

NACIONĀLAIS
ATTĪSTĪBAS
PLĀNS 2020



EIROPAS SAVIENĪBA

Eiropas Reģionālās
attīstības fonds

I E G U L D Ī J U M S T A V Ā N Ā K O T N Ē



Latvijas Universitātes

Fizikas Institūts

EIROPAS REĢIONĀLĀS ATTĪSTĪBAS FONDS

**Elektrosārņu process labākai titāna
nogulsņējumu morfoloģijai**

**Projekts Nr. 1.1.1.1./16/A/85
(Progresā ziņojums - 7)**

2018

01.08 – 31.10.

Projektā piedalās:

1. Platacis Ernests*
2. Kravalis Kalvis
3. Kārlis Gailītis
4. Linards Goldšteins
5. Mihails Majorovs
6. Blumbergs Ervīns
7. Kaļalnickovs Vadims
8. Serga Vera
9. Krūmiņa Aija
10. Alberts Romančuks
11. Sudņikovičs Sergejs
12. Šints Viesturs
13. Andrejs Šiško
14. Kaldre Imants

*Projekta zinātniskais vadītājs: tel. 67944700; mob. 26513424.

e – pasts: erik@sal.lv

Projekta administratīvā vadītāja: **M. Broka**; tel. mob. 29166326

e – pasts: maija.broka@lu.lv

Projekta uzdevums :

- Veikt rūpnieciskos pētījumus ar mērķi izstrādāt jaunu tehnoloģiju, kas balstīta uz Krola un elektrosārņu procesiem un tehnoloģijas prototipu Ti/TiAl sakausējumu iegūšanai.
-

Projekta rezultāti:

- Jābūt izveidotam jaunas Ti/TiAl sakausējumu iegūšanas tehnoloģijas prototipam;
- Jābūt apstiprinātai un aizstāvētai projekta izpildes gaitā izstrādātajai tehnoloģijai patenta formā, publicētiem 4 oriģināliem zinātniskiem rakstiem un 6 ziņojumiem starptautiskās konferencēs.

Aktivitāte Nr. 1. Tehnoloģijas prototipa izstrāde, integrējot galvenās tehnoloģiskās komponentes.

1.1. Tehnoloģijas prototips.

Lai eksperimentāli pārbaudītu izstrādāto tehnoloģiju titāna un titāna – alumīnija sakausējumu iegūšanai tika izstrādāta tehniskā dokumentācija un izgatavota jauna eksperimentālā iekārta – tehnoloģijas prototips.

Tehnoloģijas prototipa koncepcijas izstrāde tika veikta uz sekojošu apsvērumu pamata:

Reaktors ir hermētiski noslēgta nerūsējoša tērauda retorte, kurā TiCl_4 tiek reducēts ar Mg un reakcijas rezultātā radušies titāna nogulsņņumi tiek pārkausēti elektrosārņu procesā. Iekārta darbojas virs titāna kušanas punkta un tiek dzesēta ar ūdeni. Reaktoram pieslēgti trīs pamatatrakti:

- Magnija padeves trakts, kurš paredzēts noteiktas magnija dozas ievadīšanai reaktorā;
- Titāna tetrahlorīda padeves traktam jānodrošina atbilstoša TiCl_4 stehiometriskā daudzuma ievadīšana reaktorā;
- MgCl_2 evakuācijas trakts nodrošina reakcijas produktu (MgCl_2) atsūkšanu no reaktora.

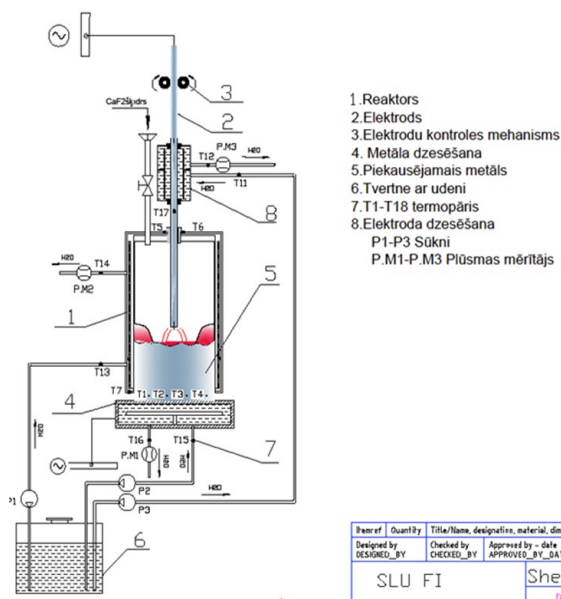
Bez tam reaktors aprīkots ar attiecīgām inženiersistēmām;

- Gāzes- vakuumu sistēmu;
- Ūdens dzesēšanas sistēmu;
- Elektro - barošanas sistēmu;
- Elektrodu padeves sistēmu un
- Tehnoloģisko un eksperimentālo parametru monitoringa (datu iegūšanas un izdošanas DAQ) sistēmu.

Katrs trakts un attiecīga inženiersistēma aprīkota un sastāv no atsevišķiem mezgliem.

Traktu un mezglu konstrukcijas apraksts dots Projekta iepriekšējās sešās atskaitēs..

Ti/TiAl eksperimentālā iekārta-tehnoloģijas prototips izgatavots un instalēts metalurģiskā boksā telpās, zīm. 1.1.



Zīm.1.1.1. Tehnoloģijas prototips (kopskats pa kreisi), principiālā shēma (pa labi).

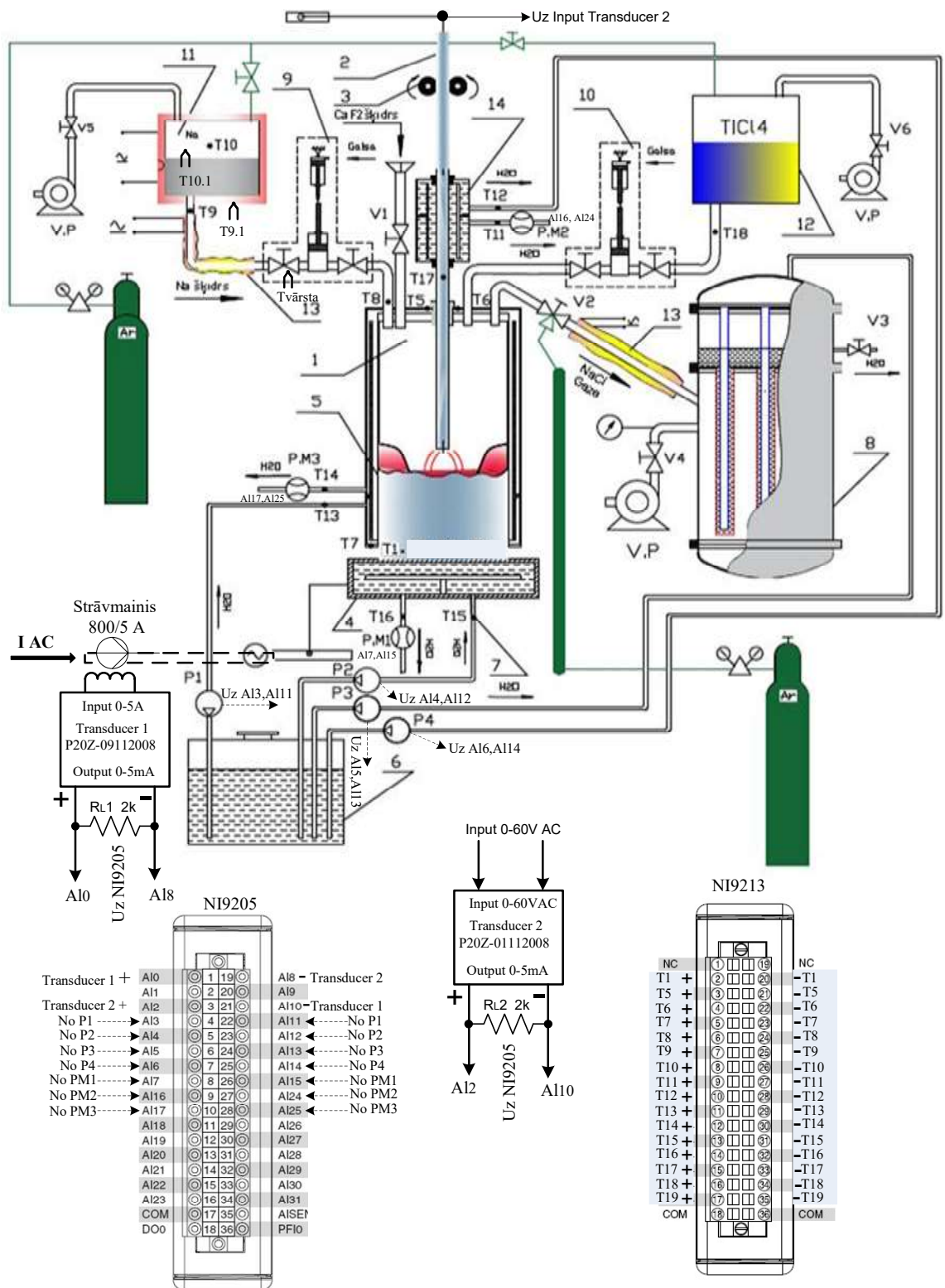
1.2. Titāna iekārtas funkcionālās elektriskās shēmas apraksts

Titāna iegūšanas eksperimentālās iekārtas funkcionālie elektriskie, temperatūras un dzesēšanas šķidruma caurplūdes lielumi tiek mērīti ar datorsistēmas palīdzību, kas sastāv no NI (National Instruments) DAQ tipa ierīces un datora ar LabView programmatūru. DAQ ierīce sastāv no elektrisko spriegumu, 16 kanālu (NI9205) mērīšanas moduļa, temperatūras vērtības devēju (termopāru T1 - T20) DC signālu mērīšanas moduļa (NI9213) un NI šasijas, kas pievienota datoram. Temperatūras devējs T1 līdz 1600° C ir R (S) tipa, PtRh, termopāris, bet temperatūras devēji T2 - T20 ir K-tipa termopāri, kas darbojas līdz 1000° C. Dzesēšanas šķidruma caurplūdes mērītāji G1/2" funkcionē uz Holla efekta principa, mērīšanas diapazons 1-30 L/min., zīm. 1.2. - 1.4.

Transducers P20Z -09112008 tipa maiņstrāvas pārveidotājs ir pielietots shēmā, lai pārveidotu titāna kausēšanas elektriskā loka maiņstrāvas vidējo kvadrātisko vērtību normālā DC spriegumā, kas tiek pievadīts NI (National Instrument) modulim tā datorizētai mērīšanai. Pārveidotāja izejas ķēde ir galvaniski izolēta no ieejas strāvas un barošanas avota. Transducera korpuss ir izgatavots no plastmasas. Ierīces ārpusei ir skrūvju spaiļi vai savienojošais savienotājs ārējo ķēžu pievienošanai.

