλος (limit cycle): Ταχύτητα συναρτήσει της θερμοκρασίας σε απόσταση 0,75" πάνω από το υπόστρωμα και $r=R_{\text{wafer}}$, για $p=250$ Torr και $\omega=40$ rad/s.

Κεφάλαιο 5^ο: ΑΠΟΤΕΛΕΣΜΑΤΑ

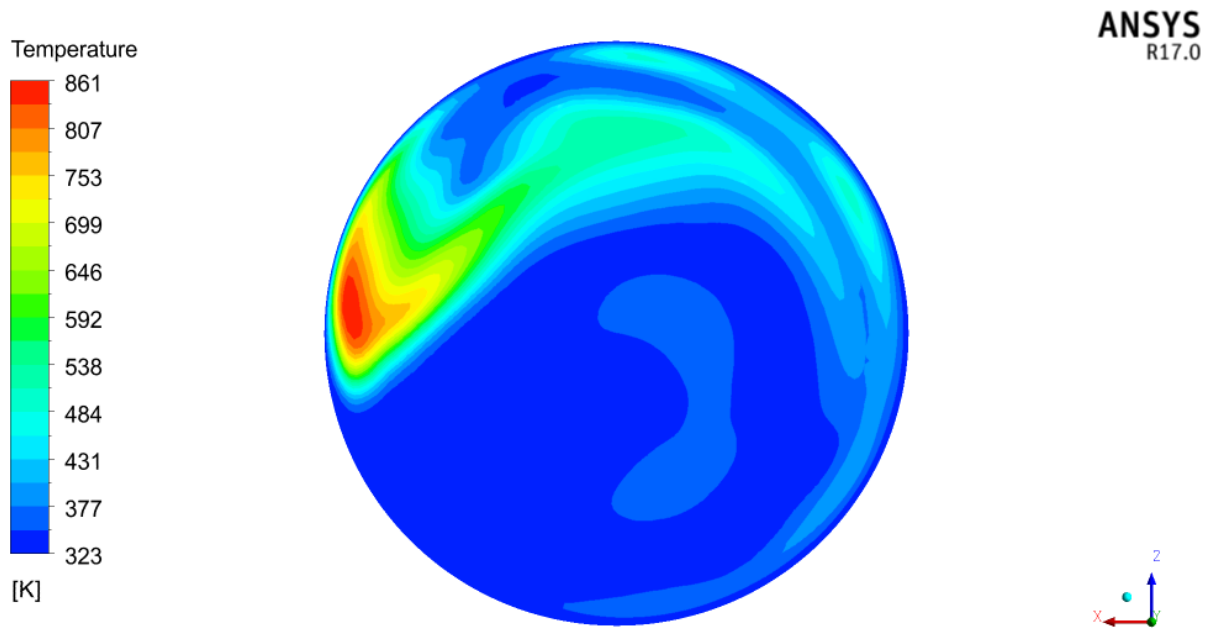
Παρακάτω φαίνονται οι θερμοκρασιακές κατανομές για κάθε εξεταζόμενη γωνιακή ταχύτητα.



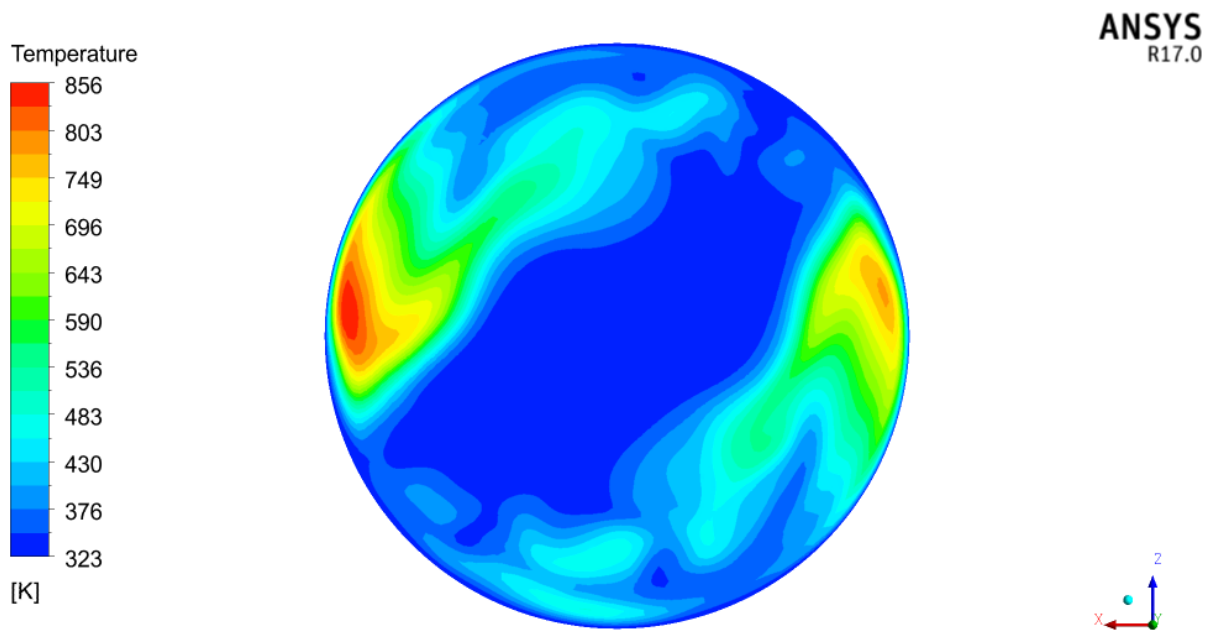
Εικόνα 5.3 Στιγμαία κατανομή θερμοκρασίας σε οριζόντια διατομή του αντιδραστήρα 0.75'' πάνω από το υπόστρωμα, για $p=250$ Torr και $\omega=40$ rad/s.



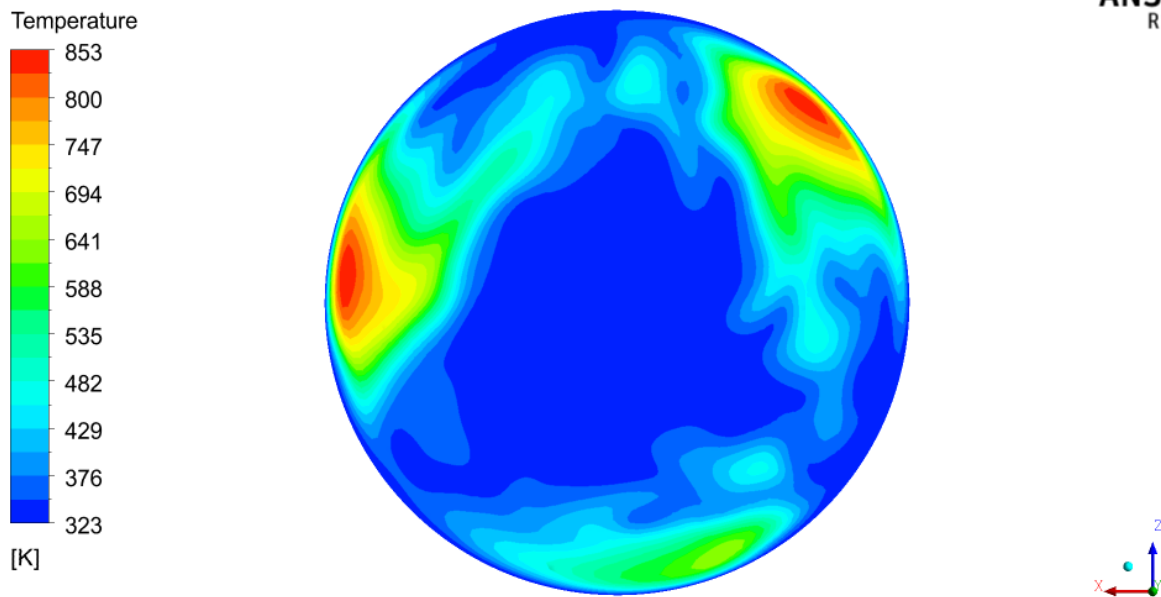
Εικόνα 5.4 Στιγμαία κατανομή θερμοκρασίας σε οριζόντια διατομή του αντιδραστήρα 0.75'' πάνω από το υπόστρωμα, για $p=250$ Torr και $\omega=50$ rad/s.



Εικόνα 5.5 Στιγμαία κατανομή θερμοκρασίας σε οριζόντια διατομή του αντιδραστήρα 0.75'' πάνω από το υπόστρωμα, για $p=250$ Torr και $\omega=60$ rad/s.

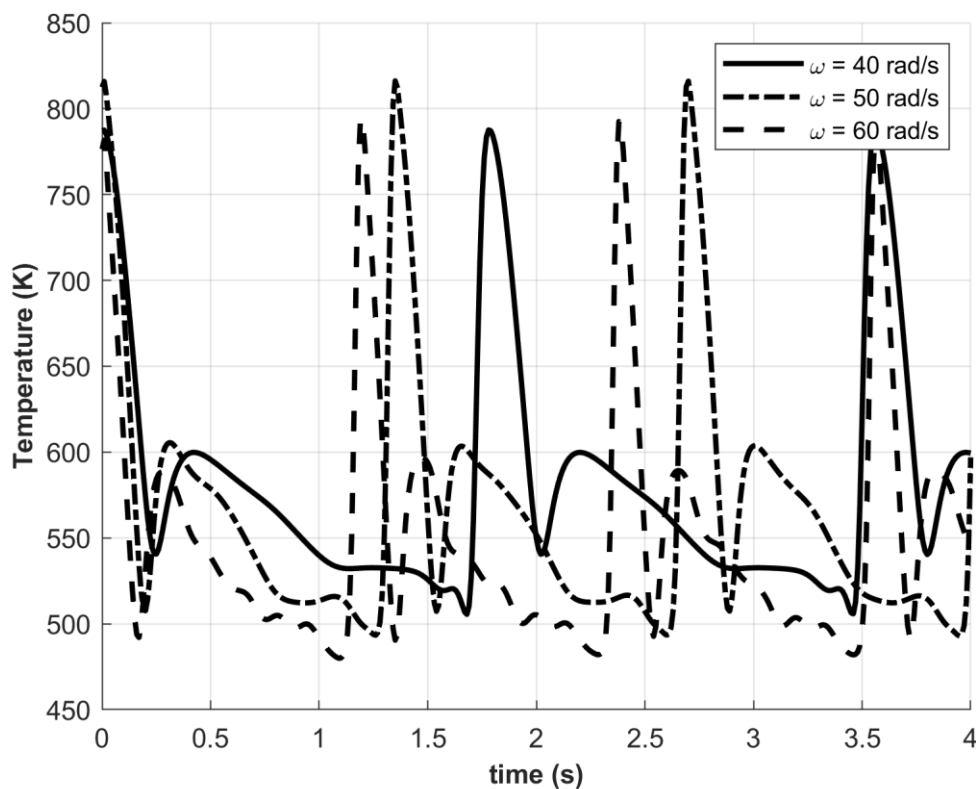


Εικόνα 5.6 Στιγμαία κατανομή θερμοκρασίας σε οριζόντια διατομή του αντιδραστήρα 0.75'' πάνω από το υπόστρωμα, για $p=250$ Torr και $\omega=70$ rad/s.

