

Projekta

„Atomāro un nepārtrauktās vides tehnoloģisko fizikālo procesu modelēšana, matemātisko metožu pilnveide un kvalitatīvā izpēte”

Nr.2009/0223/1DP/1.1.1.2.0/09/APIA/VIAA/008

Tehniskā atskaite aktivitātē

4.2. Tehnoloģisko procesu matemātiskā modelēšana

Apstiprinu:

Projekta padomes priekšsēdētājs:

_____ **Jānis Mencis**

Apstiprinu:

LU Zinātņu prorektors:

_____ **Indriķis Muižnieks**

Pētījuma apakšaktivitāte

4.2.1. Siltuma un vielas apmaiņas procesu elektromagnētiskā vadība stiklveida materiālu kausējumos, ievērojot procesu nelineāro mijiedarbību un starojuma siltuma apmaiņu

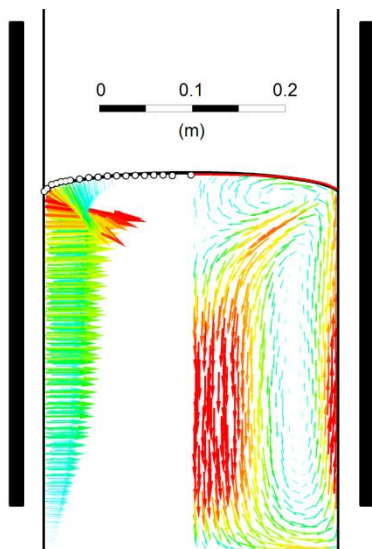
Aktivitātes vadītājs: asoc. profesors Andris Jakovičs

1. Elektrovadoša šķidrums plūsmas (HD) un brīvās virsmas dinamikas skaitliskā modelēšana mainīgā elektromagnētiskā (EM) laukā, ievērojot šo lauku mijiedarbību ar fāzu virsmu

Metalurģijā plaši izmantojamajās indukcijas krāsnīs kausējuma brīvajai virsmai ir sarežģīts un laikā mainīgs raksturs, kam par iemeslu ir izteikta EM lauka, kausējuma plūsmas un virsmas formas nelineāra mijiedarbība, kā arī vidējotās plūsmas nestabilitāte, turbulence, jaudas pārslēgšana un citi faktori. Tā kā kausējuma brīvās virsmas kontrolei un stabilitātei ir liela nozīme augstvērtīgu metālisko materiālu ražošanā (piem., levitācijas vai kvazi-levitācijas režīmos), tad ir jānodrošina iespējas prognozēt tās dinamiku.

EM inducēto plūsmu ar brīvām virsmām pētījumi ir aizsākušies ar vienkāršākajiem hidrostatiskiem kausējuma stacionārās virsmas modeļiem (*S. Roy u.c., 1995*). Vēlāk tika veikti arī sarežģītāki brīvās virsmas dinamikas aprēķini 2D, ievērojot vielas (*O. Pesteanu, E. Baake, 2011*) un siltuma (*V. Bojarevics, 2004*) pārnesi. Nesen tika ziņots par pirmajiem aprēķinu rezultātiem, kas ar vienkāršotu divparametru turbulences modeli aprakstīja diamagnētiskā šķidrums levitējošās lāses mazas amplitūdas svārstības lielas intensitātes stacionārā magnētiskā laukā jau pilnā 3D formulējumā **Error! Reference source not found.**, bet EM inducētās recirkulatīvās plūsmās šāds turbulences modelis nedod atbilstību eksperimentam (*M. Kirpo u.c., 2008*).

Līdz ar to šo pētījumu pamatmērķis bija izstrādāt un realizēt līdz šim zinātniskā literatūrā nepublicēto skaitlisko modeli EM inducēto turbulento plūsmu ar brīvo virsmu aprēķinam 3D formulējumā ar precizētu *Large Eddy Simulation* (LES) turbulences aprakstu, ievērojot EM lauka, kausējuma virsmas formas un kustības mijiedarbību.



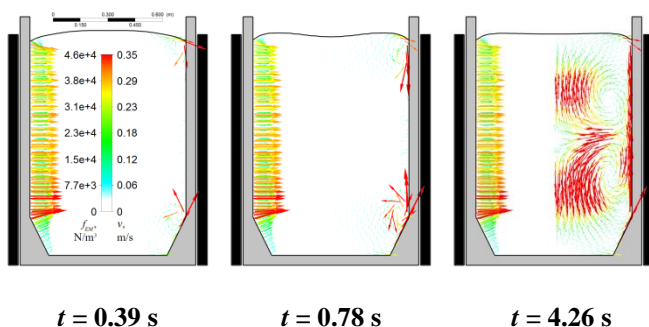
Attēls 1. Lorenca spēka blīvuma sadalījums ($0-10^5$ N/m³, pa kreisi), stacionārs ātruma lauks (0-25 cm/s, pa labi) un meniska forma aprēķināta ar 2D modeli salīdzinājumā ar eksperimentālo mērījumu (punkti) un hidrostatiskā modeļa aprēķinu (sarkanā līkne) lielajā indukcijas tīģelkrāsnī.

Pētījums aizsākās ar stacionārās kausējuma brīvās virsmas 2D vienkāršota hidrostatiskā modeļa izstrādi. Šajā modelī tika pieņemts, ka kausējuma plūsma neietekmē meniska formu. Kausējuma virsmas forma indukcijas tīģelkrāsnī tika atrasta iteratīvā ceļā, sasaistot EM lauka aprēķinu pie fiksētas kausējuma ģeometrijas galīgo elementu ANSYS programmā ar pašu izstrādātu galīgo diferencu kodu meniska formas aprēķinam. Izmantojot izstrādāto modeli tika veikta analīze induktora strāvas un frekvences, kā arī virsmas spraiguma un tīģeļa piepildījuma ietekmei uz meniska formu.

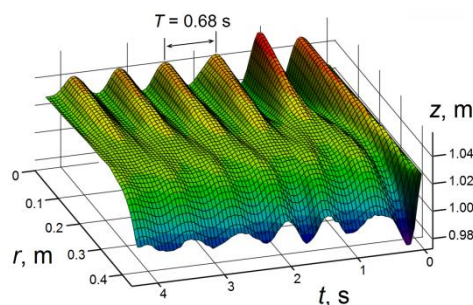
Nākamajā solī tika izveidots modelis kausējuma brīvās virsmas dinamikas aprakstam hidrodinamiskā 2D formulējumā, ārēji sasaistot hidrodinamikas aprēķinu CFX vidē pie fiksēta EM spēka ar EM spēka aprēķinu pie fiksētas kausējuma ģeometrijas ANSYS programmā. lielu Reynolds skaitļu divfāzu plūsmas modelēšanai tika izvēlēta *Volume of Fluid* (VOF) skaitliskā tehnika un *k- ω SST* turbulences modelis.

Abu modeļu korektība tika pārbaudīta, salīdzinot aprēķināto kausējuma brīvās virsmas stacionāro formu ar eksperimentālajiem mērījumiem (Attēls 1).

Bez tam, izmantojot industriālās indukcijas tīģeļkrāsns modeli, hidrodinamiskajam modelim tika iegūta arī laba atbilstība brīvās virsmas svārstību perioda teorētiskajam novērtējumam ($T_{teor} = 0.68$ s) (Attēls 2 un Attēls 3).

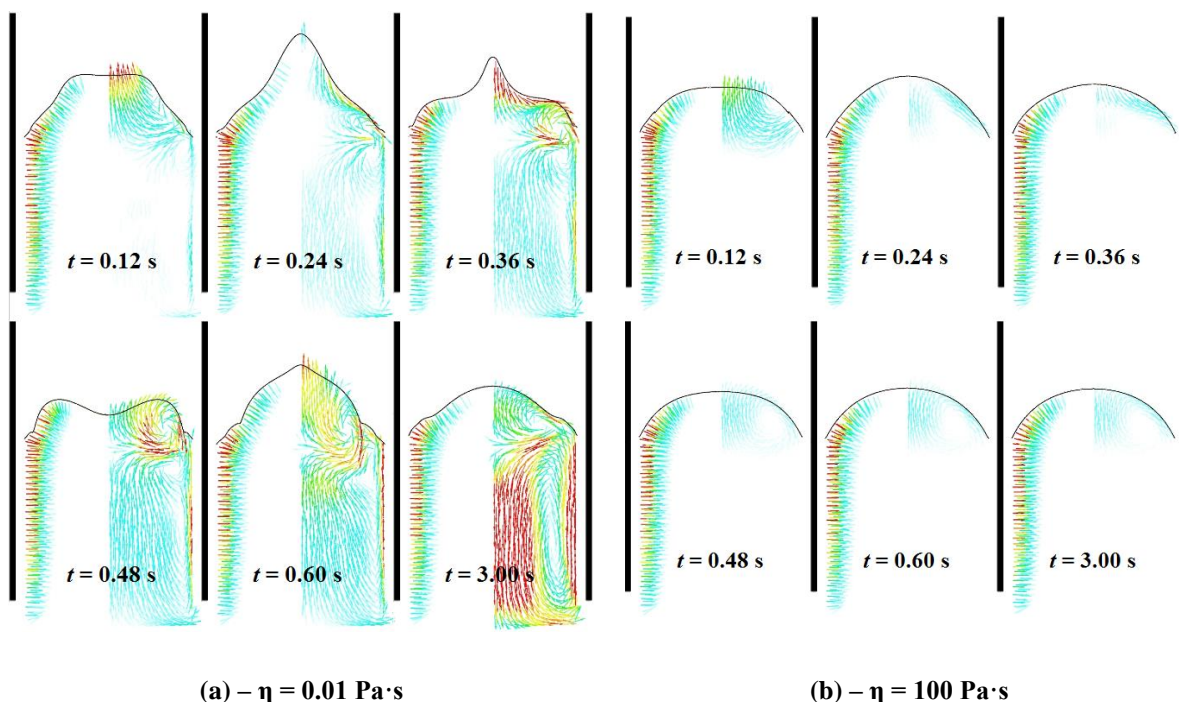


Attēls 2. 2D aprēķina rezultāti Lorenca spēka blīvuma sadalījumam (pa kreisi), ātruma laukam (pa labi) un brīvās virsmas dinamikai dažādos laika momentos industriālajā indukcijas tīģeļkrāsnī.



Attēls 3. 2D aprēķina rezultāti kausējuma brīvās virsmas profila dinamikai industriālajā indukcijas tīģeļkrāsnī un virsmas svārstību periods $T_{aprēķ} = 0.68$ s.

Pilnveidojot izstrādāto pieeju tika veikta analīze stacionārās virsmas formas atkarībai no induktora strāvas un frekvences, kā arī virsmas dinamikas atkarībai no strāvas, frekvences un kausējuma dinamiskās viskozitātes (skat. piemēru Attēls 4).

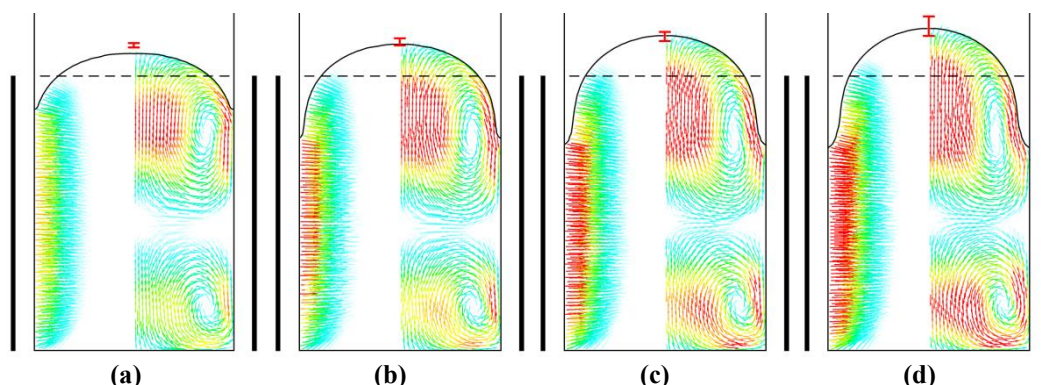


Attēls 4. Kausējumu ar dažādām viskozitātēm brīvās virsmas dinamika, Lorenca spēka blīvuma sadalījums ($0-3 \cdot 10^6$ N/m³) un plūsmas aina (0-0.7 m/s) dažādos laika momentos indukcijas tīģeļkrāsnī.

Iepriekš minētās eksperimentālās verifikācijas (Attēls 1) vājā puse bija mazs meniska augstums attiecībā pret sākuma piepildījuma augstumu. Neizbēgamas mazas neprecizitātes ģeometrijā (2D modeļa vienkāršojumi) vai materiālu īpašībās (piem., netiek ņemta vērā īpašību atkarība no temperatūras) varēja novest pie kopumā nebūtiskām izmaiņām meniska

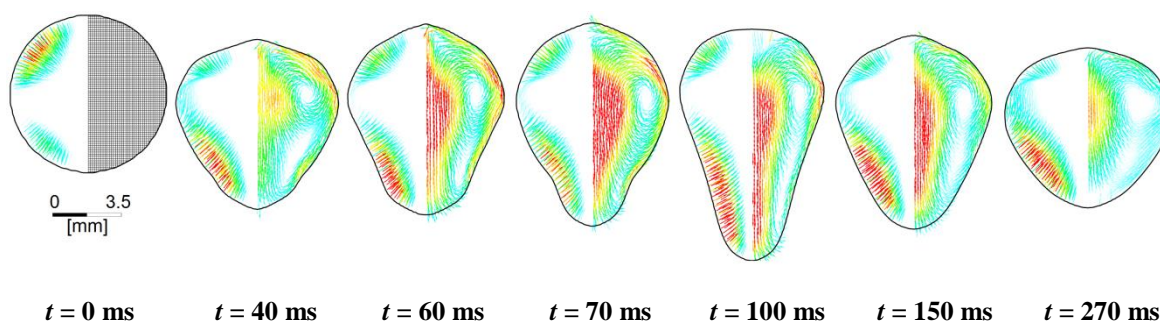
formā uz sākuma piepildījuma fona, kuras meniska augstuma mērogā varēja atšķirties vairākas reizes.

Līdz ar to, nākamajai modeļa verifikācijai, kas arī parādīja labu korelāciju, tika izmantoti eksperimentālie dati stacionāro menisku maksimāliem pacēlumiem virs sākotnējā piepildījuma līmeņa pie daudz izteiktākas brīvās virsmas deformācijas mazajā laboratorijas mēroga indukcijas tīģelkrāsni (Attēls 5).



Attēls 5. Lorencas spēka blīvuma sadalījums ($0-2.5 \cdot 10^5 \text{ N/m}^3$, pa kreisi), stacionārs ātruma lauks ($0-55 \text{ cm/s}$, pa labi) un meniska forma aprēķināta ar 2D modeli salīdzinājumā ar eksperimentālo mērījumu (sarkanā atzīme) meniska pacēlumam virs sākotnējā līmeņa pie $f = 330 \text{ Hz}$ un (a) – $I_{ef} = 1753 \text{ A}$, (b) – $I_{ef} = 2020 \text{ A}$, (c) – $I_{ef} = 2262 \text{ A}$, (d) – $I_{ef} = 2464 \text{ A}$.

Nākamajā solī 2D hidrodinamiskais modelis tika vispārināts EM levitācijas gadījuma aprakstam. Tika konstatēts, ka EM levitācijas gadījumam raksturīgās EM spēka lielās blīvuma vērtības pie brīvās virsmas sagādā grūtības VOF metodei, jo, savukārt, tai ir raksturīga neliela interfeisa difūzija, kuras dēļ nefizikāli tiek paatrināta vieglā fāze un aprēķins diverģē. Veicot vieglās fāzes ātruma reinicializāciju katrā EM spēka pārrēķina solī modelis tādējādi tika modificēts, nodrošinot korektu realizāciju EM levitācijas gadījumā, un skaitliskā eksperimentā pirmo reizi tika iegūti fizikāli rezultāti (Attēls 6).



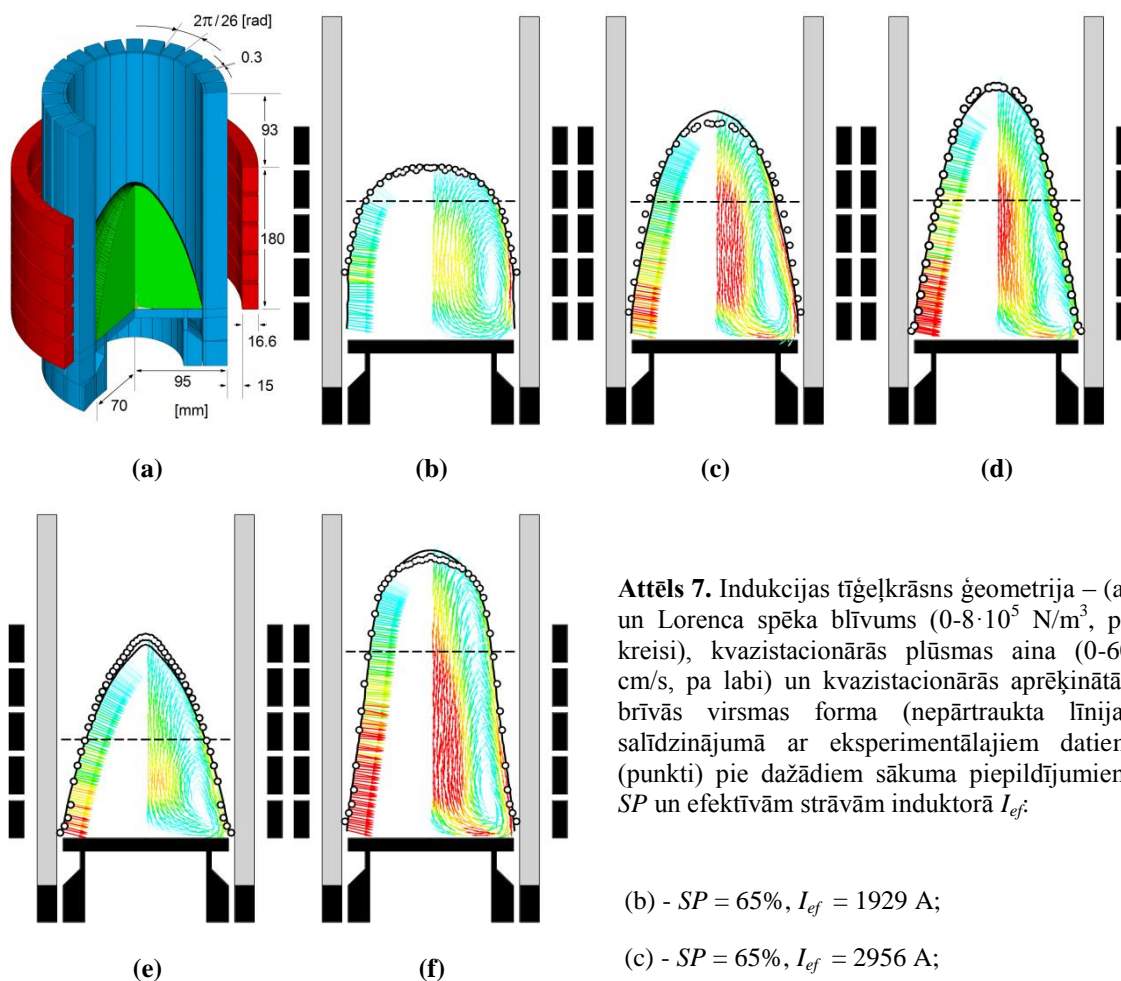
Attēls 6. 2D aprēķina rezultāti EM levitējošās lāses brīvās virsmas dinamikai, Lorencas spēka blīvuma sadalījumam ($0-2 \cdot 10^5 \text{ N/m}^3$) un momentānā ātruma lauka ainai ($0-25 \text{ cm/s}$) dažādos laika momentos

Tomēr 2D modeļa skaitliskie rezultāti *a priori* bija nepilnīgi, jo reālajās 3D iekārtās eksperimentālie brīvās virsmas dinamikas novērojumi un mērījumi kausējuma ātrumam parāda virsmas asimetriju un ievērojamu vielas azimutālo pārnesei.

Pētījuma nākamais solis tādējādi bija 3D modeļa izveide. Atšķirībā no 2D modeļa, rekonstruējot brīvo virsmu kā skalārā fāzes lauka izvirsmu, 3D gadījumā radās deģenerēti

virsmas elementi (elementi ar lielu šķautņu garumu attiecību), kas sagādāja grūtības ANSYS režģa ģeneratoram. Tāpēc modelis tika papildināts ar pašrakstītu programmas moduli, kura uzdevums bija filtrēt brīvo virsmu, lai izslēgtu problemātiskos elementus.

Kaut arī meniska augstumi mazās indukcijas tīģelkrāsns eksperimentos (Attēls 5) bija samērojami ar sākuma piepildījuma augstumu, tie neļāva gūt priekšstatu par aprēķinātās formas atbilstību reālam meniskam. Nākamajā solī stacionārā virsmas forma indukcijas tīģelkrāsnī ar auksto tīģeli (kvazi 3D aprēķins vienai sekcijai) tika salīdzināta ar eksperimentu (Attēls 7), kā rezultātā tika vēlreiz parādīta izveidotā modeļa korektība.



Attēls 7. Indukcijas tīģelkrāsns ģeometrija – (a) un Lorencas spēka blīvums ($0-8 \cdot 10^5$ N/m³, pa kreisi), kvazistacionārās plūsmas aina (0-60 cm/s, pa labi) un kvazistacionārās aprēķinātās brīvās virsmas forma (nepārtraukta līnija) salīdzinājumā ar eksperimentālajiem datiem (punkti) pie dažādiem sākuma piepildījumiem SP un efektīvām strāvām induktorā I_{ef} :

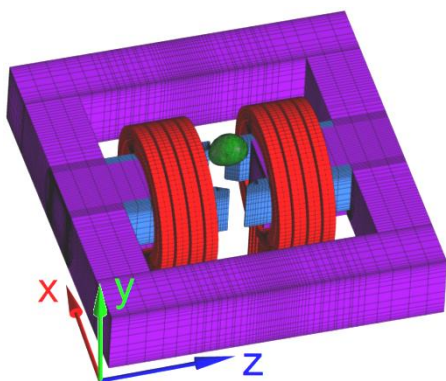
(b) - $SP = 65\%$, $I_{ef} = 1929$ A;

(c) - $SP = 65\%$, $I_{ef} = 2956$ A;

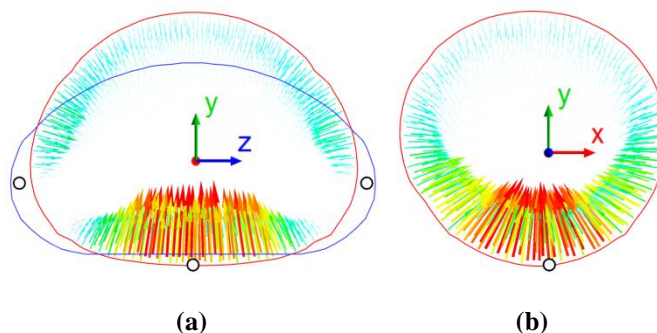
(d) - $SP = 65\%$, $I_{ef} = 3566$ A;

(e) - $SP = 46\%$, $I_{ef} = 3154$ A;

(f) - $SP = 87\%$, $I_{ef} = 3789$ A.

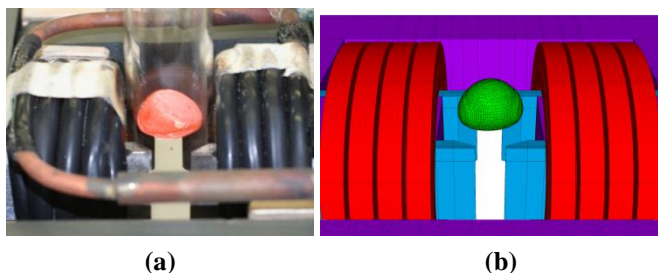


Attēls 9. Vienfrekvences EM levitācijas kausēšanas iekārtas modelis.



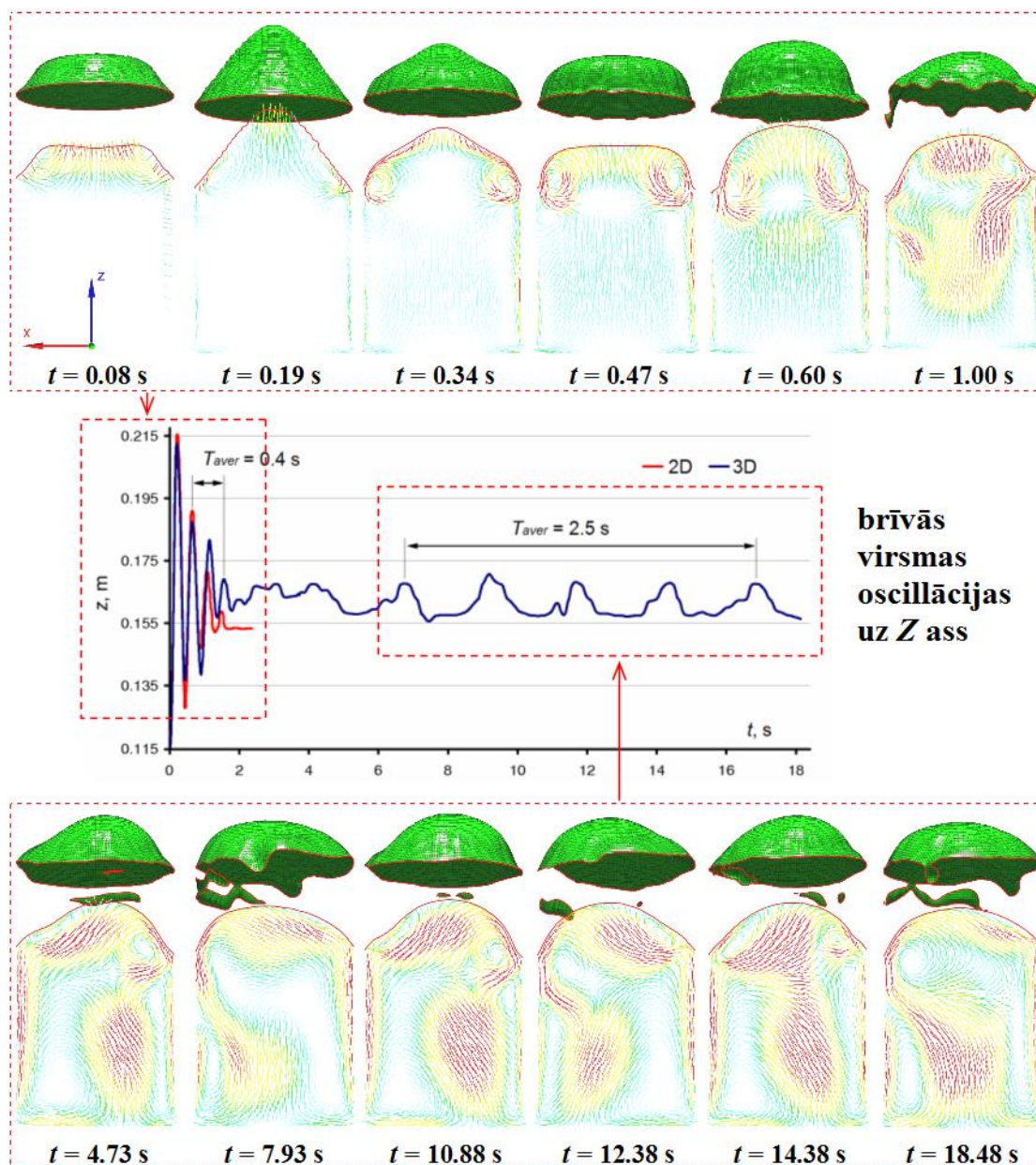
Attēls 8. 3D aprēķina rezultāti Lorencs spēka blīvuma sadalījumam ($0-3 \cdot 10^5 \text{ N/m}^3$) un virsmas formai (sarkanā līkne), salīdzinājumā ar O. Pesteanu 2D modeļa aprēķinu (zilā līkne) un eksperimentālajiem mērījumiem (punkti).

Modeļa verifikācija kvazistacionārai kausējuma formai tika pabeigta ar 3D modeļa aprēķina rezultātu salīdzinājumu ar eksperimentu vienas frekvences EM levitācijas iekārtā ar horizontālu lauku (Attēls 9) un citu autoru modeļa rezultātiem (Attēls 8).



Attēls 10. Kvalitatīvs salīdzinājums starp eksperimentāli novēroto EM levitāciju (a) un 3D modeļa aprēķina ceļā iegūto (b).

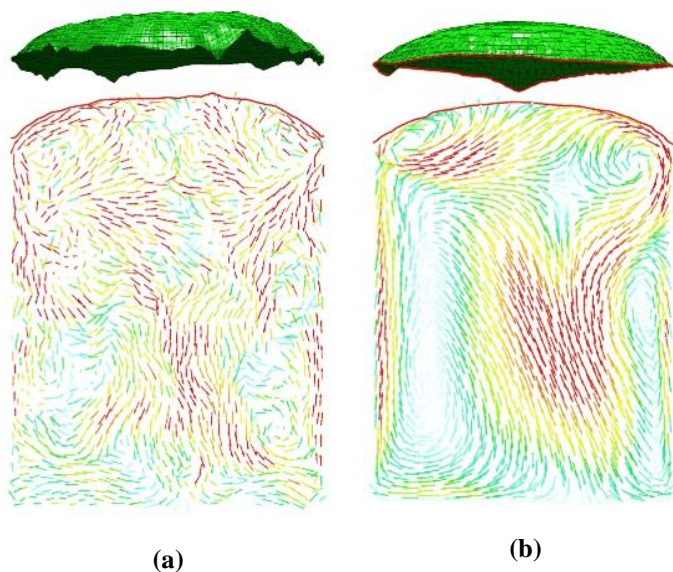
Arī šajā gadījumā tika iegūta gan kvalitatīva (Attēls 10), gan kvantitatīva atbilstība eksperimentālajam mērījumam un laba korelācija ar citu autoru modeļa aprēķinu, tādējādi, tika vēlreiz apliecināta izstrādātā brīvās virsmas dinamikas modeļa funkcionalitāte un korektība.



Attēls 11. 3D modeļa brīvās virsmas dinamikas aprēķina rezultāti indukcijas krāsnī pie $I_{ef} = 5$ kA – rimstošas brīvās virsmas svārstības un plūsmas (0-60 cm/s) attīstība uzreiz pēc krāsns ieslēgšanas $t = (0; 3)$ s, kā arī plūsmas un virsmas zemfrekvences oscilācijas kvazi-stacionārā režīmā $t = (6; 18)$ s.

Nākamajā solī tika pētīta kausējuma brīvās virsmas dinamika uzreiz pēc krāsns ieslēgšanas. Gan 2D, gan 3D modeļu rezultāti uzrāda labu atbilstību rimstošu svārstību perioda analītiskam novērtējumam ($T_{teor} = 0.39$ s) no *F. Hegewaldt u.c., 1993* darba (Attēls 11). Kvazistacionārā plūsmas režīmā tika atklātas zemfrekvences ($T = 2.5$ s) plūsmas un meniska svārstības.

Kvazistacionārās plūsmas un meniska zemfrekvenču svārstības tika iegūtas atkārtoti veicot 3D aprēķinu pie lielākas induktora strāvas $I_{ef} = 7$ kA (Attēls 12).



Attēls 14. 3D aprēķina rezultāti momentānai plūsmas ainai (0-30 cm/s) un meniska formai kvazistacionārā režīmā, izmantojot (a) – LES turbulences modeli un (b) – k- ω SST modeli.

Izveidotais modelis un aprēķinu metodika pirmo reizi nodrošina EM, HD un fāzu virsmas stāvokļa tiešu sasaisti un mijiedarbību nestacionāros apstākļos, tādējādi paverot plašas iespējas dažādiem pētījumiem magnetohidrodinamikas jomā.

Par šī pētījuma rezultātiem ir publicēti 3 raksti recenzējamās zinātniskos žurnālos (skat. publikāciju sarakstu) un nolasīti referāti piecās starptautiskās un divās LU konferencēs, kā arī ir izstrādāts laboratorijas darbs „Kausējuma brīvās virsmas dinamikas modelēšana indukcijas tīģelkrāsnī” Fizi6008 kursam „Multifizikālo procesu modeļi”.