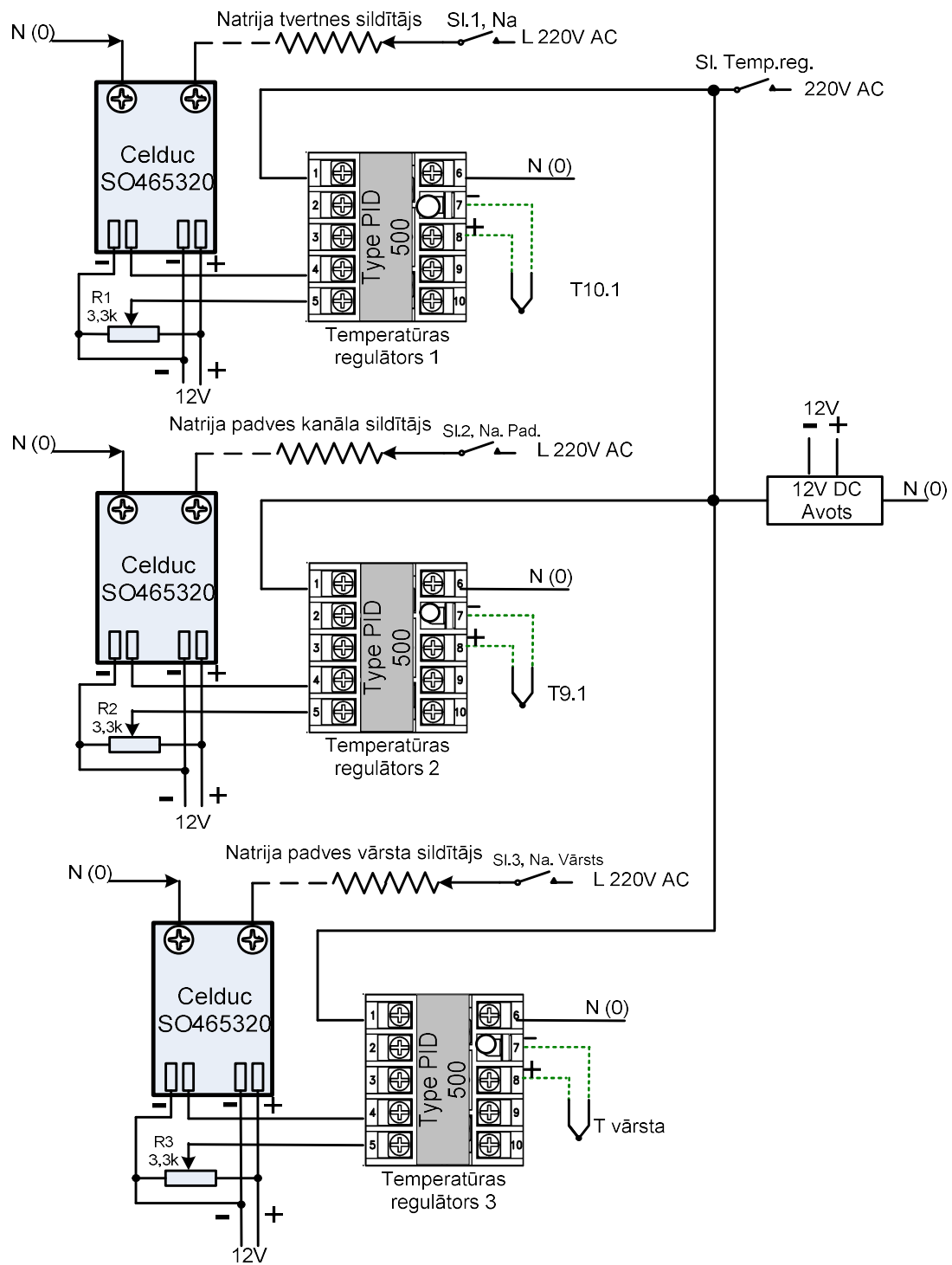
Transducers P20Z -01112008 tipa maiņsprieguma pārveidotājs ir pielietots shēmā, lai pārveidotu titāna kausēšanas elektriskā loka maiņsprieguma kvadrātisko vērtību normālā DC spriegumā, kas tiek pievadīts NI (National Instrument) modulim tā datorizētai mērīšanai. Pārveidotāja izejas ķēde ir galvaniski izolēta no ieejas maiņsprieguma un barošanas avota. Transducera korpuss ir izgatavots no plastmasas. Ierīces ārpusei ir skrūvju spaiļi vai savienojošais savienotājs ārējo ķēžu pievienošanai. Transducera parametri ir doti uz "Vadības un mērīšanas shēmas".

Titāna iegūšanas eksperimentālās iekārtas funkcionālo mezglu, plūsmas kanālu un ventiļu, temperatūra tiek nodrošināta ar firmas "Horst" sildītājiem, kuru strāva tiek regulēta ar firmas "Celduc SO465320" pusvadītāju relejiem, bet vajadzīgā temperatūra tiek uzturēta ar PID500, UK temperatūras regulatoriem, (sk. sildītāju strāvas regulatoru shēmas.)

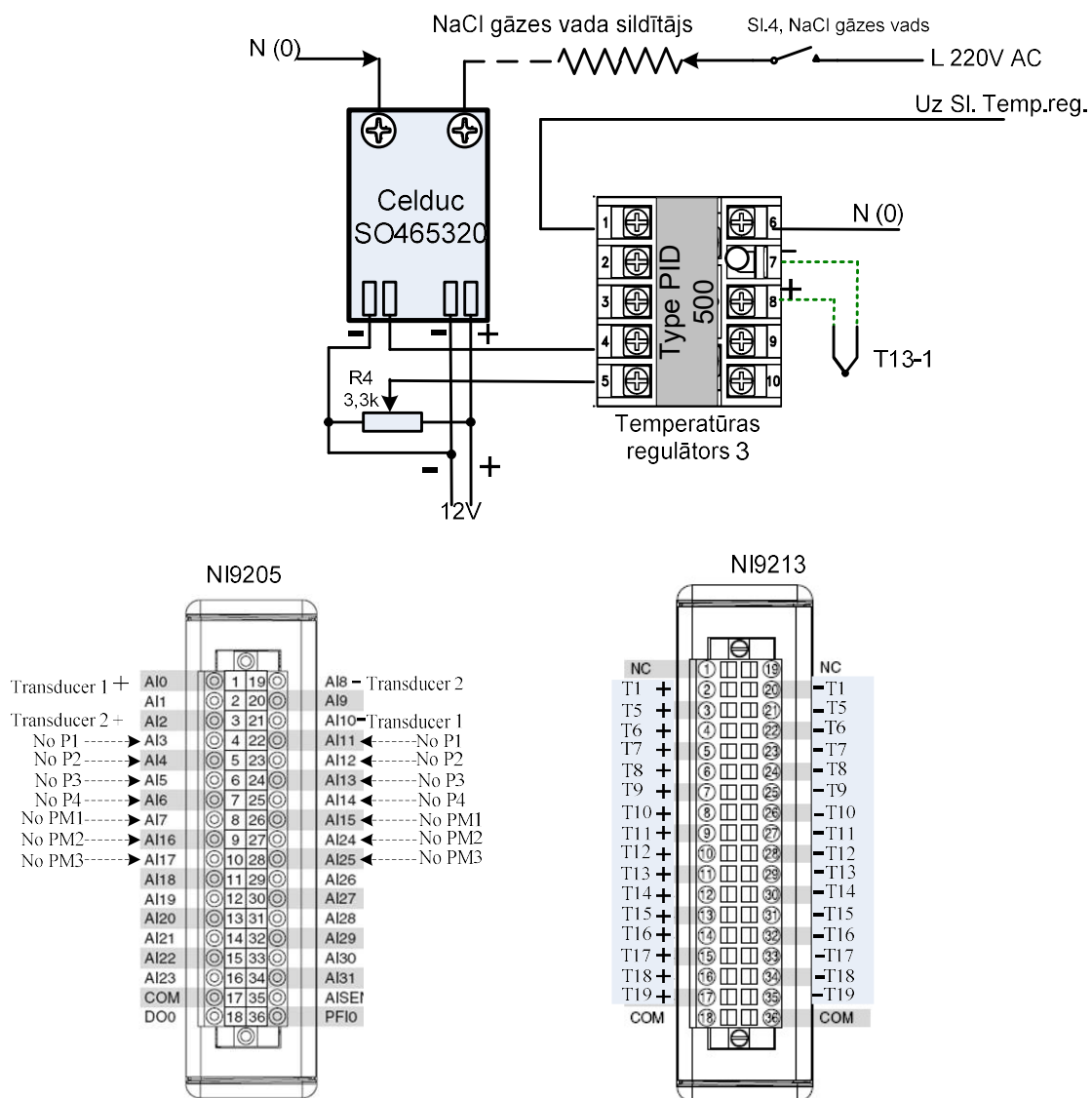


Žīm. 1.2. Vadīšanas un mērīšanas sistēma.

Sildītāju strāvas regulātoru 220V AC shēma



Zīm.1.3. Sildītāju strāvas regulātoru AC shēma.



Zīm.1.4. NI modulis.

Praktiski darbi, kas bija paredzēti Aktivitātē Nr.1 ir izpildīti. Aktivitātes beigu termiņš – 31.08.2018.

Aktivitāte Nr.2. Eksperimentālā validācija.

Ar **1.09.2018.** ir uzsākti darbi pie Aktivitātes Nr.2. Aktivitātes mērķis ir izstrādāt eksperimentālos protokolus titāna nogulsņējumu iegūšanai vienlaicīgi veicot titāna tetrahlorīda reducēšanu un elektrosārņu pārkausēšanu vienas iekārtas – tehnoloģiskā prototipa ietvaros.

Saskaņā ar veicamajiem darbiem Aktivitātes Nr.2 ietvaros atskaites periodā (septembris – oktobris) tika pārbaudīta tehnoloģiskā prototipa atsevišķu traktu un to mezglu funkcionālā darbība un vajadzīgo parametru nodrošināšana (vakuums, temperatūras režīmi, strāva, spriegums), kā arī veikts eksperiments ar kūstošu Mg elektrodu.

Aktivitāte Nr. 3. Mērījumi, modelēšana un raksturošana.

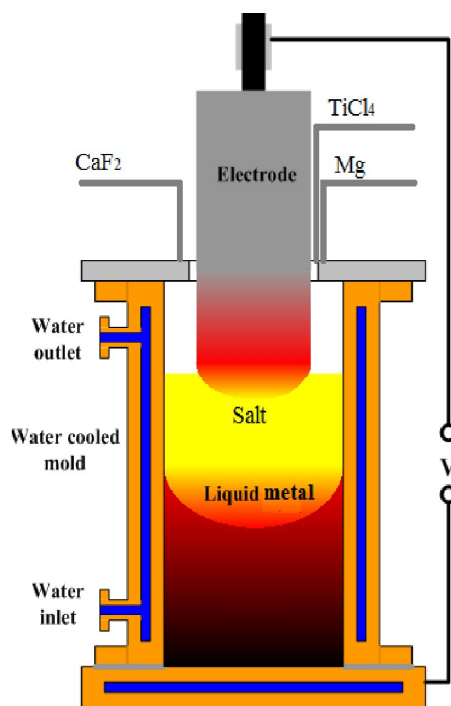
Titāna elektrosārņu kausēšanas matemātiskā modelēšana

Imants Kaldre (11.2018)

3.1. Numerical model of electroslag melting

Veikti skaitliskie aprēķini ar programmu Comsol 5.3. Līdz šim izstrādāti skaitliskie modeļi maza mēroga modeļa eksperimentam $H=120$ mm, $D=60$ mm. Veikti aprēķini temperatūras, strāvas un plūsmas sadalījumam reaktorā. Novērtēts naturālās konvekcijas ātrums un tā ietekme uz temperatūras sadalījumu.

Veikti novērtējumi elektrovirpuļplūsmai un Marangoni konvekcijas izraisītai kustībai tilpumā. Veikts skaitliskais modelis salīdzināšanai ar eksperimentu kad sāļu maisījums tiek kausēts ar titāna elektrodu, kas pamazām kust. Tas noved pie ievērojamas temperatūras atšķirības, kas izraisa intensīvu konvektīvo kustību un noved pie temperatūras pārdalīšanās reaktora kamerā. Konvektīvās kustības galvenais cēlonis ir sāļu blīvuma izmaiņa atkarībā no temperatūras. Parādīts, ka jau pie samērā mazas šķidrums plūsmas konvektīvā siltuma pārnese ir dominējošais siltumpārnese mehānisms starp elektrodu un sienu. Ir arī citi mazāk nozīmīgi kustības cēloņi, kā piemēram kustība dēļ strāvas un tās radītā magnētiskā lauka mijiedarbības, kā arī dēļ virsmas spraiguma atkarības no temperatūras (Marangoni efekts). Maza mēroga reakcijas kamera ir veidota, lai varētu vienā ciklā iegūt vienu molu titāna (49 g).