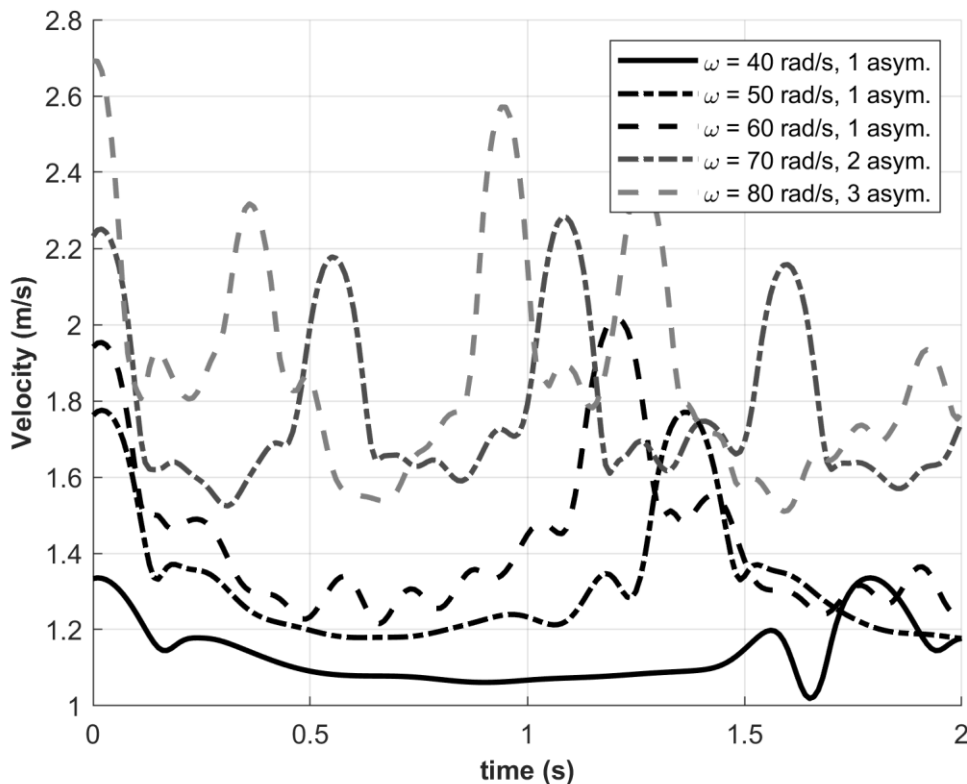


Εικόνα 5.7 Στιγμαία κατανομή θερμοκρασίας σε οριζόντια διατομή του αντιδραστήρα 0.75'' πάνω από το υπόστρωμα, για $p=250$ Torr και $\omega=80$ rad/s.

Από τα εύρη (legend) των θερμοκρασιακών κατανομών στην επιλεγθείσα οριζόντια διατομή και το Σχήμα 5.5, φαίνεται ότι για $\omega=50$ rad/s η θερμοκρασία της ασύμμετρης περιοχής είναι η υψηλότερη, σε σύγκριση με τις υπόλοιπες τιμές γωνιακής ταχύτητας του δίσκου.



Σχήμα 5.5 Θερμοκρασία συναρτήσει του χρόνου σε απόσταση 0,75'' πάνω από το υπόστρωμα και $r=R_{\text{wafer}}$, για πίεση $p=250$ Torr.



Σχήμα 5.6 Ταχύτητα συναρτήσει του χρόνου σε απόσταση 0,75" πάνω από το υπόστρωμα και $r=R_{\text{wafer}}$, για πίεση $p=250$ Torr.

Όπως αναφέρθηκε παραπάνω, το αποτέλεσμα της μη-αξονοσυμμετρικής ροής είναι η περιφορά μίας ή περισσότερων θερμών περιοχών με σταθερή συχνότητα (για το εκάστοτε ω) γύρω από τον κατακόρυφο άξονα. Αυτό το φαινόμενο γίνεται εμφανές και στα παραπάνω σχήματα, όπου φαίνεται η θερμοκρασία και το μέτρο της ταχύτητας σε ένα σταθερό σημείο του αντιδραστήρα για διαφορετικές τιμές του ρυθμού περιστροφής. Στο Σχήμα 5.5 προβάλλεται η εξέλιξη της θερμοκρασίας μόνο σε κάποιες λύσεις, για καλύτερη εποπτεία.

Επιπλέον, δείχθηκε στην παράγραφο 5.1 πως στις ίδιες συνθήκες εμφανίζονται και ευσταθείς μόνιμες αξονοσυμμετρικές λύσεις. Άρα, σε αυτή την πίεση λειτουργίας ο χώρος λύσεων του πεδίου ροής της διεργασίας παρουσιάζει πολλαπλότητα για όλες τις εξεταζόμενες τιμές ρυθμού περιστροφής πάνω από 40 rad/s. Ειδικότερα, όλα αυτά τα ζεύγη συνθηκών λειτουργίας έχουν μια μόνιμη αξονοσυμμετρική λύση και μια αντίστοιχη περιοδική, όπου λαμβάνει χώρα ρήξη της συμμετρίας.

Τέλος, για όλες τις παραπάνω λύσεις εφαρμόζεται η συνδυαστική μέθοδος της παραγράφου 4.3 για την εύρεση της περιόδου (και της συχνότητας) περιστροφής των ασυμμετριών γύρω από τον κατακόρυφο άξονα. Τα αποτελέσματα αυτά, μαζί με τα βασικά χαρακτηριστικά του εκάστοτε πεδίου ροής, συγκεντρώνονται στον παρακάτω πίνακα.

Κεφάλαιο 5^ο: ΑΠΟΤΕΛΕΣΜΑΤΑ

Πίνακας 5.1 Σύνοψη χαρακτηριστικών μη-συμμετρικών λύσεων, για πίεση 250 Torr.

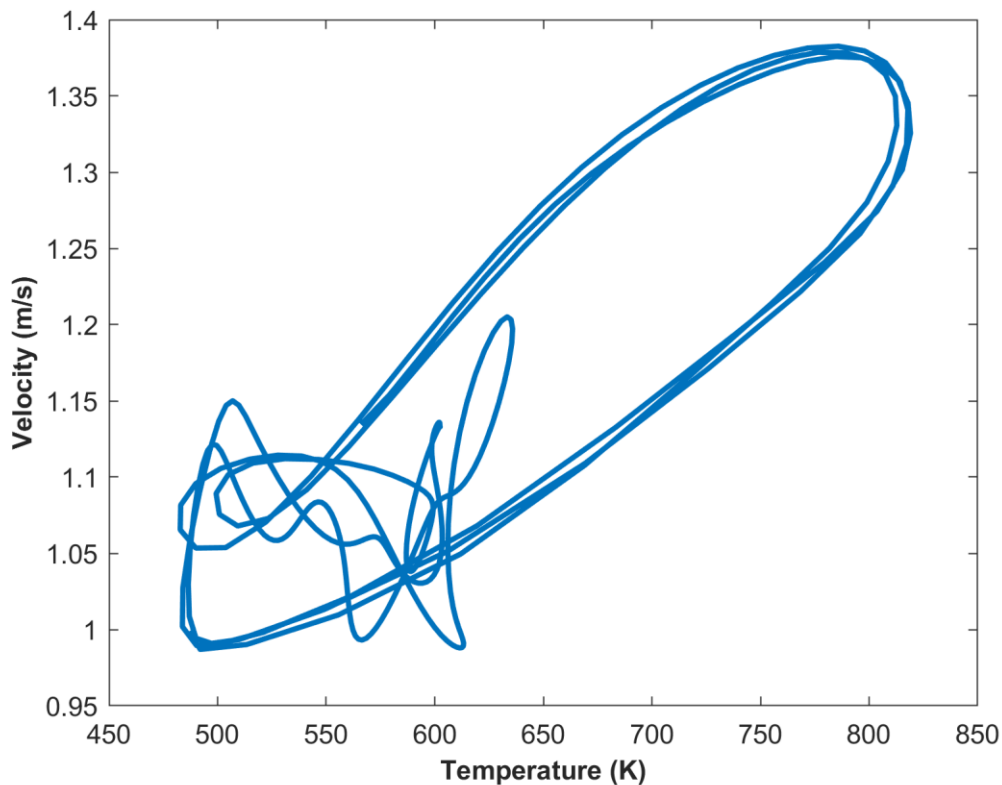
Ρυθμός περιστροφής (rad/s)	Μη-συμμετρικές περιοχές	Περίοδος (s)	Συχνότητα (Hz)
40	1	1.78	0.56
50	1	1.35	0.74
60	1	1.19	0.84
70	2	1.06	0.94
80	3	0.99	1.01

Από τον πίνακα φαίνεται η μείωση της περιόδου περιστροφής και η αύξηση των ασύμμετρων, περιστρεφόμενων περιοχών ρευστού συναρτήσει της γωνιακής ταχύτητας του δίσκου.

Πίεση 300 Torr

Στην ενότητα αυτή παρουσιάζονται τα αποτελέσματα των περιοδικών λύσεων για 300 Torr. Στην πίεση αυτή προσομοιώνεται η διεργασία για $\omega=20-70$ rad/s. Μόνο οι λύσεις για ρυθμό ίσο ή μεγαλύτερο από 40 rad/s είναι περιοδικές, ενώ οι υπόλοιπες μεταβατικές και μη-περιοδικές αναφέρονται στην ενότητα 5.3.

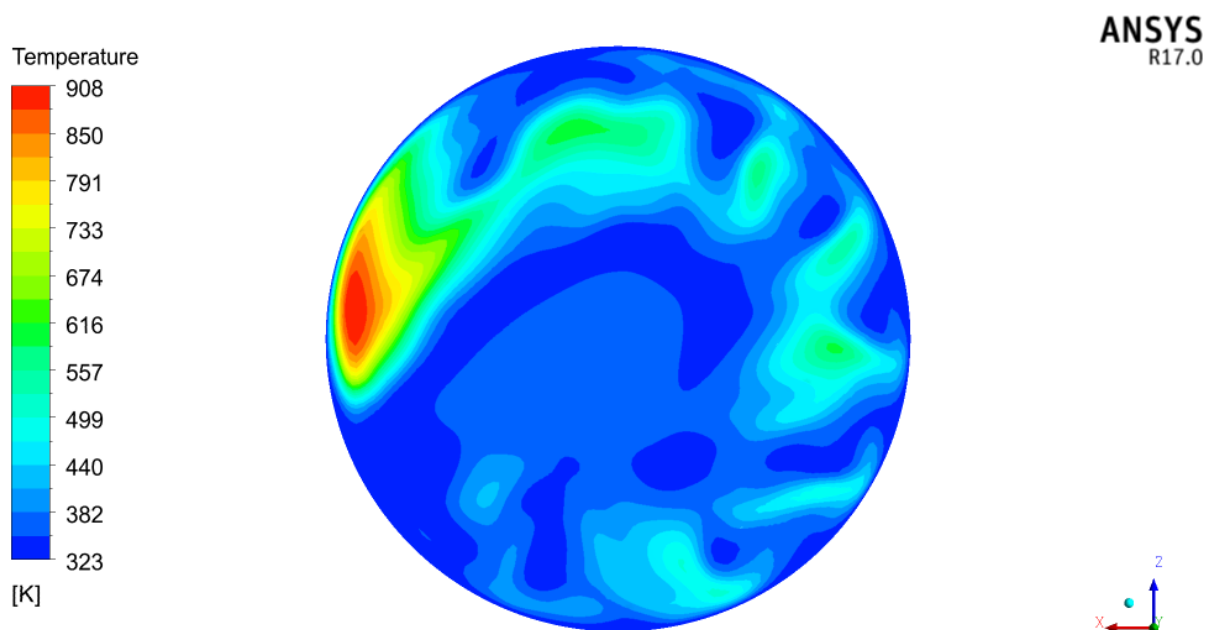
Αρχικά, δίνεται το διάγραμμα φάσεων των μεταβλητών ταχύτητας και θερμοκρασίας σε ένα σταθερό σημείο του αντιδραστήρα, ξανά για τον μικρότερο ρυθμό περιστροφής $\omega=40$ rad/s.