Galvenās publikācijas

1. **S. Spitans, A. Jakovics, E. Baake, B. Nacke.** Numerical modelling of free surface dynamics of conductive melt in the induction crucible furnace. *Magnetohydrodynamics*, 2010, N4, pp. 317-328.
2. **S. Spitans, A. Jakovics, E. Baake, B. Nacke.** Numerical modelling of free surface dynamics of melt in an alternate electromagnetic field. *Magnetohydrodynamics*, 2011, N4, pp. 461-473.
3. **S. Spitans, A. Jakovics, E. Baake, B. Nacke.** Numerical modelling of free surface dynamics of melt in alternate electromagnetic field // *Journal of iron and steel research international* – 2012, vol. 19, suppl. 1, p. 531 – 535.

2. Elektronevadošu daļiņu dinamikas elektrovadoša šķidrums turbulentā plūsmā skaitliskā modelēšana, izmantojot Eilera-Lagranža pieeju un lielo virpuļu modelēšanas (LES) metodi

Noslēgtas elektromagnētiski ierosinātas plūsmas ir raksturīgas vairākām plaši izmantotām metalurģiskās kausēšanas iekārtām, bet tikai pēdējā desmitgadē datoru tehnikas attīstība deva iespēju izpētīt šādas turbulentes plūsmas ar lielu Reynolds skaitli, izmantojot precizētus turbulences modeļus. Īpaša vieta šajā modeļu spektrā ir lielo virpuļu modelēšanas metodei (*Large Eddy Simulation*). Izmantojot šo pieeju iespējams iegūt virkni jaunu līdz šim skaitliski neiegūtu efektu, kuru izpēte realizēta šajā pētījumā.

Šis pētījums bija tieši vērsts uz cieta piemaisījumu pārnese procesa izpēti EM ierosinātās turbulentās šķidro metālu plūsmās, kuras ir raksturīgas metalurģiskajām indukcijas krāsnīm. Piemaisījumu pārnese procesu izpēte ir ārkārtīgi svarīga gan no fundamentālā, gan no industriālā viedokļa. Tādu procesu kā leģējošo daļiņu (speciālie piemaisījumi) homogenizācija, piemaisījumu izgulsnēšanās, kanālu aizaugšana un erozija, vielas pārnese optimizācija ir svarīga metalurģijas industrijai un ļauj samazināt enerģijas patēriņu un uzlabot lējumu kvalitāti.

Ir zināmas vairākas skaitliskās metodes cieta daļiņu pārnese aprēķinam turbulentās plūsmās, daļu no kurām nav iespējams pielietot EM ierosinātām plūsmām. Piemēram, koncentrācijas vienādojuma pieeja šeit nav derīga, jo EM spēks, kurš ietekmē daļiņu kustību, nav potenciāls. Difūzijas-inerces modelis (*Diffusion-Inertia Model*) dod iespēju modelēt daļiņu kustību, ņemot vērā atgriezenisko ietekmi uz plūsmu to koncentrēšanas vietās, bet ir zināmas tikai modeļa realizācijas uz divparametrīgo turbulences modeļu (*k-ε*, *k-w*) bāzes, kuri neapmierinoši apraksta noslēgtās šķidro metālu plūsmas industriālās kausēšanas iekārtās.

Ņemot vērā to, ka industriālajās iekārtās piemaisījumu tilpums nepārsniedz 1- 2% no šķidrā metāla tilpuma, ir iespējams uzskatīt to daļu par mazu un neņemt vērā daļiņu atgriezenisko ietekmi uz plūsmu un daļiņu savstarpējo mijiedarbību. Šādā gadījumā daļiņu kustību var modelēt, izmantojot Lagranža vienādojumu - šajā pētījumā tika attīstīta uz LES plūsmas aprēķina bāzēta Eilera-Lagranža pieeja, kur daļiņu pārnese tiek aprēķināta pēc šādas formulas:

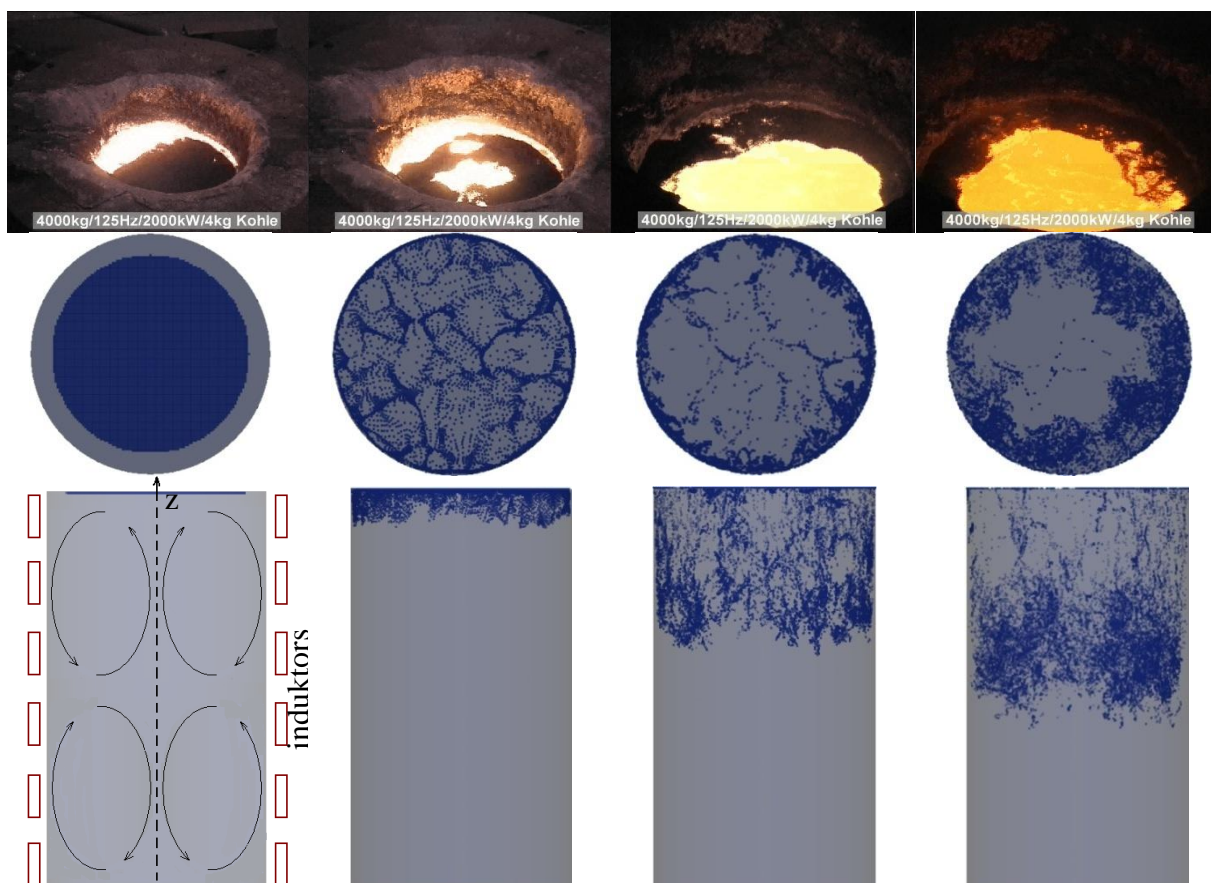
$$\underbrace{\left(1 + \frac{C_A \rho_f}{2 \rho_p}\right)}_{\text{daļiņu / plūsmas ātrumu pievienotās masas spēks}} \cdot \frac{d \mathbf{u}_p}{d t} = \underbrace{C_D \cdot U}_{\text{bīdes spēks}} + \underbrace{\left(1 - \frac{\rho_f}{\rho_p}\right) \cdot \mathbf{g}}_{\text{gravitācijas spēks}} - \underbrace{\frac{3}{4} \frac{1}{\rho_p} f_{em}}_{\text{EM spēks}} + \underbrace{\frac{\rho_f}{\rho_p} C_L \xi}_{\text{celtspēks}} + \underbrace{\left(1 + \frac{C_A \rho_f}{2 \rho_p}\right)}_{\text{paātrinājuma pievienotās masa}} \cdot \frac{D \mathbf{u}_f}{D t}$$

kur \mathbf{u}_p un \mathbf{u}_f ir daļiņas un plūsmas ātrumi, $\mathbf{U} = \mathbf{u}_p - \mathbf{u}_f$, ρ_p un ρ_f ir daļiņu un šķidrā metāla blīvumi, $\xi = [\mathbf{U} \times [\nabla \times \mathbf{U}]]$, $f_{em} = \frac{1}{2} Re[\mathbf{j} \times \mathbf{B}^*]$, \mathbf{j} ir inducētās strāvas blīvums, \mathbf{B} ir magnētiskā lauka intensitāte, D/Dt ir konvektīvais atvasinājums, \mathbf{g} ir brīvās krišanas paātrinājums; nelineārie koeficienti C_D , C_L un C_A nosaka attiecīgo spēku aproksimāciju turbulentās plūsmas gadījumā: *Schiller & Naumann (1933)* aproksimācija bīdes spēkam, (*Legendre & Magnaudet, 1998*) aproksimācija celtspēkam un *Odar & Hamilton (1964)* aproksimācija pievienotās masas spēkam.

Šāda pieeja dod iespēju precīzāk modelēt plūsmu un kopā ar to daļiņu kustību. Pētījumā tika parādīts, ka metalurģisko iekārtu noslēgtajās EM ierosinātajās plūsmās jāņem vērā ne tikai pretestības (jeb bīdes) spēks, bet arī gravitācijas cēlējspēks, plūsmas cirkulācijas (jeb spiediena gradienta) celtspēks, EM spēks, plūsmas paātrinājuma un pievienotās (jeb virtuālās) masas spēki. Spiediena gradienta celtspēkam, bīdes, plūsmas paātrinājuma un pievienotās

masas spēkiem proporcionalitātes koeficients ir atkarīgs no Reinoldsa skaitļa, daļiņas transversālā sprieguma un relatīvā paātrinājuma. Attiecīgais aprēķinu algoritms tika ieprogrammēts, izmantojot brīvā koda OpenFOAM programmatūras resursus.

Izmantojot Lagranža pieeju ar iepriekš aprakstītajiem spēkiem skaitliski tika izpētīta cieto daļiņu dinamika noslēgtās plūsmās cilindriskā tīlpumā, kuras atbilst plūsmai indukcijas tīģelkrāsnīs. Daļiņas sākotnējā laika brīdī tika ievietotas horizontālā plaknē pie šķidrums augšējās brīvās virsmas, kas tuvināti atbilst legējošo daļiņu piemaisīšanas industriālajam procesam.



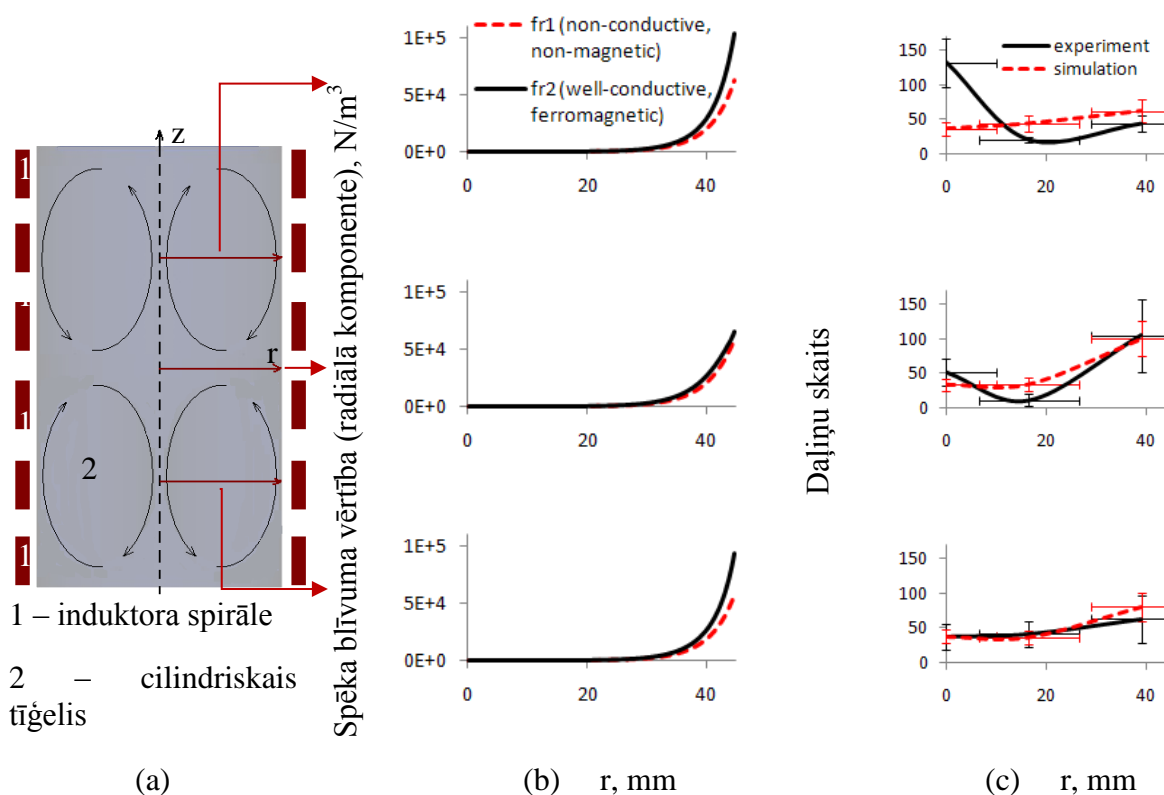
Attēls 1: 100 μm grafiņa daļiņu iemaisīšana tērauda kausējumā 2 kW indukcijas tīģelkrāsnī (125 Hz). Industrijas procesa momentuzņēmumi, iegūti Otto Junker GmbH krāsnī (1. rinda). Modelēšanas rezultāti: skats uz kausējuma augšējo virsmu (2. rinda); daļiņas kausējuma vertikālā šķērs griezumā, skats no krāsns sāna (3. rinda).

Attēls 1 salīdzināta industriāli novērotā cieto piemaisījumu kustība uz kausējuma brīvās virsmas tīģelkrāsnī un attiecīgās modelēšanas rezultāti. Var redzēt, ka novērojums kvalitatīvi sakrīt ar modelēšanas rezultātiem, kas liecina par izstrādātā skaitliskā modeļa piemērotību šādu plūsmu un daļiņu kustības modelēšanai.

Bet šāda kvalitatīva salīdzināšana nespēj sniegt informāciju par modeļa atbilstību plūsmas tīlpumā. Vēl vairāk, pasaulē neeksistē efektīva eksperimentāla tehnoloģija, kura ļautu pētīt cieto piemaisījumu dinamiku šķidrās metālos un verificēt šādus matemātiskos modeļus. Lielākais šķērslis, kurš liedz izmantot klasiskās metodes (*Particle Image Velocimetry* – PIV, *Particle Tracking Velocimetry* – PTV), ir šķidro metālu optiskās īpašības – metāli nav caurspīdīgi. 1980. gados ASV Masačusetsa Tehnoloģiskajā Universitātē tika pārbaudīta iespēja aizvietot šķidro metālu ar sāļu kausējumu, saglabājot galvenās plūsmas īpašības (sk. *Sadoway & Szekely, 1980*), bet šis mēģinājums izrādījās neveiksmīgs, jo EM izraisītā kustība sāļu kausējumā raksturojās ar vienu virpuli, kas atbilst dominējošas termiskās konvekcijas

gadījumam. Rentgena staru tehnoloģijas arī ir mazefektīvas, ekstremāli augstas intensitātes starojums ir nepieciešams lai caurskatīt samērā neliela biezuma šķidrā metāla paraugus. Pasaulē ir zināma tikai viena veiksmīga tehnoloģija – sacietējušo paraugu šķēlumu optiskais pētījums (sk. piem. *Taniguchi & Brimacombe, 1994*). Bet tāda tehnoloģija nesniedz informāciju par daļiņu kustības dinamiku, tikai indicē uz sienas izgulsnēto daļiņu daudzumu.

Tādēļ projektā izstrādāto modeļu un skaitlisko programmu pārbaudei pēdējā gada laikā tika izvirzīta jauna eksperimentāla ideja – izmantot feromagnētiskās daļiņas zemu temperatūru kausējumos kā fizikālo modeli nevadošiem oksīdveida piemaisījumiem. Atbilstoši šai pieejai šķidrā metāla paraugi tiek ņemti lokāli konkrētos laika momentos. Feromagnētiskās daļiņas tādā veidā paņemtajā šķidrā paraugā tiek atdalītas no kausējuma ar patstāvīgo magnētu un saskaitītas. Šī tehnoloģija ļauj izpētīt piemaisījumu koncentrāciju šķidrā metālā, kā arī paver iespējas dārgo zemu temperatūru sakausējumu daudzreizējai izmantošanai, pilnīgi atīrot to no tāda veida piemaisījumiem.



Attēls 2: (a) Indukcijas tīģelkrāsns shēma; (b) EM spēka blīvuma vērtības (radiālā komponente) nevadošo & nemagnētisko un labi vadošo & feromagnētisko daļiņu gadījumos; (c) $300 \pm 50 \mu m$ sfērisko daļiņu skaits indukcijas tīģelkrāsns kausējumā 11 s no maisīšanas sākuma brīža (kvazistacionārs režīms).

Gan teorētiskais novērtējums, gan skaitliskie rezultāti rāda, ka spēks, kurš darbojas uz feromagnētisko daļiņu, ir proporcionāls spēkam, kurš darbojas uz oksīdveida (nevadošu) daļiņu (sk. Attēls 2 b).

Veiktie eksperimenti parādīja, ka daļiņu koncentrācijas sadalījums kausējumā ar apmierinošu precizitāti atbilst modelēšanas rezultātiem (sk. Attēls 2 c) gandrīz visos mērījumu punktos. Tikai augšējā virpuļa zonā uz tīģeļa simetrijas ass eksperimentālā un skaitliskā vērtības stipri atšķiras. Eksperimenti ar mērķi palielināt mērījumu precizitāti tiks turpināti.

Daļiņu kustības skaitliskā analīze parādīja, ka gadījumā, kad tās sākotnēji izvietotas pie tilpuma augšējās virsmas, sekojot plūsmas virzienam, daļiņu mākonis tuvojas stūrim starp augšējo virsmu

un krāsns sienu un pēc tam gar sienu nonāk tīģeļa vidējā zonā. Vidējā zonā plūsma maina savu virzienu un atraujas no sienas. Daļiņas seko plūsmai un sadalās divos sekundāros mākoņos, viens nonāk augšējā plūsmas virpuļa zonā, bet otrs – zonā, kur dominē vidējoztās turbulentās plūsmas apakšējais virpulis. Bīdes, EM un gravitācijas spēku relatīvie lielumi nosaka varbūtību daļiņām ar dažādu izmēru un blīvumu nonākt augšējā zonā vai tīģeļa apakšējā pusē. Pieaugot daļiņu izmēram pieaug varbūtība daļiņu izgulsnēšanai uz sienas tīģeļa vidus zonā, ko nosaka bīdes spēka samazināšanās un EM spēka dominance. Iepriekš minētais process ir daudzparametrisks, kura labāku izpratni nodrošina skaitlisko un eksperimentālo datu salīdzinošā analīze.

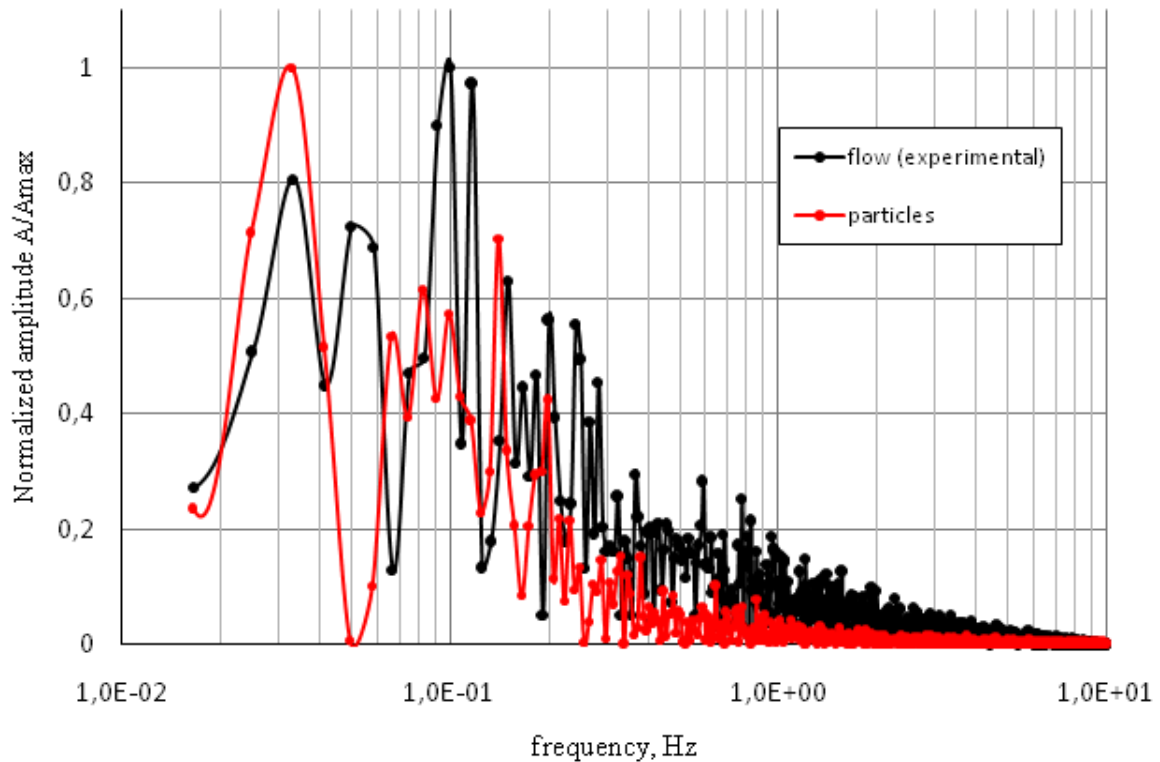
Tabula 1: Aprēķināts cieto piemaisījumu homogenizācijas laiks 57 cm augstajā un 32.6 cm platajā tīģelī ar strāvu 2000 A un frekvenci 365 Hz.

<i>Šķidrums-daļiņu blīvuma attiecība</i>	<i>diametrs, μm</i>	<i>t_{hom}, s</i>
1.0	50	53±9
	100	52±10
	200	47±11
1.1	50	58±9
	100	57±10
	200	53±13
1.5	50	80±13
	100	82±15
	180	85±19
	190	86±19
	200	86±20

Tika izveidota skaitliskā pieeja empīriska 2 parametru (daļiņu izmērs un šķidrums-daļiņu blīvuma attiecība) modeļa izveidei cieto piemaisījumu homogenizācijas laika noteikšanai. Ar homogenizācijas laiku saprot laiku, kurš ir nepieciešams lai sasniegt aptuveni nemainīgu daļiņu koncentrācijas attiecību starp augšējo un apakšējo virpuli – to nosaka sekojoša formula

$$t_{hom}(S, D) = t_{1.st} + t_{2.st}(S, D) = t_{1.st} + \frac{(\Delta N/N)_{\infty} + \delta(S, D) - 1}{a(S, D)},$$

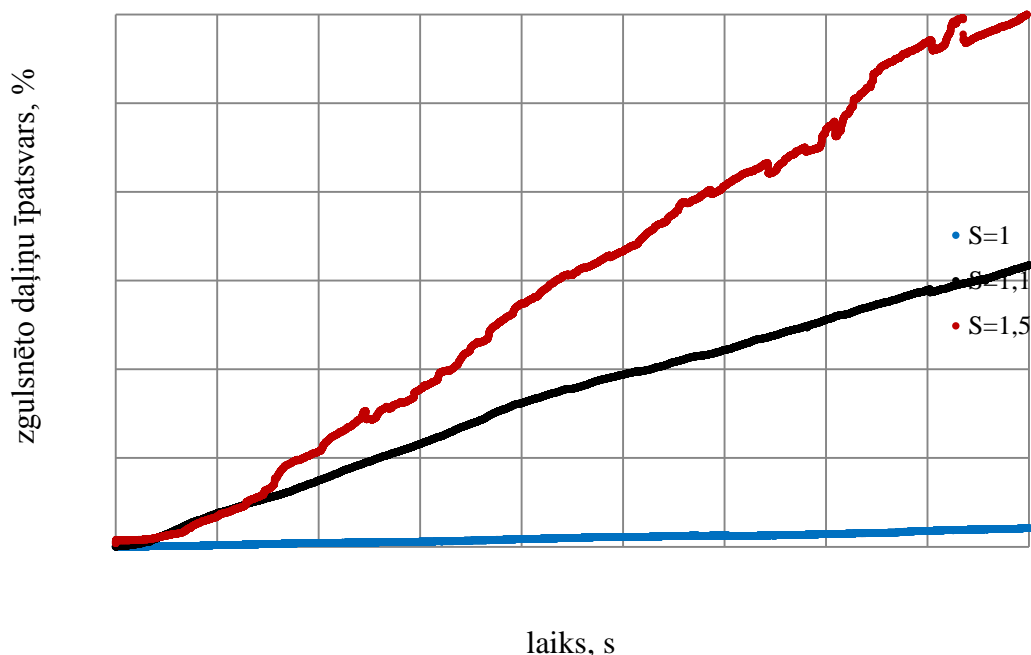
kur $t_{1.st}$ ir pirmā ātrās homogenizācijas posma laiks, $(\Delta N/N)_{\infty}$ ir homogenizācijas kritērija asimptotiskā vērtība, $\delta(S, D)$ un $a(S, D)$ ir parametru atkarīgi otrās lēnās homogenizācijas posma kritēriji, kuri nosaka lineāru homogenizācijas kritērija atkarību no minētiem modeļa parametriem. Tabula 1 apkopoti uz šāda modeļa bāzes noteiktie homogenizācijas laiki dažādu izmēru un blīvumu daļiņām.



Attēls 3: Integrālo plūsmas ātruma pulsāciju spektrs (eksperimentālie dati) un daļiņu skaita izmaiņu spektrs (modelēts rezultāts) indukcijas tīģeļkrāsns kausējuma plūsmas vidus zonā (augstumu intervālā 260-310 mm no tīģeļa dibena). Spektrs ir izveidots, analizējot 100 μm lielas daļiņas ar šķidrums-daļiņu blīvuma attiecību $S = 1$

Pētot cieto piemaisījumu homogenizācijas procesu, tika pievērsta uzmanība plūsmas un daļiņu svārstībām tīģeļa vidus zonā (starp makroskopiskajiem virpuļiem). Šās svārstības tieši nosaka homogenizācijas procesa raksturu. Attēls 3 ilustrē šo svārstību spektru salīdzinājumā ar plūsmas svārstībām. Ir novērots, ka kopumā spektri sakrīt, bet daļiņām zemākas frekvences ir nozīmīgākas, kas var tikt pamatots ar to inerci

Tika novērots, ka relatīvi lielāks EM spēks spiež lielās elektronevadošāsdaļiņas pie sienas – lielāka EM lauka virzienā, un tādā veidā sekmē arī to izgulsnēšanos. Izgulsnēšanas ātrums ir atkarīgs no šķidrums-daļiņu blīvuma attiecības, kas arī šajā pētījumā tika skaidrots teorētiski. Attēls 4 ilustrē izgulsnēšanas procesa dinamiku daļiņām ar dažādiem blīvumiem.



Attēls 4: 200 μm daļiņu izgulsnēšanas uz sienas process atkarība no daļiņu blīvuma.

Galvenās publikācijas

1. **M. Scepanskis, A. Jakovics, B. Nacke.** Homogenization of alloying particles in induction crucible furnaces // Modelling for material processing – Riga, Latvia, 2010, pp. 259 - 264.
2. **M. Scepanskis, A. Jakovics, B. Nacke.** Homogenization of nonconductive particles in EM induced metal flow in a cylindrical vessel // Magnetohydrodynamics – 2010, Vol. 46, Nr. 4, pp. 413 - 424.
3. **M. Scepanskis, A. Jakovics, E. Baake.** Statistical analysis of the influence of forces on particles in EM driven recirculated turbulent flows // Journal of physics: Conference series – 2011, vol. 333, 012015, 14 p
4. **M. Scepanskis, A. Jakovics, E. Baake, B. Nacke.** Numerical analysis and experimental verification of the behaviour of solid inclusions in induction crucible furnaces // Journal of iron and steel research international – 2012, vol. 19, suppl. 1, p. 713 - 716.

3. Siltuma un vielas apmaiņas elektrovadoša šķidrums turbulentās plūsmās sarežģītas konfigurācijas sistēmās skaitliska modelēšana, izmantojot lielo virpuļu metodi (LES) un ievērojot kombinētu siltuma apmaiņu ar apkārtējo vidi

Galveni šajā jomā veiktie darbi un iegūtie rezultāti ir šādi:

1. Industriālo indukcijas kanālkrāšņu (IKK) pētījumiem tika izveidoti vairāki modeļi, kuri ir apvienojami divās grupās:

- trīs modeļi (att. 1,2,3) tika izveidoti siltuma un masas pārnesei IKK kausējumā ilgtermiņa pētījumiem;

- trīs modeļi (att. 4,5,6) tika izveidoti elektriski nevadošu izgulsnējumu un aizsērējumu ietekmes uz IKK elektromagnētisko (EM), turbulento hidrodinamisko (HD) un siltuma lauku sadalījumiem skaitliskiem novērtējumiem.

Pirmās grupas modeļiem ir šādas īpatnības:

√ *Modelis 1* (att. 1) ar diviem simetriskiem kanāla zariem reprezentē IKK ģeometrijas oriģinālo dizainu;

√ *Modelim 2* (att. 2) ir būtisks paplašināts kreisais kanāla zars un tā šķērsriezuma laukums palielināts no 100% līdz 200% kanāla izejai zonā uz IKK kaklu;

√ *Modelis 3* (att. 3) ir *Modeļa 2* modifikācija, kura izveidota ar magnetovada rotāciju pulksteņa virzienā uz leņķi $\alpha = 90^\circ$, mainot magnētvasda pozīciju no labā kanāla zara uz pozīciju kreisajā kanāla zarā.

Modeļiem 1–3 ir fiksēts Džoula siltuma jaudas blīvums kausējumā ~ 215 kW līmenī.