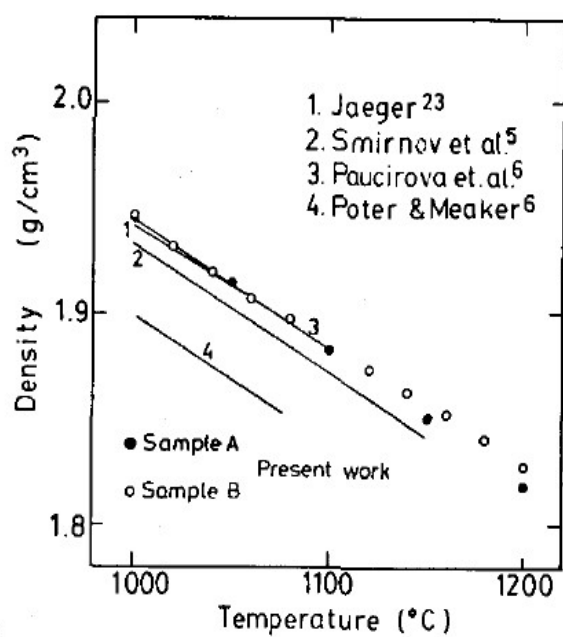
Zīm.3.1. Eksperimentālās iekārtas shēma

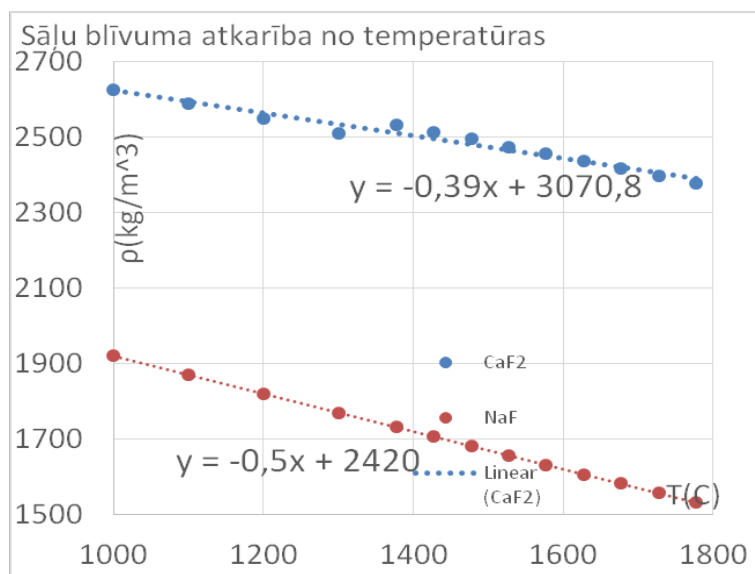
Skaitliskā modeļa pieņēmumi:

Cilindriska kamera D=60 mm, H=120 mm pilnībā aizpildīta ar šķidro sāli

Volframa elektrods d=14 mm iegremdēts sāli 50 mm no kameras apakšas

Kameras ārējās sienas ir fiksētā 100 C temperatūrā (tiek dzesētas ar ūdeni)



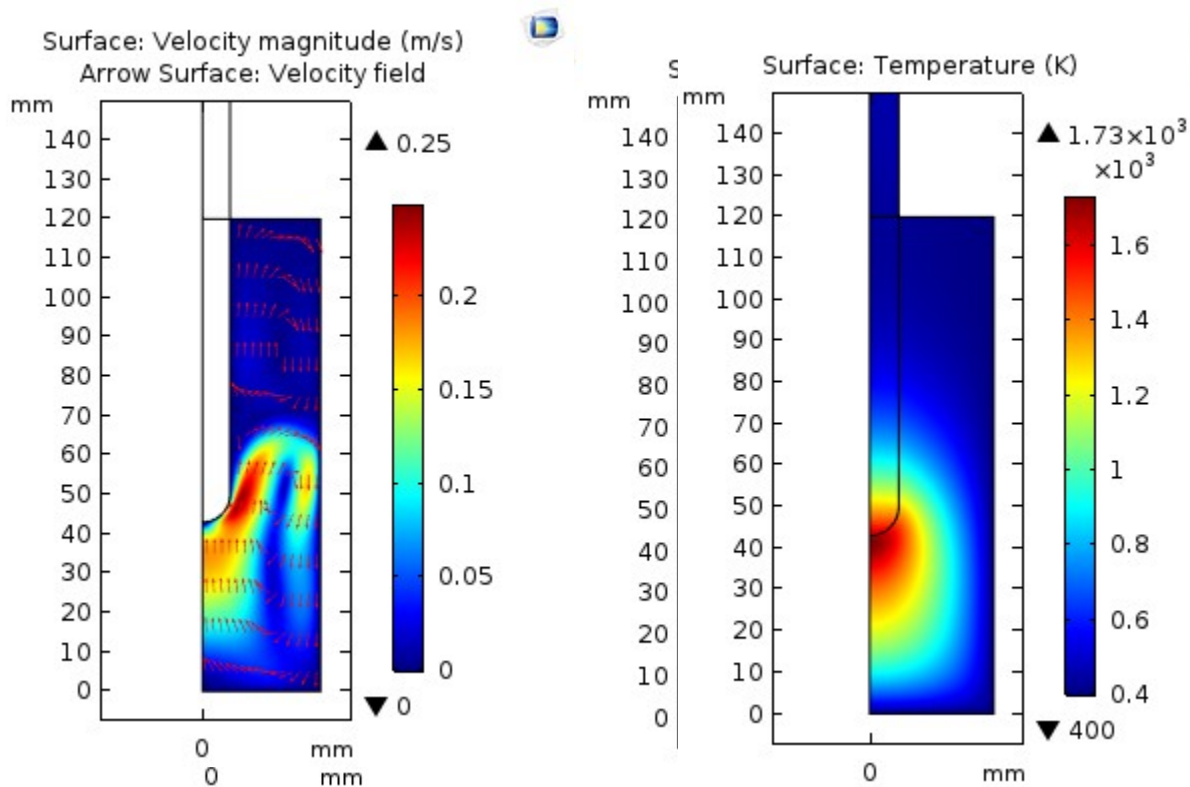


Zīm.3.2. Šķidro sāļu NaF un CaF₂ blīvuma atkarība no temperatūras.

Modelī izmantotas lineāras aproksimācijas:

$$\text{CaF}_2 = 3070 - 0.39 \cdot T, \text{NaF} = 2420 - 0.5 \cdot T$$

Aprēķinātais ātruma sadalījums cilindriskā reaktorā parādīts zīm. 3.3. Redzams, ka neatkarīgi no elektroda izvietojuma šķidruma pacelšanās notiek gar elektrodu, tad tas atdziest un gar ārējo ūdens

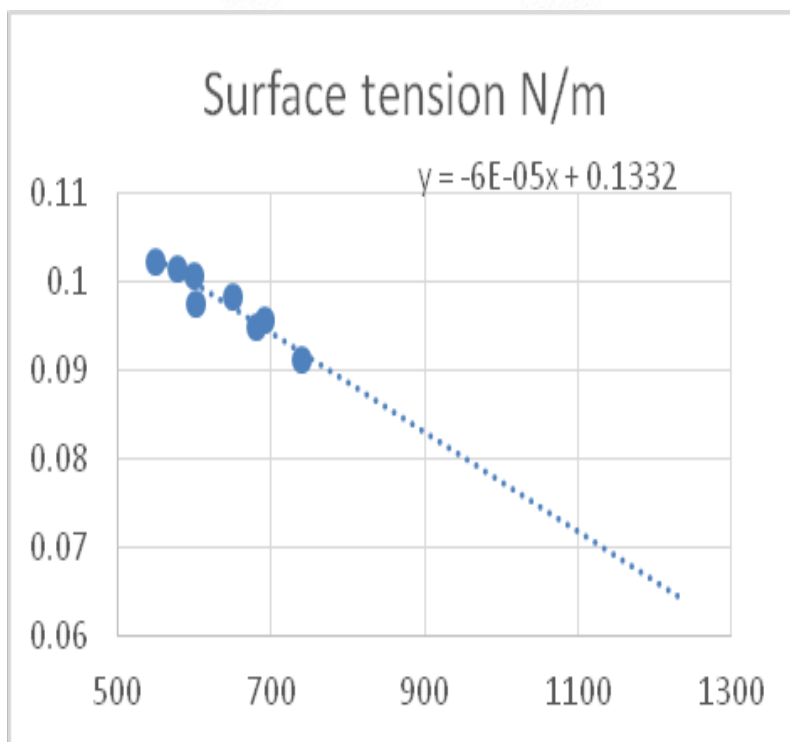


Zīm.3.3. Aprēķinātā šķidro sāļu plūsma un temperatūra reaktora kamerā

Marangoni efekts notiek, ja saskarnē starp divām fāzēm ir virsmas spraiguma gradients - vairumā gadījumu - šķidrums un gāzes saskarni. Virsmas spraigums parasti mainās sakarā ar šķidrums koncentrācijas, virsmaktīvās vielas koncentrācijas un temperatūras izmaiņām visā saskarnē, zīm.3.4.

Table II. Surface Tension Measurements of 6.1 Wt. % NaF-17.7 Wt. % NaCl-76.2 Wt. % NaI Eutectic

Temperature, ° C.	Surface Tension, Dynes/Cm.
550	102.3
578	101.5
600	100.5
602	97.4
651	98.2
681	94.8
693	95.5
741	91.0

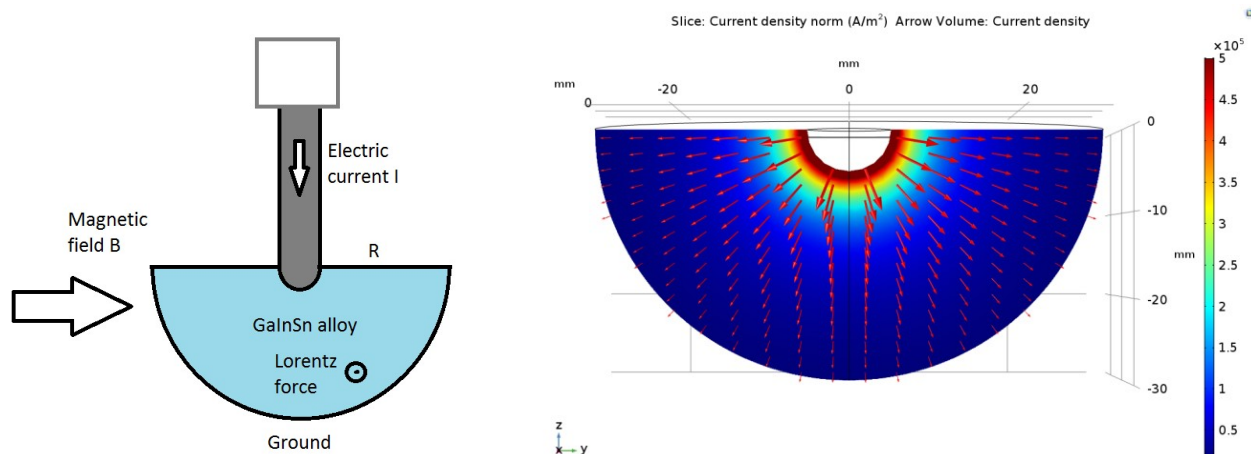


Zīm.3.4. NaF-NaCl sāļu virsmas spraigums

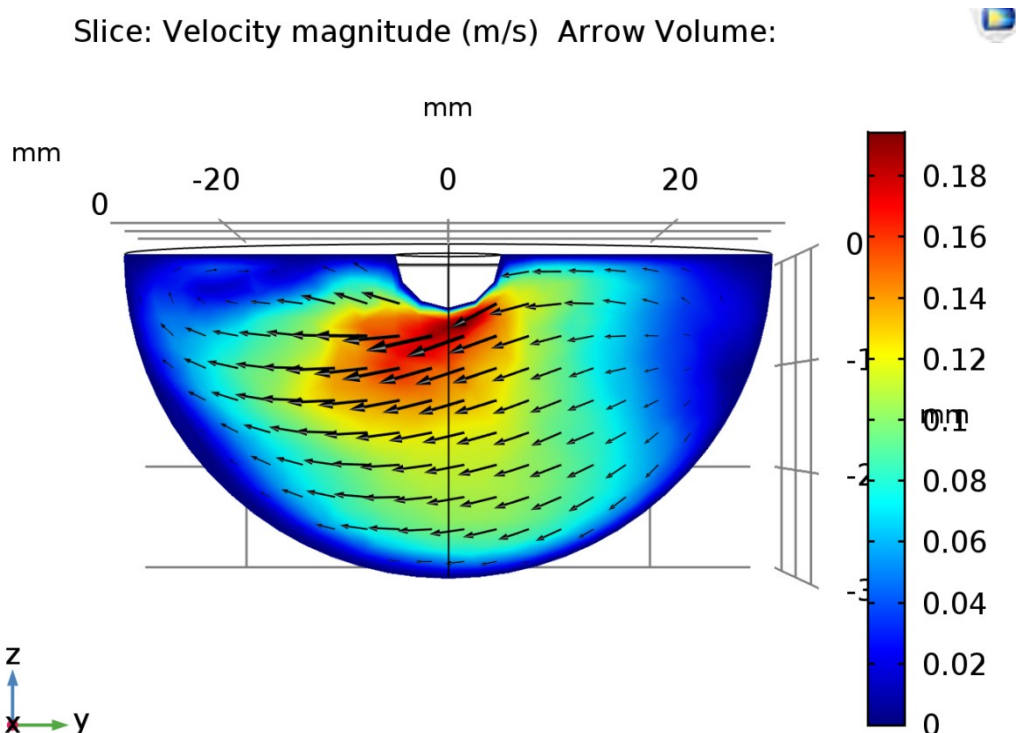
$$\text{virsmas spraigums} = 0.133 - 6 \cdot 10^{-5} \cdot T \text{ (N/m)}$$

3.2. Ārējā magnētiskā lauka ietekme uz šķidruma konvekciju elektrosārņu procesā.