Σχήμα 5.7 Οριακός κύκλος (limit cycle): Ταχύτητα συναρτήσει της θερμοκρασίας σε απόσταση 0,75'' πάνω από το υπόστρωμα και $r=R_{\text{wafer}}$, για $p=300$ Torr και $\omega=40$ rad/s.

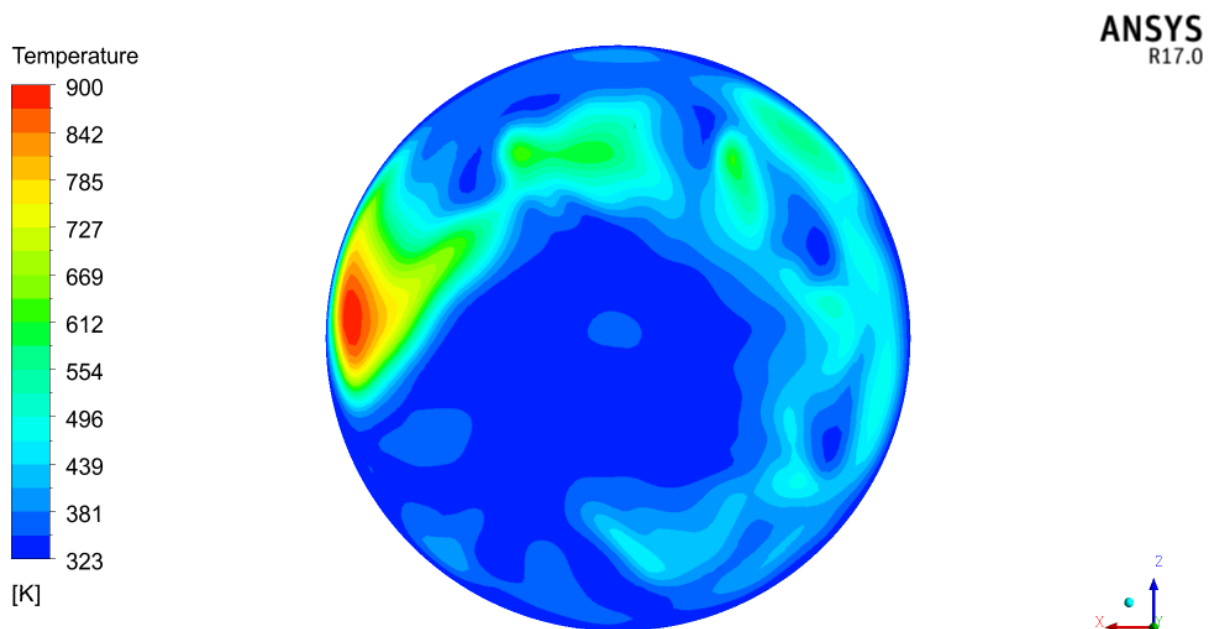
Η κάπως απρόβλεπτη συμπεριφορά στις χαμηλές τιμές των μεταβλητών στο παραπάνω σχήμα οφείλεται στις δυνάμεις άνωσης, οι οποίες σε αυτήν την πίεση αρχίζουν να γίνονται σημαντικές. Όπως φαίνεται και στις επόμενες εικόνες, πίσω από την κύρια ασύμμετρη θερμή περιοχή δημιουργούνται δίνες ρευστού, που διαταράσσουν ακόμα περισσότερο τη ροή. Παράλληλα, ο οριακός κύκλος έχει μια μικρή απόκλιση από περιστροφή σε περιστροφή στο άνω δεξιό μέρος του σχήματος, που αντιστοιχεί στη στιγμή που η ασυμμετρία διέρχεται από το σταθερό σημείο καταγραφής.

Παρουσιάζονται και πάλι οι κατανομές θερμοκρασίας στην οριζόντια διατομή για τις νέες συνθήκες πίεσης.

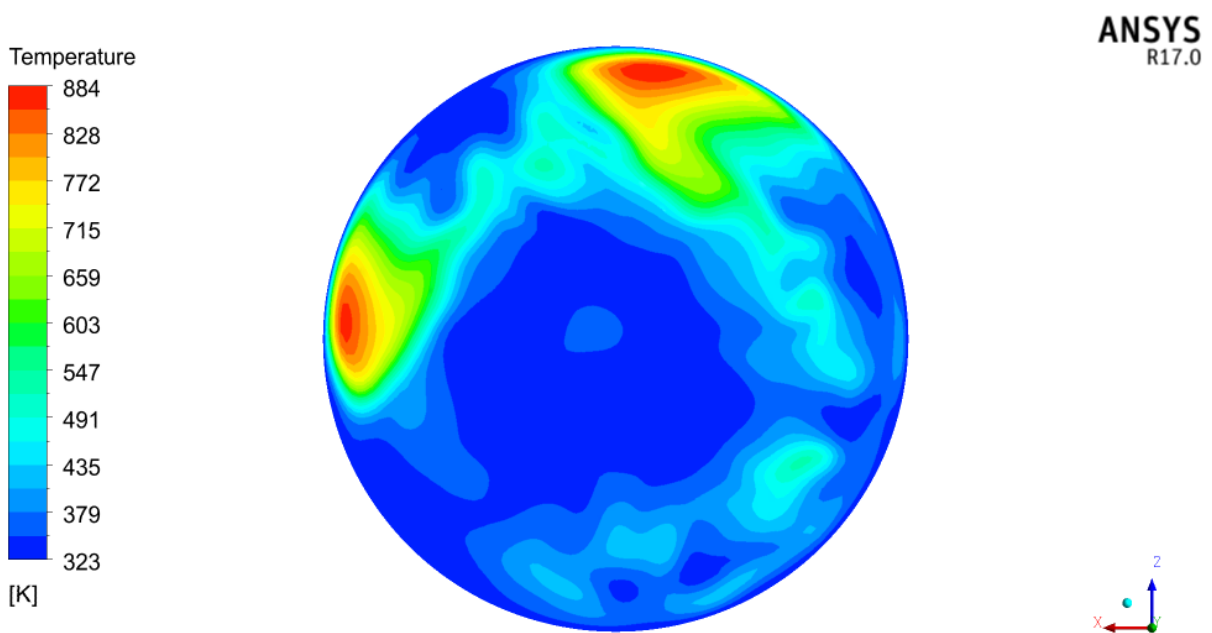


Εικόνα 5.8 Στιγμαία κατανομή θερμοκρασίας σε οριζόντια διατομή του αντιδραστήρα 0.75'' πάνω από το υπόστρωμα, για $p=300$ Torr και $\omega=40$ rad/s.

Στις συνθήκες λειτουργίας του αντιδραστήρα όπου η πίεση είναι 300 Torr και η γωνιακή ταχύτητα του δίσκου 50 rad/s προκύπτουν δύο διαφορετικές ευσταθείς περιοδικές και μη συμμετρικές λύσεις, με διαφορετικά πεδία ροής. Η επικράτηση της πρώτης ή της δεύτερης ροής εξαρτάται από την αρχικοποίηση.

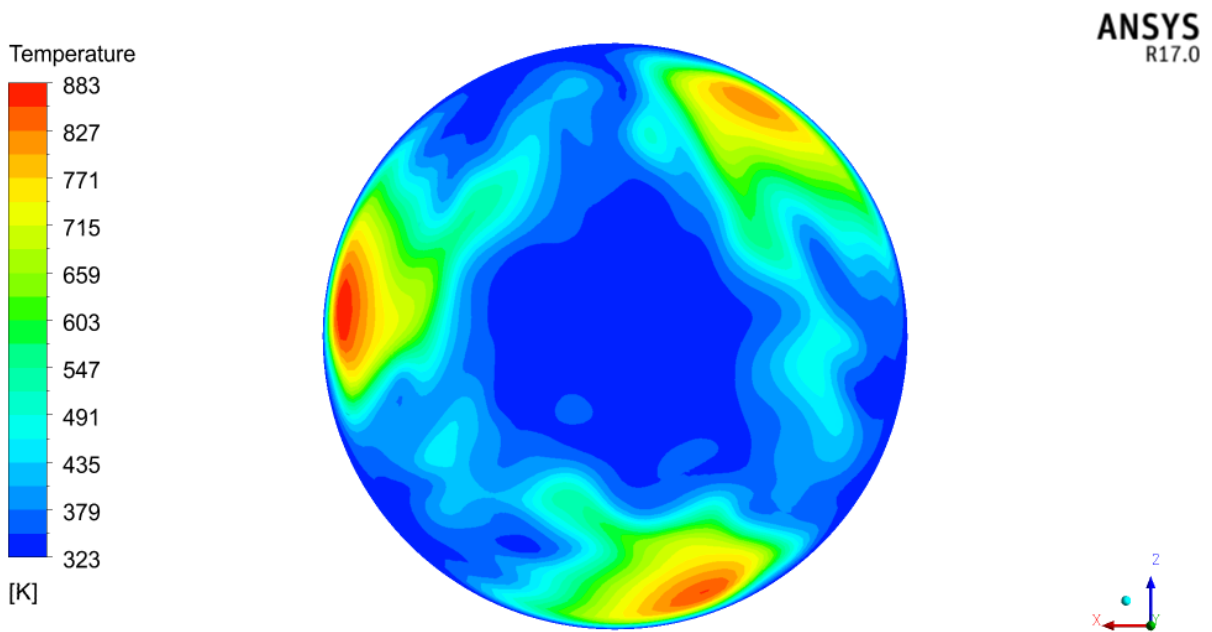


Εικόνα 5.9 Στιγμαία κατανομή θερμοκρασίας σε οριζόντια διατομή του αντιδραστήρα 0.75'' πάνω από το υπόστρωμα, για $p=300$ Torr και $\omega=50$ rad/s. Η αρχικοποίηση έγινε βάσει στιγμιότυπου περιοδικής λύσης για ίδια πίεση και $\omega=40$ rad/s.