Otrās grupas modeļiem ir šādas īpatnības:

√ *Modelim 4* (att. 4) ir būtisks sašaurināts kreisais kanāla zars un tā šķērsriezuma laukums samazināts no 100% līdz 25% kanāla izejai zonā uz IKK kaklu. *Modelis 4* reprezentē IKK ar aizaudzēto kreiso kanāla zaru;

√ *Modelis 5* (att. 5) reprezentē IKK kakla dibena zonas elektriski nevadošu aizsērējumu “kalna” formā;

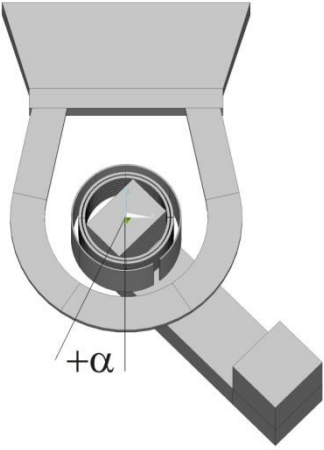
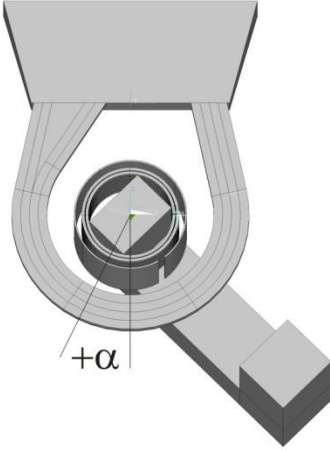
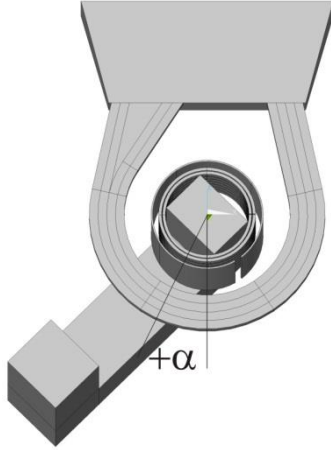
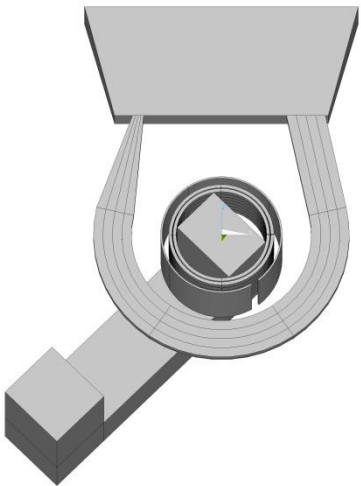
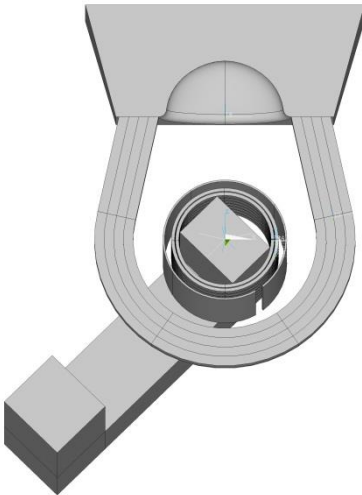
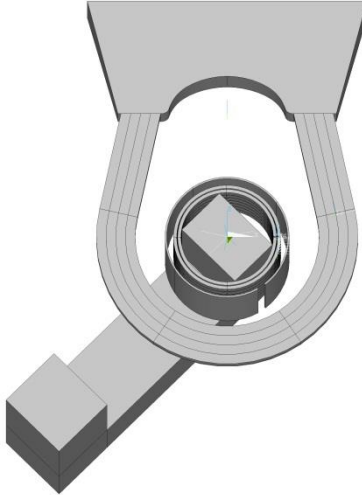
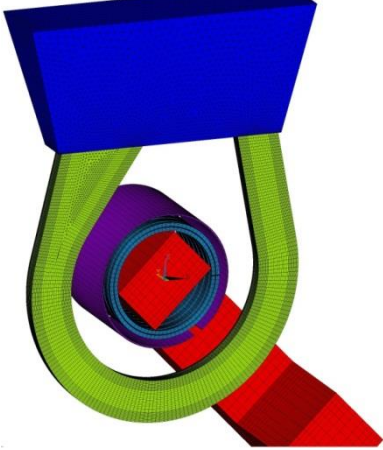

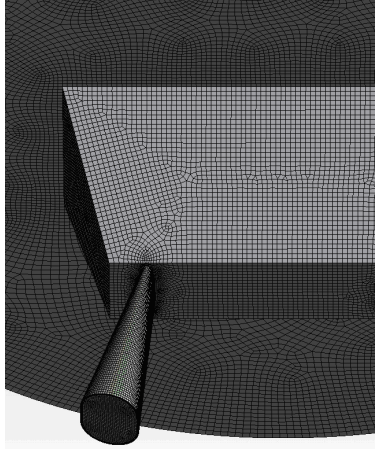
√ *Modelis 6* (att. 6) reprezentē IKK kakla dibena zonas elektriski nevadošu aizsērējumu “segļu” formā.

Modeļiem 4–6 ir fiksēta induktora maiņstrāvas amplitūda 1850 A līmenī (induktora vijumu skaits ir 28).

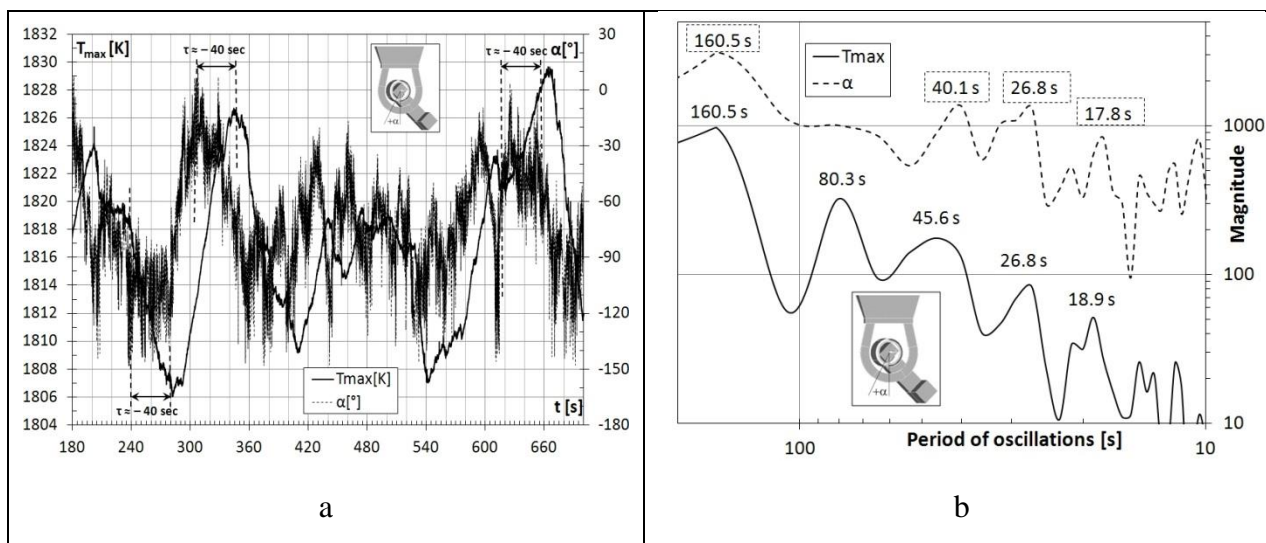
2. Tika izveidoti strukturēta režģa varianti (att. 7, 9) skaitliskajai modelēšanai datoru klasterī, kā arī uz izplatītākās galddatora darbstacijas (3.4 GHz 4-core (8-thread) Intel Core i7-2600 procesors, 8 GB RAM), izmantojot komerciālas programmatūras paketes:

√ ANSYS Classic versijām no 11.0 līdz 14.0 – EM lauku aprēķiniem (modelējama apgabala ģeometrija parādīta att. 7);

√ ANSYS CFX versijām no 12.0 līdz 14.0 un FLUENT versijai 6.2.6 – turbulento hidrodinamisko (HD) un temperatūras lauku aprēķiniem (modelējama apgabala ģeometrija parādīta att. 8).

		
<p>Att. 1. Oriģināla IKK ģeometrija – simetrisks kanāls un magnētavada pozīcija</p>	<p>Att. 2. IKK ar paplašinātu kreiso kanāla zaru</p>	<p>Att. 3. IKK ar paplašināto kreiso kanāla zaru un pagrieztu magnētavadu</p>
		
<p>Att. 4. IKK ar sašaurinātu kreiso kanāla zaru, kas modelē aizaudzētu kanāla izeju uz kakla zonu</p>	<p>Att. 5. IKK ar kakla zonas dibena aizsērējumu "kalna" formā</p>	<p>Att. 6. IKK ar kakla zonas dibena aizsērējumu "segļu" formā</p>
		
<p>Att. 7. IKK ģeometrija EM lauku modelēšanai un režģis IKK ģeometrijai ar paplašināto kreiso kanāla zaru</p>	<p>Att. 8. IKK ģeometrija HD un siltuma lauku modelēšanai IKK ģeometrijai ar sašaurināto kreiso</p>	<p>Att. 9. Režģa fragments HD un termisko lauku modelēšanai IKK ģeometrijai ar sašaurināto kreiso kanāla zaru</p>

	kanāla zaru	
--	-------------	--



Att. 10. IKK ar simetrisku kanālu šķērs griezums $y = 0$, plūsmas laiks $t = 000-700$ sekundes:

(a) maksimālā temperatūra T_{max} un tas pozīcijas leņķis α ; (b) FFT analīzes rezultāti priekš T_{max} un α

Strukturēta režģa (elementu skaits ar kārtu no 3 līdz 6 miljoniem HD un siltuma aprēķiniem) izveides un laika soļa izvēles procesā tika ņemti vērā vairāki ierobežojumi un prasības, t.sk.:

- izplatītākā galddatora atmiņas un ātrdarbības ierobežojumi;
- IKK vairāku zonu ģeometrija ar dažādiem, būtiski atšķirīgiem kausējuma ātruma intensitātes līmeņiem;
- EM, HD un termiskie robežslāņi ar pretrunīgām prasībām diskretizācijai;
- *Lielo Virpuļu Modelēšanas (Large Eddy Simulation – LES)* pieejas vēlamā lietošana kausējuma plūsmas turbulenta režīma aprēķiniem salīdzinājumā ar divparametru turbulences modeļiem – $k-\varepsilon$ vai $k-\omega$ SST (*Shear Stress Transport*);
- prizmatisku (*hexahedral*) elementu vēlamā lietošana salīdzinājumā ar tetraedra (*tetrahedral*) elementiem.

3. LES turbulences modelis nodrošina ievērojami detalizētākus rezultātus HD un temperatūras sadalījumiem, kas ievērojami atšķiras no rezultātiem, kas tika iegūti ar $k-\varepsilon$ vai ar $k-\omega$ SST modeļiem, it īpaši siltuma pārneses procesu raksturlielumu un turbulentas kinētiskas enerģijas sadalījumiem:

- temperatūras sadalījuma kvasistabilais stāvoklis (att. 10a) simetriskajai IKK (att. 1) kas iegūts, izmantojot LES modeli, krasi atšķiras no temperatūras sadalījuma, kas tika aprēķināts ar $k-\varepsilon$ modeli;

- temperatūras maksimuma pozīcija (att. 11a) asimetriskās IKK paplašinātajā kanāla zarā (att. 2, 3), kas iegūta ar $k-\varepsilon$ modeli, tikai kvalitatīvi atbilst rezultātiem, kas iegūti ar LES metodi.

4. Industriālai IKK tika skaitliski analizētas temperatūras maksimālas vērtības un tās pozīcijas oscilācijas IKK kanālā. Šādiem ilgtermiņa pētījumiem nav analogu zinātniskajā literatūrā – tie veikti pirmo reizi.

Lai ilgtermiņa modelēšanas gaitā sasniegtu kvazistacionāro stāvokli temperatūras lauka sadalījumam (att. 10a, 11a) ir nepieciešams vairāku simtu sekunžu plūsmas laika intervāls – simetriskajā IKK (att. 1) tika sasniegts plūsmas laika intervāls gandrīz 12 minūtes (700 sekundes) un IKK ar paplašināto zaru (att. 2, 3) – vairāk nekā 3 minūtes (200 sekundes).

Ilgtermiņa modelēšanas rezultātu analīze, izmantojot FFT (*Fast Fourier Transformation*) metodi, ļāva noteikt temperatūras maksimālas vērtības un tas pozīcijas kanālā oscilācijas ar zemām frekvencēm:

- simetriskajā IKK (att. 1) – 160 sekundes (att. 10b);
- IKK ar paplašināto zaru (att. 2, 3) – 65 sekundes (att. 11b),

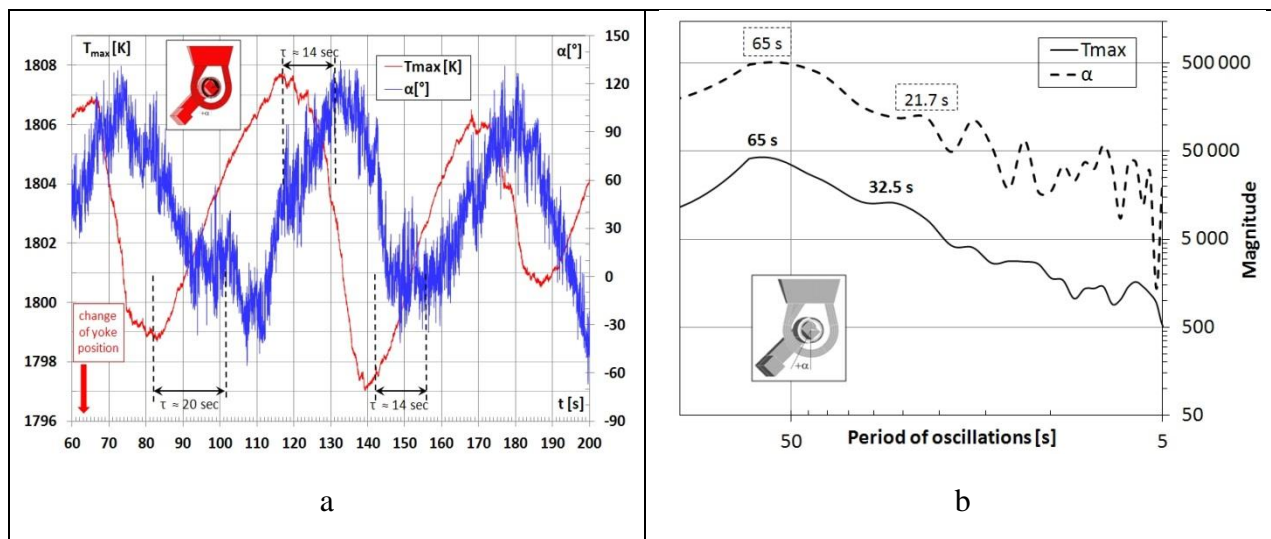
Būtiski, kā šīs frekvences ir 3–4 reizes mazākas par izpētīto plūsmas laika intervālu.

5. Ilgtermiņa aprēķinos izpētītie plūsmas laika intervāli ļāva fiksēt arī sekojošus efektus temperatūras laukam IKK kanālā:

- abu asimetrijas faktoru (kanāla zara paplašināšana, kā arī magnētovada pozīcija) kombinācija viena kanāla zarā (att. 3) dod regulārāku ilgtermiņa oscilācijas amplitūdas sadalījumu visam izpētītajam plūsmas laika intervālam;

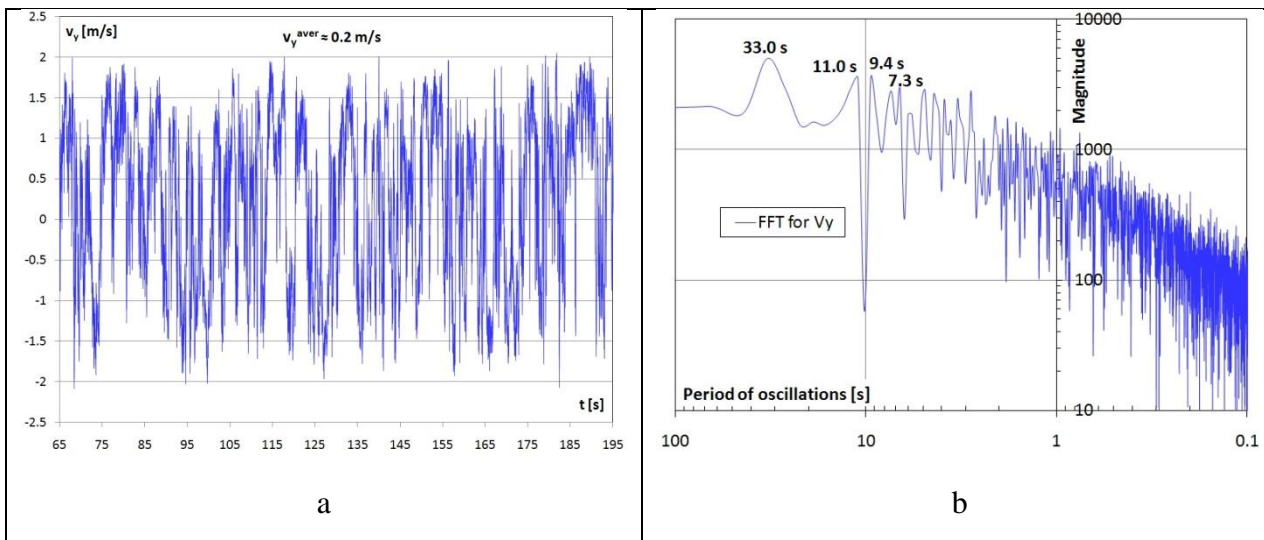
- simetriskajā IKK (att. 1) temperatūras maksimuma vērtības pulsācijas atpaliek fāzē no temperatūras maksimuma pozīcijas kanālā oscilācijas apmēram par perioda ceturtdaļu (att. 10a);

- IKK ar paplašināto kanālu (att. 2, 3) temperatūras maksimuma vērtības oscilācijas apstaidz fāzē temperatūras maksimuma pozīcijas kanālā oscilācijas apmēram par piekto daļu no perioda (att. 11a);



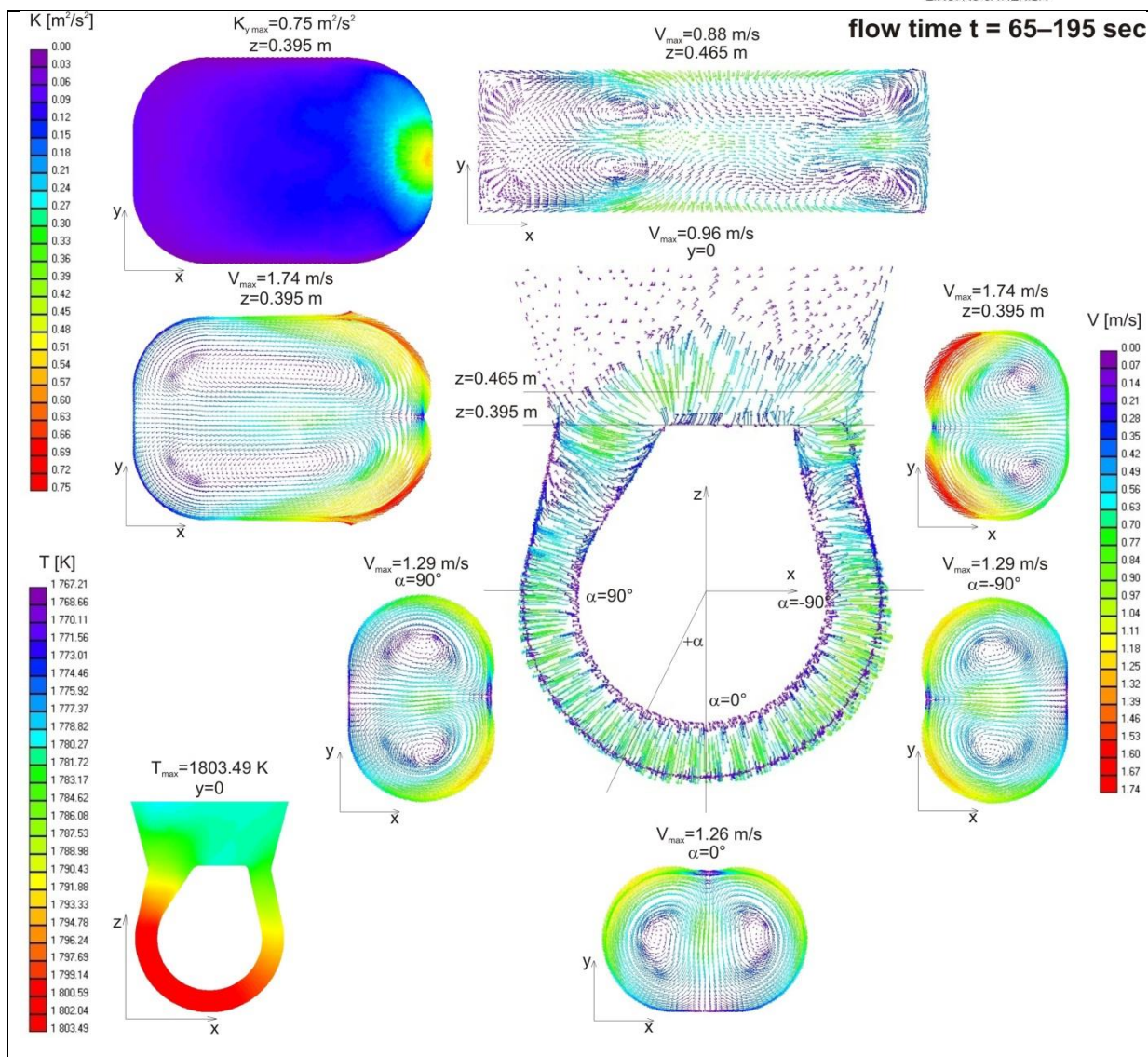
Att. 11. IKK ar kanāla paplašināto zaru šķērsriezums $y = 0$, plūsmas laiks $t = 60-200$ sekundes:

(a) maksimālā temperatūra T_{\max} un tas pozīcijas leņķis α ; (b) FFT analīzes rezultāti priekš T_{\max} un α



Att. 12. IKK ar kanāla paplašināto zaru šķērsriezums $y = 0$, plūsmas laiks $t = 65-195$ sekundes:

(a) ātruma y-komponente; (b) FFT analīzes rezultāti ātruma y-komponentei



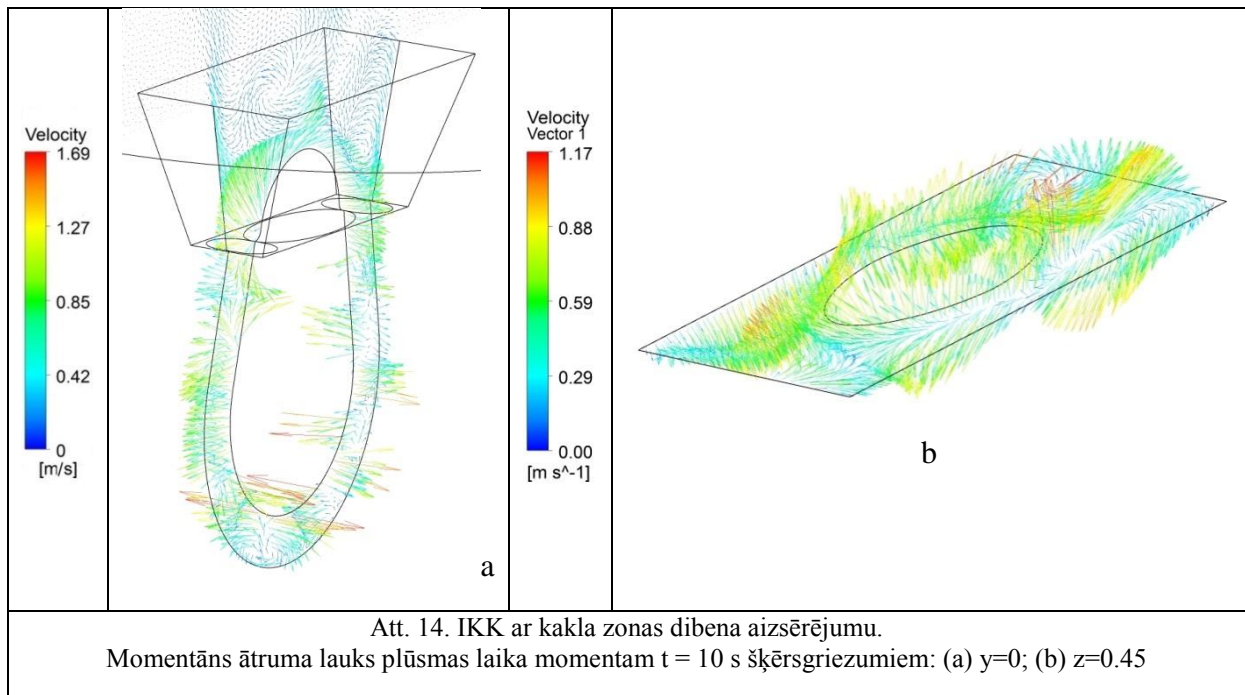
Att. 13. IKK ar kanāla paplašināto zaru.

Vidējais laikā ātruma lauks plūsmas laikā intervālam $t = 65-195$ sekundes sekojošiem šķērsgriezumiem: $y=0$; $z=0.465$ m; $x=0$; $\alpha=0^\circ$; $\alpha=-90^\circ$; $\alpha=90^\circ$; $z=0.395$ m (kanāla kreiso un labo zaru izejas kaklā zonā). Vidējais laikā temperatūras lauks plūsmas laikā intervālam $t = 65-195$ sekundes šķērsgriezumam $y=0$

- vidējās laikā tranzīta ātrumu vērtības modeļiem ar paplašināto kanāla zaru (att. 2, 3) ir pa divām kārtām mazākas nekā maksimālie vidējie plūsmas ātrumi IKK šķērsgriezumos (att. 13). Tranzīta ātrums virzīts pa kreisi uz paplašināto kanālu zaru, t.i., uz reģionu ar labākiem termiskās konvekcijas attīstības apstākļiem. Tādējādi tas ir nozīmīgāks faktors salīdzinājuma ar EM avotu pozīciju, kas rosina maksimālas temperatūras pozīciju kanāla palikt paplašinātajā kanāla zarā;

- ir zināma korelācija starp temperatūras maksimuma pozīciju noteiktajā kanāla zarā un tranzīta ātrumu virzienu uz to pašu kanāla zaru. Gadījumā, ja temperatūras maksimuma pozīcija aprēķinu sākumā ir pretruna ar minēto korelāciju, tika konstatēta temperatūras maksimuma pozīcijas maiņa – simetriskajā IKK (att. 1) no kreisa kanāla zaru uz labo kanāla zaru;

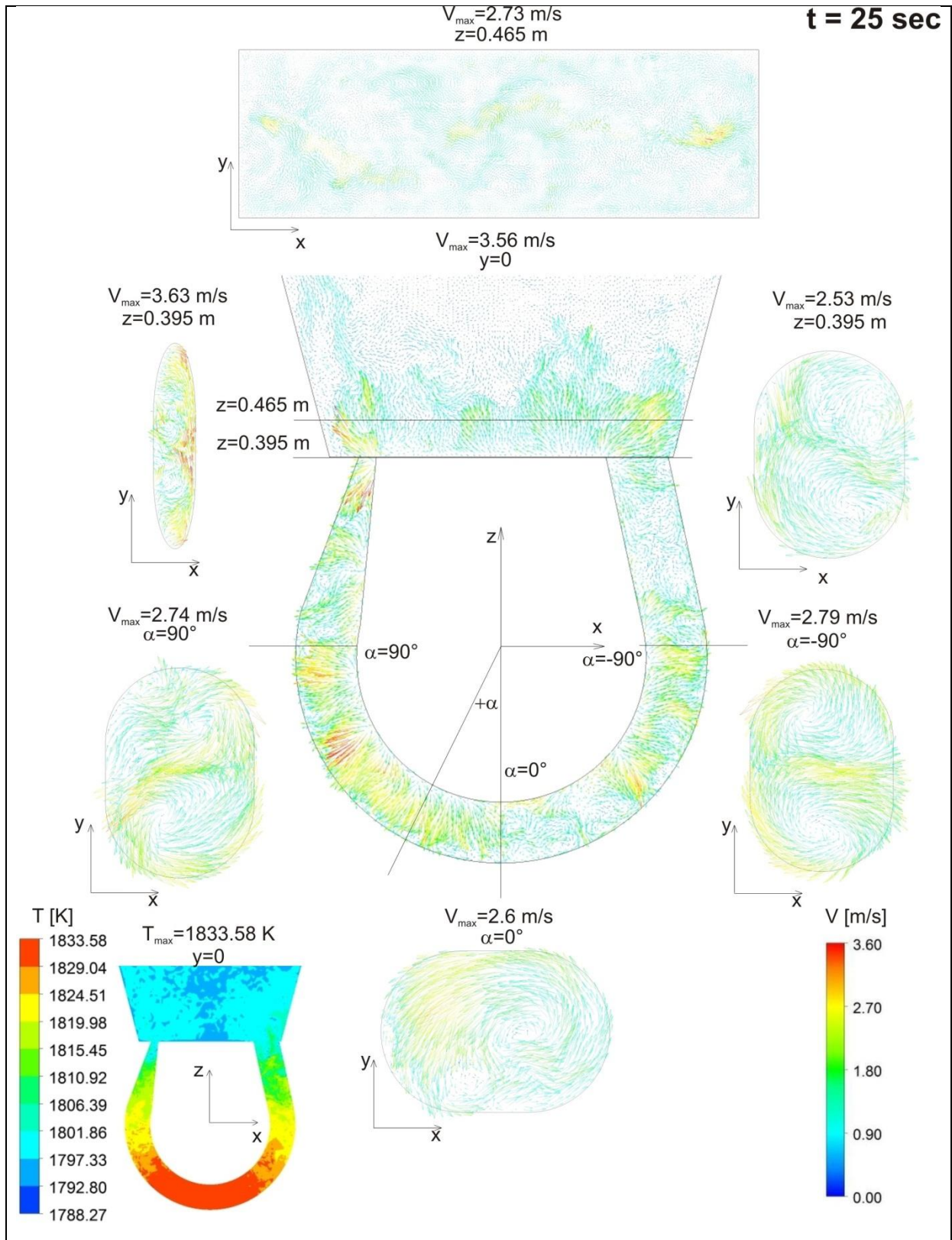
- IKK konstrukcija ar pagrieztu magnētovadu (att. 3) nodrošina mazāku pārkaršanas temperatūru kanālā salīdzinājumā ar modeli (att. 2) ar oriģinālo magnētovada pozīciju.



6. Visos IKK kanāla šķērs griezumos (att. 13) laikā vidēnotā cirkulācija sastāv no diviem kausējuma plūsmas virpuļiem ar pretējiem virzieniem un aptuveni vienādu intensitāti.

Aprēķināts ar LES metodi momentānais ātruma sadalījums (att. 12a) režģa punktā starp pretējo virziena plūsmas virpuļiem un ātruma zemfrekvenču oscilācijas spektrs (att. 12b) ir līdzīgs eksperimentālajam sadalījumam indukcijas tīģelkrāsnī starp virpuļiem (skat. iepriekš).

Turbulentās kinētiskās enerģijas sadalījuma raksturs zonā, kur mijiedarbojas divi kausējuma plūsmas virpuļi ar pretēju rotācijas virzienu, nav atkarīgs no konkrētās MHD ierīces un to var uzskatīt par vispārējo likumsakarību.



Att. 15. IKK ar sašaurināto kanāla zaru.

Momentānais ātruma lauks plūsmas laika momentam $t = 25$ sekunde sekojošiem šķērsgriezumiem: $y=0; z=0.465$ m; $x=0; \alpha=0^\circ; \alpha=-90^\circ; \alpha=90^\circ; z=0.395$ m (kanāla kreiso un labo zaru izejas kaklā zonā).
Momentānais temperatūras lauks plūsmas laika momentam $t = 25$ sekunde šķērsgriezumam $y=0$

7. Kausējuma plūsmas struktūra kanālā (att. 14a) IKK ar kakla zonas dibena izgulsnējumiem (att. 5, 6) ir līdzīga plūsmas struktūrai simetriskajā IKK (att. 1).

Aizsērējumu izveidošanās būtiski maina plūsmas struktūru kakla zonā (att. 14b), jo samazinās efektīvs kakla zonas augstums.

Ātrumu vērtības kakla zonā pieaug tāpēc, ka izgulsnējumu izveidošanās kakla zonas dibenā izsauc IKK kanāla nosacītu pagarināšanās efekta, kuru varētu interpretēt kā kanāla izejas uz kakla zonu pārvietošanu uz augstāku līmeni.

Modelī ar sašaurināto kanāla zaru (att. 4) šķērsriezuma laukuma samazināšanās dēļ kanāla aizaugšanas rezultātā saskaņā ar Bernulli vienādojumu nesaspiežamam šķidrums būtiski palielinās kausējuma momentāna ātruma maksimālas vērtības (att. 15) kanāla izejā zonā, kā arī IKK kaklā tuvu kanāla izejai.

Vidēja laikā tranzīta ātruma vērtība (att. 19) modelī ar sašaurināto kanāla zaru (att. 4) ir mazākā, nekā simetriskai (att. 1) un asimetriskai (att. 2, 3) IKK, ko varētu interpretēt, kā kanāla daļējo bloķēšanu.

8. IKK kakla zonas dibena aizsērējumi (att. 5, 6) var izraisīt ievērojamu Džoula siltuma jaudas blīvuma koncentrāciju izgulsnējumu tuvumā. Tādējādi tas var izraisīt Džoula siltuma pārdalīšanos starp dažādām IKK zonām.

Elektriski nevadoši izgulsnējumi IKK kakla zonas dibena var izraisīt ievērojamu kausējuma lokālu pārkaršanu, kas var saīsināt industriālo IKK efektīvo darbību periodu.

9. Modelī ar sašaurināto kanāla zaru (att. 4) ir fiksētas divas Džoula siltuma jaudas blīvuma maksimālo vērtību zonas (att. 16):

- kanāla cilpā zonā magnetovada tuvumā;
- daļēji aizaugušā kanāla izejas zonā.

Momentānās temperatūras lauka sadalījumam ir divas zonas ar konkurējošām maksimālām vērtībām, kas atbilst Džoula siltuma izdalīšanas maksimuma zonām (att. 17).

LES aprēķinos realizētajam plūsmas laika intervālam $t = 0-25$ sekundes divu vidējās laikā temperatūras zonu, kas atbilst Džoula siltuma izdalīšanas maksimuma zonām, veidošanās pagaidām nav fiksēta (att. 19).