Izvēlēta pussfēriskā ģeometrija no temperatūras apsvērumiem, jo uz ūdens dzesējamās sienas ir cieto sāļu slānis, kas aizkavē siltumatdevi.

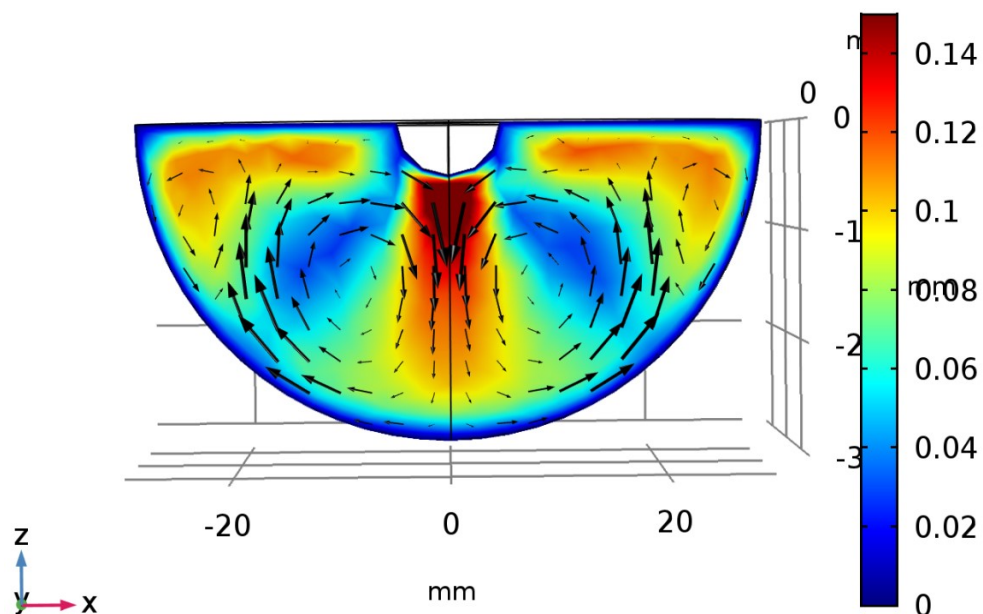


Modeļa eksperimentā elektromagnētiski orientētās plūsmas skaitliskā simulācija. Gar x asi vērsts viendabīgs magnētiskais lauks 0,1 T. Izstrādāta 3D skaitliskā simulācija programmā Comsol 5.3 plūsmas aprēķinam.



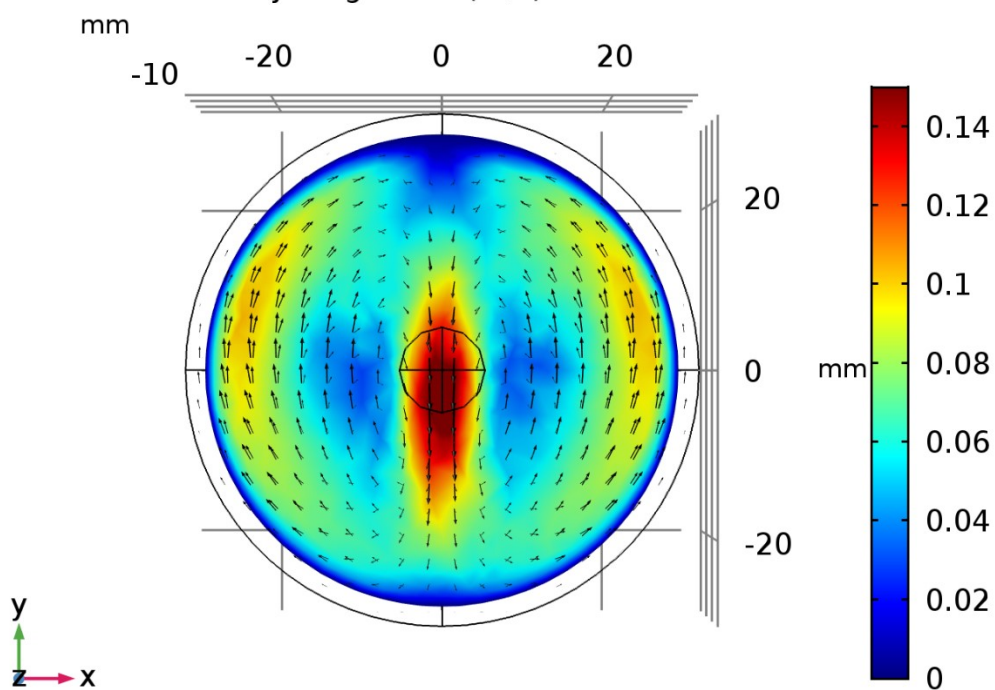
Zīm. 3.5. Ātruma izplatība ZY plaknē (perpendikulāri magnētiskajam laukam)

Slice: Velocity magnitude (m/s) Arrow Volume:



Zīm.3.6. Ātruma sadalījums ZX plaknē (B pa x ass)

Slice: Velocity magnitude (m/s) Arrow Volume:



Zīm.3.7. Ātrums pie vidējā plūsmas augstuma

Redzams, ka iegūtā ātruma vērtības pat samērā neliela ārējā lauka klātbūtnē ir ievērojamas, kas nozīmē, ka strāvas pievadu vai elektrisko komponentu radītais lauks noteiktos apstākļos var ietekmēt ātruma sadalījumu reaktorā, zīm. 3.5 – 3.7.

3.3. Elektrosārņu pārkausēšanas modelēšana

Imants Kaldre, Kārlis Gailītis, Linards Goldšteins

3.3.1. Ievads

Ti elektroda un Ti švammes pārkausēšana ir sarežģīts multifizikāls process. Teorētiski to var sadalīt vairākās fizikālās problēmās, kas ir savstarpēji saistītas:

1. Elektrostatika/Elektrosildīšana
2. Siltumpārnese
3. Kristalizācija/Fāzu pāreja
4. Hidrodinamika

Jāņem vērā, ka lielu temperatūras starpību dēļ dažādos reaktora apgabalos, var krasi atšķirties materiālu īpašības (blīvums, siltum- un elektro- vadīšanas koeficienti, siltumietilpība utml.).

Viss iepriekš minētais noved pie stipri nelineāras diferenciālvienādojumu sistēmas, kur atsevišķas uzdevuma daļas var aplūkot analītiski, taču praktiski jārisina izmantojot skaitliskās metodes. Šajā darbā lietota programma COMSOL Multiphysics 5.2.

3.2. Apskatāmās problēmas apraksts

3.2.1. Modeļa ģeometrija

Kā vienkārša modeļa ģeometrija tiek apskatīta aksiālsimetriska sistēma, kas sastāv no:

(Konstrukcijas materiālu sienas (nerūsošais tērauds 304 vai 316) netiek apskatītas).

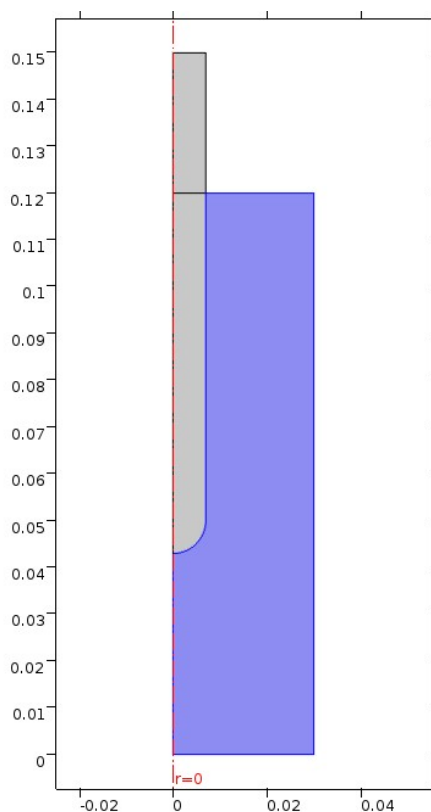
1. Elektroda: Ti - titāna (pārkausējams) vai W - volframa (nepārkausējams)
2. Sāļiem CaF_2 (izmanto praksē) vai NaCl (projekta ietvaros izmantots kā modelējošs materiāls)

Reaktora izmēri:

- a) Garums: 120 mm
- b) Rādiuss: 30 mm

Elektroda izmēri:

- a) Garums: 107 mm
- b) Rādiuss: 7 mm



Zīm.3.8. Modeļa ģeometrija. Ar zilu attēlots CaF_2 sāļu apgabals, ar pelēku – elektrods (Ti)

3.3.2. Materiālu fizikālās īpašības

Nozīmīgākais modeļa materiāls ir kalcija fluorīds (CaF_2), caur kuru tiek realizēta titāna pārkausēšana un kura fizikālās īpašības lielā mērā nosaka pārkausēšanas procesu. Samērā liels kušanas un vārēšanās temperatūru diapazons (1119 [K]) ļauj izmantot šo sāli dažādu metālu pārkausēšanai.

CaF_2 kušanas temperatūra ir: $T_{\text{melt}} = 1691$ [K] (1418 [C])

CaF_2 vārēšanās temperatūra ir: $T_{\text{boil}} = 2810$ [K] (2533 [C])

Tā kā CaF_2 šajā procesā nav paredzēts izmantot gāzveida fāzē, zemāk apkopotas šī materiāla īpašības cietā un šķidrā veidā, izmantojot polinomiālu aproksimāciju temperatūras atkarībai ne lielāku par 2. kārtu, piem.:

$$k = AT^2 + BT + C$$

Tabula 1 CaF_2 īpašības cietā fāzē

Īpašība:	A	B	C	Mērvienība:
Blīvums,			3180	kg/m^3
Īpatnējā siltumietilpība, C_p		0.3791	777.42	J/kg/K
Siltumvadāmība, k	2.38E-6	-7.62E-3	7.24	W/m/K
Elektrovadāmība			-	S/m

Tabula 2 CaF₂ īpašības šķidrā fāzē

Īpašība:	A	B	C	Mērvienība:
Blīvums,		-0.391	3179	kg/m ³
Īpatnējā siltumietilpība, C_p			1678	J/kg/K
Siltumvadāmība, k			0.1	W/m/K
Siltumvadāmība eff., k_{eff}			6	W/m/K
Elektrovadāmība,		-0.03	710.94	S/m
Viskozitāte,			0.017	Pa.s

Tabulās 1 un 2 apkopotā informācija tālāk prezentēta grafiskā veidā zīm. 3.9. – 3.12., kā atkarība no temperatūras.