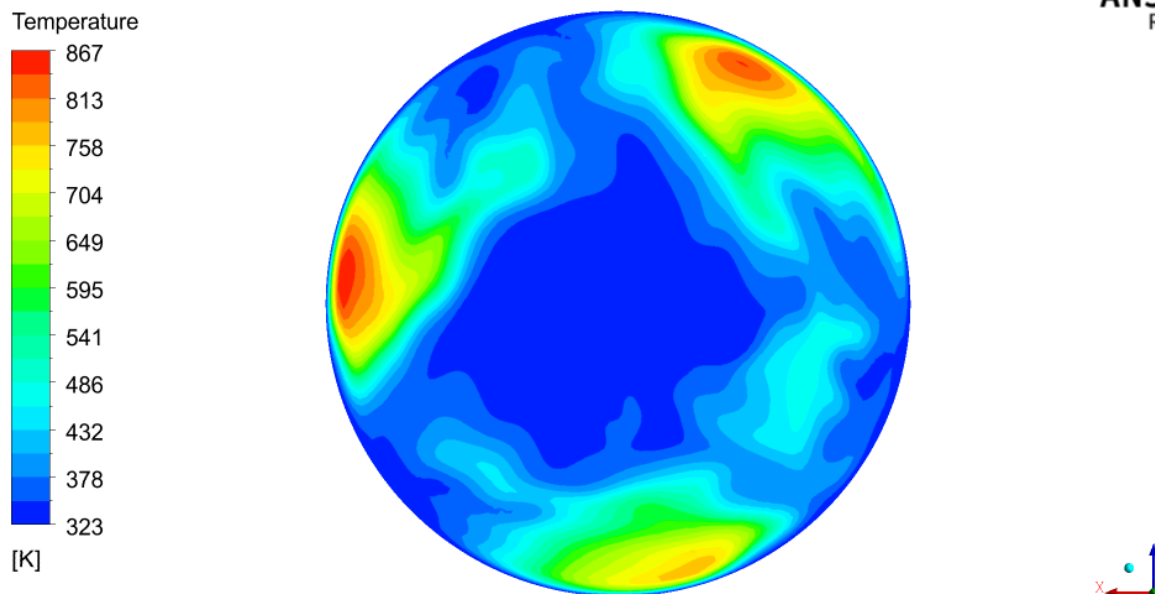


Εικόνα 5.10 Στιγμαία κατανομή θερμοκρασίας σε οριζόντια διατομή του αντιδραστήρα 0.75'' πάνω από το υπόστρωμα, για $p=300$ Torr και $\omega=50$ rad/s. Η αρχικοποίηση έγινε βάσει στιγμιότυπου περιοδικής λύσης για ίδια γωνιακή ταχύτητα και $p=350$ Torr.

Ενδιαφέρον προκαλεί το γεγονός ότι στο παραπάνω σχήμα οι θερμές ασύμμετρες περιοχές έχουν μεταξύ τους μικρότερη διαφορά φάσης από εκείνη που ίσως θα περίμενε κάποιος, δηλαδή να κινούνται αντιδιαμετρικά η μία από την άλλη, με διαφορά 180 μοιρών. Ακόμα, βρέθηκε ότι η συχνότητα μιας πλήρους περιστροφής των ασύμμετρων περιοχών είναι επίσης διαφορετική για καθεμιά από τις δύο παραπάνω λύσεις.



Εικόνα 5.11 Στιγμαία κατανομή θερμοκρασίας σε οριζόντια διατομή του αντιδραστήρα 0.75'' πάνω από το υπόστρωμα, για $p=300$ Torr και $\omega=60$ rad/s.



Εικόνα 5.12 Στιγμαία κατανομή θερμοκρασίας σε οριζόντια διατομή του αντιδραστήρα 0.75'' πάνω από το υπόστρωμα, για $p=300$ Torr και $\omega=70$ rad/s.

Στα σχήματα που αντιστοιχούν στα 60 και 70 rad/s φαίνεται πως οι τρεις μη-συμμετρικές περιοχές κινούνται με περίπου ίδια διαφορά φάσης μεταξύ τους, δηλαδή 120 μοίρες.

Η μεθοδολογία εύρεσης της περιόδου των μη-συμμετρικών λύσεων ακολουθείται ξανά και βάσει των αποτελεσμάτων κατασκευάζεται ο ακόλουθος πίνακας.

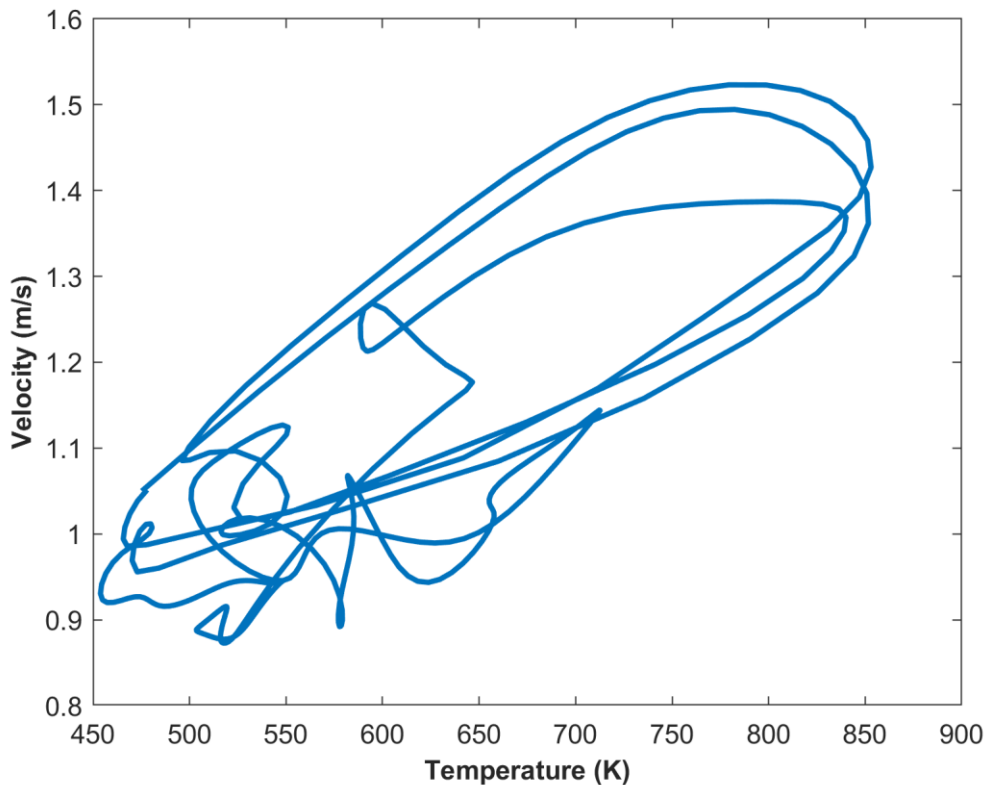
Πίνακας 5.2 Σύνοψη χαρακτηριστικών μη-συμμετρικών λύσεων, για πίεση 300 Torr.

Ρυθμός περιστροφής (rad/s)	Μη-συμμετρικές περιοχές	Περίοδος (s)	Συχνότητα (Hz)
40	1	1.67	0.60
50	1	1.37	0.73
50	2	1.47	0.68
60	3	1.23	0.81
70	3	1.08	0.93

Και σε αυτή την πίεση η περίοδος της λύσης μειώνεται όσο κλιμακώνεται η γωνιακή ταχύτητα, ενώ το αντίθετο συμβαίνει στο πλήθος των μη-συμμετρικών περιοχών. Επιπλέον, τα δύο ευσταθή περιοδικά πεδία ροής για $\omega=50$ rad/s παρουσιάζουν διαφορετική συμπεριφορά ως προς το χρόνο, καθώς η λύση με μόνο μία ασυμμετρία έχει 7% μικρότερη περίοδο από εκείνη με τις δύο θερμές περιοχές.

Πίεση 350 Torr

Η μεγαλύτερη πίεση λειτουργίας όπου βρέθηκαν περιοδικές λύσεις είναι τα 350 Torr. Όλα τα πεδία ροής που εξετάστηκαν είναι περιοδικά και μη συμμετρικά, εκτός από εκείνο με ταχύτητα 30 rad/s. Στο τελευταίο οι δυνάμεις άνωσης κυριαρχούν και καθιστούν την ροή πολύ απρόβλεπτη, αφού αναπτύσσονται ισχυρές δευτερεύουσες ροές.



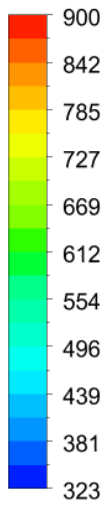
Σχήμα 5.8 Οριακός κύκλος (limit cycle): Ταχύτητα συναρτήσει της θερμοκρασίας σε απόσταση 0,75" πάνω από το υπόστρωμα και $r=R_{\text{wafer}}$, για $p=350$ Torr και $\omega=40$ rad/s.

Οι απότομες και σε ένα βαθμό τυχαίες μεταβολές των μεταβλητών στο παραπάνω σχήμα είναι απόρροια των πολύ ισχυρών δυνάμεων άνωσης. Η σύγκριση του παραπάνω με τα δύο αντίστοιχα διαγράμματα για μικρότερες πιέσεις και ίδια περιστροφή (Σχήμα 5.4 και Σχήμα 5.7) δίνει μια καλή εικόνα της αρνητικής επίδρασης της άνωσης στον αντιδραστήρα.

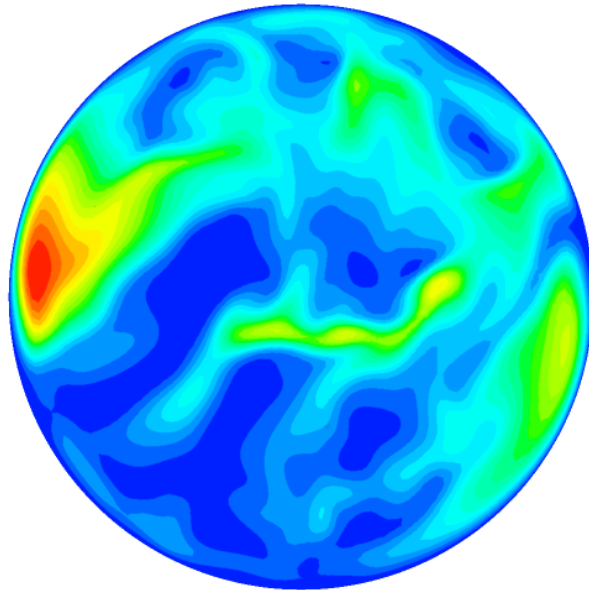
Είναι εμφανές ότι η συμπεριφορά των μεταβλητών στο κάτω αριστερό τμήμα του σχήματος γίνεται πολύ απρόβλεπτη. Αυτό οφείλεται στο ότι με την περαιτέρω αύξηση της πίεσης ενισχύονται ακόμα περισσότερο οι δευτερεύουσες ροές, οι οποίες δρουν αποσταθεροποιητικά στη ροή. Για τον ίδιο λόγο, η μέγιστη τιμή της πίεσης και της θερμοκρασίας δεν ταυτίζεται σε κάθε περιστροφή, αλλά παρουσιάζει μια μη αμελητέα διακύμανση.

Στη συνέχεια δείχνονται και πάλι οι θερμοκρασιακές κατανομές στην οριζόντια διατομή, λίγο πάνω από τον περιστρεφόμενο δίσκο.