Zemfrekvenču oscilācijas maksimālai temperatūrai un tas pozīcijai kanālā (att. 18) pagaidām nav fiksētas, jo izpētīts plūsmas laika intervāls ir ievērojumi īsāks, nekā sagaidāmās oscilācijas frekvences.

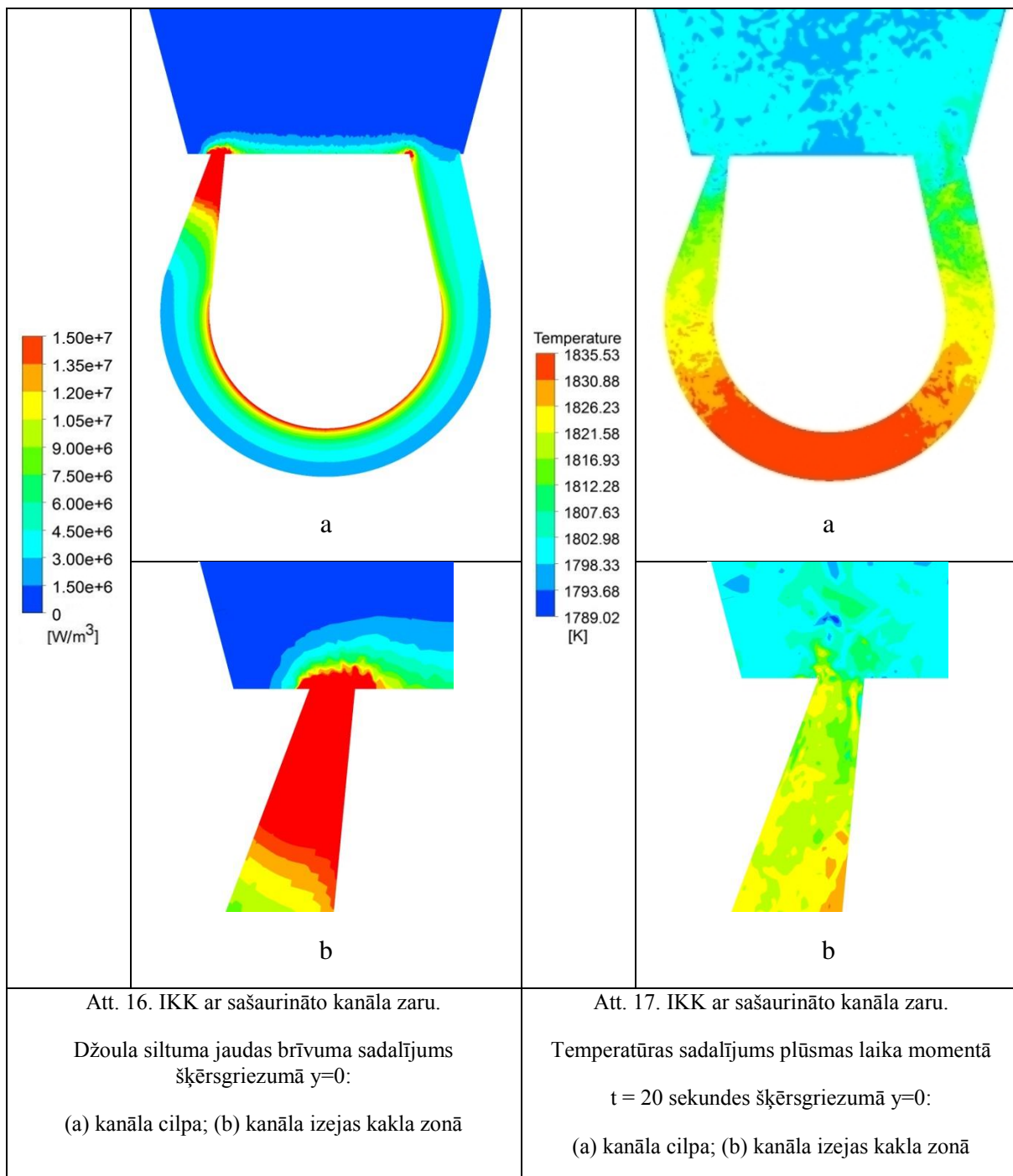
10. Simetriskai IKK (att. 1) un IKK ar paplašināto kanāla zaru (att. 2) tika veiktas ilgtermiņa aprēķini daļiņu kustībai ar šādām īpašībām:

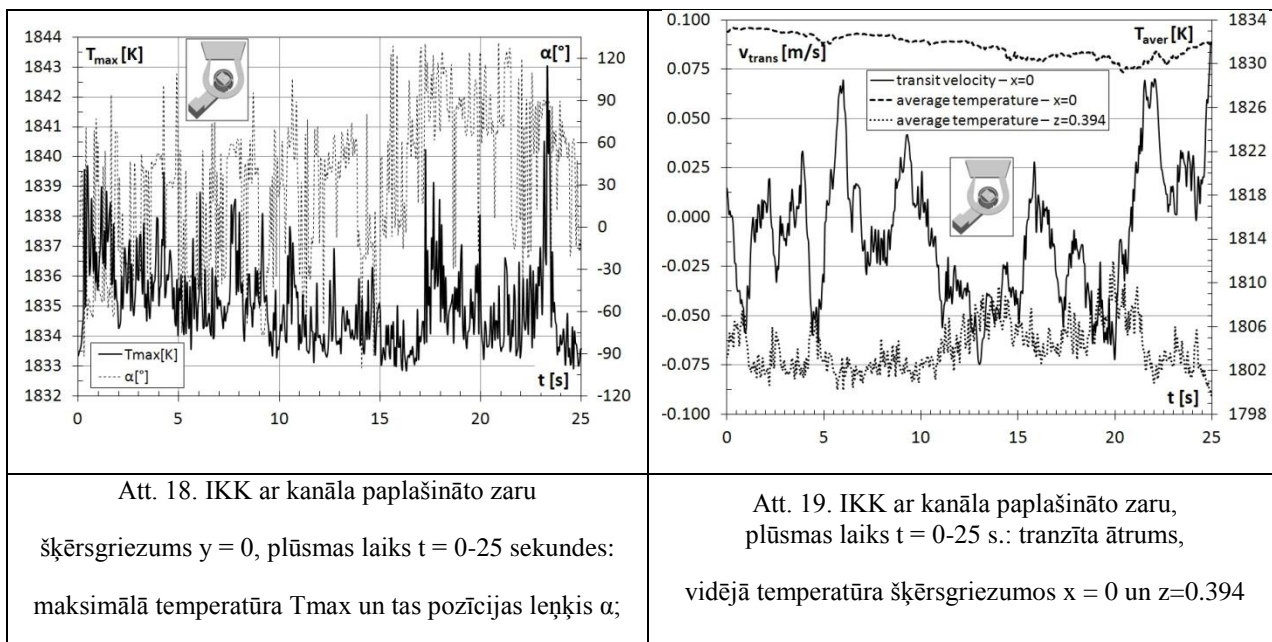
- daļiņas ir elastīgas sfēras;
- daļiņas ir elektriski nevadošas;
- daļiņas neietekmē kausējuma plūsmas struktūru un ātrumu;
- daļiņu-daļiņu mijiedarbība ir niecīga.

Katras daļiņas kustība tiek noteikta integrējot kustības vienādojumu, ņemot vērā sekojošo spēku līdzsvaru (att. 20):

- berzes spēka, kas iedarbojas uz daļiņu kausējuma viskozitātes dēļ;

- cēlējspēka, kas parādās daļiņas un kausējuma brīvumu atšķirības dēļ;
- EM spēka, kas parādās, kad elektronevadoša daļiņa atrodas kausējumā, uz kura iedarbojas EM spēks.





Izmantota Lagranža pieeja ļauj atrast:

- daļiņu mākoņu sadalījumu laikā (att. 22 un 23 pa labi);
- daļiņu ātrumus (att. 21a);
- daļiņu trajektorijas (att. 21b)

11. Tika novērtēta IKK metāla kausējuma piesārņojuma pakāpe, kad kanāla sieniņu keramiskais materiāls infiltrējas kausējumā, t.i. kanāla erozijas gadījumā. Piesārņojuma pakāpe tika nodēfīnēta, kā attiecība starp daļiņu skaitu, kas ir sasnieguši IKK vannu laika vienībā (piemēram, $t = 1$ min), un kopējo daļiņu skaitu.

Daļiņu mākoņa aprēķinos IKK ar paplašināto kanāla zaru (att. 2) tika sasniegts kopējais plūsmas laiks gandrīz 2 minūtes plūsmas laika intervālam $t = 95-205$ sekundes.

Novērtēta piesārņojuma pakāpe ir $\sim 85\%$ (att. 22).

12. Tika novērtēts leģējošas piedevas homogenizācijas laiks, kad tās sadalās tuvināti vienmērīgi pa kausējumu vannas tilpumu.

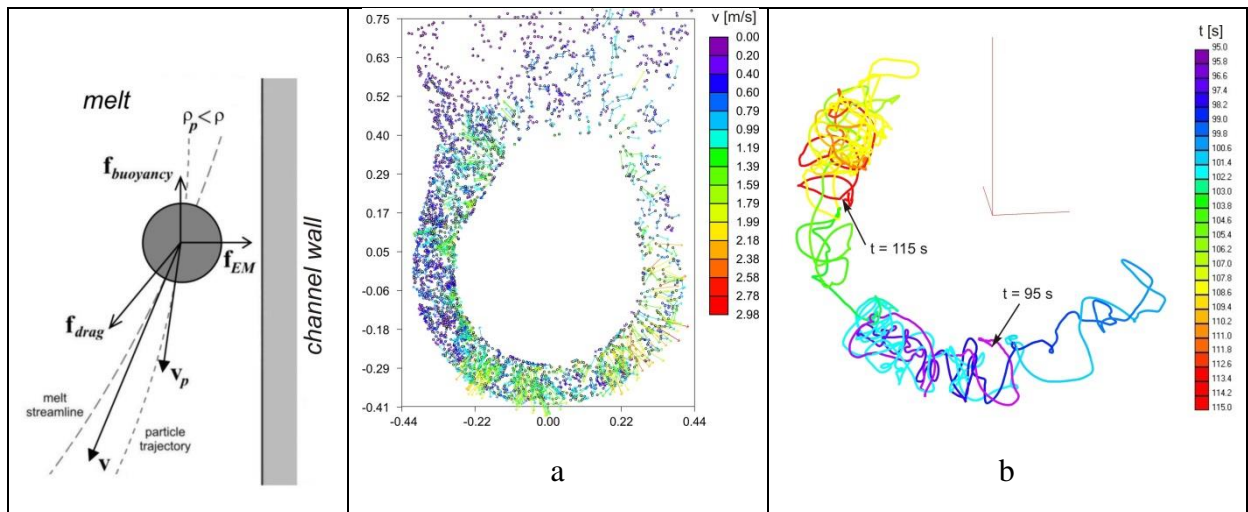
Daļiņu mākoņa aprēķinos simetriskai IKK (att. 1) tika sasniegts kopējais plūsmas laiks ap 9 minūtēm plūsmas laika intervālam $t = 10-555$ sekundes.

Novērtētais homogenizācijas laiks ~ 2 min (att. 23).

13. Veiktie ilga laika plūsmas aprēķini rāda LES pieejas efektivitāti daļiņu kustības noteikšanai kopā ar kausējuma turbulentās plūsmas un siltuma lauka nestacionārajiem raksturlielumiem industriālajām IKK.

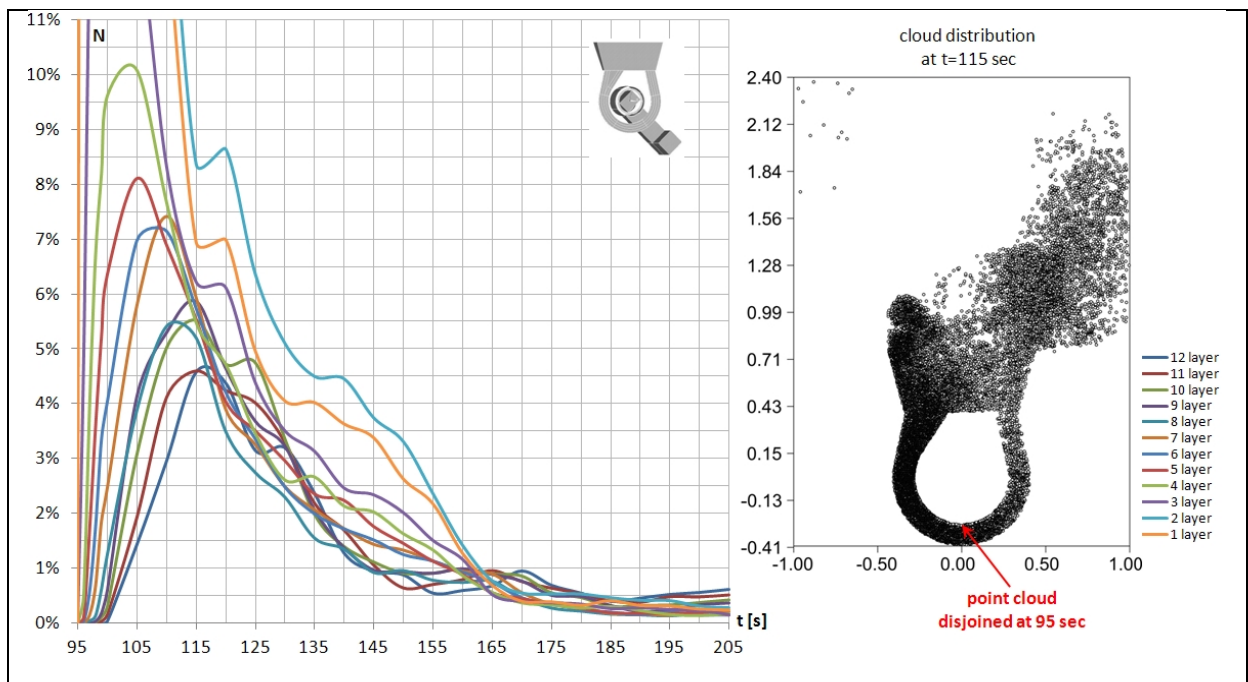
LES pieeja tika sekmīgi verificēta salīdzinot HD un temperatūras lauku modelēšanas un eksperimentu rezultātus.

Eksistē būtiskas grūtības (skat. arī p. 2) veikt daļiņu kustības skaitliskā modeļa eksperimentālo pārbaudi augsttemperatūras necaurspīdīgiem elektriski vadošiem kausējumiem. Šī problēma vēl pagaidām nav pilnībā atrisināta.

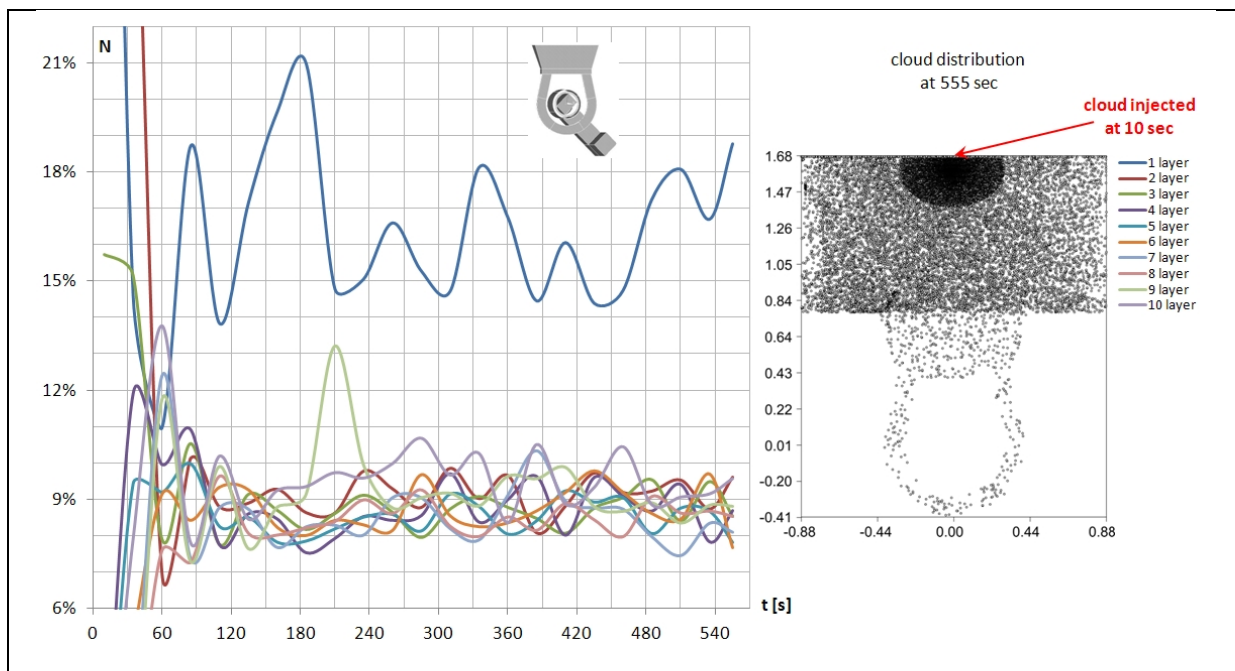


Att. 20. Spēku, kas darbojās uz viegļu daļiņu ($\rho_p < \rho$), shēma tuvu IKK kanāla sienai

Att. 21. IKK ar paplašināto kanāla zaru:
 (a) mākoņa daļiņu ($\rho_p \approx \frac{3}{4} \rho_{melt}$) ātrumu vektori kanālā un kakla zonā plūsmas laika momentam $t = 125$ sekunde;
 (b) daļiņas ($\rho_p \approx \frac{3}{4} \rho_{melt}$) trajektorija (izkrāsotā attiecībā laika momentam plūsmas laika intervālam $t = 95$ –115 sekundes



Att. 22. IKK ar paplašināto kanāla zaru ICF, plūsmas laika intervāls $t = 95$ –200 sekundes:
 (pa kreisi) 25000 mākoņa daļiņu relatīvais skaits ($\rho_p \approx \frac{3}{4} \rho_{melt}$) vienāda biezuma horizontāliem 1–12 slāņiem (skat. pa labi) kanālā un kakla zonā;
 (pa labi) mākoņa daļiņu sadalījums plūsmas laika momentam $t = 115$ sekunde



Att. 23. IKK ar simetrisko kanālu ICF, plūsmas laika intervāls $t = 10\text{--}555$ sekundes:

(pa kreisi) 16000 mākoņa daļiņu relatīvais skaits ($\rho_p \approx \frac{1}{4} \rho_{\text{melt}}$)

vienāda biezuma horizontāliem 1–10 slāņiem (skat. pa labi) cilindriskajā vannā;

(pa labi) mākoņa daļiņu sadalījums plūsmas laika momentam $t = 555$ sekunde

Galvenās publikācijas

1. **Baake E., Jakovics A., Pavlovs S., Kirpo M.** Numerical analysis of turbulent flow and temperature field in induction channel furnace with various channel design. *Proceedings of International Scientific Colloquium "Modelling for Material Processing", September 16–17, 2010, Riga*, pp. 253–258.

2. **Baake E., Jakovics A., Pavlovs S., Kirpo M.** Long-term computations of turbulent flow and temperature field in induction channel furnace with various channel design. *Magnetohydrodynamics*, 2010, Vol. 46, No. 4, pp. 317–330.

3. **Baake E., Jakovics A., Pavlovs S., Kirpo M.** Influence of the channel design on the heat and mass exchange of induction channel furnace. *The International Journal for Computation and Mathematics in Electrical and Electronic Engineering (COMPEL)*, 2011, Vol. 30, No. 5, pp. 1637–1650.

4. **Jakovics A., Pavlovs S., Kirpo M., Baake E.** Long-term LES study of turbulent heat and mass exchange in induction channel furnaces with various channel design. *Fundamental*

and applied MHD (*Proceedings of 8th PAMIR International Conference on Fundamental and Applied MHD, September 5–9, 2011, Borgo, France*). 2011, Vol. 1, pp. 283–288.

5. **Pavlovs S., Jakovics A., Baake E., Nacke B., Kirpo M.** LES modelling of turbulent flow, heat exchange and particles transport in industrial induction channel furnaces. *Magnetohydrodynamics*, 2011, Vol. 47, No. 4, pp. 399–412.

6. **Pavlovs S., Jakovics A., Baake E., Nacke B.** LES long-term analysis of particles transport in melt turbulent flow for industrial induction channel furnaces. *Proceeding of 8th International Conference on Clean Steel, May 14–16, 2012, Budapest, Hungary*. 12 p.

7. **Pavlovs S., Jakovics A., Bosnyaks D., Baake E., Nacke B.** Turbulent flow, heat and mass exchange in industrial induction channel furnaces with various channel design, iron yoke position and clogging. *Proceeding of the XVII Congress UIE-2012, May 21–25, 2012, Saint Petersburg, Russia*, 8 p.

8. **Jakovics A., Pavlovs S., Bosnyaks D., Spitans S., Baake E., Nacke B.** Influence of channel and yoke design and clogging on turbulent flow and heat exchange in induction channel furnaces. *International Journal of Iron and Steel Research*, 2012, Vol. 19, Supplement 1, pp. 749–753.

Pētījuma apakšaktivitāte

4.2.2. Silīcija monokristālu izdusriālās audzēšanas matemātiskā modelēšana

Aktivitātes vadītājs: asoc. profesors Andris Muižnieks

1. Ievads

Apakšaktivitātes zinātniskais vadītājs bija asoc.-prof. Dr.-Phys. Andris Muižnieks. Apakšaktivitātes izpildīšanā piedalījās asoc.-prof. Dr.-Phys. Andris Muižnieks, Dr.-Phys. Armands Krauze un Dr.-Chem. Ģirts Barinovs kā, kā arī vairāki Fizikas bakalaura programmas studenti.

Apakšaktivitātes ietvaros tika pilnveidota matemātisko modeļu sistēma un programmu komplekss *FZone* silīcija monokristālu audzēšanas procesa ar peldošās zonas metodi (*floating zone (FZ) method*) matemātiskai modelēšanai. Pirmo reizi FZ procesam tika izveidots integrēts argona plūsmas modelis, kurā tiek aplūkota temperatūras sadalījuma silīcijā un argona plūsmas iekārtā mijiedarbība. Tāpat pirmo reizi FZ procesam tika izveidots trīsdimensionāls (3D) modelis izkusušās zonas formas un temperatūras sadalījuma zonā aprēķinam. Abi modeļi tika implementēti paketē *FZone*. Tika pilnveidota 3D hidrodinamikas un masas pārnese aprēķina sistēma, kas ir realizēta uz daudzprocesoru klāsterā *Linux* vidē, izmantojot *OpenFOAM* bibliotēku.

Aktivitātes ietvaros tika iesniegti un publicēti 4 zinātniskie raksti, kuros ir norādes uz šo ESF projektu:

1. A. Krauze, A. Muižnieks, K. Bergfelds, K. Janisels, G. Chikvaidze. Reduction of silicon crust on the crucible walls in silicon melt purifying processes with electron beam technology by means of low-frequency traveling magnetic fields. *Magnetohydrodynamics*, 2011, Vol. 47, No. 4, 369-383.
2. A. Muižnieks, K. Lācis, A. Rudevičs, U. Lācis, A. Sabanskis, M. Plāte. Development of numerical calculation of electromagnetic fields in FZ silicon crystal growth process. *Magnetohydrodynamics*, 2010, Vol. 46, No. 4, 475-486.
3. K. Lācis, A. Muižnieks, A. Rudevičs, A. Sabanskis. Influence of DC and AC magnetic fields on melt motion in FZ large Si crystal growth. *Magnetohydrodynamics*, 2010, Vol. 46, No. 2, 199-218.
4. A. Krauze, N. Jēkabsons, A. Muižnieks, A. Sabanskis, U. Lācis. Applicability of LES turbulence modeling for CZ silicon crystal growth systems with traveling magnetic field. *Journal of Crystal Growth*, 2010, Volume 312, Issue 21, 3225-3234.

Aktivitātes ietvaros tika ņemta dalība sekojošās starptautiskās konferencēs ar mutiskiem vai stenda referātiem:

1. 5th International Workshop on Crystal Growth Technology, Berlin, Germany, June 26-30, 2010.
2. "Deutsche Kristallzüchtungstagung 2012", Freiberga, Vācija, 7-9.03.2012;
3. "4th European Conference on Crystal Growth", Glasgova, Skotija, 17-21.06.2012.
4. "8. Workshop – Angewandte Simulation in der Kristallzuechtung", Potsdama, Vācija, 19-21.11.2012.
5. LU CFI rīkotās konferences FMNT2011 un FMNT2012.

Tālākajā tekstā tiek dots aktuālo rezultātu kopsavilkums angļu valodā.

2. Summary of actual mathematical model for FZ silicon single crystal growth

The actual calculation scheme of the program complex *FZone* is shown in Fig. 2.1. The temperature field in the silicon parts and temperature and velocity fields in the argon atmosphere is calculated as axis-symmetric. The high frequency (HF) electromagnetic (EM) field is calculated in three dimensions (3D). Melt free surface can be modeled as axis-symmetric or in three dimensions because the distribution of the electromagnetic pressure produced by a high-frequency inductor can be strongly non-symmetric. The flow, temperature and dopant transport in the molten zone is calculated in 3D. The calculated three-dimensional temperature field in melt is azimuthally averaged and used in *FZone* for phase boundary calculations.

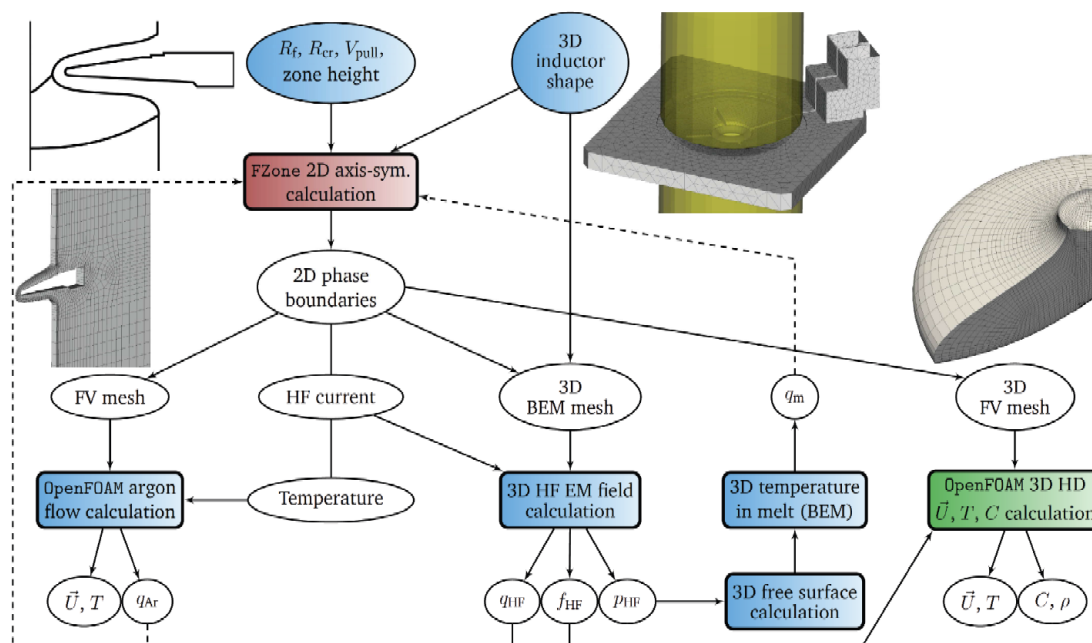


Fig. 2.1. The actual calculation scheme of the program complex *FZone*.

In the case of neglecting convective heat transport in the molten zone, a simpler scheme can be used, in which only HF EM field is considered in 3D or in 2D, see Fig.2.2. Fig.2.2 also shows a corresponding axis-symmetric calculation example. Shown is the finite element mesh in the crystals, temperature field in the melt, and magnetic field lines produced by a high-frequency inductor.

Fig. 2.3. shows calculated three-dimensional distribution of electromagnetic power density induced by a high-frequency inductor on the free melt and crystal surfaces.

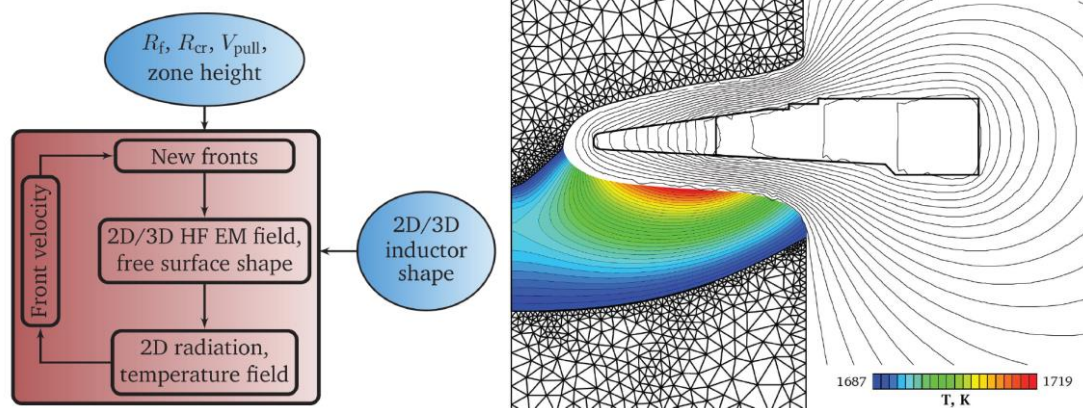


Fig. 2.2. A simpler calculation scheme, in which only HF EM field is considered in 3D or in 2D (left) and an axis-symmetric calculation example

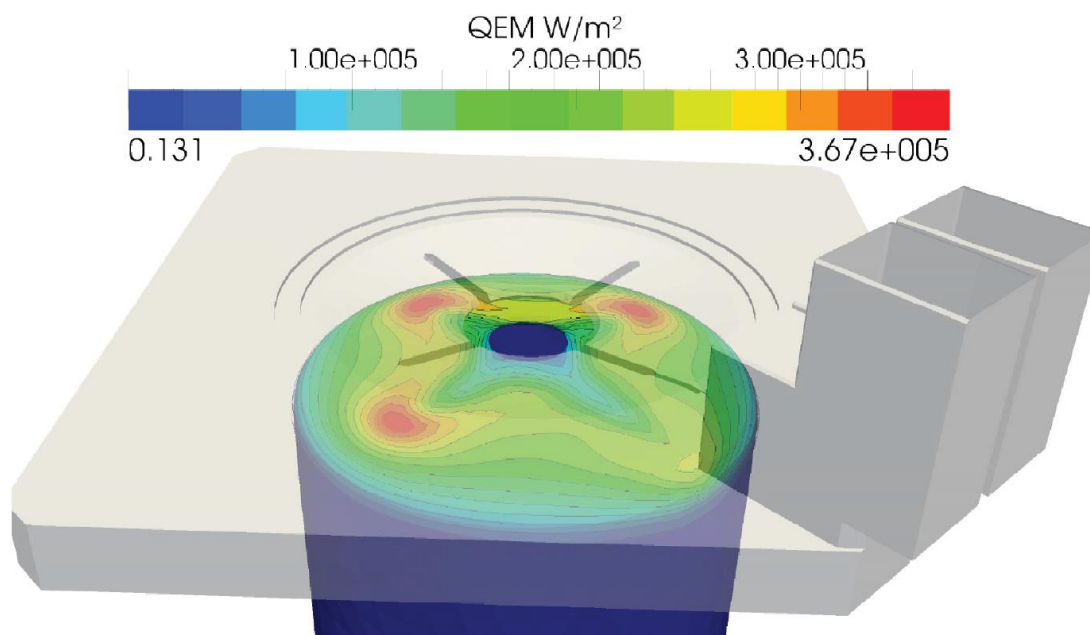


Fig. 2.3. Three-dimensional distribution of electromagnetic power density induced by a high-frequency inductor on the free melt and crystal surfaces

3. 3D model for asymmetric free surface influence on the FZ growth

3.1. Introduction

To obtain a steady state three-dimensional (3D) solution for the FZ zone process, the following iterative model was developed, see Fig. 3.1. A special program module in (*FZone*) carries out high frequency EM field 3D calculations for a given inductor current. The result is distribution of the EM pressure on the free surface. Another program recalculates the form of the free surface, which changes due to EM pressure. To obtain a steady-state form of the free surface, the EM and free surface calculations are repeated iteratively until precision condition is satisfied. After that, a 3D boundary element calculation is run for the temperature distribution in the melt. It uses the EM heat distribution on the free surface as a part of the absorbed heat. The calculation results from the 3D BEM program are supplied to a 2D heat transfer program that models the heat transfer in the whole FZ system and updates the geometry of it. The procedure is repeated until a solution is found.