Apskatot CaF₂ siltumietilpību, jāņem vērā, ka izkausēšanas process sastāv no 2 etapiem:

1. vispirms pie temperatūras $T_{\alpha\beta} = 1424 \pm 20$ [K] notiek fāzu pāreja no α uz β kristālisko struktūru, kuras latentais siltums ΔH ir 4.8 ± 0.4 [kJ/mol] jeb 61.5 [kJ/kg]
2. Pēc tam pie temperatūras $T_{melt} = 1691 \pm 5$ [K] notiek fāžu pāreja no β kristālisko struktūru uz šķidrumu, kuras latentais siltums ΔH ir 29.7 ± 0.4 [kJ/mol] jeb 380.4 [kJ/kg]

Modeļu vienkāršošanai abas fāzu pārejas apvieno un nepieciešamais izkausēšanas siltums ir:

$$\Delta H_{melt} = 441.9 \left[\frac{kJ}{kg} \right]$$

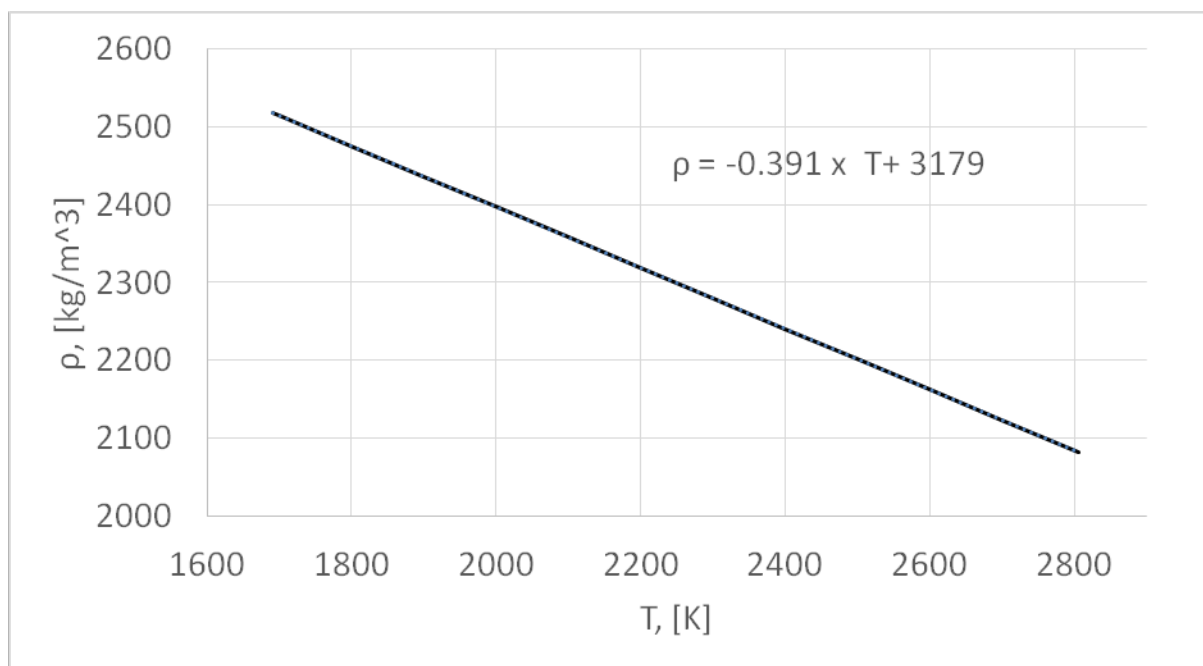
Līdz ar to var novērtēt siltumietilpības izmaiņu kušanas punktā:

$$\Delta C_p = (C_{p_{liquid}} - C_{p_{solid}}) = \frac{\Delta H_{melt}}{T_{melt}} = 261 \left[\frac{J}{kg * K} \right]$$

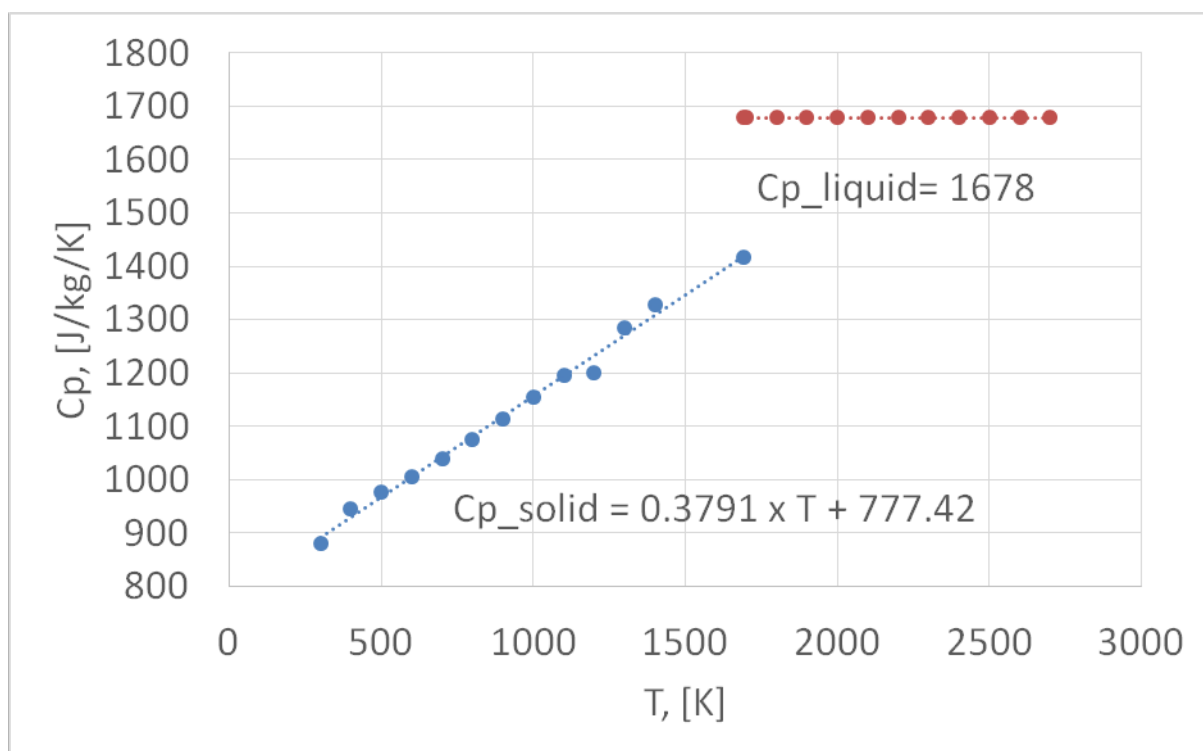
Šķidrā fāzē CaF₂ siltumietilpība ir praktiski konstanta līdz ar to modelī izmanto no datiem pieejamo vidējo vērtību:

$$C_{p_{liquid}} = 1678 \left[\frac{J}{kg * K} \right]$$

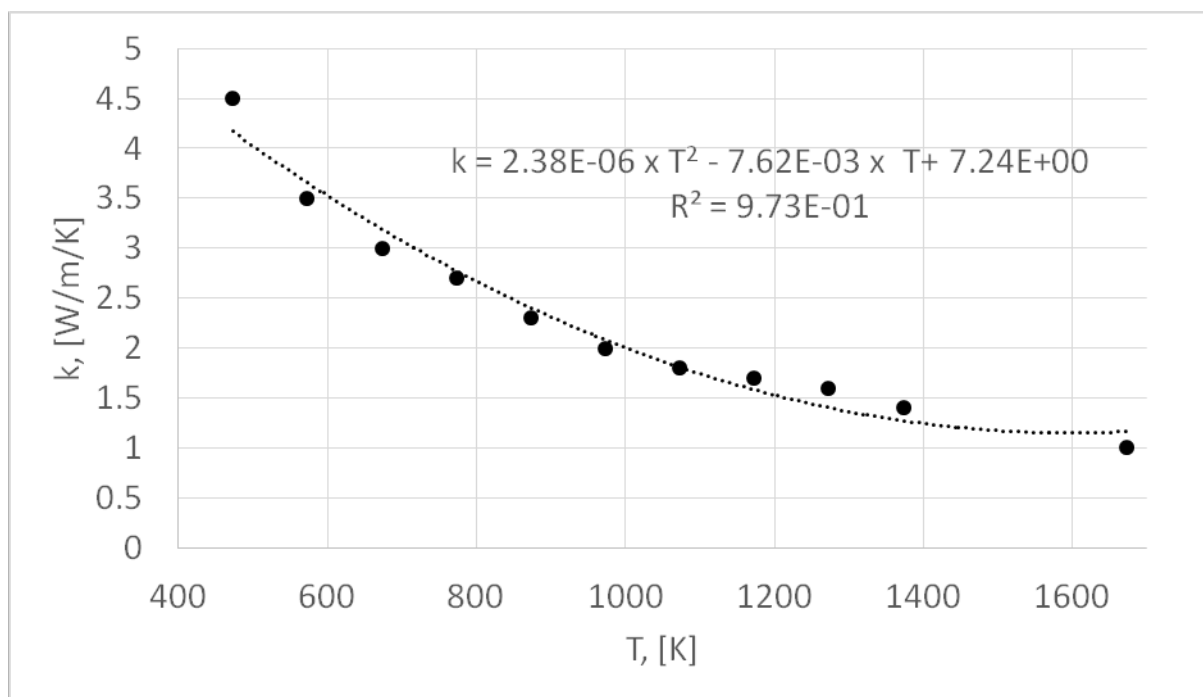
Izmantojot fāzu pārejas noteikto siltumietilpības lēcieni iegūst sakarību siltumietilpībai CaF₂ cietā stāvoklī ($C_{p_{solid}}$), ko izmanto modelī (Fig.3.10.):



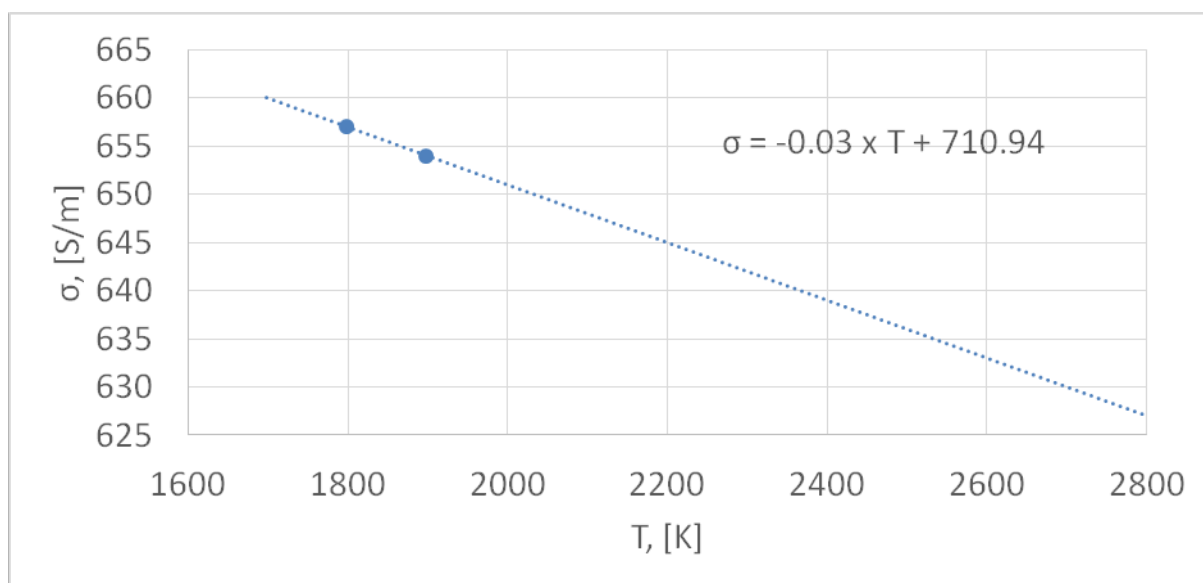
Zīm.3.9. CaF_2 blīvuma atkarība no temperatūras.