Temperature



[K]

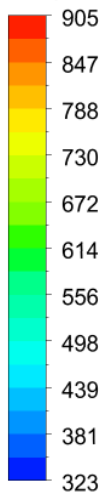


ANSYS
R17.0

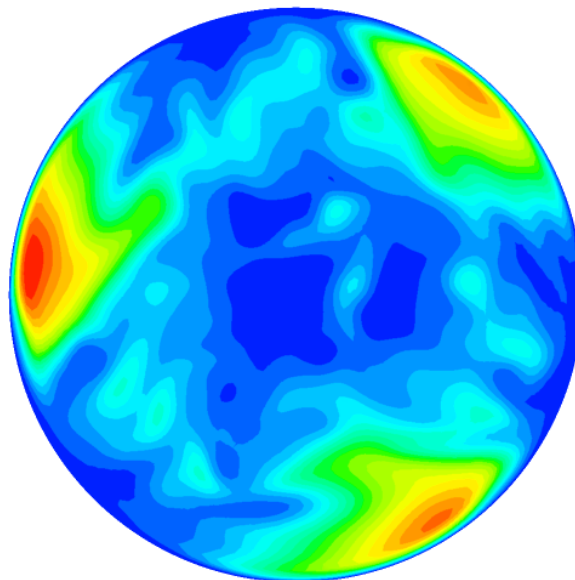
Εικόνα 5.13 Στιγμαία κατανομή θερμοκρασίας σε οριζόντια διατομή του αντιδραστήρα 0.75'' πάνω από το υπόστρωμα, για $p=350$ Torr και $\omega=40$ rad/s.

Στην Εικόνα 5.13 φαίνεται πως στις συγκεκριμένες συνθήκες p - ω ξεκινά ο σχηματισμός μιας δεύτερης μη-συμμετρικής περιοχής ρευστού, αλλά ο ρυθμός περιστροφής δεν επαρκεί για την πλήρη ανάπτυξη της.

Temperature

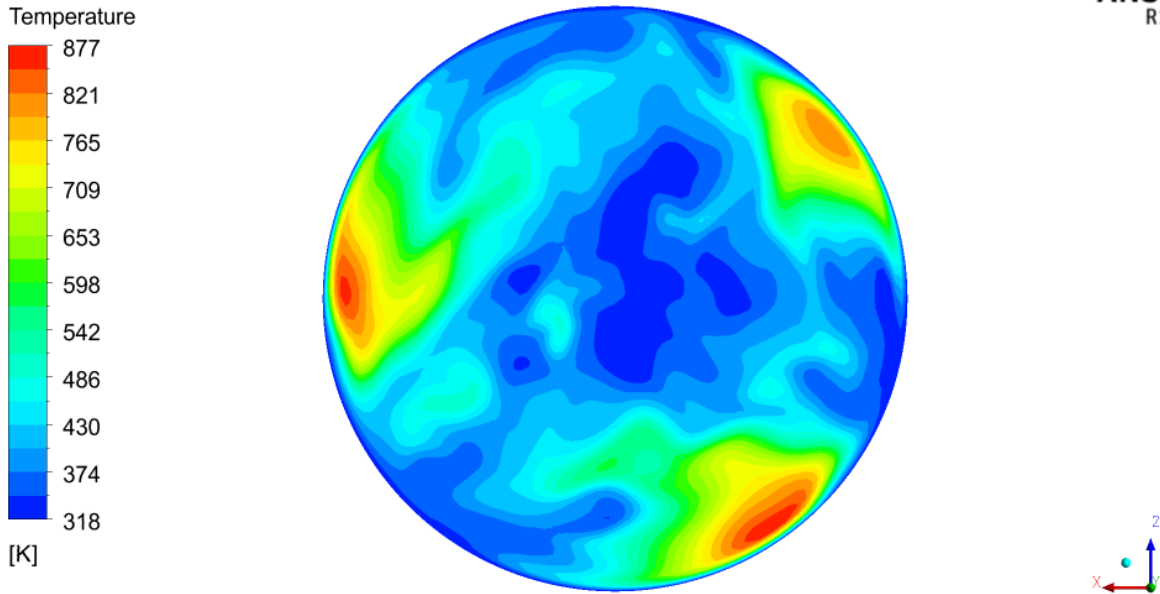


[K]

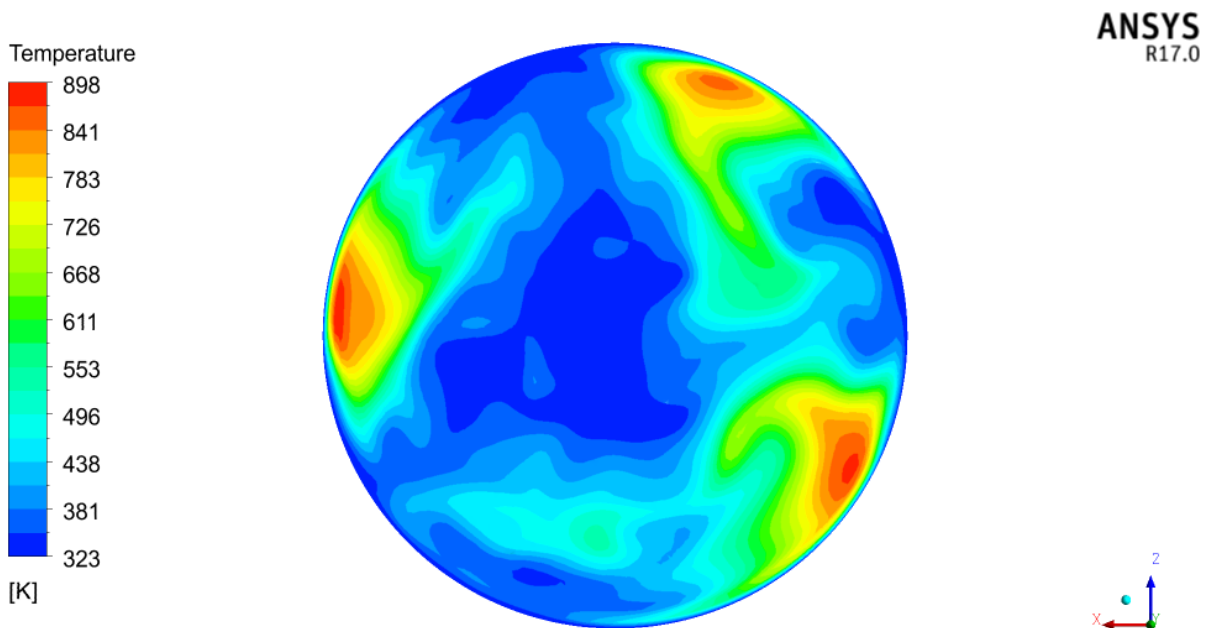


ANSYS
R17.0

Εικόνα 5.14 Στιγμαία κατανομή θερμοκρασίας σε οριζόντια διατομή του αντιδραστήρα 0.75'' πάνω από το υπόστρωμα, για $p=350$ Torr και $\omega=50$ rad/s.

ANSYS
R17.0

Εικόνα 5.15 Στιγμαία κατανομή θερμοκρασίας σε οριζόντια διατομή του αντιδραστήρα 0.75'' πάνω από το υπόστρωμα, για $p=350$ Torr και $\omega=60$ rad/s.



Εικόνα 5.16 Στιγμαία κατανομή θερμοκρασίας σε οριζόντια διατομή του αντιδραστήρα 0.75'' πάνω από το υπόστρωμα, για $p=350$ Torr και $\omega=70$ rad/s.

Για τους υψηλούς ρυθμούς περιστροφής 60 και 70 rad/s οι ασύμμετρες περιοχές δεν παραμένουν σε ίση γωνία μεταξύ τους, αλλά η διαφορά φάσης τους παρουσιάζει μια αξιοσημείωτη διακύμανση συναρτήσεως του χρόνου. Επίσης, σε αυτές τις συνθήκες οι θερμές περιοχές τείνουν να εμφανίζουν απότομες κινήσεις στην αξονική διεύθυνση. Αυτό εικάζεται ότι συμβαίνει λόγω των ανταγωνιζόμενων ισχυρών δυνάμεων άνωσης και των φυγόκεντρων δυνάμεων, που ωθούν το ρευστό προς αντίθετες κατευθύνσεις, δηλαδή την είσοδο και την έξοδο του αντιδραστήρα, αντίστοιχα.

Κεφάλαιο 5^ο: ΑΠΟΤΕΛΕΣΜΑΤΑ

Το τελευταίο εύρημα για την πίεση αυτή είναι οι περίοδοι των λύσεων. Για τον υπολογισμό τους χρησιμοποιήθηκε η ίδια συνδυαστική μέθοδος φασματικής ανάλυσης, όπως και παραπάνω.

Πίνακας 5.3 Σύνοψη χαρακτηριστικών μη-συμμετρικών λύσεων, για πίεση 350 Torr.

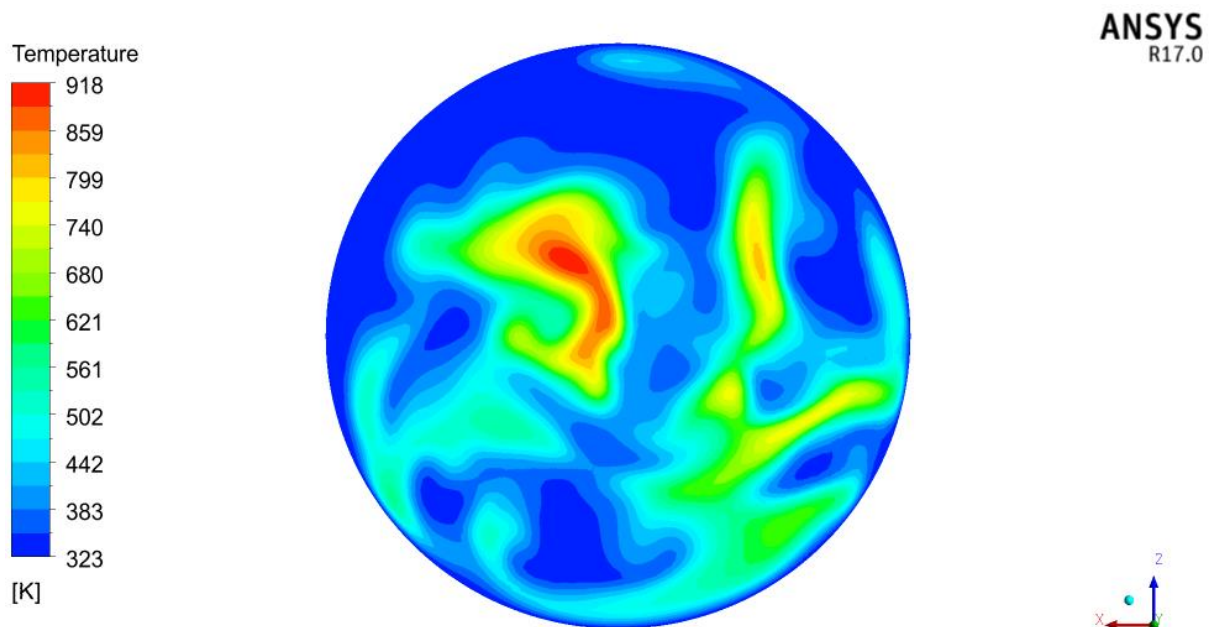
Ρυθμός περιστροφής (rad/s)	Μη-συμμετρικές περιοχές	Περίοδος (s)	Συχνότητα (Hz)
40	1	1.65	0.61
50	3	1.39	0.72
60	3	1.14	0.88
70	3	0.96	1.04

Και πάλι, ο αριθμός των μη-συμμετρικών περιοχών και η συχνότητα της περιστροφής των ασυμμετριών αυξάνονται συναρτήσει του ρυθμού περιστροφής του δίσκου.