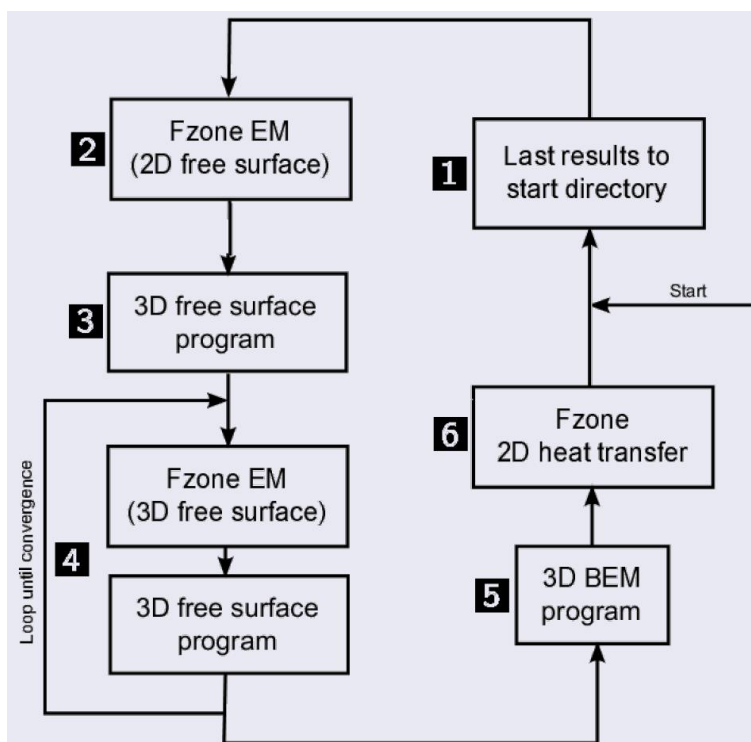


Fig. 3.1. General iterative scheme for the 3D calculation of the shape of the molten zone, 3D calculation of the temperature in the molten zone and coupling with FZone

For modeling the 3D free surface shapes, the method is used, which corresponds to the method described in the manual for the program "Surface Evolver". This method was improved by adding the EM pressure influence on the melt shape.

For the 3D calculation of the temperature field in the molten zone, the 3D boundary element method is used with following boundary conditions: the temperature on the melting and crystallization interfaces is set constant; on the melt free surface the heat flux density is set, which is obtained from EM heat sources in the skinlayer and takes into account the heat radiation.

A calculation example is shown in Fig. 3.2, Fig. 3.3 and Fig.3.4. The calculated system corresponds to one experimental setup for FZ 4" silicon crystal growth in the Institute for Crystal Growth in Berlin.

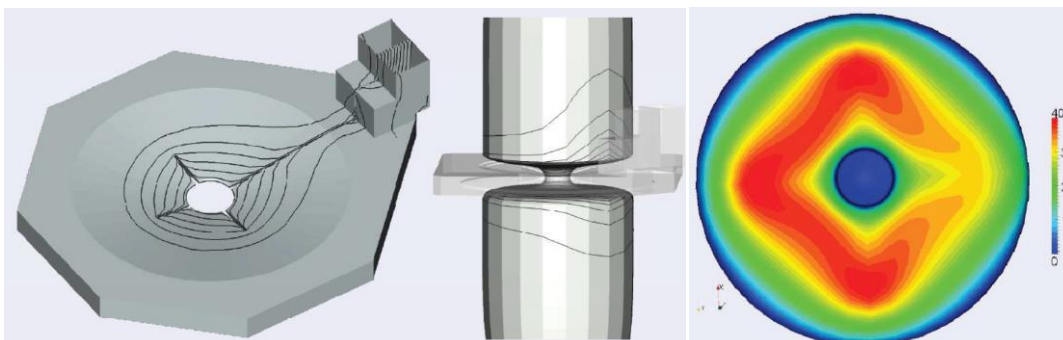


Fig. 3.2. HF inductor with the main slit and additional slits, calculated surface current lines distribution (left); calculated temperature distribution on the melt free surface (right)

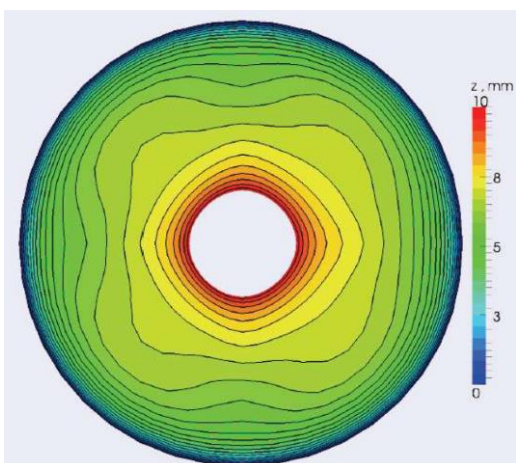


Fig. 3.3. Calculated 3D shape of the melt free surface (isolines of free surface z coordinate), the influence of additional slits and of main slits can be seen

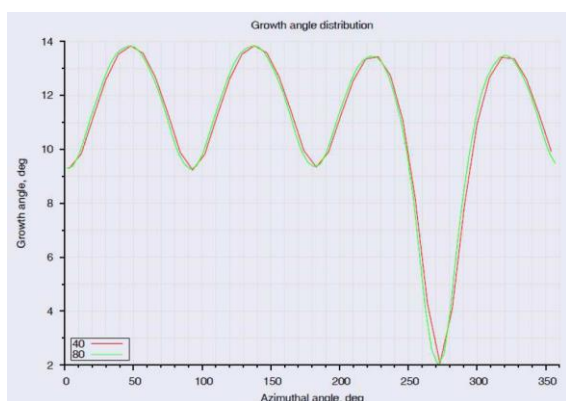


Fig. 3.4. Azimuthal distribution of the angle between the melt free surface and vertical direction at the triple point line

4. Modeling of argon flow heat transfer influence in FZ silicon single crystal growth

In practical FZ silicon single crystal growth systems, the argon atmosphere is always present (with pressure of some bar). Because this atmosphere can influence the heat exchange in the system, an axis-symmetric two-dimensional mathematical model for turbulent argon flow and heat transfer in FZ system was developed and implemented as program based on the library OpenFOAM.

4.1. Mathematical model of argon atmosphere

Argon is modeled as an ideal gas, therefore its density is

$$\rho = p \frac{M}{RT}$$

where p is the pressure, M is the molar mass of argon, $R = 8.314 \text{ J}/(\text{K}\cdot\text{mol})$ is the universal gas constant, T is the absolute temperature. In calculations the following values $p_0 = 2 \cdot 10^5 \text{ Pa}$ (reference pressure), $M = 40 \text{ g/mol}$ and $c_p = 520 \text{ J}/(\text{kg}\cdot\text{K})$ were used.

In a practical FZ puller, the density due to temperature differences in the system varies 3-4 times, therefore the argon flow is buoyancy-driven. The steady state of this compressible-like flow is described by continuity equation

$$\nabla(\rho\mathbf{U}) = 0$$

and Navier-Stokes equations

$$\begin{aligned} \nabla(\rho\mathbf{U}\mathbf{U}) = & -\nabla\left(p_{\text{rgh}} + \frac{2}{3}\mu_{\text{eff}}\nabla\mathbf{U}\right) - \mathbf{g} \times \nabla\rho + \\ & + \nabla[\mu_{\text{eff}}(\nabla\mathbf{U} + \nabla\mathbf{U}^T)], \end{aligned}$$

where \mathbf{U} is the velocity, $p_{\text{rgh}} = p - \rho\mathbf{g} \cdot \mathbf{x}$, $\mu_{\text{eff}} = \mu + \mu_t$ is the effective dynamic viscosity of argon (μ – molecular, μ_t – turbulent, obtained from turbulence model), $g = 9.81 \text{ m/s}^2$ is standard gravity, \mathbf{x} is spatial position vector. Turbulence is modeled using the SST k-omega low-Re turbulence model. The dependence of molecular dynamic viscosity on temperature $\mu(T)$ is given by Sutherland's law (Fig. 4.1).

$$\mu(T) = \frac{A_S\sqrt{T}}{1 + T_S/T}$$

Energy transfer in the FZ system is calculated using the enthalpy formulation

$$\rho\mathbf{U}\nabla h - \nabla(\alpha_{\text{eff}}\nabla h) = \mathbf{U}\nabla p,$$

where h is the enthalpy and $\alpha_{\text{eff}} = \alpha + \alpha_t$ is the effective thermal diffusivity for enthalpy (α – molecular, α_t – turbulent). Constant specific heat capacity at constant pressure c_p is assumed, therefore $h = c_p T$.

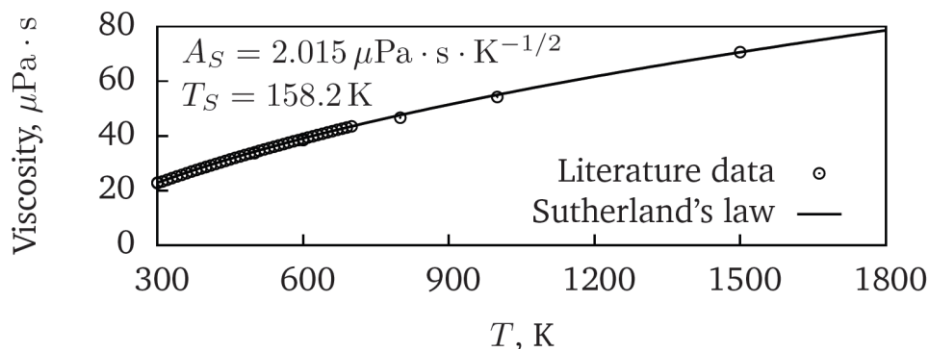


Fig. 4.1. The dependence of molecular dynamic viscosity on temperature $\mu(T)$ by Sutherland's law.

For the velocity field and enthalpy field the following boundary conditions are used:

- 1) Velocity: no-slip BC at solid walls (Si, inductor and puller wall surfaces). Crystal pulling and rotation is neglected.
- 2) Temperature: first-type BC at solid walls.
- 3) Turbulent quantities: standard low-Re model BC at solid walls.
- 4) Axial symmetry: *wedge* BC at front and back planes.

4.2. Calculation algorithm

Because the temperature field in the argon and the temperature field in silicon parts and in the inductor are coupled, the following calculation algorithm was developed (Fig. 4.2):

- 1) Calculation of the quasi-stationary shape of phase boundaries with the program *FZone*;
- 2) Creation of the geometry for argon flow calculations and mesh generation;
- 3) Interpolation of the temperature field on the Si surfaces from *FZone* to the generated mesh boundary;
- 4) Calculation of the axisymmetric steady state argon flow using *OpenFOAM* standard solver *buoyantSimpleFoam*;
- 5) Calculation of the quasi-stationary shape of phase boundaries using *FZone* with argon heat flux density (obtained in the previous step using utility *wallHeatFlux*) taken into account.

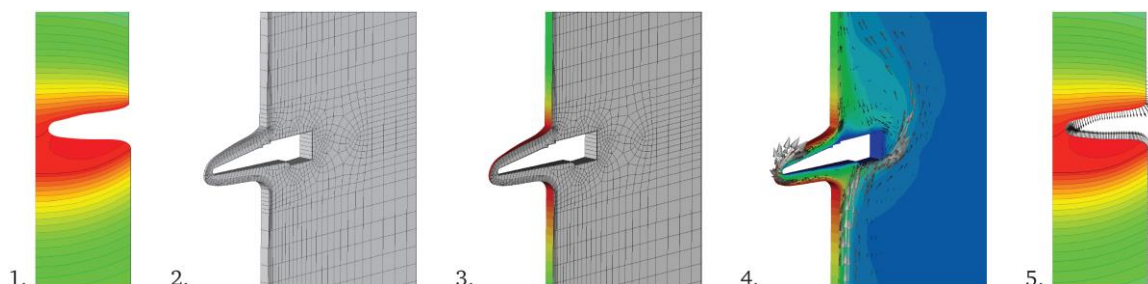


Fig. 4.2. Calculation steps in the used algorithm for the coupling of the temperature fields in argon atmosphere and in silicon parts and in the inductor

4.3. Calculation example

A typical ICG (Berlin) FZ system with crystal diameter 4" and mono- and polycrystal lengths 1 m has been considered. FZ puller height is 3 m, radius – 30 cm, the generated finite element mesh consists of ca. 50,000 cells.

The results of calculation are given in the following figures: in Fig. 4.3 the temperature and velocity fields in the vicinity of the inductor are shown; in Fig. 4.4 the influence of additional crystal cooling by argon on the quasi-stationary shape of phase boundaries is shown; in Fig. 4.5 detailed views of temperature and velocity fields at crystal surfaces, velocity magnitude, stream function isolines and viscosity ratio μ_t/μ are given.

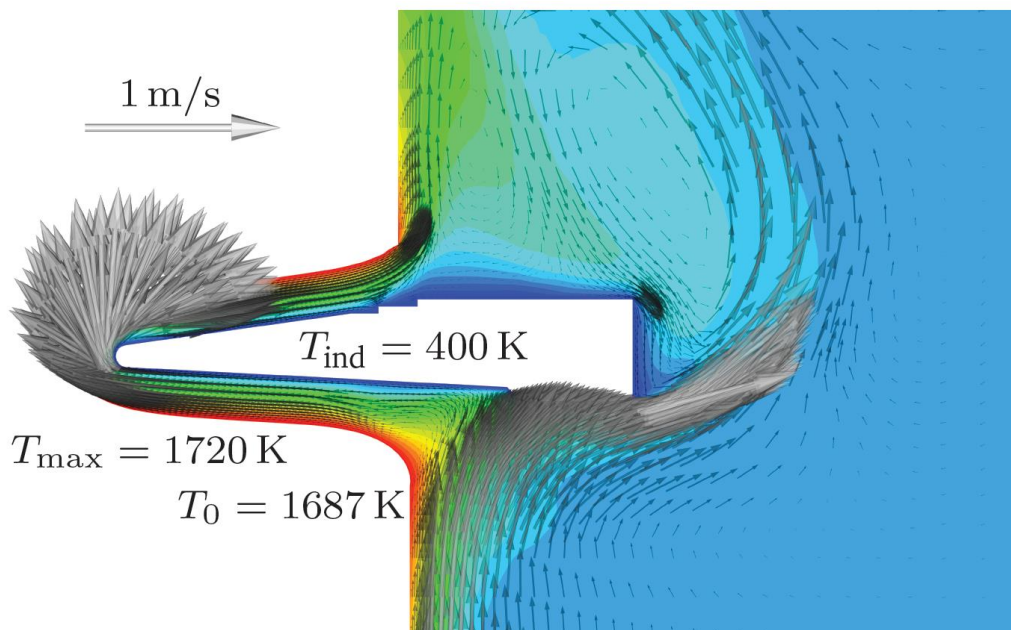


Fig. 4.3. Calculated temperature and velocity fields in the vicinity of the HF inductor.

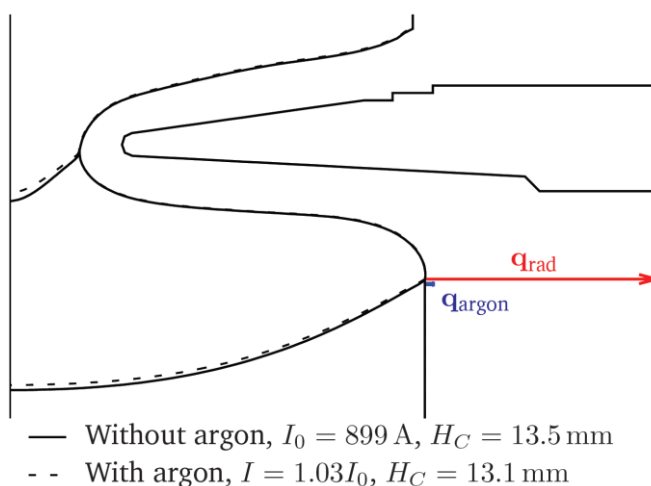


Fig. 4.4. The influence of additional crystal cooling by argon on the quasi-stationary shape of phase boundaries. I is inductor current, H_C is crystallization interface deflection.

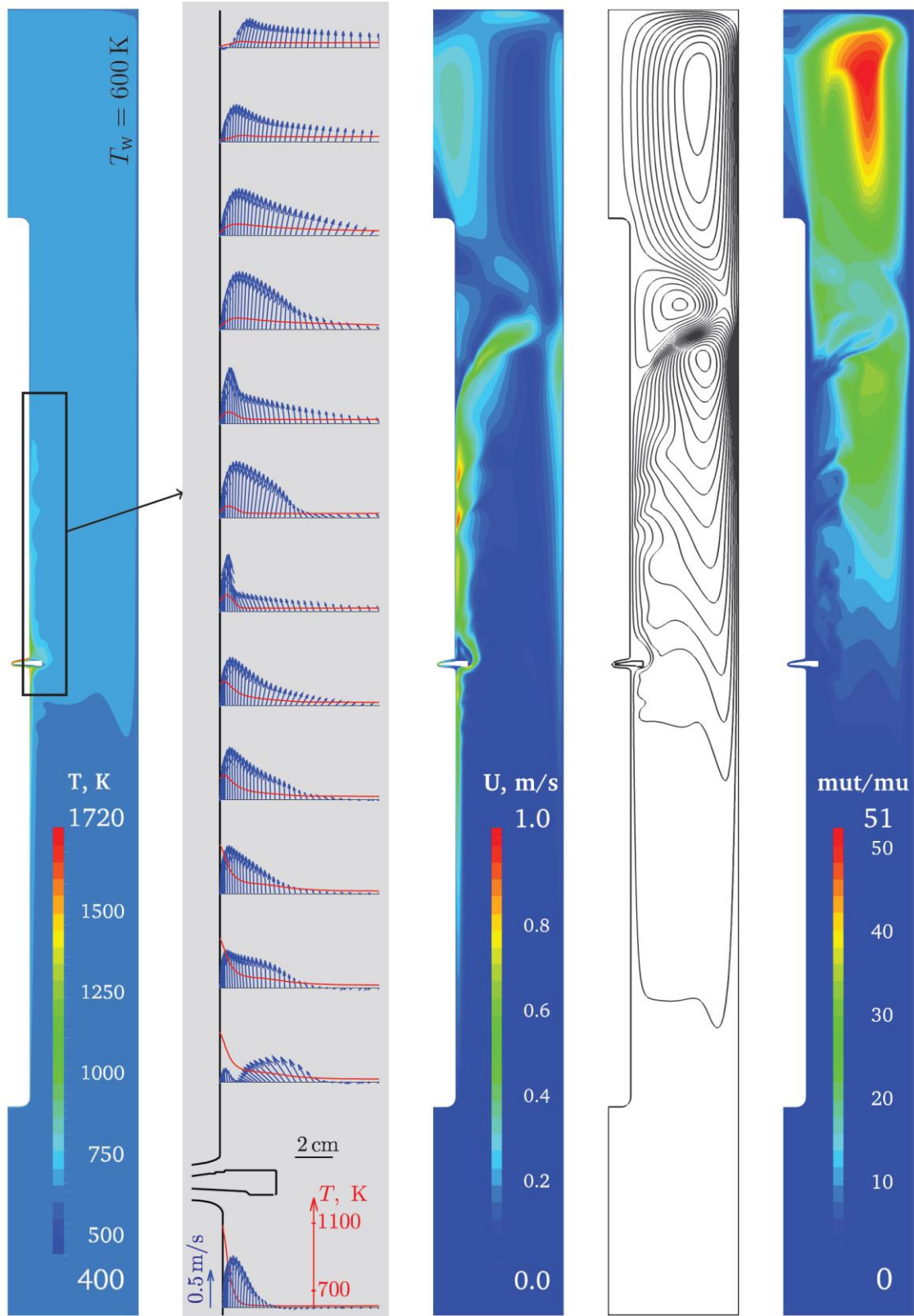


Fig. 4.5. From left to right: temperature, detailed views of temperature and velocity fields at crystal surfaces, velocity magnitude, stream function isolines, viscosity ratio μ_t / μ .

5. Three dimensional (3D) modeling of melt motion using *FZSiFOAM*

For the 3D modeling of the melt flow in the molten zone, the previously self developed calculation program FZSiFOAM (which is based on the program library OpenFOAM) was further developed. New and more precise boundary conditions were implemented in the program for the concentration field.

5.1 Mathematical model

Governing equations for non-stationary laminar and incompressible melt flow are

$$\rho_0 \frac{\partial v}{\partial t} + \rho_0 (v \nabla) v = -\nabla p + \eta \Delta v - \rho_0 g \beta (T - T_0) + f_M, \quad \nabla v = 0,$$

where ρ_0 is the density of molten silicon at melting temperature, v - velocity, p - pressure, η - viscosity, g - gravitational acceleration, β - thermal expansion coefficient, T - actual melt temperature and T_0 - melting temperature of silicon. The third term on right side describes the Boussinesq approximation for buoyancy-driven flows for small density differences in the fluid. f_M is force density due to additionally applied magnetic fields.

On the free surface electromagnetic and Marangoni forces are applied:

$$f_{FS} = f_\tau + \frac{\partial \gamma}{\partial T} \nabla_{1,2} T, \quad f_\tau = \frac{1}{4} \mu_0 \delta \nabla_{1,2} [j_{\tau HF}^2].$$

The no-slip condition is applied for melting and crystallization interfaces. Additionally, vertical velocity component is included to simulate both the polycrystal melting and crystallization process. On the crystallization interface:

$$v_x = -y \cdot 2\pi \omega_{CR}, \quad v_y = x \cdot 2\pi \omega_{CR}, \quad v_z = -v_{CR},$$

where ω_{CR} is crystal rotation rate.

If the vertical component on whole melting interface is considered constant, then

$$v_z = -v_{CR} \cdot \frac{r_{CR}^2}{r_{ITP}^2}$$

In a more realistic approach the melting process on the open melting front is taken into account. Then, the melting interface is divided in two regions – a central circle and outer ring. In the central circle the velocity is set equal to the v_{FR} – the feed rod push velocity. The vertical velocity in the ring v_{zR} is

$$v_{zR} = \frac{v_{CR} r_{CR}^2 - v_{FR} r_R^2}{r_{ITP}^2 - r_R^2},$$

where r_R is the inner radius of the ring and r_{ITP} is the outer radius of the ring, i.e. radius of the internal triple point line.

Temperature field in the melt is described as follows:

$$\rho_0 c_p \frac{\partial T}{\partial t} + \rho_0 c_p (\mathbf{v} \nabla) T = \lambda \Delta T,$$

where c_p is the specific heat of molten silicon and λ is thermal conductivity. The corresponding boundary conditions are applied: electromagnetic induced heat flux density on the melt free surface and radiation losses; crystallization temperature on the crystallization interface and on the interface with the feed rod.

Dopant transport equation in the melt is described with an equation:

$$\frac{\partial C}{\partial t} + (v(t) \nabla) C = D \Delta C,$$

where D is the diffusion coefficient of the dopant in the molten silicon. The corresponding boundary conditions are applied: the segregation condition at the crystallization interface; zero flux density or fixed value at the melt free surface; fixed value for the melt coming from the open melting front; zero value at the boundary between the molten zone and the feed rod. It must be underlined that various modifications and combinations of these boundary conditions were tested.

Normalized resistivity in the grown crystal directly at the crystallization interface is inversely proportional to dopant concentration:

$$\rho = \frac{1}{k_0 C}$$

This relation is used for the calculation of the radial resistivity variations (RRV).

5.2. Calculation example

The calculated melt flow and concentration fields for a 4" silicon single crystal growth system at the Institute for Crystal Growth (Berlin) are presented in the following figures.

Fig. 5.1 illustrates the preparation of the 3D geometry of silicon for HF EM calculations. Fig. 5.2 shows a calculation setup on a Linux cluster. In Fig. 5.3 a schematic example of computational domain subdivision into 4 parts is given; each part is solved separately on one processor. Fig. 5.4 shows calculated axis-symmetric shape of phase boundaries and temperature field in melt. A schematic view of a typical melt motion pattern in a FZ system is given in Fig. 5.5. In Fig. 5.6 a fragment of used 3D finite volume mesh for melt domain (left) and a closer look at the boundary layer at the crystallization interface (right) are shown. Fig. 5.7 shows the calculated time-averaged temperature field and velocity field on the melt free surface. The calculated time-averaged velocity field in the inductor main slit plane (top) and perpendicular to it (bottom) is given in Fig. 5.8. In Fig. 5.9 the calculated concentration field at the crystallization interface with instantaneous snapshot (left) and time-averaged field (right) is shown. Fig. 5.10 represents the calculated radial resistivity profiles.

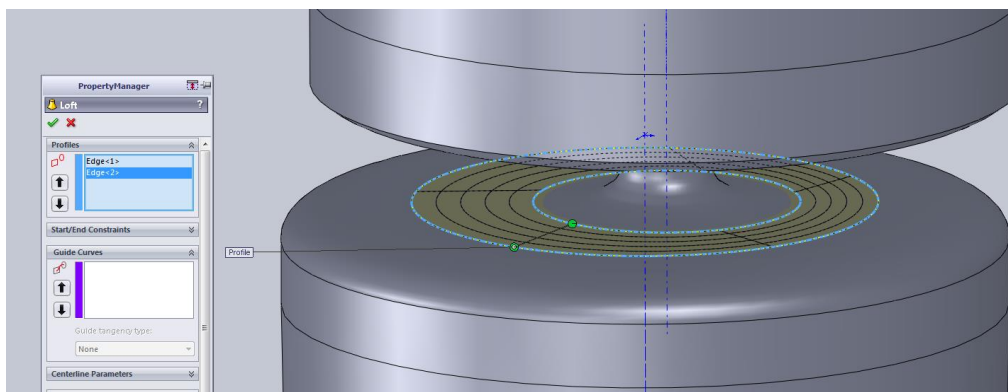


Fig. 5.1 The preparation of the 3D geometry of silicon for HF EM calculations.

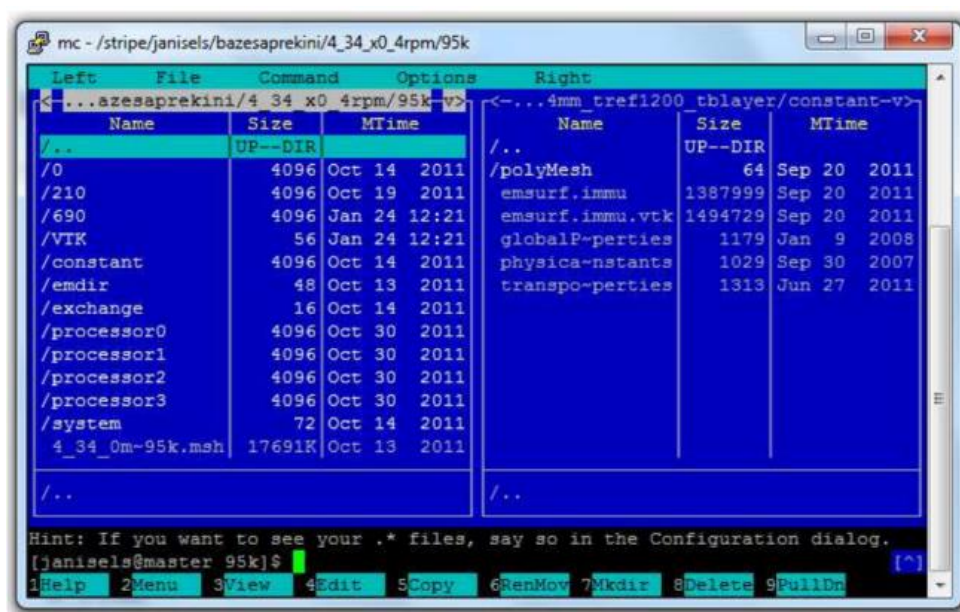


Fig. 5.2. Calculation setup on a Linux cluster.

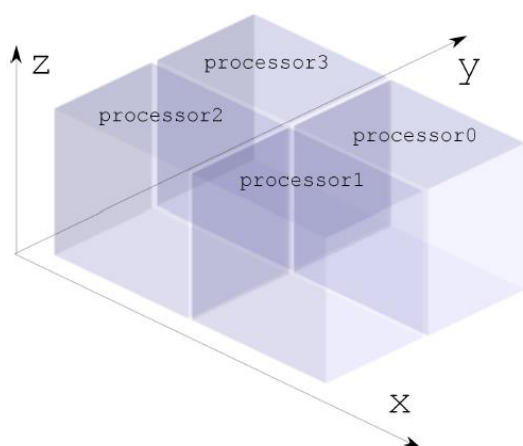


Fig. 5.3. A schematic example of computational domain subdivision into 4 parts; each part is solved separately on one processor.

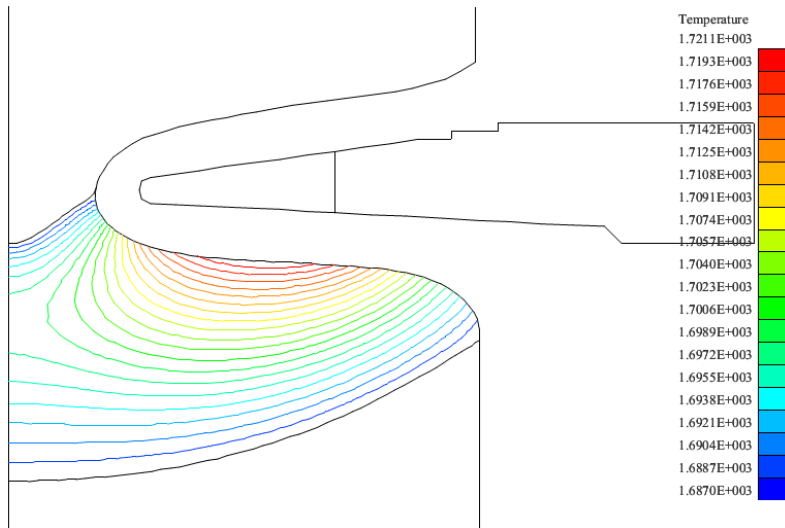


Fig. 5.4. Calculated axis-symmetric shape of phase boundaries and temperature field in melt.

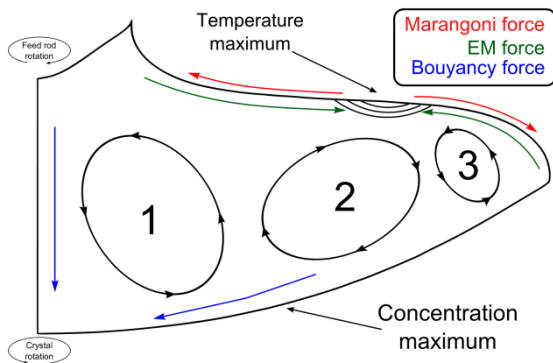


Fig. 5.5. A schematic view of a typical melt motion pattern in a FZ system.

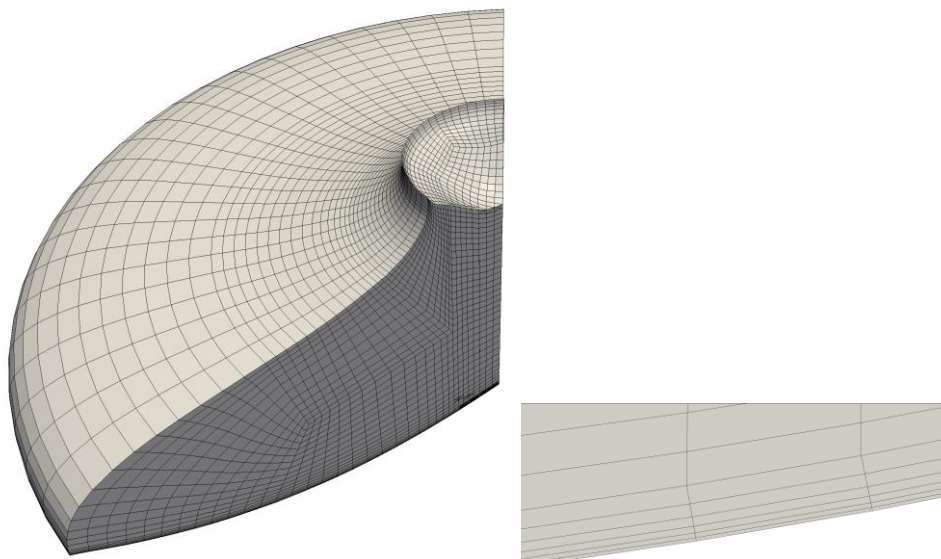


Fig. 5.6. Fragment of used 3D finite volume mesh for melt domain (left); a closer look at the boundary layer at the crystallization interface (right).