Zīm.3.10.. CaF_2 siltumietilpības atkarība no temperatūras.



Zīm.3.11. CaF_2 siltumvadīšanas koeficienta atkarība no temperatūras.



Zīm.3.12. CaF_2 elektrovadāmības atkarība no temperatūras.

Tabula 3 Cieta Ti īpašības

Īpašība:	A	B	C	Mērvienība:
Blīvums, ρ			4500	kg/m ³
Īpatnējā siltumietilpība, c_p			600	J/kg·K
Siltumvadāmība, λ			20	W/m·K
Elektrovadāmība, σ			$2.3 \cdot 10^6$	S/m

3.4. Sistēmas bezdimensionālo skaitļu novērtējums.

Nosakot fizikālā procesa bezdimensionālos skaitļus var spriest par tā gaitu un identificēt dominējošos mehānismus, kas pamatā noteiks fizikālā procesa darbu. Novērtējot sistēmai raksturīgos bezdimensionālos skaitļus lieto šādas parametru vērtības CaF₂:

Tabula 4. Sistēmas raksturīgie parametri

Parametrs:	Vērtība:	Mērvienība:
Blīvums, ρ	2300	kg/m ³
Viskozitāte, μ	0.017	Pa.s
Raksturīgais izmērs, R	0.03	m
Raksturīgais ātrums, v	0.1	m/s
Siltumvadāmība, k	0.1	W/K/m
Siltumietilpība, C_p	1680	J/K/kg

Vispirms apskata šķidruma kustību. Reynolds skaitlis Re raksturo šķidruma inerces un viskozo spēku attiecību un nosaka šķidruma kustības veidu:

1. $Re \ll 1$: Viskoza jeb Stoksa plūsma
2. $Re = 100 \dots 2400$: Lamināra plūsma
3. $Re > 3000$: Turbulenta plūsma

Pieņemot, ka siltumkonvekcijas radītais ātrums nebūs lielāks par 0.1 [m/s] un novērtētais Reynolds skaitlis izkausētajiem sārņiem (CaF₂) ir ap 400, tādēļ paredzams, ka šķidruma plūsma būs lamināra.

$$Re = \frac{\rho R v}{\mu} = \frac{2300 * 0.03 * 0.1}{0.017} = 403$$

Novērtētais Peklē skaitlis, kas raksturo konvektīvās un difūzās siltum pārneses attiecību, ir pietiekoši liels – ap 10⁴, lai varētu secināt, ka pat mazas šķidruma kustības gadījumā konvekcija krietni dominē pār difūziju.

$$Pe = \frac{\rho R v C_p}{k} = \frac{2300 * 0.03 * 0.1 * 1680}{0.1} = 1.16e4$$

Novērtētais Releja skaitlis, kas raksturo termokonvekcijas attiecību pret difūziju, ir ļoti liels. Līdz ar to dabiskā konvekcija iestāsies ar ļoti lielu varbūtību (kritiskais $Ra = 1000 \dots 2000$):

$$Ra = \frac{R^3 \Delta \rho g C_p \rho}{\mu k} = \frac{0.03^3 * 438 * 9.81 * 1680 * 2300}{0.017 * 0.1} = 2.62e8$$

Augstāk minēto var apkopot sekojošā veidā, no kā arī izriet turpmākie secinājumi par modeļa izveidi un pieņēmumiem:

1. Uzsākot sāļu elektrokausēšanu, šķīdumā radīsies kustība dabiskās konvekcijas dēļ
2. Šo šķīduma kustību var raksturot kā lamināru
3. Šādas kustības rezultātā dominējošie ir konvektīvie siltumpārneses procesi

3.5. Skaitliskie modeļi COMSOL Multiphysics 5.2

Šajā nodaļā īsumā apkopoti fizikālie modeļi, kādi tiek izmantoti skaitlisko aprēķinu paketē COMSOL Multiphysics 5.2, kas izmanto galīgo elementu metodi. Tālāk īsumā apskatīti vienādojumi un robežnosacījumi, kas tiek lietoti skaitliskajos aprēķinos.

3.5.1. Elektrostatika

Elektrostatikas vienādojumu sistēmu veido strāvas saglabāšanās, elektriskā potenciāla un Oma vienādojumi:

$$\nabla \cdot \mathbf{j} = 0$$

$$\mathbf{E} = -\nabla U$$

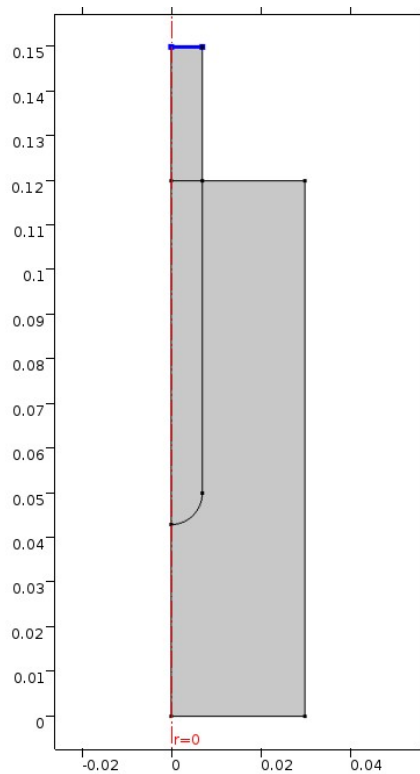
$$\mathbf{j} = \sigma \mathbf{E}$$

No tiem var izteikt Laplasa vienādojumu elektriskajam potenciālam U (sprieguma):

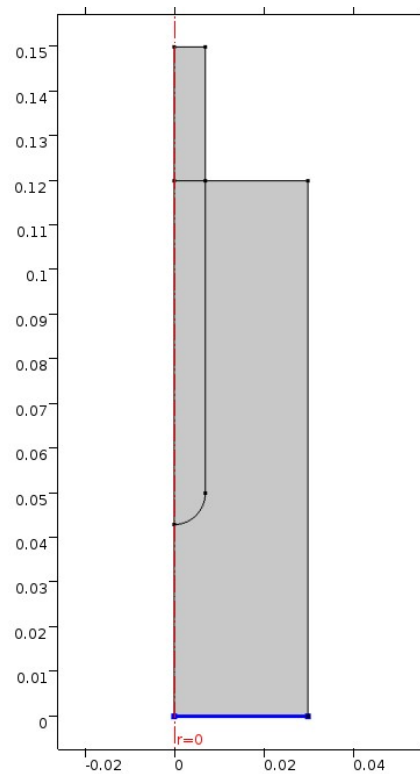
$$\Delta U = 0$$

Jeb aksiālsimetriskā sistēmā:

$$\frac{\partial^2 U}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial U}{\partial r} + \frac{\partial^2 U}{\partial z^2} = 0$$



Zīm. 3.13. Potenciāla robežnosacījums elektrodam:
 $U = 15 \text{ [V]}$



Zīm 3.14.. Potenciāla robežnosacījums zemei:
 $U = 0 \text{ [V]}$

Īpatnējo Džoula siltumu aprēķina:

$$q_H = \frac{j^2}{\sigma}$$

Modelī tiek lietoti robežnosacījumi potenciālam, fiksējot konstantu vērtību uz virsmas, zīm. 3.13.- 3.14. :

$$U = U_0$$

3.5.2. Siltumpārnese

Siltumpārnesei modelē ar skalāru konvekcijas – difūzijas vienādojumu temperatūrai:

$$\rho C_p \left[\frac{\partial T}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla T \right] = k \Delta T + q_H$$

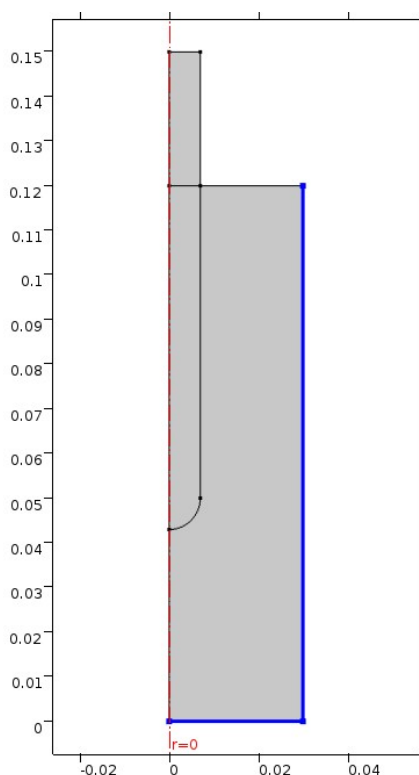
Jeb

$$\rho C_p \left[\frac{\partial T}{\partial t} + u_r \frac{\partial T}{\partial r} + u_\varphi \frac{1}{r} \frac{\partial T}{\partial \varphi} + u_z \frac{\partial T}{\partial z} \right] = k \left[\frac{\partial^2 T}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial T}{\partial r} + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2 T}{\partial \varphi^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial z^2} \right] + q_H$$

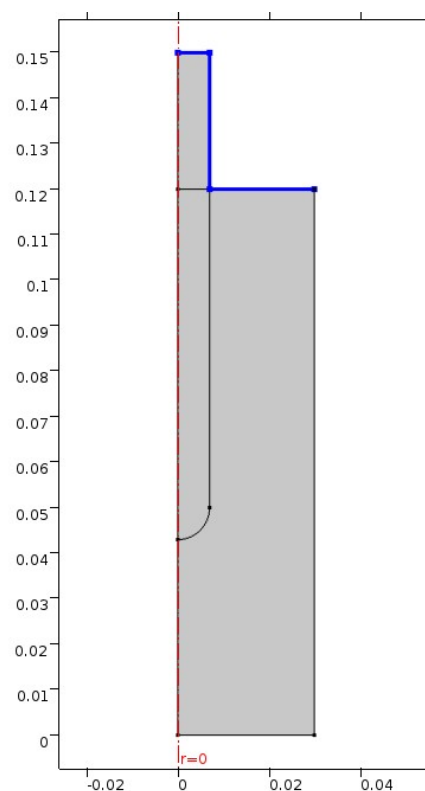
Stacionārā, aksiālsimetriskā gadījumā:

$$\rho C_p \left[u_r \frac{\partial T}{\partial r} + u_z \frac{\partial T}{\partial z} \right] = k \left[\frac{\partial^2 T}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial T}{\partial r} + \frac{\partial^2 T}{\partial z^2} \right] + q_H$$

Izmantotie robežnosacījumi parādīti zīm.3.15. – 3.16.