5.3. Μη περιοδικές μη-συμμετρικές (μεταβατικές) λύσεις

Σε κάποιες συνθήκες λειτουργίας του αντιδραστήρα βρέθηκαν μεταβατικές λύσεις, που δεν συγκλίνουν σε μόνιμη κατάσταση, αλλά ούτε παρουσιάζουν κάποια εμφανή περιοδικότητα. Αυτές εντοπίζονται για σχετικά μεγάλες πιέσεις και μικρούς ρυθμούς περιστροφής υποστρώματος και οφείλονται στις ισχυρές δυνάμεις άνωσης, οι οποίες διέπουν τη ροή.

Συγκεκριμένα, παρουσιάζεται παρακάτω ένα στιγμιότυπο της λύσης για 300 Torr και 30 rad/s, ενώ ποιοτικά παρόμοιο είδος ροής αναπτύσσεται για τα ζεύγη 300 Torr & 20 rad/s, 350 Torr & 30 rad/s και 400 Torr & 30 rad/s. Το πρώτο πεδίο από τα προαναφερθέντα έχει τη μεγαλύτερη τιμή ρυθμού περιστροφής και τη μικρότερη τιμή πίεσης μεταξύ των λύσεων, επομένως οι υπόλοιπες αυτής της κατηγορίας εμφανίζουν ακόμα εντονότερα φαινόμενα άνωσης.



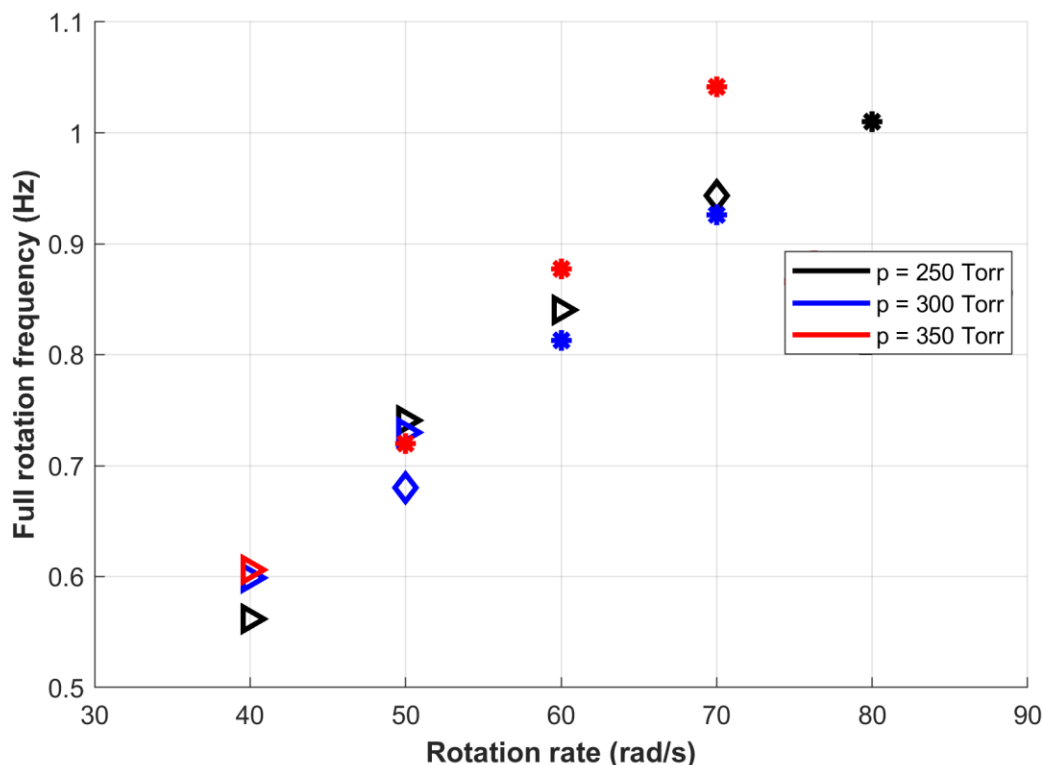
Εικόνα 5.17 Στιγμαία κατανομή θερμοκρασίας σε οριζόντια διατομή του αντιδραστήρα 0.75'' πάνω από το υπόστρωμα, για $p=300$ Torr και $\omega=30$ rad/s.

Από την κατανομή αυτή φανερώνεται η παρουσία πολύ σημαντικών δευτερευουσών ροών στον αντιδραστήρα, οι οποίες κυριαρχούν στο πεδίο ροής. Αυτές αποτελούν καταστρεπτικό παράγοντα για τις ιδιότητες του εκάστοτε παραγόμενου υμενίου και γι' αυτό σε έναν αντιδραστήρα ΧΑΑ πρέπει να αποφεύγεται με κάθε τρόπο η λειτουργία σε συνθήκες ροής επηρεαζόμενης από την άνωση.

5.4. Σύνοψη

Σε αυτή την παράγραφο συγκεντρώνονται τα αποτελέσματα των πεδίων ροής, που προέκυψαν από την μοντελοποίηση της διεργασίας ΧΑΑ σε ένα εύρος συνθηκών και ομαδοποιούνται κατάλληλα με κατά το δυνατόν περιεκτικό τρόπο. Επιπλέον, συνοψίζονται οι ποσοτικές εκτιμήσεις της περιοδικότητας όλων των σχετικών λύσεων.

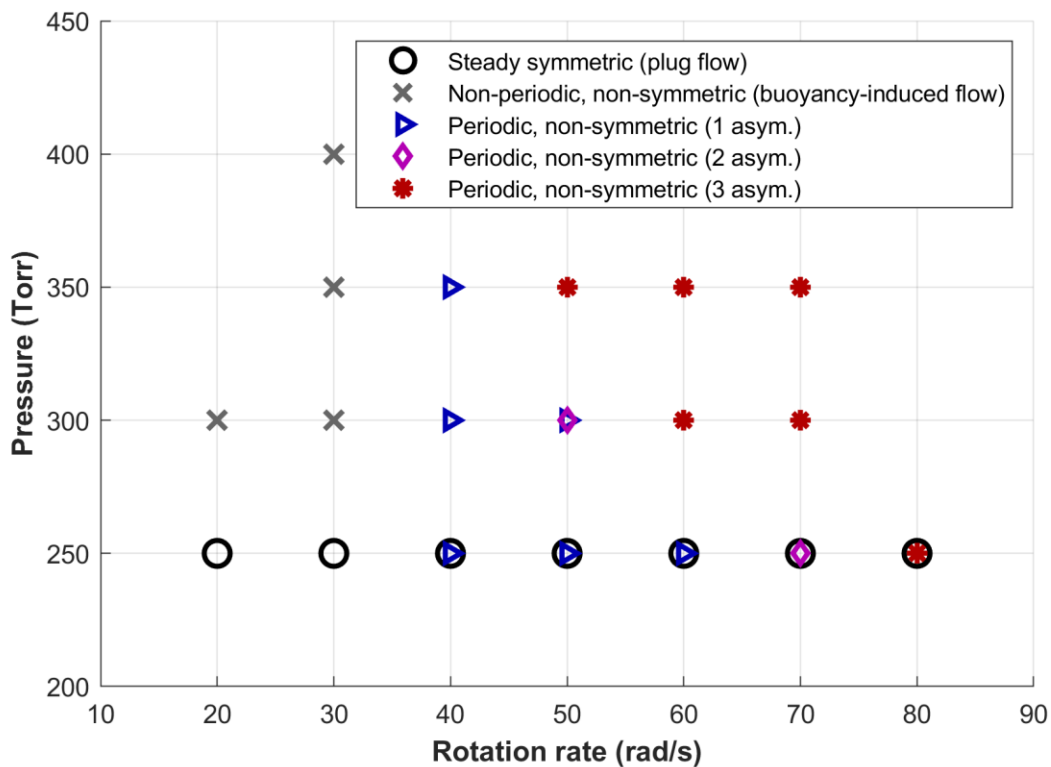
Ειδικότερα, στο πρώτο σχήμα παρουσιάζεται για κάθε περιοδική λύση η συχνότητα μίας πλήρους περιστροφής των μη-συμμετρικών περιοχών αυτής.



Σχήμα 5.9 Διάγραμμα συχνότητας μίας πλήρους περιστροφής της ασυμμετρίας συναρτήσει της γωνιακής ταχύτητας, για περιοδική ροή με μία (τρίγωνο), δύο (ρόμβοι) και τρεις (αστερίσκοι) μη-συμμετρικές περιοχές.

Από το παραπάνω σχήμα φαίνεται πως η συχνότητα περιστροφής των ασυμμετριών είναι πρακτικά ανάλογη του ρυθμού περιστροφής του υποστρώματος. Βέβαια, ανάλογα με την πίεση η κλίση της ευθείας είναι ελαφρώς διαφορετική. Παρόμοιες μελέτες επαληθεύουν τη γραμμική συσχέτιση μεταξύ των δύο μεγεθών του σχήματος σε περιοδικές, μη συμμετρικές ροές [13].

Τελευταίο κατασκευάζεται το χαρακτηριστικό διάγραμμα πίεσης-ρυθμού περιστροφής. Το διάγραμμα αυτό έχει αποδειχθεί πολύ χρήσιμο στην ανάλυση των διεργασιών οργανομεταλλικής ΧΑΑ σε αντιδραστήρες περιστρεφόμενου υποστρώματος. Εδώ συνοψίζονται όλες οι λύσεις που προέκυψαν στην παρούσα μελέτη, οι οποίες χαρακτηρίζονται με βάση το είδος της ροής ως προς το χρόνο και την ύπαρξη ή όχι συμμετρίας.



Σχήμα 5.10 Συνολικό διάγραμμα πίεσης λειτουργίας–ρυθμού περιστροφής υποστρώματος, με χαρακτηρισμό της ροής για το σύνολο των περιπτώσεων της τρισδιάστατης προσομοίωσης.

Κατ' αρχάς, στο σχήμα διακρίνεται η περιοχή της ροής επηρεαζόμενης από την άνωση, για υψηλές πιέσεις και μικρούς ρυθμούς περιστροφής.

Για πίεση 250 Torr η ροή στον αντιδραστήρα παρουσιάζει πολλαπλότητα σε ένα μεγάλο εύρος τιμών γωνιακής ταχύτητας. Όλες οι τιμές ω από 20 έως 80 rad/s συγκλίνουν σε μόνιμη, αξονοσυμμετρική λύση με πεδίο ροής ίδιο με το δισδιάστατο πρόβλημα, δηλαδή εμβολική ροή. Ταυτόχρονα, για $\omega = 40$ rad/s και άνω συνυπάρχουν περιοδικές, μη-συμμετρικές λύσεις. Η σύγκλιση του πεδίου ροής στην πρώτη ή τη δεύτερη περίπτωση εξαρτάται από την αρχικοποίηση του.

Παρόμοια, για τις πιέσεις 300 και 350 Torr και γωνιακή ταχύτητα μεγαλύτερη από 40 rad/s, η διεργασία καταλήγει και πάλι σε μία περιοδική, μη-συμμετρική λύση. Μάλιστα, η περίπτωση για 300 Torr και 50 rad/s εμφανίζει και δεύτερη ευσταθή περιοδική λύση, με δύο ασύμμετρες περιοχές ρευστού.