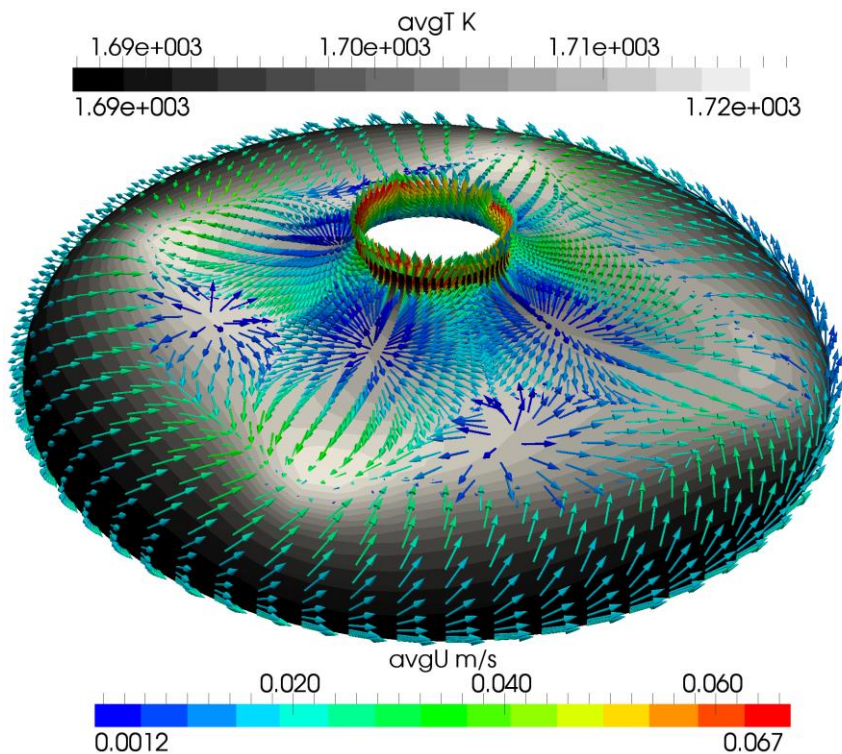


Fig. 5.7. The calculated time-averaged temperature field and velocity field on the melt free surface.

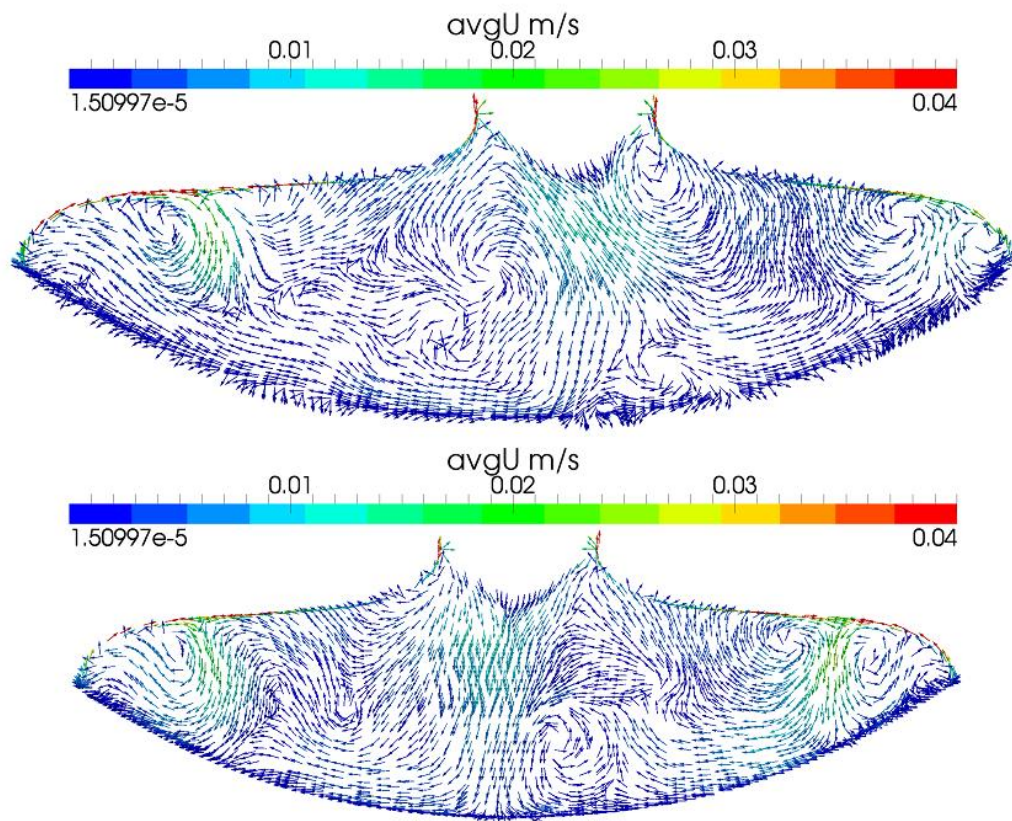


Fig. 5.8. The calculated time-averaged velocity field in the inductor main slit plane (top) and perpendicular to it (bottom).

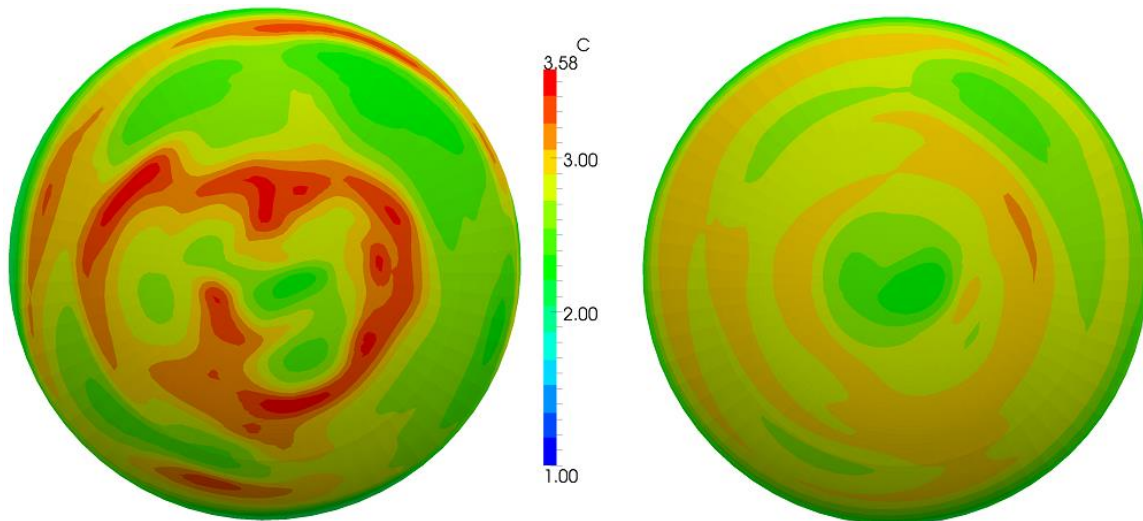


Fig. 5.9. The calculated concentration field at the crystallization interface; instant-neous snapshot (left) and time-averaged field (right).

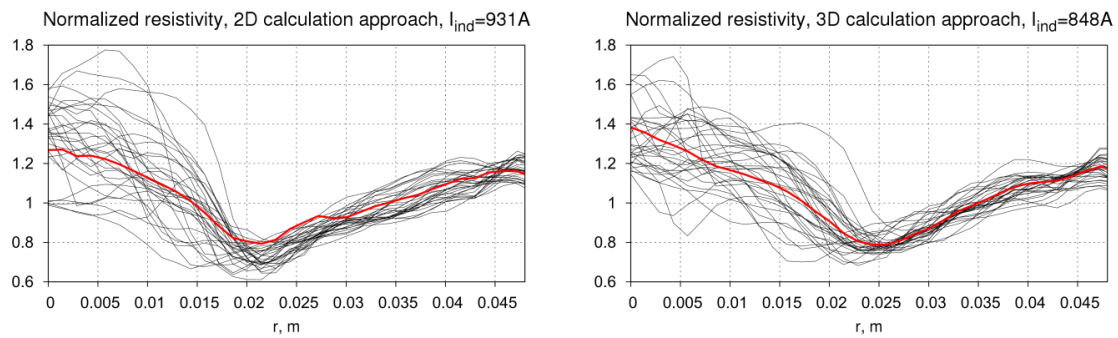


Fig. 5. 10. The calculated radial resistivity profiles.

Pētījuma apakšaktivitāte

4.2.3. Magnetoreoloģisko suspensiju īpašību matemātiskā modelēšana izmantojot kombinētu īpašību aprakstu mikro- un makromērogā

Aktivitātes vadītājs: docents Sandris Lācis

Pētījuma apakšaktivitātes uzdevumi un sagaidāmais rezultāts

Darba gaitā tika plānots tālāk attīstīt metodiku suspensiju ar magnētiskām īpašībām modelēšanā, lietojot tiešās skaitliskām modelēšanas (direct numerical simulation) metodi. Daļiņu kustības nesējšķidrumā modelēšanā jāizstrādā aprēķinu algoritmi un jāveic rezultātu verificācija sfērisku un stienīšu daļiņu gadījumos. Veicot magnetoreoloģisko šķidrumu plūsmu aprēķinus makromērogos, jāņem vērā, ka ārējais magnētiskais lauks rada anizotropiju plūsmas raksturam, kas saistās ar ārējā lauka uzdoto virzienu. Makroskopisku plūsmu aprēķiniem jāpilnveido esošā programmatūra, kas balstīta uz galīgo elementu metodiku un magnētiskā lauka noteiktu modificētu Bingema likumu ar ievērotu lauka noteikto anizotropiju. Magnētiskās mijiedarbības ievērošanai tiks uzlaboti tuvinātie aprēķinu algoritmi, kā arī uzlabota galīgo elementu programmatūra lai tabulētu magnetizējamu daļiņu mijiedarbības parametrus. Svarīgs rezultāts būtu aprēķinu metodika, kas spēj noteikt efektīvos spriegumus magnetoreoloģiskās suspensijas plūsmā, bez suspensijas īpašībām ievērojot arī magnētisko spēku ietekmi uz plūsmas raksturu.

Paveikts

Sadarbība ar matemātiķiem.

Projekta ietvaros sadarbība ar matemātiķiem izpaudās

- 1) precizējot sfēriskās harmonikas pielietošanu magnetizējamu ložu mijiedarbības aprēķiniem;
- 2) magnētiskās mijiedarbības galīgo elementu aprēķinu precizitātes novērtēšanā;
- 3) uzlabojot skaitliskās integrēšanas formulas;
- 4) pilnveidojot vienkāršotu stieņveida magnetizētu daļiņu magnētiskās mijiedarbības aprēķinu;
- 5) izstrādājot teorētiskos pamatus daļiņu cietās virsmas ievērošanai suspensiju modelēšanā.

Novērtējot galīgo elementu metodes (GEM) precizitāti magnētiskās mijiedarbības aprēķinos, nepieciešami droši testa uzdevumi. Tos iespējams izstrādāt, lietojot sfērisko harmoniku metodi magnetizētām lodēm ārējā homogēnā laukā pie nosacījuma, ka relatīvā magnētiskā caurlaidība katrai lodei ir konstants lielums. Uzdevums ir pie konstantas magnētiskās caurlaidības ir lineārs, to var risināt, aplūkojot vairākas sfēru patvaļīgu izvietojumu ārējā magnētiskā un atrisinājumu iegūt, balstoties uz potenciālu teoriju un Laplasa vienādojuma atrisinājuma izvirzījumu sfēriskajās harmonikās. Problēmsituāciju rada neskaidrais metodikas apraksts pieejamā literatūrā. Kopā ar profesoru Mihailu Belovu ir veikta formulu pārbaude, koriģētas kļūdainās vietas un iegūta lietošanai gatava metodika. Turklāt iegūtās metodikas pamatidejas iespējams pielietot arī Stoksa plūsmas ap lodēm gadījumā, kā arī ātro multipolu robeželementu metodē. Papildus ieguvums no izveidotās aprēķinu metodikas bija GEM precizitātes novērtējums magnētiskās mijiedarbības aprēķinos. Testa piemēros magnetizējamām lodēm pie konstantas magnētiskās caurlaidības iegūtie piemēri ļauj precizitāti novērtēt „no augšas”, jo nelineāras magnetizācijas gadījumā (kas ir atbilstošāka reālajiem materiāliem) lauka piesātināšanās dēļ notiek asās lēcienveida magnētiskās caurlaidības vērtības uz materiālu robežas izlīdzināšanās, kas, savukārt, noved pie precizitātes uzlabošanās.

Izstrādājot galīgo elementu metodiku aksiāli simetriskos uzdevumos, interesi izraisa specializētas skaitliskās integrēšanas formulas $P(x)/r$ tipa zemintegrāļa funkcijām.

Konsultācijās ar FMF Matemātikas nodaļas zinātniekiem noskaidrojās, ka neviens no viņiem nestrādā atbilstošā matemātikas nozarē, tomēr konsultācijas ar profesoru M.Belovu ļāva pilnveidot magnētiskā lauka aprēķinus aksiāli simetriskā gadījumā, lietojot kvadrātisku interpolāciju galīgajiem elementiem. Specializētas kvadrātu formulas trijstūrveida elementos $P(x)/r$ tipa zemintegrāļa funkcijām joprojām ir atvērts jautājums, zinātniskajās publikācijās tādas nav atrastas.

Projekta iztrādes laikā iegūtas formulas stieņveida magnetizētu daļiņu magnētiskās mijiedarbības aprēķinam. Gadījumā, ja kaut viena stieņa magnetizācija ir paralēla stieņa asij, tiek lietotas precīzās formulas, kas iegūtas integrējot diegveida magnetizācijas sadalījumu. Šķersmagnetizācijas gadījumā jālieto tuvinātas formulas, jo precīzā integrēšana sniedz ļoti garus un aprēķinus neefektīvus rezultātus.

Suspensiju daļiņu plūsmas tiešajā skaitliskajā modelēšanā viena no risināmajām problēmām ir daļiņu savstarpējās iespīšanās skaitlisku efektu dēļ novēršana. Modelēšanas taktēšana ar mazu laika soli ir neefektīva, jo neļauj modelēt pietiekoši lielus daļiņu ansambļus. Matemātikas nodaļas profesoru H.Kaļa un A.Reinfelds vadītā seminārā tika apspriestas sadarbības iespējas ar matemātiķiem, piedaloties arī Uldim Strautiņam, kuram ir liela kompetence šķiedru suspensiju modelēšanā (publikācijas A.Latz, U.Strautins, D.Niedziela, Comparative numerical study of two concentrated fiber suspension models, JOURNAL OF NON-NEWTONIAN FLUID MECHANICS, 165, 2010, pp764-781; U.Strautins, A.Latz, Flow-driven orientation dynamics of semiflexible fiber systems, RHEOLOGICA ACTA, 46, 2007, pp1057-1064). Kā problēmas atrisinājums tika norādīts risinājums, kad kvazicietos daļiņu aglomerātus modelē kā vienotus veselumus. Šāds aglomerāts pārvietojas kā vienots ciets objekts līdz brīdim, kad notiek kādas daļiņas atrašanās. Projektā veikts darbs pie šī modeļa ieviešanas, tas tiks izmantots tālākajā pētniecībā.

Daļiņu magnētiskā mijiedarbība

Būtiski jaunais magnētiskās mijiedarbības aprēķinos ir sekojošais.

1. Apgūta sfērisko harmoniku pielietošanas metodika vairāku ložu mijiedarbības aprēķiniem konstantas magnētiskās caurlaidības gadījumos.
2. Pilnveidota aksiāli simetriskā gadījuma GEM (galīgo elementu metodes) programmatūra, ieviešot kvadrātisku interpolāciju elementos. Kvadrātiskās interpolācijas lietošana ļauj uzlabot precizitāti pie tā paša aprēķinu laika (salīdzinot ar lineāro interpolāciju).
3. Pilnveidota 3D magnētiskās mijiedarbības GEM modelēšanas programmatūra, ieviešot kvadrātisku interpolāciju elementos, paredzot iespēju uzdot periodiskus robežnosacījumus 3D gadījumā, kas ļauj modelēt daļiņu ķēdes slīpā laukā.

Risina Laplasa vienādojumu skalārajam potenciālam

$$\vec{\nabla}(\mu \vec{\nabla} \Psi) = 0$$

Nelineārai magnetizācijai magnētiskās caurlaidības μ aprakstam izmanto Frēliha-Kenelija likumu

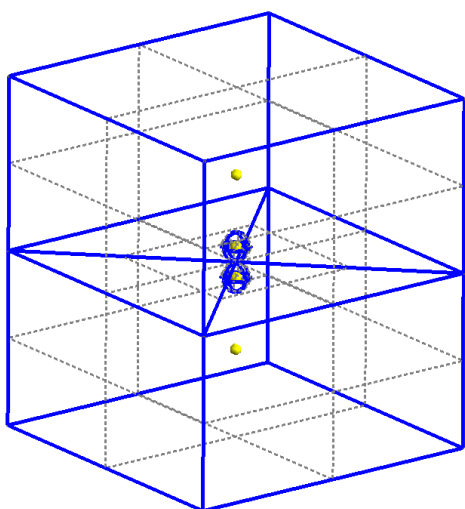
$$\mu = 1 + \frac{(\mu_{ini} - 1)M_S}{(\mu_{ini} - 1)H + M_S}$$

kur μ_{ini} ir magnētiskā caurlaidība maziem laukiem un M_S ir piesātinājuma magnetizācija. H ir magnētiskā lauka intensitāte.

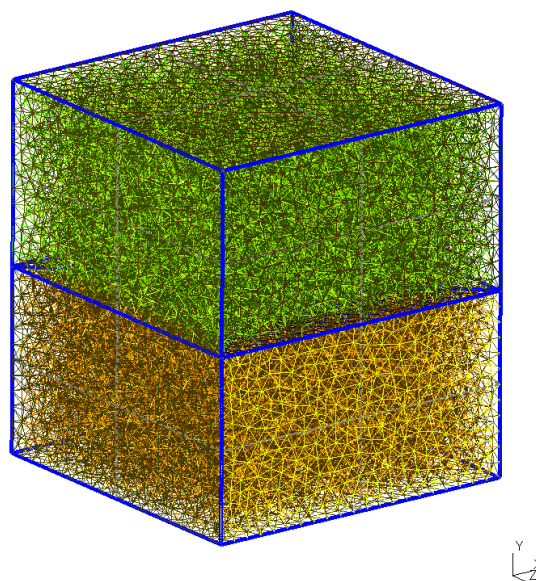
Pie konstanta μ veicot aprēķinus divu ložu mijiedarbībai dažādi orientētos ārējos laukos, konstatēts, ka pie saprātīga izvēlēta režģa soļa relatīvā kļūda spēka aprēķinos ir 1.0-2.5% apmērā. Tika aplūkots $\mu = 100; 1000$, relatīvā pussprauga starp lodēm $\frac{d}{a} = 0.1; 1; 2$, lauka leņķis pret simetrijas asi $\phi = 0; \frac{\pi}{6}; \frac{\pi}{3}; \frac{\pi}{2}$. Līdz ar to vir izvirzīt hipotēzi, ka magnētiskās mijiedarbības aprēķinos arī nelineārai magnetizācijai var rēķināties, ka relatīvā kļūda nepārsniegs 2.5% lietojot adekvātu režģa soli mijiedarbojošos daļiņu tuvumā.

Projektā izstrādāts programmatūras komplekss MRmultiPart, kas paredzēts magnētiskās mijiedarbības aprēķiniem starp vairākām patvaļīgas formas feromagnētiskām daļiņām. Nelineāro magnetizāciju apraksta ar Frēliha-Kenelija likumu, nav principiālu ierobežojumu iestrādāt arī citu magnetizācijas likumu, uzdodot to, piemēram ar splainu funkciju. Programma veidota C++ programmēšanas valodā kā Linux vides „komandlīnijā” izsaukams izpildāmais fails, līdz ar to sērijveida aprēķinus veic kā Linux čaulas (shell) komanfailu vadītus uzdevumus. Ievaddatu (GEM režģa) sagatavošanai papildus nepieciešama no interneta resursiem lejup lādējama brīvā programmatūra GMSH (<http://geuz.org/gmsh/>), kuras iespējas ļauj to lietot arī fizikālo lauku vizualizācijai rezultātu pēcapstrādē.

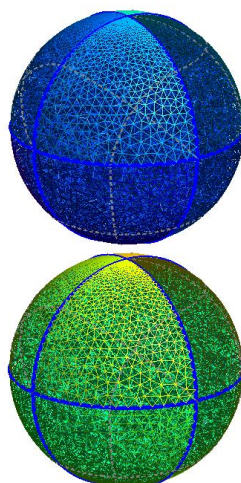
Programmatūras kompilēšanai nepieciešamas UMFPACK (SuiteSparse) un BLAS bibliotēkas (detalās aprakstītas dokumentā Programmu kompleksa MRmultiPart dokumentācija, kas iesniegts atsevišķi kā projekta auditējamā vērtība).



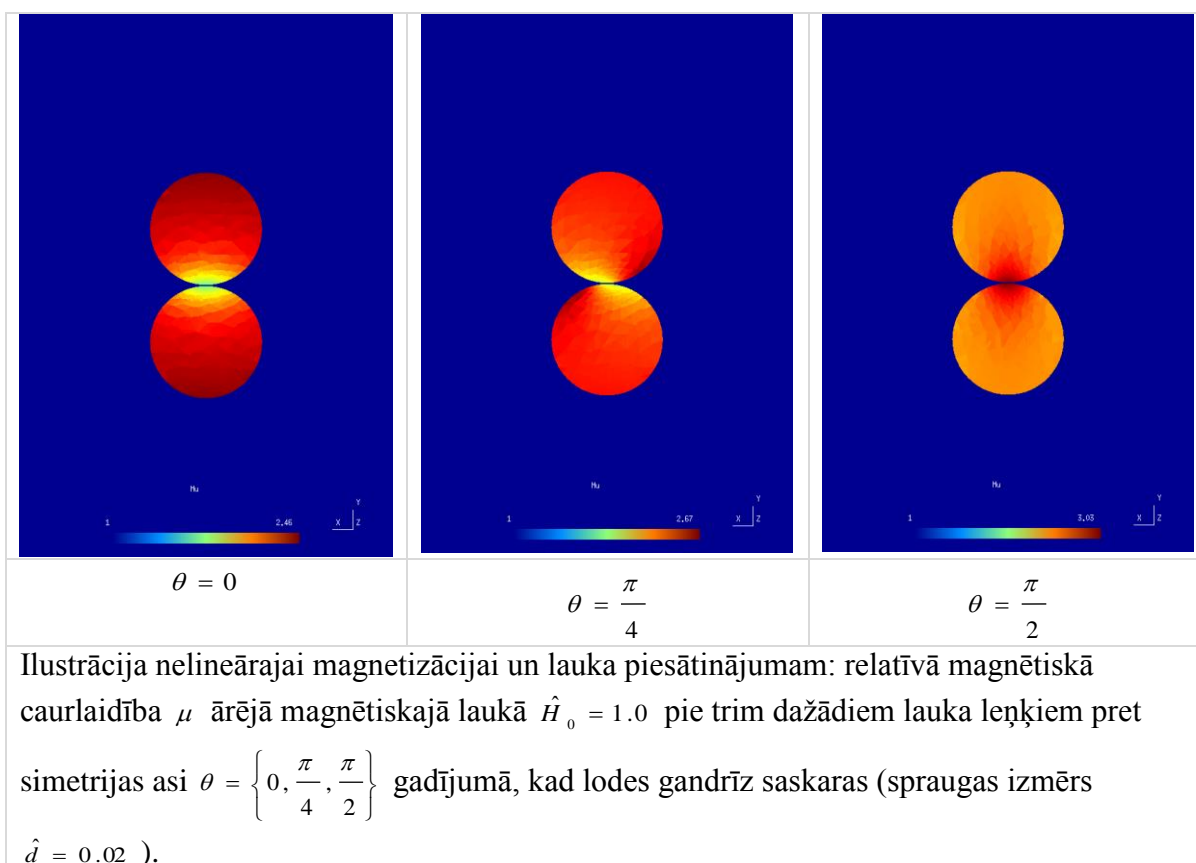
Ģeometrijas sagataves GMSH režģa ģenerēšanai



No ģeometrijas sagatavēm izveidotais GMSH tetraedru režģis aprēķiniem ar GEM



No ģeometrijas sagatavēm izveidotais GMSH tetraedru režģis aprēķiniem ar GEM, palielināts ložu režģis.

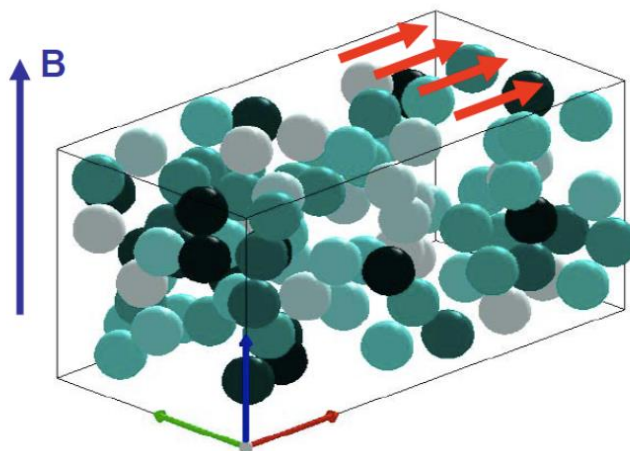


Programmatūra spēj rēķināt spēkus patvaļīgas formas objektiem, protams, katram gadījumam jāveido savs GEM režģis, izmantojot GMSH režģa ģeneratoru.

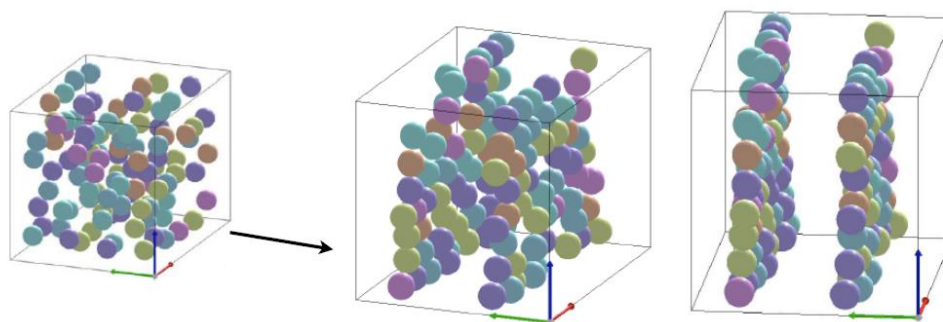
Magnetoreoloģisko suspensiju plūsmu mikromodelēšana sfēriskām un adatveida daļiņām.

Projektam sākoties, bija jau izstrādāta programmatūra sfērisku daļiņu suspensijas modelēšanai, ievērojot daļiņām piemītošo magnētisko mijiedarbību, ko rada magnetizācija

ārējā laukā. Būtiska nepilnība modeļa pielietojumā bija sekojošs trūkums – tas nedeva pietiekoši precīzu magnetoreoloģiskā efekta novērtējumu efektīvo spriegumu rezultātos.



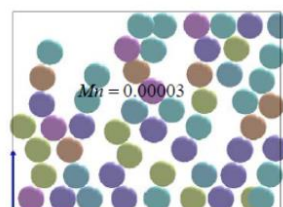
Pozitīvais izstrādātajā modelī bija reālistisku struktūru veidošanās daļiņu ansambļiem.



90 laika vienības

$$M_a = 0.00003$$

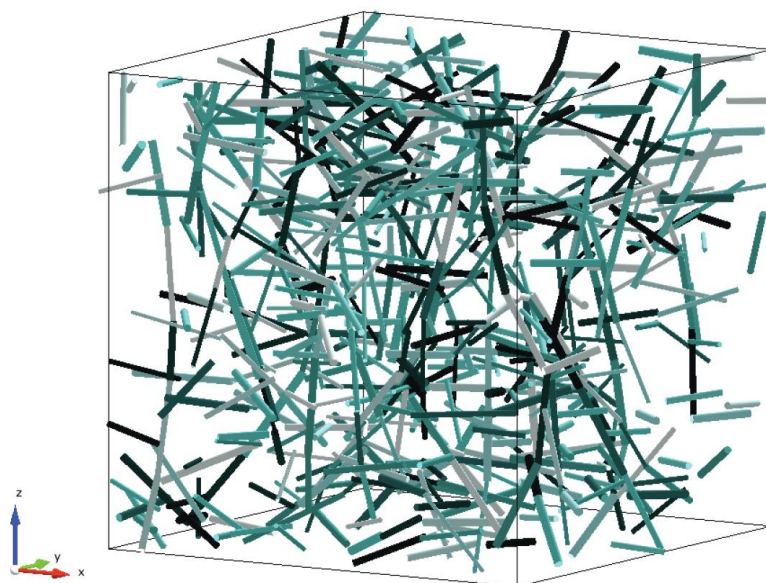
$$N = 106$$



Lameļu veidošanās, „īstermiņa” ķēžu fragmenti

Tomēr tālāko modeļa pielietojumu kavēja adekvāta efektīvo spriegumu aprēķinu modeļa iztrūkums.

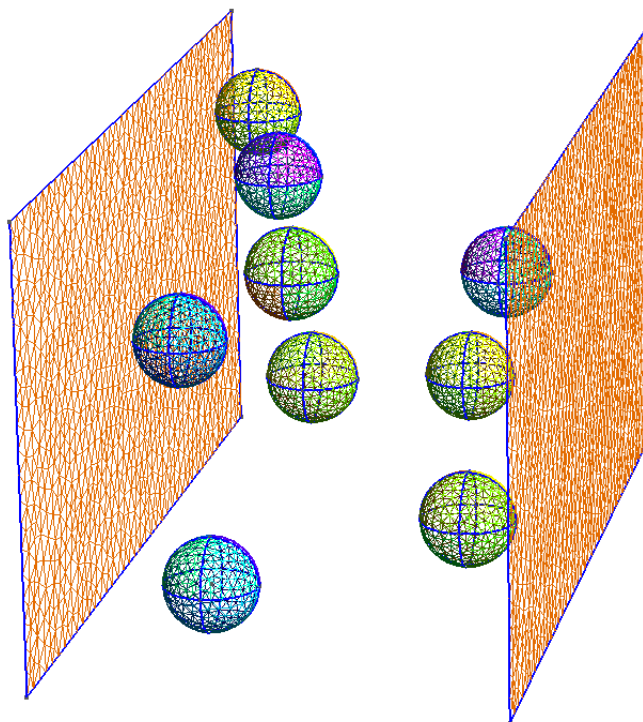
Viens no projekta mērķiem bija tiešās modelēšanas algoritmu un programmatūras piemērošana vispārinātākai daļiņu formai, uzsvāru liekot tieši uz adatveida (stienveida) daļiņu magnetoreoloģisko suspensiju modelēšanu.



Adatveida suspensijas plūsma, daļiņu tilpuma frakcija $\approx 1,45\%$

Neregulāras formas daļiņām ir lielāka iespēja veidot plūsmu traucējošus aglomerātus arī pie relatīvi vājām daļiņu tilpuma frakcijām, tomēr arī to modelēšana ir apgrūtinātāka, salīdzinot ar lodveida daļiņām. Modeļa pareizību apliecināja tā saucamo Džefrija orbītu aprēķini atsevišķai daļiņai nobīdes plūsmā, aprēķinātais bezdimensionālais skaitlis 61.8 ļoti labi atbilst teorijas vērtībai 61.9.

Projekta gaitā tikai izveidota hipotēze, ka efektīvo spriegumu aprēķinam liederīgi izmantot robeželementu metodi (BEM), iespējams, to kombinējot ar ātro multipolu metodiku. Metodikas sākotnējā pārbaude tiks veikta 2012.gada novembrī. BEM priekšrocība ir tā, ka Stoksa tuvinājumā, jānoskaidro nezināmais spēka avota funkciju sadalījums uz daļiņu un kanāla sienu virsmām, tad tiek aprēķināts viskozo spriegumu ieguldījums spēkos uz kanāla virsmas, kas tad arī nodrošina efektīvo spriegumu spēku aprēķinu. Metodika vienlīdz labi strādā jebkuras formas daļiņām, ja iepriekš jau ir noteikti cieto daļiņu translācijas un rotācijas ātrumi.