Zīm.3.15. Temperatūras robežnosacījums:
 $T = 100 [C]$



Zīm.3.16. Siltumizolācijas
robežnosacījums: $\frac{\partial T}{\partial n} = 0$

3.5.3. Fāzu pāreja

Fāzu pārejas modelī izmanto t.s. šķietamās siltumietilpības (angl. *apparent heat capacity*) pieeju. Tā vietā, lai pievienotu enerģijas vienādojumā latentu siltumu tieši pie kušanas temperatūras T_m uzskata, ka fāzu pāreja notiek temperatūras intervālā:

$$T_m - \frac{\Delta T}{2} \dots T_m + \frac{\Delta T}{2}$$

Šajā intervālā materiāla fāze tiek definēta ar funkciju $\theta(T) = [0 \dots 1]$, kur:

$$\theta\left(T < T_m - \frac{\Delta T}{2}\right) = 0$$

$$\theta\left(T_m - \frac{\Delta T}{2} \leq T \leq T_m + \frac{\Delta T}{2}\right) = [0 \dots 1]$$

$$\theta\left(T > T_m + \frac{\Delta T}{2}\right) = 1$$

Definē θ_1 un $\theta_2 = (1 - \theta_1)$ kā attiecīgo fāžu 1 un 2 daļas. Tad efektīvais blīvums pierakstāms kā:

$$\rho = \theta_1 \rho_1 + \theta_2 \rho_2$$

Efektīvā siltumvadāmība:

$$k = \theta_1 k_1 + \theta_2 k_2$$

Efektīvā siltumietilpība:

$$C_{p,ef} = \frac{1}{\rho} (\theta_1 \rho_1 C_{p1} + \theta_2 \rho_2 C_{p2})$$

Siltumietilpības izmaiņa, kas apraksta latentā siltuma izdalīšanos tiek aproksimēta kā:

$$C_L(T) = \Delta H \frac{d\alpha_m}{dT}$$

Kur α_m ir masas daļa:

$$\alpha_m = \frac{1}{2} \frac{\theta_2 \rho_2 - \theta_1 \rho_1}{\rho}$$

No šejienes redzams, ka tīrai pirmajai fāzei: $\alpha_m = -\frac{1}{2}$, bet tīrai otrajai fāzei: $\alpha_m = \frac{1}{2}$, un, apskatot fāzu pāreju minētajās temperatūru robežās, latentais siltums saglabājas:

$$\int_{T_m - \frac{\Delta T}{2}}^{T_m + \frac{\Delta T}{2}} C_L(T) dT = \int_{T_m - \frac{\Delta T}{2}}^{T_m + \frac{\Delta T}{2}} \Delta H \frac{d\alpha_m}{dT} dT = \Delta H \left([\alpha_m]_{T_m + \frac{\Delta T}{2}} - [\alpha_m]_{T_m - \frac{\Delta T}{2}} \right) = \Delta H$$

Līdz ar to šķietamā siltumietilpība tiek definēta kā:

$$C_p = \frac{1}{\rho} (\theta_1 \rho_1 C_{p1} + \theta_2 \rho_2 C_{p2}) + \Delta H \frac{d\alpha_m}{dT}$$

No siltumpārnēses vienādojuma izriet, ka stacionārā gadījumā šķietamās siltumietilpības efekts izpaužas, ja ir nodefinēts ātruma sadalījums. Nulles ātruma gadījumā temperatūras sadalījuma izmaiņas, izmantojot šo modeli, notiks efektīvā siltumvadāmības koeficienta dēļ.

3.5.4. Hidrodinamika

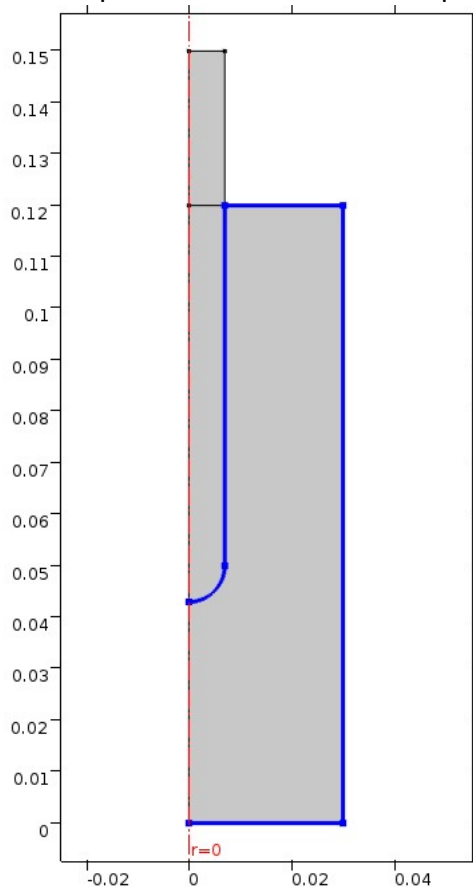
Šķidruma kustību apraksta Navjē-Stoksa vienādojums, kam kā tilpuma spēks tiek pievienots smaguma spēks ρg , kas nevienmērīgā temperatūras sadalījuma dēļ darbojas kā siltumkonvekcijas avots. Stacionārā gadījumā, vienādojums pierakstāms:

$$\rho(u \nabla)u = -\nabla p + \mu \Delta u + \rho g$$

Jā atzīmē, ka materiālu īpašības blīvums ρ (un tādējādi smaguma spēks) un viskozitāte μ ir funkcijas no temperatūras. Ar ātruma sadalījumu un minētajām īpašībām tiek sasaistīti siltumpārnēses un hidrodinamikas vienādojumi.

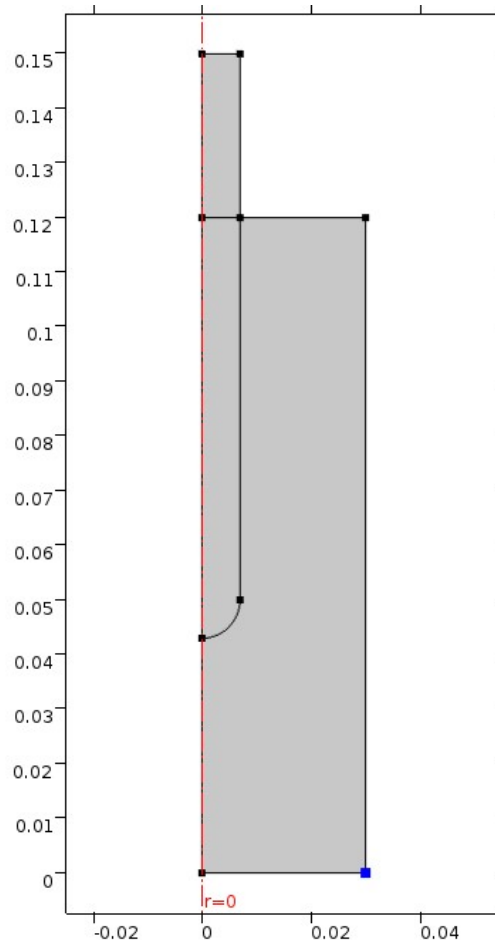
Lai aprakstītu cieto vidi, viskozitātei tiek izmantota soļa funkcija, kas paredz, ka sasniedzot temperatūru zemāku par 1691 [K] šķidrā CaF₂ viskozitāte 100 [K] intervālā pieaug 3000 reizes.

Tiek izmantoti pielipšanas robežnosacījumi uz šķidruma robežām ($u = 0$), zīm. 17.kā arī fiksēta spiediena vērtība konkrētā punktā ($p = 0$), zīm.18.



Zīm.3.17 . Pielipšanas robežnosacījums:

$$u = 0 \left[\frac{m}{s} \right]$$



Zīm.18. Spiediens fiksēts punktā: $p = 0$ [Pa]

3.5.5.Citi skaitlisko aprēķinu pieņēmumi

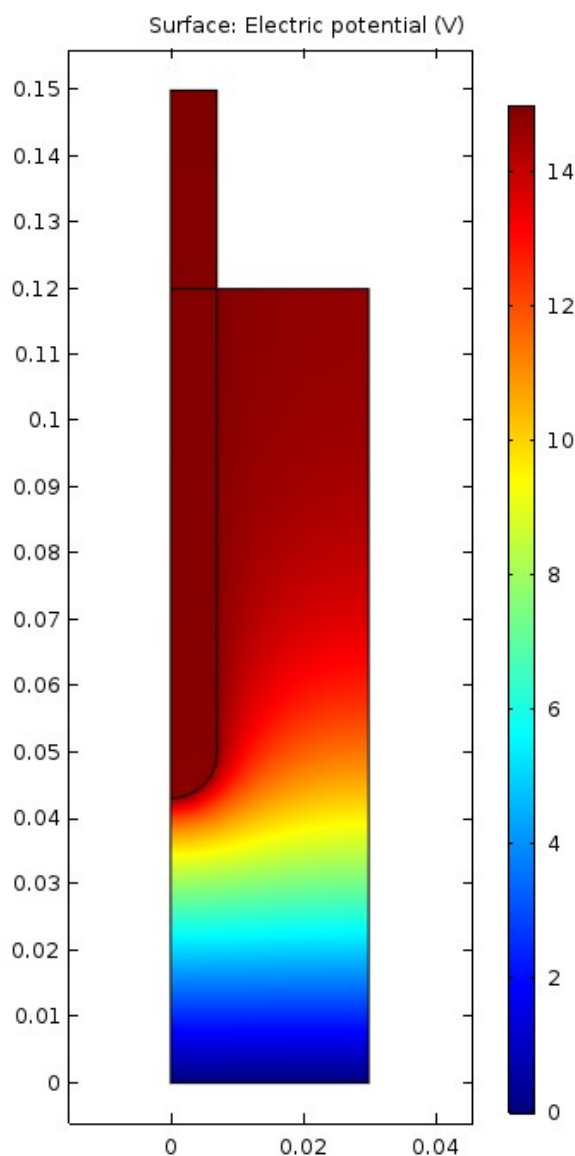
Fāzu pārejas procesā siltumvadāmība mainās lēcienveidīgi un aptuveni par kārtu, tas rada grūtības precīzas kristalizācijas frontes iegūšanai un rezultāta konverģencei kopumā, jo uz frontes veidojas lieli temperatūras gradienti. Viens no risinājumiem ir temperatūras diapozonas ΔT palielināšana, tādējādi padarot fāzu pārejas zonu plašāku. Tas nozīmē arī palielināt jeb *izsmērēt* apgabalu, kurā izdalās pārejas siltums.

Pašreizējā skaitliskajā modelī elektrosildīšana un siltumpārnese ir “cieši” sasaistīta, savukārt hidrodinamika - “vāji”. Tas nozīmē, ka vispirms tiek aprēķināti siltumpārneses procesi un, izmantojot iegūto temperatūra sadalījumu, pēc tam tiek aprēķināts ātruma lauks.

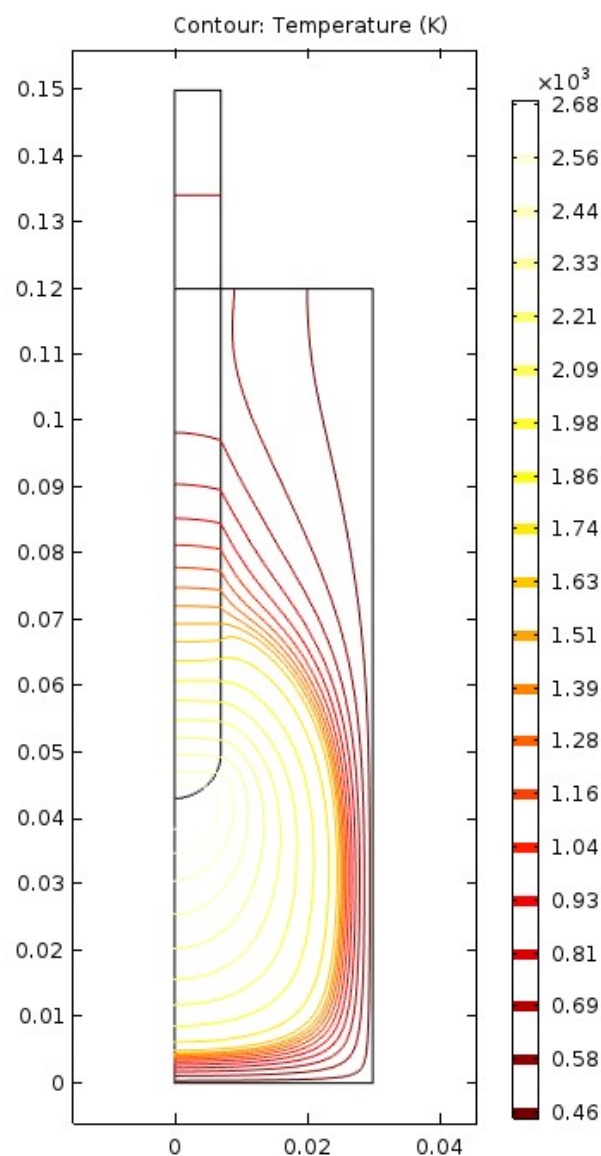
Nemot vērā lielo siltumkonvekcijas ietekmi uz procesu, sākotnējiem aprēķiniem tiek lietota paaugstināta efektīvā siltumvadītspēja šķidram CaF_2 : $k = 10$ [W/m/K].

4. Rezultāti

Zemāk atainoti aprēķinu rezultāti. Vispirms zīm.. 3.19. parādīts elektriskā potenciāla sadalījums un zīm. 3.20.. iegūtie temperatūras kontūri. Redzams, ka pie izvēlētajiem parametriem – uzdotās sprieguma starpības un efektīvās CaF_2 siltumvadāmības, tiks izkausēts gana liels CaF_2 apjoms, taču maksimālā temperatūra nepārsniedz vārīšanās sliekšni.