Όπως φαίνεται στο σχήμα, ο αριθμός των ασύμμετρων θερμών περιοχών τείνει να αυξάνεται όσο μεγαλώνει η πίεση και η γωνιακή ταχύτητα. Παράλληλα, φαίνεται πως η ανάπτυξη μία ή τριών ασυμμετριών είναι ευνοϊκότερη, ενώ η ύπαρξη δύο περιστρεφόμενων ασύμμετρων περιοχών δεν είναι τόσο ευσταθής.

6. ΣΥΜΠΕΡΑΣΜΑΤΑ

Στα πλαίσια της παρούσας εργασίας, πραγματοποιήθηκαν τρισδιάστατες προσομοιώσεις της ροής σε έναν αντιδραστήρα οργανομεταλλικής χημικής απόθεσης από ατμό περιστρεφόμενου υποστρώματος, με χρήση του εμπορικού λογισμικού υπολογιστικής ρευστοδυναμικής Fluent. Η μοντελοποίηση καλύπτει ένα τυπικό εύρος των δύο βασικών λειτουργικών παραμέτρων, δηλαδή της πίεσης και του ρυθμού περιστροφής, στο οποίο συναντάται βιομηχανικά αυτή η διεργασία. Ο χώρος λύσεων στην μελέτη αυτή παρουσιάζει ιδιαίτερο ενδιαφέρον και τα αποτελέσματα που προέκυψαν οδηγούν σε αρκετά σημαντικές διαπιστώσεις σχετικά με τα πεδία ροής στον παρόντα αντιδραστήρα.

Η μικρότερη εξεταζόμενη πίεση των 250 Torr παρουσιάζει την πρώτη και πιο έντονη πολλαπλότητα στις λύσεις. Συγκεκριμένα, από την επίλυση του προβλήματος για τους υψηλούς ρυθμούς περιστροφής προκύπτουν δύο ευσταθείς λύσεις, με την αρχικοποίηση να καθορίζει σε ποια από τις αυτές θα συγκλίνει ο μεταβατικός επιλύτης. Αναλυτικότερα:

Η πρώτη από αυτές εμφανίζεται σε όλο το εύρος των μελετώμενων ρυθμών περιστροφής 20 – 80 rad/s, είναι μόνιμη και αξονοσυμμετρική και το αναπτυσσόμενο πεδίο είναι εμβολικής ροής. Τα προφίλ της ταχύτητας και της θερμοκρασίας σε αυτή την περίπτωση ταυτίζονται με τα αντίστοιχα για μοντελοποίηση του συστήματος στις δύο διαστάσεις. Στις συνθήκες της εμβολικής ροής η μεταφορά μάζας αποτελεί το ελέγχον στάδιο και έτσι ο ρυθμός ανάπτυξης του υμενίου είναι αντιστρόφως ανάλογος του πάχους του οριακού στρώματος. Όμως, το πάχος του οριακού στρώματος μειώνεται συναρτήσει του $Re_{\omega}^{-1/2}$, όπως δείχθηκε ήδη στα αποτελέσματα παραπάνω. Για αυτό, πρέπει να επιδιώκονται τα μέγιστα δυνατά ζεύγη τιμών πίεσης και ρυθμού περιστροφής, τα οποία διατηρούν αυτό το πεδίο ομοιόμορφης ροής.

Η δεύτερη λύση στα 250 Torr προκύπτει για ω ίσο ή μεγαλύτερο από 40 rads. Εδώ η λύση είναι περιοδική και μη συμμετρική, αφού δημιουργείται μια ή περισσότερες θερμές περιοχές ρευστού, οι οποίες περιστρέφονται με σταθερή περίοδο.

Παρόμοια περιοδικά, μη-συμμετρικά πεδία ροής δίνει και η επίλυση των εξισώσεων ροής στις μεγαλύτερες πιέσεις των 300 και 350 Torr. Με την αύξηση της πίεσης οι δυνάμεις άνωσης αποσταθεροποιούν εμφανώς της ροή, όχι μόνο στα τοιχώματα αλλά και στο κεντρικό τμήμα του υποστρώματος. Έτσι, δημιουργούνται ανεπιθύμητες δευτερεύουσες ροές στο κέντρο του αντιδραστήρα, ενώ ταυτόχρονα συνεχίζεται η περιστροφή των ασυμμετριών με σταθερό ρυθμό δίπλα στο πλευρικό τοίχωμα.

Οι περιοδικές μη-συμμετρικές λύσεις που προέκυψαν με την παρούσα 3-D μοντελοποίηση είναι ένα καινούριο εύρημα, το οποίο δεν ήταν δυνατό να ανακαλυφθεί στις προηγούμενες δισδιάστατες μελέτες. Σε όλες αυτές τις λύσεις αυτές παρατηρείται αύξηση του αριθμού των μη συμμετρικών θερμών περιοχών συναρτήσει του ρυθμού περιστροφής και της πίεσης. Αυτό συμβαίνει επειδή οι δύο παραπάνω μεταβλητές ισχυροποιούν τις φυγόκεντρες

Κεφάλαιο 6^ο: ΣΥΜΠΕΡΑΣΜΑΤΑ

δυνάμεις και ταυτόχρονα η αυξημένη πίεση ενισχύει την άνωση. Σαν αποτέλεσμα, το εκτόπισμα του ρευστού λόγω της περιστροφής εγκλωβίζει μεγαλύτερες ποσότητες στο τοίχωμα, που σχηματίζουν αυτές τις θερμές περιστρεφόμενες μάζες.

Ακόμα, φαίνεται πως η επίλυση των μη μόνιμων εξισώσεων ροής ευνοεί την ανάπτυξη μία ή τριών περιοδικών ασυμμετριών. Αντίθετα, η ύπαρξη δύο μη-συμμετρικών περιοχών βρέθηκε μόνο σε δύο περιπτώσεις, στις οποίες μάλιστα το σύστημα παρουσιάζει πολλαπλότητα. Η αιτία του φαινομένου αυτού δεν είναι βέβαιη και αναμφίβολα χρήζει περισσότερης διερεύνησης.

Από την αρμονική ανάλυση στις περιοδικές λύσεις διαπιστώνεται πως η συχνότητα μιας πλήρους περιστροφής των μη-συμμετρικών περιοχών είναι ανάλογη και περίπου μια τάξη μεγέθους μικρότερη από την αντίστοιχη της περιστροφής του υποστρώματος.

Τέλος, από την συνολική ανάλυση επαληθεύεται ότι η άνωση στην τρισδιάστατη μοντελοποίηση είναι παράγοντας έντονης αποσταθεροποίησης της ροής. Ειδικά στην 3-D ανάλυση αποδεικνύεται εξαιρετικά απρόβλεπτος μηχανισμός – παρατήρηση που δεν ισχύει στον ίδιο βαθμό για τις αντίστοιχες λύσεις της μοντελοποίησης στις δύο διαστάσεις.

7. ΠΡΟΤΑΣΕΙΣ

Από την παρούσα μελέτη και τα αποτελέσματα που προέκυψαν αναδεικνύονται ενδιαφέροντα ερωτήματα και νέες ιδέες προς περαιτέρω διερεύνηση.

Κατ' αρχάς, στην παρούσα μελέτη μοντελοποιήθηκε μόνο η ροή και αγνοήθηκε η χημεία των αντιδράσεων. Μια χρήσιμη και απαιτητική εργασία θα ήταν η προσομοίωση της λειτουργίας του αντιδραστήρα στις τρεις διαστάσεις, ενσωματώνοντας στο μαθηματικό μοντέλο τις αντιδράσεις. Αυτό θα βοηθούσε στην ποσοτικοποίηση της επίδρασης των ασυμμετριών ροής στον ρυθμό απόθεσης και την ομοιομορφία του παραγόμενου υμενίου.

Επίσης, μια άλλη ιδέα είναι η σύνδεση του υπολογιστικού κώδικα με εξωτερικές μεθόδους βηματισμού παραμέτρου (arc-length continuation methods). Τέτοιες τεχνικές αποβαίνουν ιδιαίτερα αποτελεσματικές στον εντοπισμό ευσταθών κλάδων σε παραμετρικά συστήματα μη γραμμικών εξισώσεων, όπως το παρόν. Με αυτό τον τρόπο μπορεί να επιταχυνθεί σημαντικά η σύγκλιση σε πολλές ευσταθείς ροές και να βρεθούν ευκολότερα τα σημεία διακλαδώσεως (bifurcation points) του χώρου λύσεων.

Μια τρίτη πρόταση είναι να πραγματοποιηθεί μοντελοποίηση της ροής για διαφορετικές συνθήκες λειτουργίας. Συγκεκριμένα, στην συγκεκριμένη μελέτη οι μόνοι παράμετροι ήταν η πίεση και ο ρυθμός περιστροφής του υποστρώματος, ενώ οι υπόλοιπες μεταβλητές παρέμειναν αμετάβλητες κατά τη διάρκεια της όλης ανάλυσης. Τέτοιες σημαντικές μεταβλητές της διεργασίας είναι η μαζική ροή και η θερμοκρασία των τοιχωμάτων. Προτείνεται, λοιπόν, η παραμετρική ανάλυση αυτών των μεγεθών για την απόκτηση μιας πληρέστερης εικόνας για τη διεργασία.

Επιπλέον, για τα ζεύγη τιμών λειτουργίας που η ροή είναι μεταβατική αλλά μη-περιοδική, θα μπορούσε να επιβληθεί η περιοδικότητα με εξωτερική προσθήκη της κατάλληλης συνθήκης κατά την διαδικασία επίλυσης. Αυτή πιθανόν να οδηγήσει στην ανακάλυψη ασταθών περιοδικών λύσεων του τρισδιάστατου μοντέλου, που διαφορετικά δεν μπορούν να εντοπιστούν από τυπικά λογισμικά υπολογιστικής ρευστοδυναμικής.

Τέλος, μια τολμηρή ενέργεια θα ήταν η εισαγωγή της τύρβης στις περιπτώσεις όπου η ροή αναπτύσσει ισχυρές περιστροφικές δυνάμεις, στις οποίες παύει να ισχύει η παραδοχή της στρωτής ροής. Βέβαια, μια τέτοια μοντελοποίηση θα ήταν αρκετά δαπανηρή υπολογιστικά και συστήνεται εφ' όσον προηγουμένως έχουν εξεταστεί διεξοδικά οι υπόλοιπες κομβικές παράμετροι της διεργασίας.