BEM režģis efektīvo spriegumu aprēķinam (piemērs)

Šķidrumu plūsmu aprēķins makromērogos

Magnetoreoloģisko suspensiju kā viskoelastīgu šķidrumu, kuru īpašības nosaka ārējais magnētiskais lauks, modelēšana makromērogā realizēta aksiāli simetriskai ģeometrijai, kas ir raksturīga daudzos rūpnieciskajos pielietojumos (piemēram, automašīnu amortizatoros u.c.). Pilnā 3D realizācija veikta kā testa piemērs, jo ekspluatācijai tā ir datorresursu ietilpīga un pētnieciskajam darbam šobrīd nedod principiāli jaunus rezultātus.

Šai tematikā projekta laikā ir aizstāvēts maģistra darbs (J.Cīmurs „Magnetoreoloģisko suspensiju makroskopiskā skaitliskā modelēšana, izmantojot viskoelastīgu plūsmu modeļus”, 2010, LU FMF).

Šķidruma plūsma tiek aplūkota vispārinātā Stoksa plūsmas tuvinājumā, pieņemot, ka šķidruma viskozitāte ir atkarīga no ātrumu sadalījuma un tā tad ir koordinātes funkcija stacionārai plūsmai. Tiek risināts stacionārs Stoksa vienādojums

$$0 = \vec{\nabla} \vec{\sigma} + \vec{f}.$$

No ātrumu lauka atkarīgā viskozitāte tiek ieviesta spriegumu tenzoram $\vec{\sigma}$ izmantojot Bingema likumu. Lietosim apzīmējumu

$$\dot{\gamma} = \sqrt{\frac{1}{2} \dot{\epsilon}_{ij} \dot{\epsilon}_{ji}},$$

kur $\dot{\epsilon}_{ij}$ deformāciju ātrumu tenzora komponentes. Bingema likums saista deformāciju ātrumus $\dot{\epsilon}$ ar pieskares spriegumiem τ :

$$\dot{\epsilon} = \begin{cases} 0 & , ja \tau < \tau_0 \\ \frac{\tau - \tau_0}{2 \mu_\infty} & , ja \tau \geq \tau_0 \end{cases}$$

Aprēķinos viskozitātes uzdošanai tika testētas 3 metodes kā Bingema likuma tuvinājumi:

1. metode (metode bez lauzuma)

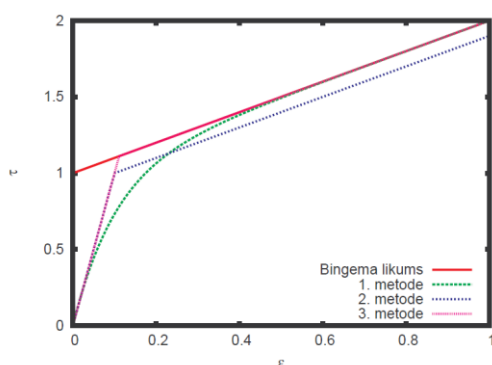
$$\hat{\mu} = 1 + \frac{Bn}{\hat{\gamma}} [1 - e^{-\alpha \hat{\gamma}}]$$

2. metode (ar lauzumu pie τ_0)

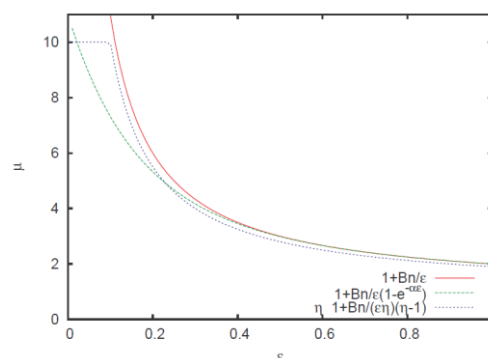
$$\hat{\mu} = \begin{cases} \hat{\eta} & , ja \hat{\eta} \hat{\gamma} < Bn \\ 1 + \frac{Bn}{\hat{\eta} \hat{\gamma}} [\hat{\eta} - 1] & , ja \hat{\eta} \hat{\gamma} \geq Bn \end{cases}$$

3. metode (ar lauzumu)

$$\hat{\mu} = \begin{cases} \hat{\eta} & , ja \hat{\gamma} < \frac{Bn}{\hat{\eta} - 1} \\ 1 + \frac{Bn}{\hat{\gamma}} & , ja \hat{\gamma} \geq \frac{Bn}{\hat{\eta} - 1} \end{cases}$$



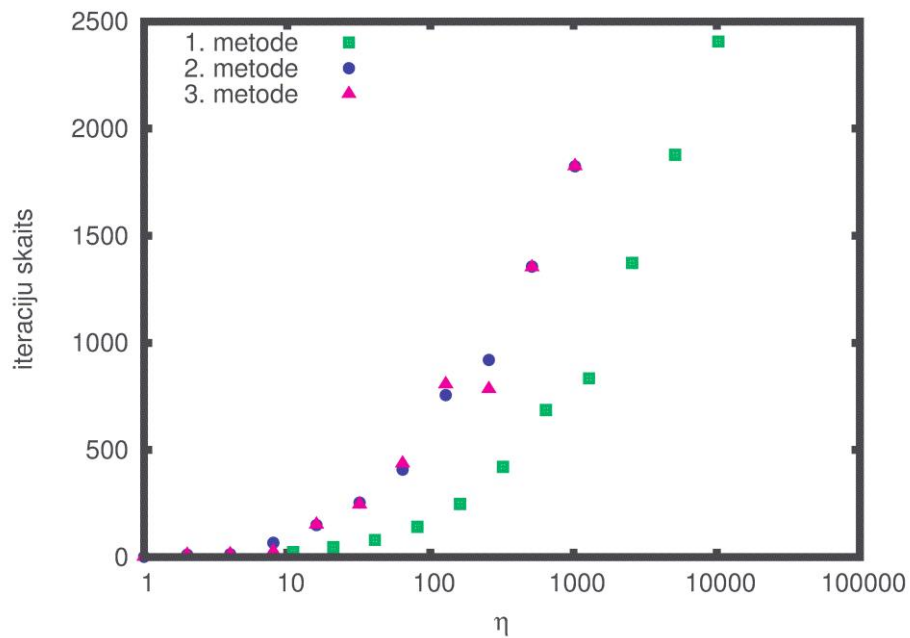
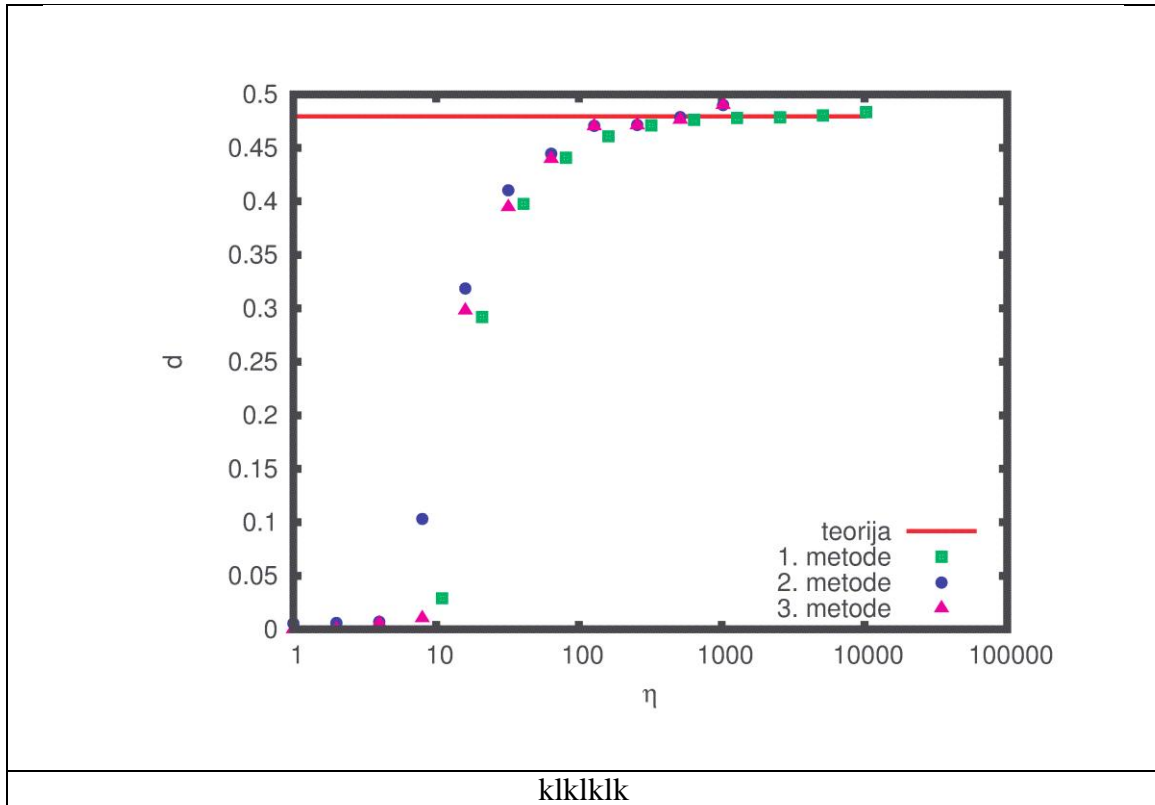
Viskozo spriegumu atkarība no nobīdes plūsmas. Bingema likums salīdzinājumā ar trim tā tuvinājumiem.



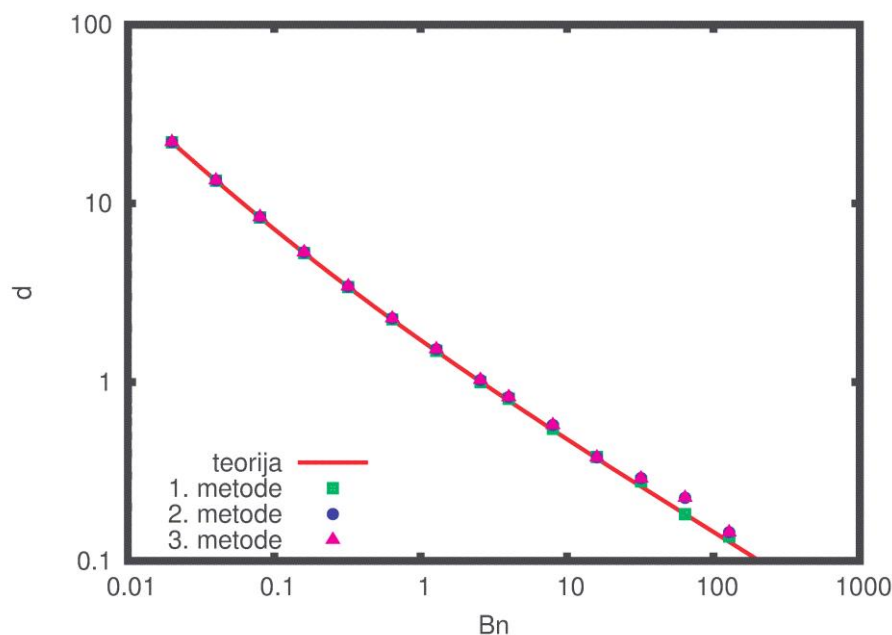
Viskozitātes koeficienta atkarība no nobīdes plūsmas. Bingema likums salīdzinājumā ar diviem tā tuvinājumiem.

$$(Bn = 1, \hat{\eta} = 10, \alpha = 10)$$

Veikta modeļa testēšana plūsmai cilindriskā apgalā, pārbaudot 3 tuvinātās Bingema likuma formulas. Salīdzinot ar analītisko atrisinājumu cilindriskai plūsmai, tika iegūti grafiki, kas raksturo trīs metodes:

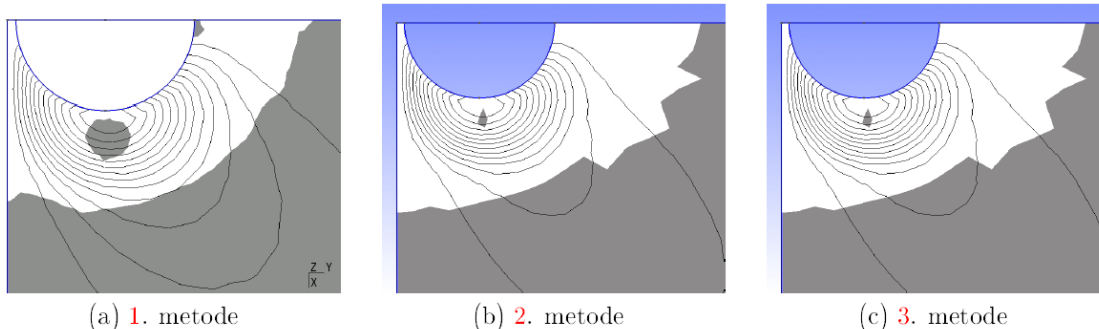


Iterāciju skaits (konverģences ātrums) dažādām metodikām.



Metožu sakritība ar teoriju pie dažādiem Bingema skaitļiem Bn .

Lodes aptecēšanas modelēšana uzrādīja 1.metodes nelielu atšķirību no pārējām divām.



Neplūstošā zona (pelēks) un plūsmas līnijas lodei triecoties pret sienu ārējā aksiālsimetriskā magnētiskajā laukā dažādām Bingema likuma tuvinājuma metodēm pie $\hat{\eta} = 1000$

Tika testēta arī „intrinsic XFEM” metodika, tomēr tās pielietojamība šobrīd šķiet apšaubāma.

Izstrādājot aprēķinu metodiku, secināts:

1. Elastīgajā un plūstošajā vidē tiek izmantoti līdzīgi vienādojumi, kurus ir nepieciešams savienot uz robežvirsmas. Diemžēl, lai veiktu precīzus aprēķinus gan plūstošajā zonā, gan elastīgajā vidē, uz robežas ir nepieciešams veidot lauka lēcienus.
2. Bingema likuma modelēšanai var lietot trīs aprakstītās metodes, katrai ir savas īpatnības (priekšrocības un trūkumi).
3. Tika izveidotas un testētas 3 dažādas metodes Bingema likuma tuvinātam aprakstam. Tika iegūts, ka visbiežāk lietotā 1. metode (bez lauzuma) ir visātrdarbīgākā, tomēr aprēķinos ar magnētisko lauku šī labākā metode nav rekomendējama.
4. Metodei bez lauzuma tika noteikts cits tuvinājuma parametrs, kas nav jāmaina atkarībā no Bingema skaitļa, lai iegūtu to pašu precizitāti.

Publikācijas

1. **J. Cīmurs, J. Evertovskis, S. Lācis** „DIPOLE APPROXIMATION LIMITS FOR MAGNETIC INTERACTION FORCES BETWEEN SPHERES”, Proceedings of the 6th International Scientific Colloquium, Rīga, 2010, pp 133-138;
2. **D. Goško, S. Lācis** „MAGNETORHEOLOGICAL SUSPENSION COMPOSED OF FIBER PARTICLES: NUMERICAL SIMULATION OF ANISOTROPIC BEHAVIOR”, Proceedings of the 6th International Scientific Colloquium, Rīga, 2010, pp 335-340

Konferenču tēzes:

D. Goško, S. Lācis NUMERICAL SIMULATION OF MAGNETORHEOLOGICAL SUSPENSION COMPOSED OF FIBER PARTICLES, 8th International pamir conference on Fundamental and applied MHD, Borgo, Corsica, France, September 5-9, 2011

Referāti LU konferencēs:

LU 68. Konferences Fizikas nodaļas sekcija, 2010. gada 4. februārī

- **J. Cīmurs, D. Goško, S. Lācis** Dipolu tuvinājuma pielietojamības robežas magnetizējamu daļiņu mijiedarbības aprēķinā.
- **D. Goško, S. Lācis** Magnetizējamu stienņveida daļiņu ansambļa uzvedība nesējšķidrumā. Modelēšanas iespējas.

LU 69. Konferences Fizikas nodaļas sekcija, 2011. gada 4. februārī

- **D. Goško, S. Lācis** Magnetizējamu stienīšu mijiedarbības spēku modelēšana
- **J. Evertovskis, S. Lācis** Magnetizējamu ložu ansambļa mijiedarbības spēku aprēķins, izmantojot multipolu izvirzījumu sfēriskās koordinātēs

LU 70. Konferences Fizikas nodaļas sekcija, 2012. gada 3. februārī

- **Juris Evertovskis, Sandris Lācis** Multipolu rindas: pārbīdes formulas un izvirzījumu pielietošana magnētisma uzdevumos

Pētījuma apakšaktivitāte

4.2.4: Termoelektrisko strāvu un magnētiskā lauka mijiedarbības izraisītas šķidra metāla plūsmas izpēte adatveida režģa apkārtņē; akustiskās kavitācijas modelēšana

Aktivitātes vadītājs: asoc. profesors Leonīds Buligins

Plānotais.

Darba gaitā tiks izstrādāts fizikāls modelis termoelektrisko strāvu un magnētiskā lauka mijiedarbības izraisītās kustības eksperimentālai novērošanai. Modelis sastāv no vairākām adatām ap kurām ir šķidr metāls un pieliekot siltuma plūsmu rodas termoelektrisko strāvu cirkulācija. Iekārta tiks aprīkota ar grozāmu magnētu sistēmu, lai varētu pētīt kā magnētiskais lauks ietekmē metāla kustību atkarībā no lauka orientācijas. Paredzēts izgatavot vairākas modeļiekārtas ar dažādiem parametriem un kvalitatīvi salīdzināt novēroto metāla kustību. Šajā daļā tiks arī novēroti un piemeklēti piemērotākie materiāli iekārtas izgatavošanai, lai optimizētu tās darbību. Šim modelim ir fizikāla līdzība ar parādībām, kas saistītas ar dendrītu augšanas mehānismiem metālu kristalizācijas laikā, un magnētiskā lauka iedarbība uz to var būtiski ietekmēt iegūtā metāla struktūru un mehāniskajām īpašībām. Šis eksperiments iecerēts, lai uzrādītu iespējas ietekmēt daudzkomponentu sakausējumu dendrītveida kristalizāciju, izveidojot vēlamu siltuma un masas pārneši šķidrā fāzē. Tālākā darba gaitā tiks veikta arī reāla metāla kristalizācija dažādas konfigurācijas magnētiskā lauka klātbūtnē. Iegūtos datus plānots izmantot skaitlisko modeļu pārbaudei.

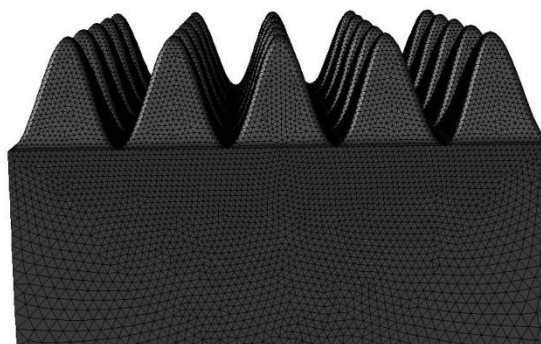
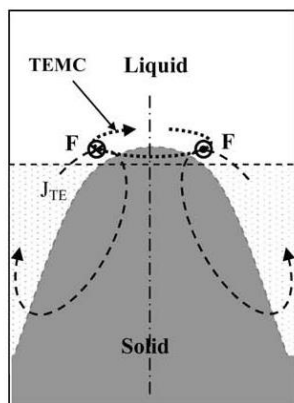
Paveikts

Projekta laikā veikta temperatūras un termoelektriskās strāvas sadalījuma skaitliska aprēķināšana uz robežvirsmas starp divām vidēm ar dažādiem siltumvadīšanas un Zēbeka koeficientiem. Strāvas avots šajā gadījumā ir potenciālu starpība, kas rodas dēļ uz robežvirsmas pastāvošā temperatūras gradienta. Dendrītveida kristalizācijas gadījumā uz robežas var pastāvēt samērā liels temperatūras gradients, kas izraisa termostrāvas plūsmu no dendrīta galotnes un pamata vai pretēji, atkarībā no tā, kurai no fāzēm ir lielāks absolūtais termo-EDS koeficients. Pieliekot ārējo magnētisko lauku iespējams ierosināt šķidrās fāzes kustību, kas izmaina enerģijas un koncentrācijas pārdalīšanās mehānismus kristalizācijas frontes tuvumā. Šādai iedarbībai var būt iespaids uz lietņa struktūru pēc kristalizācijas.

Eksperimentālā iekārta ar kobalta adatām, ko aptver šķidr GaInSn sakausējums izstrādāta, lai varētu makroskopiskā mērogā pētīt šīs parādības un novērtēt to raksturu. Projekta laikā veikti eksperimenti pētīt šķidra GaInSn sakausējuma kustību kobalta adatu režģa apkārtne. Kustība šajā gadījumā tiek ierosināta ar magnētisko lauku, kas mijiedarbojas ar termoelektrisko strāvu, kas parādās uz robežvirsmas starp abām vielām (termoelektromagnētiskā konvekcija (TEMC)). Veikti virsmas deformācijas un siltuma sadalījuma mērījumi dažādu magnētisko lauku ietekmē. Veikti arī siltuma sadalījuma dēļ termoelektriskās konvekcijas

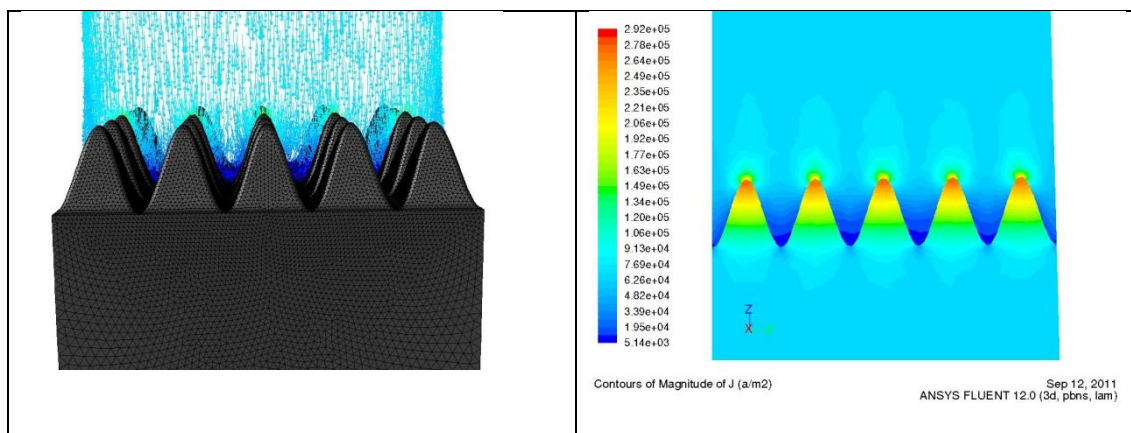
Salīdzināšanai ar eksperimentālajiem rezultātiem tika veikta arī šī procesa skaitliskā modelēšana. Skaitliskajai modelēšanai arī ir nozīme, lai varētu eksperimentālos rezultātus, kas iegūti makroskopiskā mērogā interpretēt kā šī parādība izpaudīsies mikroskopiskā mērogā reālas dendrītveida kristalizācijas laikā. Izstrādāti datormodeļi temperatūras un strāvas sadalījuma aprēķināšanai fiksētas kristalizācijas frontes gadījuma divdimensionālā un trīsdimensionālā gadījumā. Veikti arī plūsmas aprēķini dažādas konfigurācijas adatu izkārtojuma šķērsvirziena un garenvirziena magnētiskā lauka gadījumā, izmantojot dažāda raupjuma režģus. Šie rezultāti sniedz ieskatu par to cik labi izpildās teorētiski aprēķinātā sakarība par to kā mainās TEMC ātrums atkarībā no pieliktā magnētiskā lauka dažādu garuma

mērogu gadījumā. Pieliktais magnētiskais lauks rada arī inducētās strāvas, kas savukārt rada spēku, kas bremzē šķidrās fāzes kustību. Šis spēks ir proporcionāls magnētiskajam laukam otrajā pakāpē, bet TEMC ir proporcionāls lauka pirmajai pakāpei, tādējādi eksistē lauka vērtība, pie kuras kustības intensitāte sasniedz maksimumu. 3 mm diametra adatai teorētiskais aprēķins ar modelēšanas rezultātiem sakrīt klūdas robežās un apstiprināja tendenci, ka kustība pie laukiem, kas lielāki par kritisko vērtību kļūst vājāka.

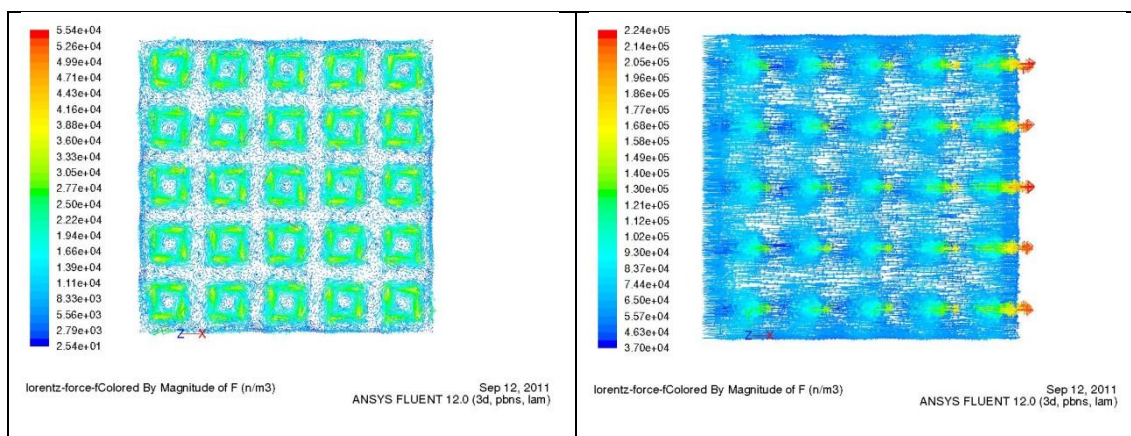


1.att. TEMHD plūsmas ap vienu dendrītu shematisks attēlojums (no [1]) un izveidotā dendrītu sistēmas ģeometrija ar virsmas režģi.

Veikta arī skaitliskā modelēšana par pieliktās ārējās elektriskās strāvas ierosinātu kustību magnētiskajā laukā, pētot šīs kustības līdzību ar TEMC (1.att.). Šī pētījuma mērķis ir izvērtēt iespējas pastiprināt vai noslāpēt TEMC kustību, vai arī radīt līdzīga rakstura kustību metālu sistēmās, kur dažādu apstākļu dēļ neveidojas termoelektriskās strāvas. Šajā gadījumā veikta trīsdimensiju modelēšana 25 dendrīta adatu režģim (2.att.). Iegūts apstiprinājums, ka kustības raksturs tiešām ir līdzīgs TEMC. Aksiāls magnētiskais lauks mijiedarbojoties ar tāda paša virziena strāvu rada šķidrums rotāciju ap katru dendrīta zaru, bet šķērslauks rada vienu virpuli visā tīģeļa mērogā (3.att.).



2.att. Strāvas blīvuma vektori un modulis plaknē $x=0$.



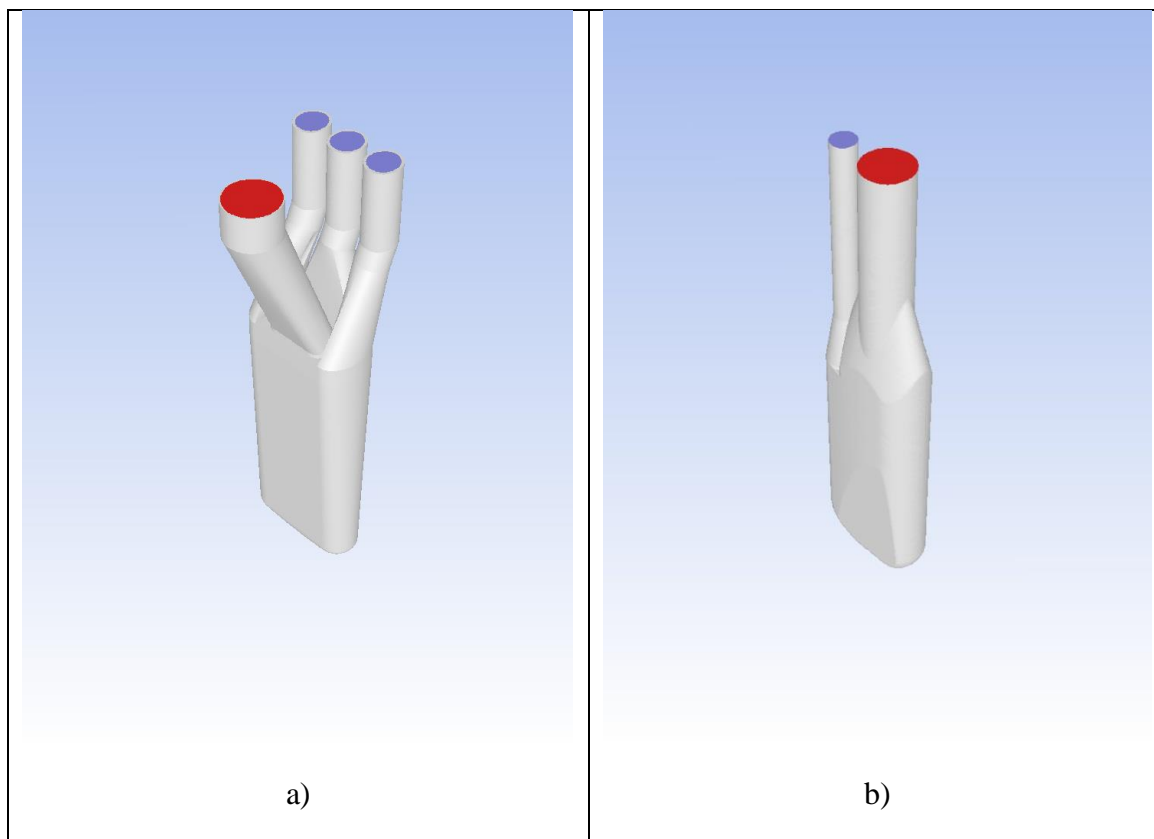
3.att. Lorenca spēka blīvums pie $B_z=1T$ un $B_y=1T$ un modulis plaknē $z=0$.

Šajā gadījumā līdzīgi kā TEMC, spēks šķidrā fāzē parādās tikai uz robešvirsmas, jo cietajai un šķidrā fāzei ir būtiski atšķirīgas elektrovadītspējas. Šī darba rezultāti prezentēti astotajā PAMIR konferencē Fundamental and applied MHD. Vēlāk publicēts arī raksts žurnālā Magnetohydrodynamics „Investigation of liquid phase motion generated by the thermoelectric current and magnetic field interaction”. Rezultāti apkopti publikācijās [2-6].

Projekta ietvaros izveidots smago metālu protonu mērķa hidrodinamikas modelis, kas ietver siltuma enerģijas izdalīšanos protonu mijiedarbības ar kodoliem rezultātā. Modelis realizēts licenzētas komercprogrammatūras vidē (ANSYS Fluent) ietverot C valodā izstrādātas apakšprogrammas siltuma enerģijas ievērošanai.

Projekta izpildes gaitā salīdzinātas vairākas atšķirīgas dzīvsudraba protonu mērķu konstrukcijas, kurās plūsma veidota balstoties uz dažādām koncepcijām. Viena no konstrukcijām ir ESS 2003.gada mērķis, otra – iespējami vienkārša ģeometrija, kuras ārējā forma tiek izmantota plūsmas regulēšanai. Abu mērķu ģeometrija attēlota 4.attēlā.