8. ΒΙΒΛΙΟΓΡΑΦΙΑ

- [1] H. O. Pierson, *Handbook of Chemical Vapor Deposition: Principles, Technology and Applications*, New York: Noyes Publications, 1999.
- [2] Ν. Χειμαριός, "Προσομοίωση πολλαπλών Χωρικών Κλιμάκων και Συστημική Ανάλυση διεργασιών Χημικής Απόθεσης από Ατμό," Διδακτορική Διατριβή, ΕΜΠ, 2012.
- [3] "National Programme on Technology Enhanced Learning," Department of Chemical Engineering, IIT Madras, December 2015. [Online]. Available: <https://nptel.ac.in/courses/103/106/103106115/#>. [Accessed April 2019].
- [4] "AZO materials," [Online]. Available: <https://www.azom.com>. [Accessed September 2019].
- [5] B. Mitrovic, A. Gurary and L. Kadinski, "On the flow stability in vertical rotating disc MOCVD reactors under a wide range of process parameters," *Journal of Crystal Growth*, vol. 287, no. 2, pp. 656-663, 2006.
- [6] G. Gakis, E. Koronaki and A. Boudouvis, "Numerical investigation of multiple stationary and time-periodic flow regimes in vertical rotating disc CVD reactors," *Journal of Crystal Growth*, no. 432, pp. 152-159, 2015.
- [7] H. K. Versteeg and W. Malalasekera, *An Introduction to Computational Fluid Dynamics*, 2nd ed., New York: Pearson Education Limited, 2007.
- [8] "<https://www.nasa.gov>," National Aeronautics and Space Administration (NASA), [Online]. Available: <https://www.grc.nasa.gov/www/wind/valid/tutorial/errors.html>. [Accessed June 2019].
- [9] Ansys FLUENT 12.0 Documentation, ANSYS Inc., 2009.
- [10] F. J. Kelecý, "Coupling Momentum and Continuity Increases CFD Robustness," *ANSYS Advantage*, vol. II, no. 2, pp. 49-51, 2008.
- [11] E. Koronaki, N. Cheimarios, H. Laux and A. Boudouvis, "Non-Axisymmetric Flow fields in Axisymmetric CVD Reactor Setups Revisited: Influence on the Film's Non-Uniformity," *ECS Solid State Letters*, vol. 3, no. 4, pp. 37-40, 2014.
- [12] M. Van Keijser, C. Van Opdorp and C. Weber, "Peculiar asymmetric flow pattern in a vertical axisymmetric VPE reactor," *Journal of Crystal Growth*, no. 92, pp. 33-36, 1988.
- [13] H. Van Santen, C. R. Kleijn and H. E. Van Den Akker, "Symmetry breaking in a stagnation-flow CVD reactor," *Crystal Growth*, vol. 212, no. 1-2, pp. 311-323, 2000.
- [14] P. Gkinis, I. Aviziotis, E. Koronaki, G. Gakis and A. Boudouvis, "The effects of flow multiplicity on GaN deposition in a rotating disk CVD reactor," *Journal of Crystal Growth*, no. 458, pp. 140-148, 2017.
- [15] P. Atkins and J. De Paula, *Physical Chemistry*, 9th ed., Oxford, Portland: W. H. Freeman, 2009.

Κεφάλαιο 8^ο: ΒΙΒΛΙΟΓΡΑΦΙΑ

- [16] S. Chapman and T. Cowling, *The Mathematical Theory of Non-Uniform Gases*, 2nd ed., Cambridge University Press, 1952.
- [17] Δ. Ασημακόπουλος, Β. Λυγερού και Γ. Αραμπατζής, *Μεταφορά Θερμότητας και Μάζας*, Αθήνα: Παπασωτηρίου, 2012.
- [18] ChemKin, «TRANSPORT: A software package for the evaluation of gas-phase, multicomponent transport properties,» 2000.
- [19] H. Schlichting, *Boundary Layer Theory*, 8th ed., Berlin: Springer, 2000.
- [20] M. Vlachos, P. Yu and V. Castelli, "On Periodicity Detection and Structural Periodic Similarity," *SIAM Journal*, 2005.
- [21] K. T. Aligood, T. D. Sauer και J. A. Yorke, *CHAOS: An Introduction to Dynamical Systems*, New York: Springer, 1996.
- [22] "Matlab R2019a," [Online]. Available: <https://www.mathworks.com/help/>. [Accessed July 2019].
- [23] Ά. Θ. Παπαϊωάννου, *Μηχανική των Ρευστών*, τόμ. Ι, Κοράλι, 2002.
- [24] F. P. Incropera, D. P. DeWitt, T. L. Bergman and A. S. Lavine, *Fundamentals of Heat and Mass Transfer*, 6th ed., John Wiley & Sons, 2007.

9. ΠΑΡΑΡΤΗΜΑ

9.1. Κώδικες Matlab

Συνάρτηση εύρεσης υποψήφιων περιόδων

```
function [cand_freqs, cand_freq_powers, cand_Ts, cand_T_ranges,
cand_T_errors, ...
        psd, freq, max_Power] = getPeriodHints(signal, window, Fs, conf_int,
max_cand)
% This function distinguishes the dominant frequencies within a given
% signal using the periodogram and returns the corresponding candidate
% periods as hints.

% INPUT:
% signal:          Signal array
% window:         Window function (array)
% Fs:             Signal sampling frequency (Hz)
% conf_int:       Confidence interval (real number between 0 and 1)
% max_cand:       Maximum allowed number of candidates (positive integer)

% OUTPUT:
% cand_freqs:     Candidate dominant frequencies (Hz)
% cand_freq_powers: Candidate frequency powers
% cand_Ts:        Candidate dominant periods (s)
% cand_T_ranges: Candidate dom. periods upper and lower bounds
% cand_T_errors:  Candidate dom. periods error limits

%% Creation of arrays & and useful parameters
n = 1000;          % Number of permutations
% s = length(signal); % Length of original signal

max_perm_powers = []; % Maximum power of permuted signal in periodogram
cand_freqs = [];     % Candidate dominant frequencies
cand_freq_powers = []; % Candidate frequency powers
cand_Ts = [];        % Candidate dominant periods (s)
cand_T_ranges = []; % Candidate dom. periods upper and lower bounds

%% Signal processing
% Periodogram (Power Spectral Density)
[psd, freq] = periodogram(signal, window, length(signal), Fs);

%% Random permutation procedure
for i = 1:n
    p = randperm(length(signal))'; % Vector of size length(signal), with
    random integer values
    table = sortrows([p signal]); % Randomly permuted signal table, by
    sorting vector p
    perm_signal = table(:,2);      % Take only the permuted signal column

    [perm_psd] = periodogram(perm_signal, window, length(signal), Fs);
% Calculating permuted PSD
    [max_perm_powers] = [max_perm_powers; max(perm_psd)]; % Retrieving
    top power of rand. perm. signal
end
```

Κεφάλαιο 9^ο: ΠΑΡΑΡΤΗΜΑ

```
sorted = sortrows(max_perm_powers); % Sorting array of maximum power
for all n permutations, in ascending order
max_Power = sorted(round(conf_int*n)); % Power threshold, above which
frequency is considered important (for specified confidence interval)

%% Comparison & and candidates detection
cands = 0; % Count candidates
%for i = last_negl+1:length(psd)-1
for i = 4:length(psd)-1 % Starting from 4th frequency ( f_i=1 = 0 Hz) ???!
    if psd(i)>max_Power && psd(i)>=psd(i-1) && psd(i)>=psd(i+1)

        cand_freqs = [cand_freqs; freq(i)];
        cand_freq_powers = [cand_freq_powers; psd(i)];
        cand_Ts = [cand_Ts; 1/freq(i)];
        cand_T_ranges = [cand_T_ranges;
2/Fs*[0.5*(Fs/2/freq(i+1)+Fs/2/freq(i))-1 0.5*(Fs/2/freq(i)+Fs/2/freq(i-
1))+1]];
        cands = cands + 1;
    end
end
cand_T_errors = abs(cand_Ts - cand_T_ranges);

%% Sorting (and Keeping the frequencies with highest power)
if max_cand > 0
    % Sorting
    table = [cand_freq_powers cand_freqs cand_Ts cand_T_ranges
cand_T_errors];
    table = sortrows(table, 'descend');
    cand_freq_powers = table(:,1); cand_freqs = table(:,2);
    cand_Ts = table(:,3); cand_T_ranges = table(:,4:5);
    cand_T_errors = table(:,6:7);

    if max_cand < cands
        % Keeping only top-powered frequencies
        cand_freq_powers = cand_freq_powers(1:max_cand); cand_freqs =
cand_freqs(1:max_cand);
        cand_Ts = cand_Ts(1:max_cand); cand_T_ranges =
cand_T_ranges(1:max_cand,:);
        cand_T_errors = cand_T_errors(1:max_cand,:);

    else
        disp('Candidates less than maximum allowed by user - keeping all
candidates!')
    end

elseif max_cand == 0
    % NO action - Keep all candidates
else
    disp('Error: Maximum candidates value must be non-negative!!!')
end

end
```


Συνάρτηση πιστοποίησης έγκυρων περιόδων

```

function [valid_Ts] = getValidPeriods(cand_Ts, cand_T_ranges, acf, t_acf)
% This function checks whether the period candidates from the periodogram
% correspond to valid ones, by searching for peaks at the corresponding
% area in the autocorrelation diagram.

% INPUT:
% cand_Ts:           Candidate dominant periods (s)
% cand_T_ranges:    Candidate dom. periods upper and lower bounds
% acf:              Autocorrelation function values
% t_acf:            ACF time array

% OUTPUT:
% valid_Ts:         Valid periods, among all period candidates

valid_Ts = [];
for i = 1:length(cand_Ts)
    % Find indexes corresponding to limits of the "suspect" range
    i_low = find(cand_T_ranges(i,1)<t_acf, 1)-1;
    i_high = find(cand_T_ranges(i,2)<t_acf, 1);

    [pks,locs] = findpeaks(acf(i_low:i_high)); % Find peaks and
    corresponding local locations
    global_locs = (i_low-1) + locs; % Find global locations
    of local peaks
    t_pks = t_acf(global_locs); % Find period of local
    peaks
    t_dists = abs(t_pks - cand_Ts(i)); % Compute time distance
    between candidate and local peaks
    %dist_to_pk_strength = t_dists./abs(pks);

    table = [pks t_pks t_dists];
    table = sortrows(table, 3); % Sort peaks according to distance
    from candidate T
    pks = table(:,1); t_pks = table(:,2);

    for j = 1:length(pks)
        if pks(j) > 0; valid_Ts = [valid_Ts; t_pks(j)]; break; end
    end
end

% Remove duplicates
valid_Ts = unique(valid_Ts);

end

```

Κεφάλαιο 9^ο: ΠΑΡΑΡΤΗΜΑ

Script εφαρμογής της συνδυαστικής μεθόδου

```
%% Initialize
clear, clc, close all

Ts_matrix = [];

%% Important parameters
Fs = 100;          % Sampling frequency (Hz)
max_cand = 0;     % zero --> There is no limit in possible period candidates
conf_int = .999; % Confidence interval, 99 %

%% Reading data
filename = FILE_NAME;
xlRange = EXCEL_RANGE;
data = xlsread(filename,xlRange);
signal = data(:,process_col);

%% Signal normalisation
norm_signal = normalize(signal);

%% Windowing
window = hamming(length(signal));

%% Periodogram - getting Period Hints/Candidates
[cand_freqs, cand_f_powers, cand_Ts, cand_T_ranges, cand_T_errors, psd,
freq, max_Power]...
= getPeriodHints(norm_signal, window, Fs, conf_int, max_cand);

%% Autocorrelation function (ACF) - getting valid candidate periods
lags = length(norm_signal)/2;
acf = autocorr(norm_signal, 'NumLags',lags); % ACF
t_acf = (0:1/Fs:lags*1/Fs)';

[valid_Ts] = getValidPeriods(cand_Ts, cand_T_ranges, acf, t_acf);

valid_Ts
```