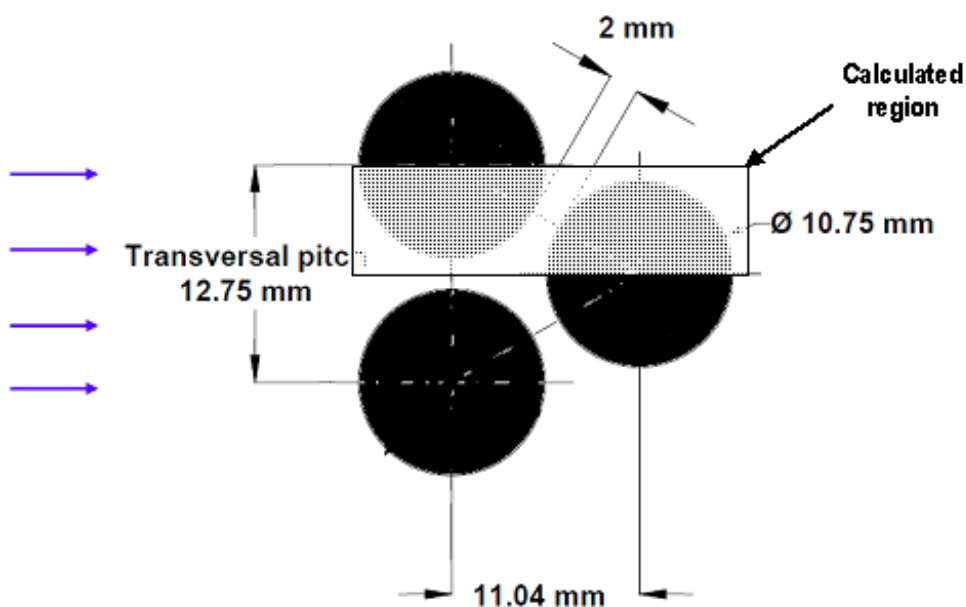
Šķidrā metāla plūsma mērķos tiek organizēta atšķirīgi. ESS mērķī ir trīs ieejas, no kurām sānu ieejas nodrošina pamata plūsmu, bet vidējā caur mazu spraugu loga zonas tuvumā nodrošina loga dzesēšanu. Konstrukcija kopumā ir ļoti sarežģīta un pie 13 l/s rada apm. 3 atm lielu spiediena kritumu.



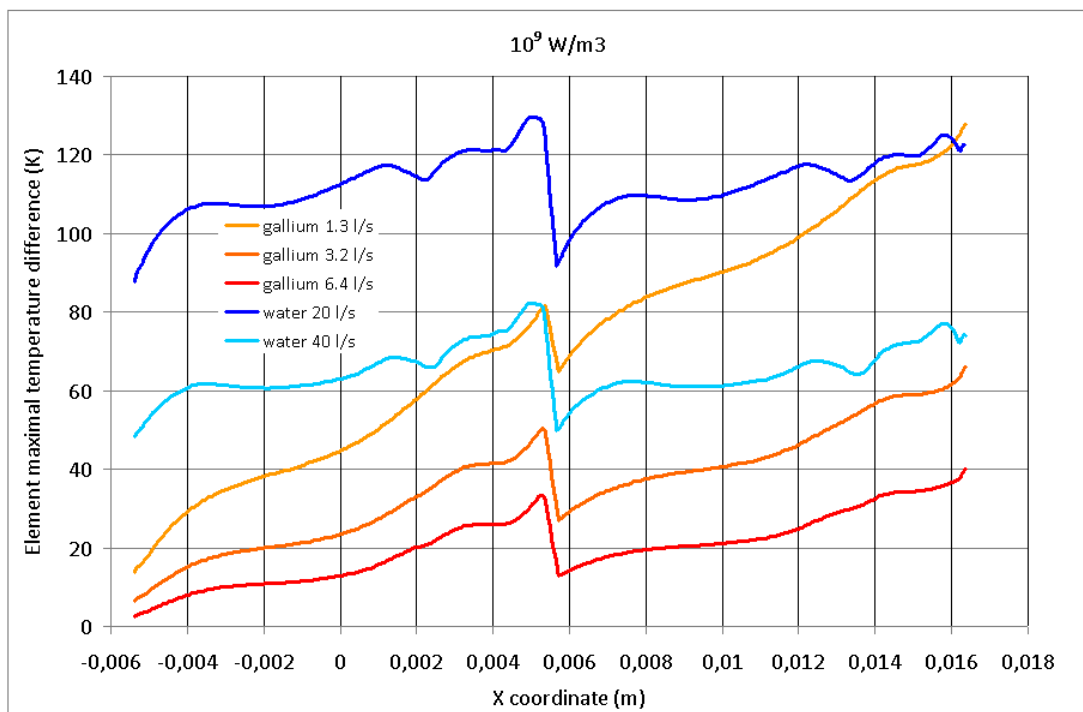
4.att. Protonu mērķu ģeometrija. Ar zilu attēlota šķidrā metāla ieplūdes, ar sarkanu – izplūdes virsmas. a) ESS dzīvsudraba mērķa sākotnējais (2003.g.) dizains, b) viena no apskatītajām mērķa formām.

Alternatīvā mērķa konstrukcija (4.att.b)) raksturojas ar daudz vienkāršāku plūsmas struktūru, mērķī nav nekādu iekšējo starpsienu, raksturīgā spiediena starpība pie 13 l/s apm. 1 atm ir trīs reizes mazāka nekā ESS 2003.g. mērķī. tādējādi piedāvātais mērķis kopumā raksturojas ar daudz vienkāršāku konstrukciju, paredzamāku plūsmas izturēšanos un mazāku spiediena starpību, nekā 2003.g.ESS mērķis.

Izveidots smago metālu protonu mērķa modelis, kurā siltuma enerģijas izdalīšanās protonu mijiedarbības ar kodoliem rezultātā notiek cietā fāzē. Par dzesētāju tiek izmantoti vai nu tradicionāli siltumnesēji (ūdens, gāzes), kas raksturojas ar vidējiem Prandtļa skaitļiem, vai šķidrie metāli, kas raksturojas ar maziem Prandtļa skaitļiem. Tiek izmantota mērķa cietās fāzes ģeometrija periodisku stieņu formā, kas izmantota Paula Šērera institūtā (5.att.). Izmantotas dažādas stieņu konstrukcijas. Vienkāršākā atbilst viena materiāla stienim, sarežģītākajās iespējama vairāku materiālu izmantošana, piemēram, nerūsējošā tērauda vai cirkonija caurule, kas pildīta ar svinu. Apskatīta arī mērķa konstrukcija, kurā stieņu vietā izmantota periodisku lodīšu sistēma. Veikta dažādu kombināciju stieņi-dzesētājs enerģijas pārnese raksturlielumu analīze, parādīts (6.att.), ka šķidro metālu izmantošana par dzesētājiem arī cieto mērķu gadījumā nodrošina ievērojamas priekšrocības salīdzinājumā ar tradicionālajiem dzesētājiem, kas izpaužas kā maksimālo temperatūru samazināšanās pie ievērojami mazākām plūsmām.



5.att. Izvēlētais matemātiskais modelis, kas ņem vērā mērķa periodisko struktūru un aprēķinu apgabals.



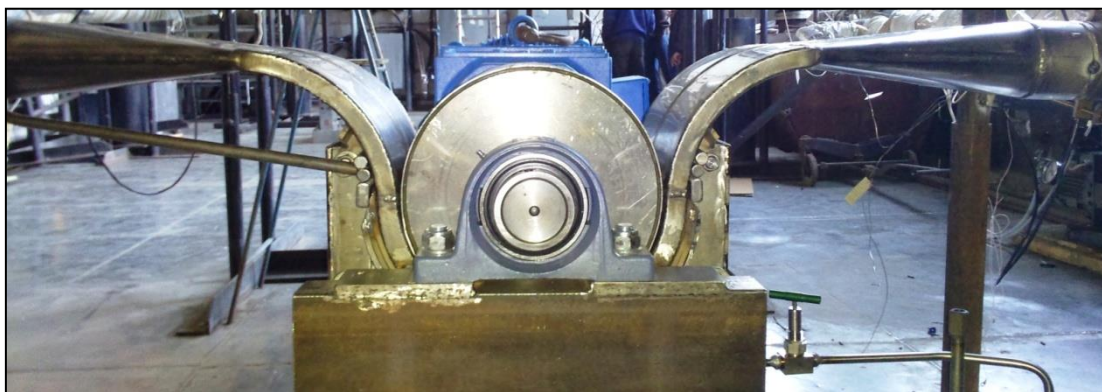
6.att. Temperatūras sadalījums uz stieņu virsmas simetrijas plaknē $z=0.05$.

Par rezultātiem referēts konferencēs [7, 8], sadarbībā ar Paula Šēra institūtu (Šveice) tiek gatavotas vairākas publikācijas.

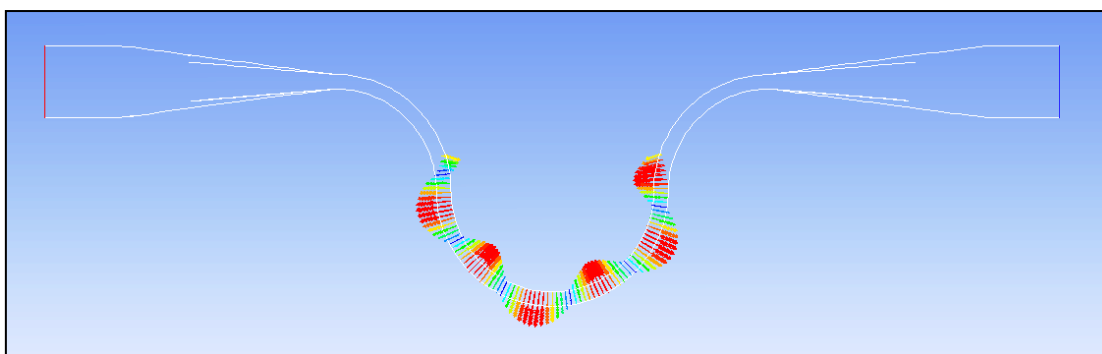
Laika posmā no 2011. gada 1. marta līdz 2012. gada 30. novembrim tika veidoti elektromagnētisko indukcijas sūkņu (EMIS) skaitliski modeļi, izmantojot komerciālo programmatūru ANSYS Fluent un tajā ietilpstošo magnetohidrodinamikas (MHD) moduli. Modulis papildināts izmantojot lietotāja definētas funkcijas (UDF), kas ļauj uzdot skrejošu magnētisko lauku dažādām EMIS konstrukcijām.

Šis rezultāts ir viens no būtiskākajiem panākumiem veiktā darba ietvaros, jo dod samērā labu priekšstatu par programmas darbības principiem, kā arī paver iespējas uzdot patvaļīgu magnētiskā lauka sadalījumu. Tas ir būtiski tādēļ, ka ļauj veidot precīzus EMIS skaitlisko modeļus, kur magnētiskā lauka kustība ir, piemēram, cilindriska, nevis lineāra, tādējādi ievērojami paplašinot programmas pielietojuma iespējas. Šī apsvēruma dēļ tika iesākts darbs pie centrālās elektromagnētiskā indukcijas sūkņa (CEMIS) skaitliskā modeļa izveides.

Projekta ietvaros izstrādāts precīzs EMIS darbības tehnoloģiskā procesa modelis, kas ņem vērā kanāla ģeometrijas, EM gala efektu un magnētiskā lauka sadalījuma īpatnības (sk.7. un 8.att.).

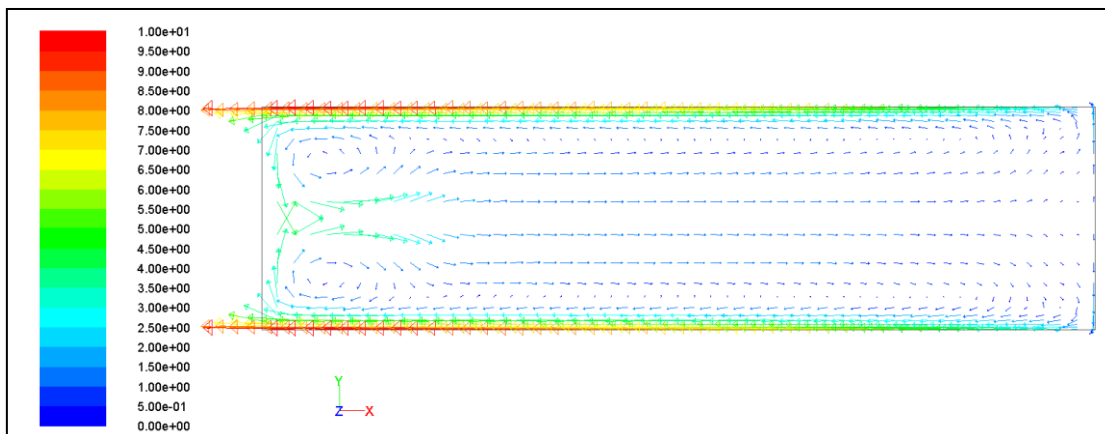


7.att. Reāls EMIS iemontēts eksperimentālajā kontūrā.



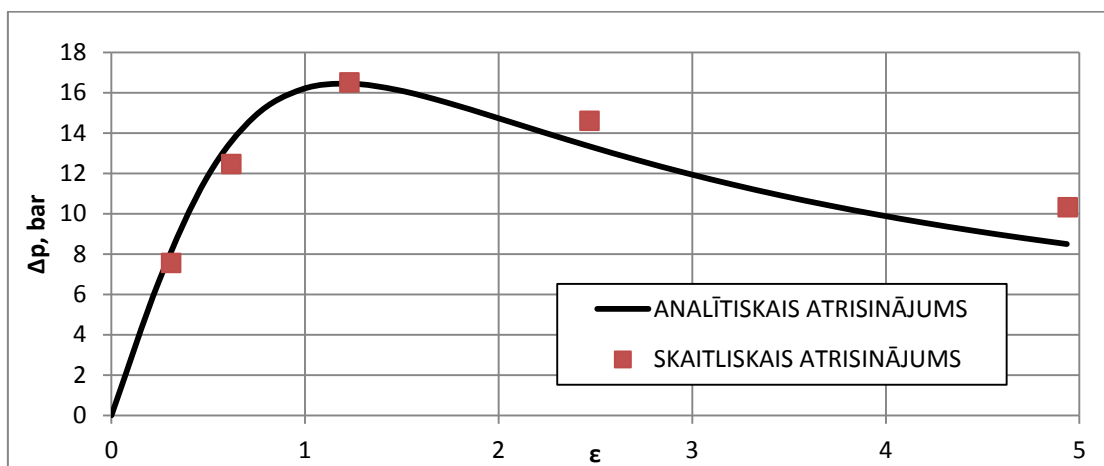
8.att. Pilnais cilindriska EMIS kanāla modelis ar skrejošu magnētisko lauku.

Tika arī novērots interesants efekts, kas tika iegūts tieši skaitlisko aprēķinu rezultātā. Proti, pie nulles caurteces, kanālā bija ievērojama šķidrā metāla cirkulācija (9.att.). Iemesls šādam efektam ir nevienmērīgais EM spēka sadalījums pa kanāla platumu. Lai gan tamlīdzīgu efektu eksistence ir minēta literatūrā, taču metodes to ietekmes novērtēšanai nav pilnveidotas.

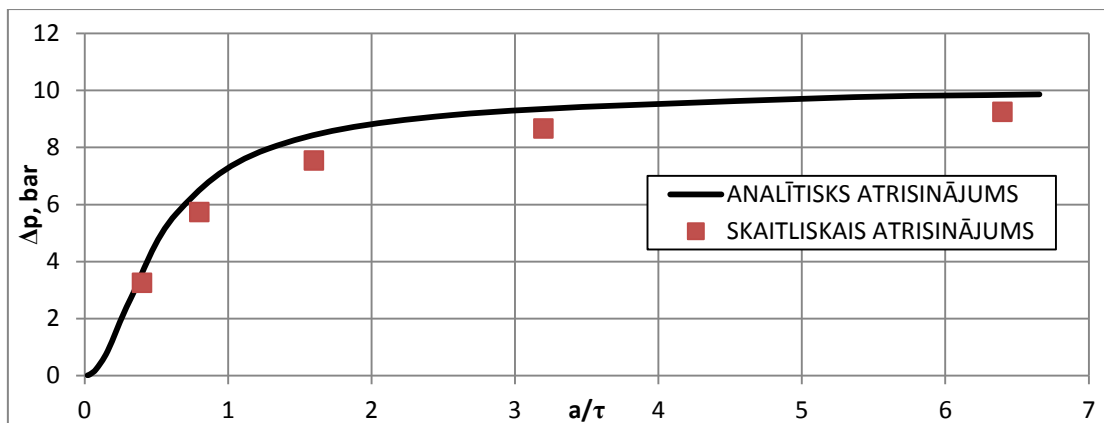


9.att. Ātruma vektoru lauks pie nulles caurteces un novērota cirkulācija.

Veikti aprēķini EMIS ar pastāvīgajiem magnētiem, apskatot iztaisnotu kanālu bez elektrovadošām sienām. Šāda tipa ģeometrijai ir samēra precīzs analītisks atrisinājums, kas bieži vien tiek izmantots praksē. Tika veikts literatūras apskats, kurā pētīti EMIS ar maiņstrāvas induktoriem, un balstoties uz šo izvedumu apskatīti EMIS ar pastāvīgajiem magnētiem. Iegūtais atrisinājums tika salīdzināts ar skaitliskajiem rezultātiem pie dažādiem sistēmas raksturīgajiem parametriem pie nulles caurteces. Iegūtie skaitliskie rezultāti labi sakrīt ar analītiskajiem atrisinājumiem (sk.10. un 11.att.).

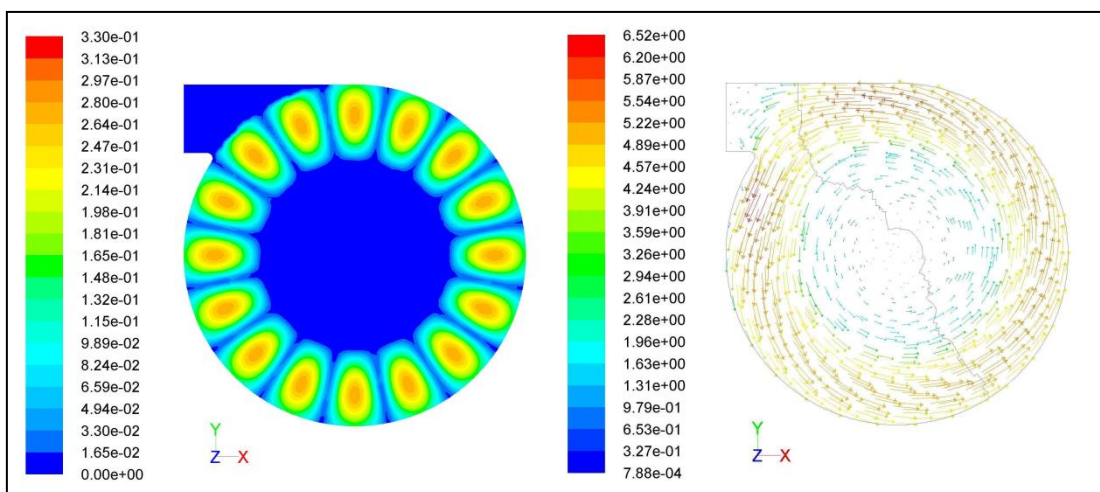


10.att. Attīstītais spiediens pie dažādiem magnētiskā Reynoldsa skaitļiem.



11.att. Attīstītais spiediens pie dažādām kanāla platuma un magnētiska lauka viļņa garuma attiecībām.

Pielietotie paņēmieni un metodes ļauj ne tikai aprakstīt EMIS darbību, bet paver iespēju arī citu MHD procesu modelēšanai, piemēram, šķidrā metāla maisīšanai, kas ir neatņemams tehnoloģisks process metalurģijā. Līdz ar to apgūtie un izmantotie programmatūras rīki, kā arī izstrādātie paņēmieni šī darba ietvaros ir pietiekami universāli, lai tos varētu uzskatīt par labiem tālāko pētījumu veikšanai.



12.att. CEMIS uzdotais magnētiskā lauka sadalījums plaknē izmantojot UDF (pa kreisi) un aprēķinātais šķidra metāla ātruma vektoru sadalījums (pa labi).

Iegūtie analītiskie un skaitliskie rezultāti (12.att.) tika izmantoti maģistra darbā: L. Goldšteins „Centrbēdzes elektromagnētiskie sūkņi ar pastāvīgajiem magnētiem šķidra metāla transportam”, kas tika novērtēts ar atzīmi „teicami”. Šīs atskaites rakstīšanas brīdī publikācija par šo tēmu: „Possibilities of 3D simulations of electromagnetic induction pumps with permanent magnets” ir iesniegta žurnālā *Magnetohydrodynamics* un tiek veikti recenzenta ieteiktie noslēdzošie labojumi.

Publikācijas

1. Xi Li, Annie Gagnoud, Zhongming Ren, Yves Fautrelle, Rene Moreau Investigation of thermoelectric magnetic convection and its effect on solidification structure during directional solidification under a low axial magnetic field. *Acta Materialia* 57 (2009) 2180–2197.
2. I. Kaldre, Y. Fautrelle, J. Etay, A. Bojarevics and L. Buligins, Investigation of liquid phase motion generated by the thermoelectric current and magnetic field interaction, *Magnetohydrodynamics*, Vol. 46, No. 4, 371-380, 2010.
3. I. Kaldre, Y. Fautrelle, J. Etay, A. Bojarevics and L. Buligins, Magnetic field and current interaction influence on the structure of binary metallic alloys, 8th PAMIR International Conference on Fundamental and Applied MHD Borgo – Corsica - France September 5 - 9, 2011.
4. I. Kaldre, Y. Fautrelle, J. Etay, A. Bojarevics and L. Buligins, ABSOLUTE THERMOELECTRIC POWER OF Pb Sn ALLOYS, *Modern Physics Letters B*, Vol. 25, No. 10 (2011) 731–738.
5. I. Kaldre, Y. Fautrelle, J. Etay, A. Bojarevics, L. Buligins. Influence of the slowly rotating transverse magnetic field on the solidification of metallic alloys. The 7th International Conference on Electromagnetic Processing of Materials. 22-26 Oct, 2012 · Beijing, China.
6. I. Kaldre, A. Bojarevics, Y. Fautrelle, J. Etay and L. Buligins, Current and magnetic field interaction influence on liquid phase convection, *Magnetohydrodynamics*, Vol. 48, No. 2, 399-406, 2012.
7. K. Thomsen, E. Platacis, O. Lielausis, I. Bucenieks, A. Ziks, A. Romančuks, K. Kravalis, L. Buligins and R. Moormann. Experience with a first LGE loop and in proposal for further investigations flowing LGE, IWSMT 10th International Workshop on Spallation Materials Technology 18-22 October, 2010, Beijing, China.
8. K. Thomsen, L. Buligins, M. Butzek, G. Heidenreich, F. Heinrich, M. Magán, E. Pitcher. Target Cooling Options for Neutron Sources at High Power Densities UCANS-III, Bilbao, July 2012.

Referāti LU konferencēs:

LU 68. Konferences Fizikas nodaļas sekcija, 2010. gada 4. februārī

- Kaldre, A. Bojarēvics, L. Buligins, Y. Fautrelle Termoelektriskās strāvas un magnētiskā lauka mijiedarbības izraisītas šķidra metāla kustības izpēte.

LU 70. Konferences Fizikas nodaļas sekcija, 2012. gada 3. februārī

- Imants Kaldre, Andris Bojarēvičs, Leonīds Buligins, Kārlis Kundziņš Termoelektromagnētiskās konvekcijas ietekme uz bināru sakausējumu makrosegāciju
- L.Goldšteins, I.Bucenieks, L.Buligins Šķidrā metāla sūkņu uz pastāvīgiem magnētiem eksperimentālie pētījumi un modelēšana.

Ultraskaņas ietekme uz gāzu burbuļu augšanas šķidrumā dinamiku. Matemātiskā modeļošana.

Silīcija plāksnes (*wafers*) ir mūsdienu elektronikas pamatā. To ražošanas process ir sarežģīts un viena no tā sastāvdaļām ir izgatavoto un sagrieztu kristāla plāksņu tīrīšana, pie tam ir svarīgi aizvēst arī daļiņas, kuru izmēri ir mazāki par 100 nm. Šādam procesam izmanto īpaši augstas frekvences ultraskaņas (~1MHz, *megasonic*) tīrīšanas vannas. Labi zināms un plaši novērots fenomens ir ultraskaņas kavitācija – neliela izmēra (~1µm ... 1mm) gaisa burbulīšu veidošanās šķidrumā ultraskaņas ietekmē. Burbulīši ultraskaņas ietekmē ne tikai rodas, bet arī maina savu tilpumu – saraujas un izplešas (bieži arī saglabājot savu sfērisko formu). Šo procesu sauc par burbuļa kolapsu. Eksperimentālie novērojumi liecina, ka pats daļiņu aizvākšanas process ir saistīts ar burbuļa kolapsu un tā izraisītajām šķidruma mikroplūsmām.

Literatūrā ir aprakstīti vairāki modeļi, kas apraksta burbuļa rādiusa izmaiņas laikā, pieņemot, ka gaisa daudzums burbulī ir konstants (Kellera – Mikša vienādojums, kā arī no tā atvasinātie vienādojumi). Šie modeļi rāda, ka burbuļa svārstību dinamika ir tuva uzspiestām svārstībām, proti, katram burbuļa izmēram miera stāvoklī atbilst noteikta akustiskā frekvence, pie kuras svārstības ir vislielākās. Burbuļa miera stāvokļa izmērs ir atkarīgs no tajā esošā gaisa daudzuma.

No augstāk aprakstītās informācijas izriet, ka lai optimizētu augstfrekvences ultraskaņas vannas darbību ir nepieciešamas zināšanas par burbuļu sadalījumu pa to miera stāvokļa izmēriem. Eksistē vairāki procesi, kas ietekmē burbuļu sadalījumu pa miera stāvokļiem:

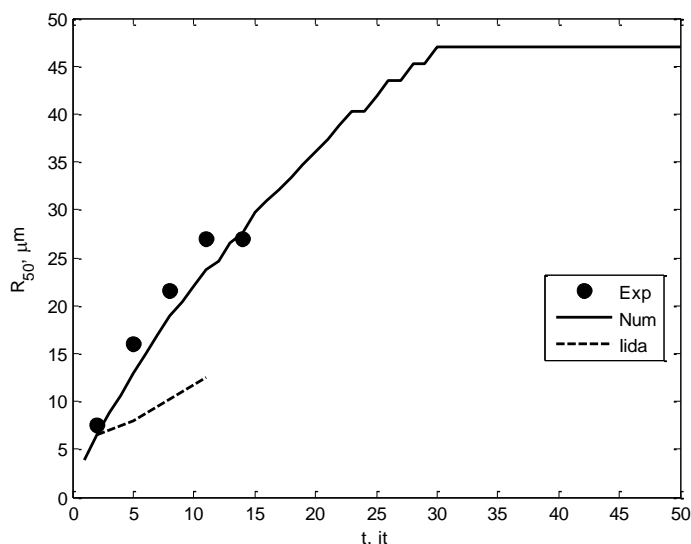
- Burbuļu ģenerācijas process. Modernā literatūra liecina, ka burbuli rodas uz netīrumu un neļūdumu vietām tīrīšanas vannā vai arī uz mikroskopiskajām materiāla daļiņām. Diemžēl nav īstas skaidrības par to, kāda izmēra burbuli tiek ģenerēti, bet ir saprātīgi pieņemt, ka mazāka izmēra burbuli tiek ģenerēti vairāk kā lielāka izmēra burbuli.
- Burbulī katrā izplešanās saraušanās ciklā nonāk nedaudz gaisa (vai arī gluži otrādi – nedaudz izplūst, tipiski ~0.1% no kopējās burbuļa masas). Šo procesu sauc par rektificēto difūziju.
- Ja akustisko lauku izslēdz, gaiss no burbuļiem izplūst, jo gāzes koncentrācija burbulī ir lielāka kā apkārtējā vidē.
- Burbuļi akustiskajā laukā pārvietojas. Mijiedarbību starp akustisko lauku un burbuli apraksta pirmā veida Bjerkes spēks, bet divu burbuļu pievilkšanos vai atgrūšanās, kas arī ir atkarīga no burbuļa oscilācijām – otrā veida Bjerkes spēks. Diviem burbuļiem pievelkoties gana tuvu notiek to apvienšanās – koalescence.

Tika secināts, ka vienīgajā modelī, ko izdevās atrast modernajā literatūrā, ir iespējams veikt vairākas nopietnas izmaiņas. Iida et al [1] modelis ņēma vērā burbuļu ģenerāciju un koalescenci, taču pieņēma, ka koalescences notikumu biežums ir vienāds visiem burbuļu izmēriem, turklāt burbuļu sadalījums tika apskatīts konstantā attālumā no ultraskaņas avota.

Darba uzdevums, kas arī tika izpildīts, bija papildināt Iida modeli ar rektificētās difūzijas procesiem, ieviest koalescences atkarību no otrā veida Bjerkes spēka vērtības. Papildus tam tika ieviesta arī viena telpas dimensija (z), kas atbilstoši tipiskam akustiskās tīrīšanas vannas dizainam, ir norobežota ar ultraskaņas avotu vienā malā (apakšā) un brīvu ūdens virsmu, kurā burbuli izzūd (savienojas ar gaisu) otrā malā (augšā).

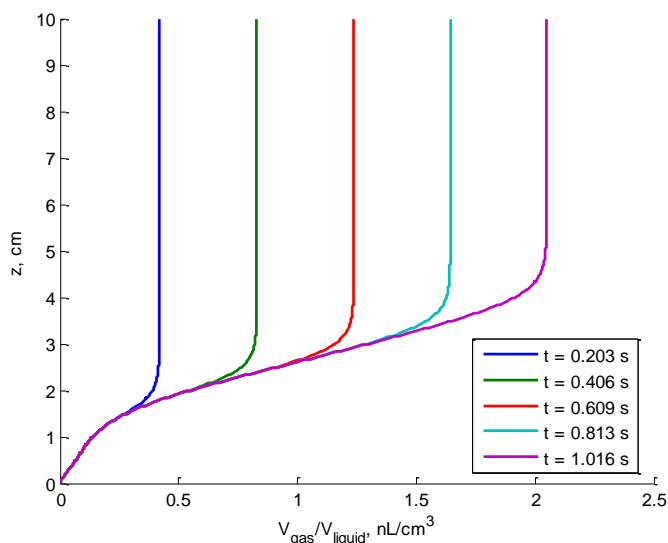
Lai iegūtu pēc iespējas precīzākas rektificētās difūzijas un otrā veida Bjerknes spēka vērtības, tika veikti burbuļa oscilāciju aprēķini ar mainīgu gāzes daudzumu burbulī, kas pieprasa arī gāzes koncentrācijas un temperatūras izmaiņu vienādojumu aprēķinu šķidrumā burbuļa tuvumā.

Rezultāti rāda, ka pētījuma laikā izveidotais modelis ne tikai ir skaitliski tuvs eksperimentālajiem rezultātiem, bet arī pēc noteikta laika iziet uz stacionāru stāvokli, kas sakrīt ar eksperimentu rezultātiem.



1. attēls. Burbuļa vidējā rādiusa atkarība no laika. Eksperimentālo datu (Exp), pētījuma laikā izveidotā modeļa (Num) un literatūrā aprakstītā modeļa (lida) salīdzinājums.

Tā kā burbuļa oscilācijas ir atkarīgas arī no akustiskās enerģijas burbuļa atrašanās vietā, tika veikti aprēķini pie vienkāršota, no burbuļu koncentrācijas atkarīga, enerģijas absorbcijas modeļa, kas atļautu aprēķināt akustiskās enerģijas sadalījuma pa z asi. Tā kā burbuļa oscilāciju aprēķini ir laikietilpīgi, tika izmantota datu interpolācija.



- attēls. Burbuļu telpiskā sadalījuma piemērs. Dažāda izmēra burbuļu kopējais tilpums dažādos laika momentos.

[1] Iida, Y. et al.: *Bubble population phenomena in sonochemical reactor*. Ultrasonics Sonochemistry, Vol. 17, 2010, pp. 480–486.

Darba rezultāti prezentēti šādās konferencēs:

Sīle T., Virbulis J. Timuhins A., Sennikovs J, Bethers U.: *Modelling of Cavitation and Bubble Growth during Ultrasonic Cleaning Process*, Proceedings of the International Scientific Colloquium MODELLING FOR MATERIAL PROCESSING Rīga, September 16-17, 2010

Sīle T., Virbulis J. Mathematical modelling of bubble size distribution during acoustic cavitation, WIMRC 3rd International Cavitation Forum 2011 University of Warwick, UK, 4th-6th July 2011

Referāti LU konferencēs:

LU 68. Konferences Fizikas nodaļas sekcija, 2010. gada 4. februārī

- **T. Sīle, J. Virbulis** Ultraskaņas akustiskajā laukā kavitējošu gāzes burbuļu augšanas modelēšana

LU 69. Konferences Fizikas nodaļas sekcija, 2011. gada 4. februārī

- **T. Sīle, J. Virbulis** Kavitācijas burbuļu telpiskais sadalījums augstfrekvences akustiskās tīrīšanas vannās