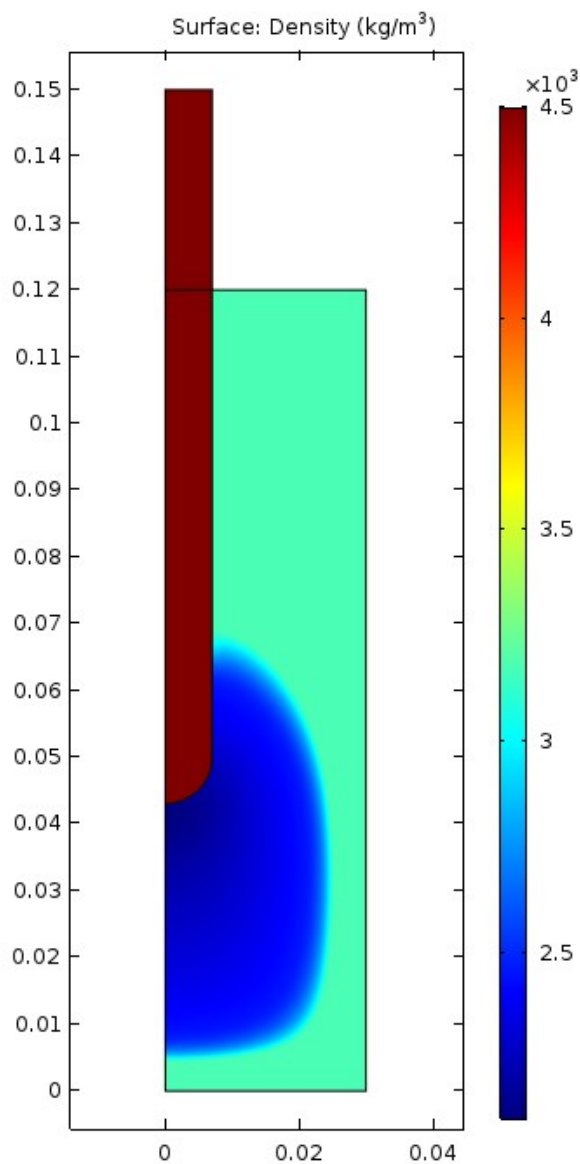


Zīm.3.19. Elektriskā potenciāla sadalījums

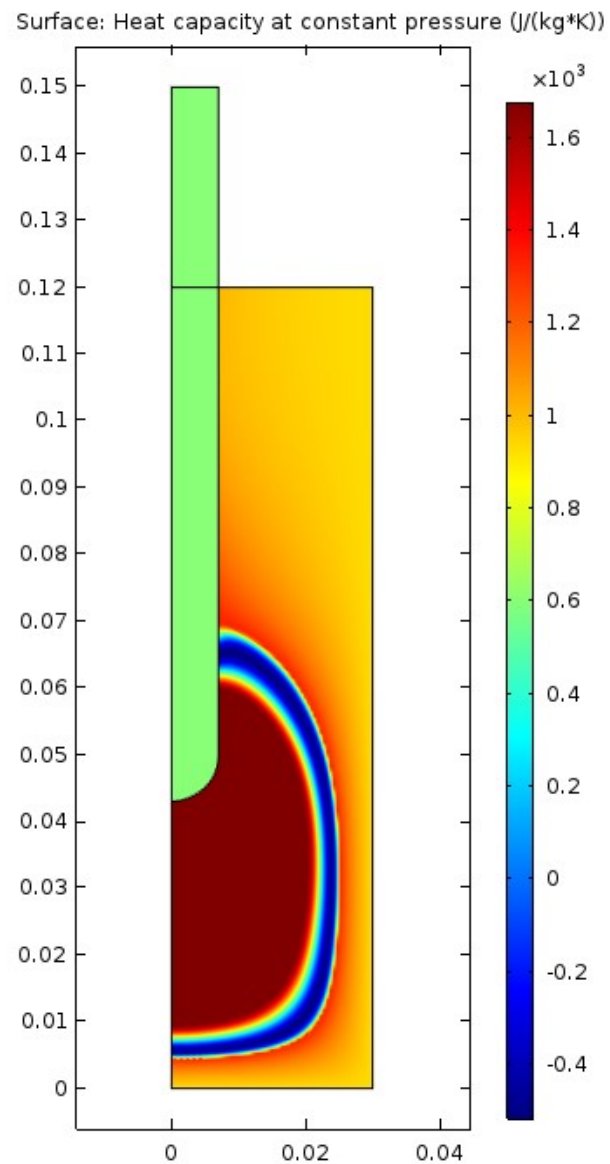


Zīm.3.20. Temperatūras sadalījums

Ievērojamās kausējuma temperatūras starpības dēļ tiek iegūts blīvuma sadalījums, zīm.3.21., kas principā arī ieskicē 3 raksturīgās zonas : cieto elektrodu (brūns), cieto CaF_2 (zaļš) un izkausēto CaF_2 (zils). Zīm. 3.22. parādīta efektīvā siltumietilpība. Redzams, ka uz kristalizācijas robežas tā pat kļuvusi negatīva, jo uz kušanas frontes tiek aizvadīts papildus siltums.

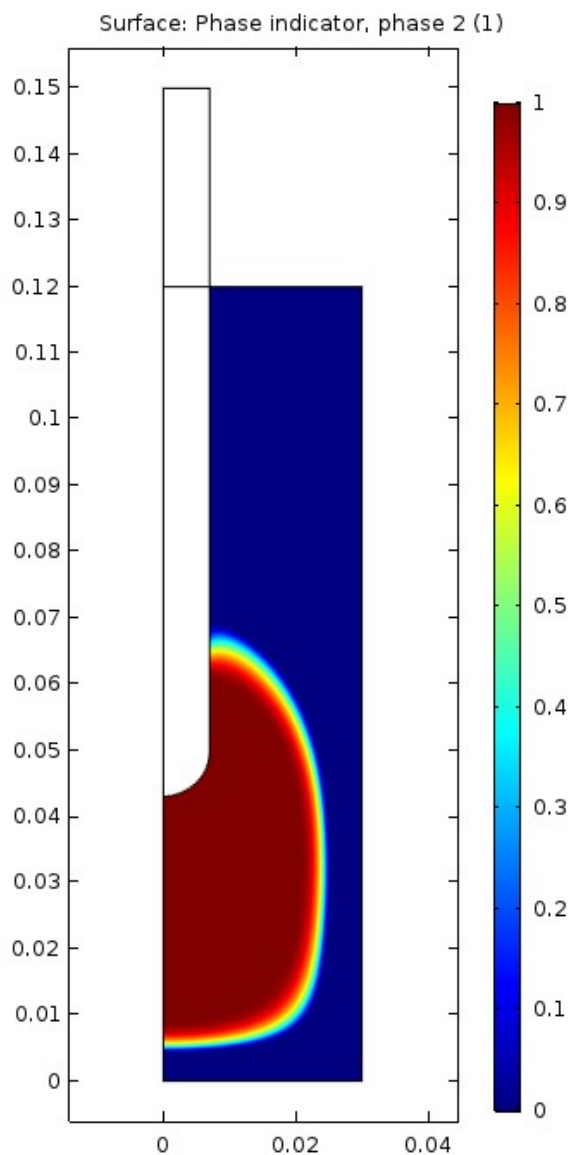


Zīm. 3.21. Materiālu blīvuma sadalījums

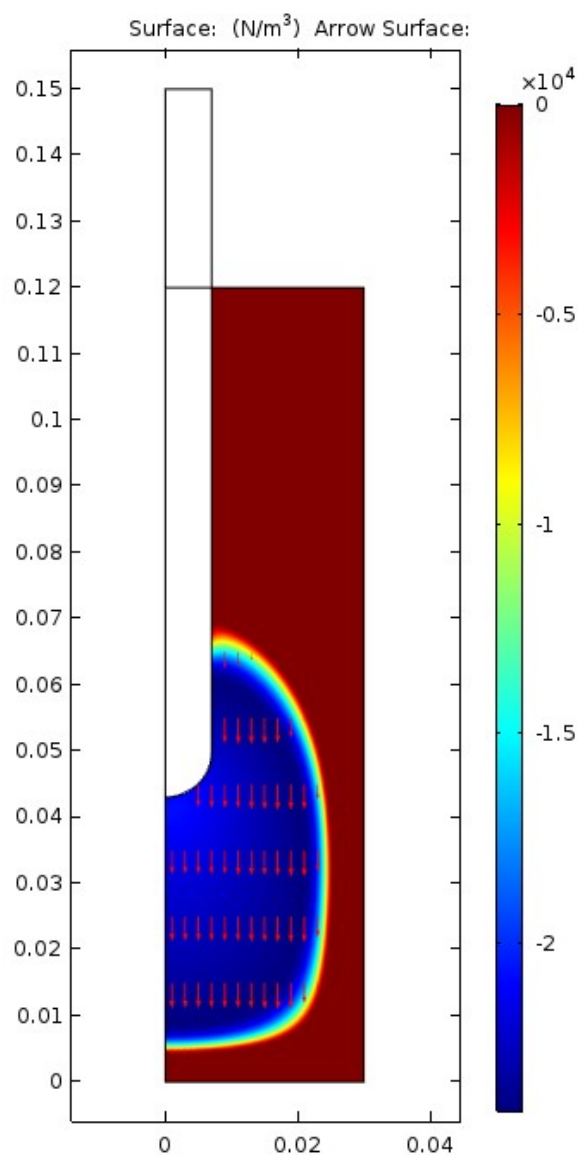


Zīm.3.22. Efektīvās siltumietilpības sadalījums

Zīm.3.23. attēlots aprēķinātais šķidrās CaF_2 fāzes sadalījums. Ņemot to vērā un pareizino ar blīvuma sadalījumu (zīm3.21.), kā arī brīvās krišanas paātrinājumu, tiek iegūts smaguma spēka sadalījums (zīm.3.24.), ko izmanto kā avotu hidrodinamikas aprēķinos.

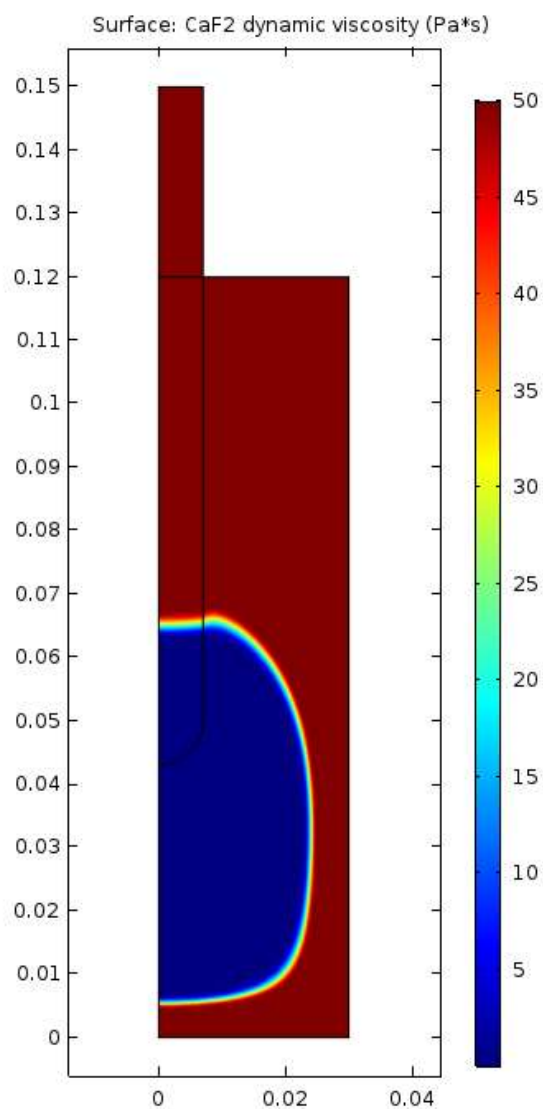


Zīm.3.23. CaF_2 šķidrās fāzes sadalījums

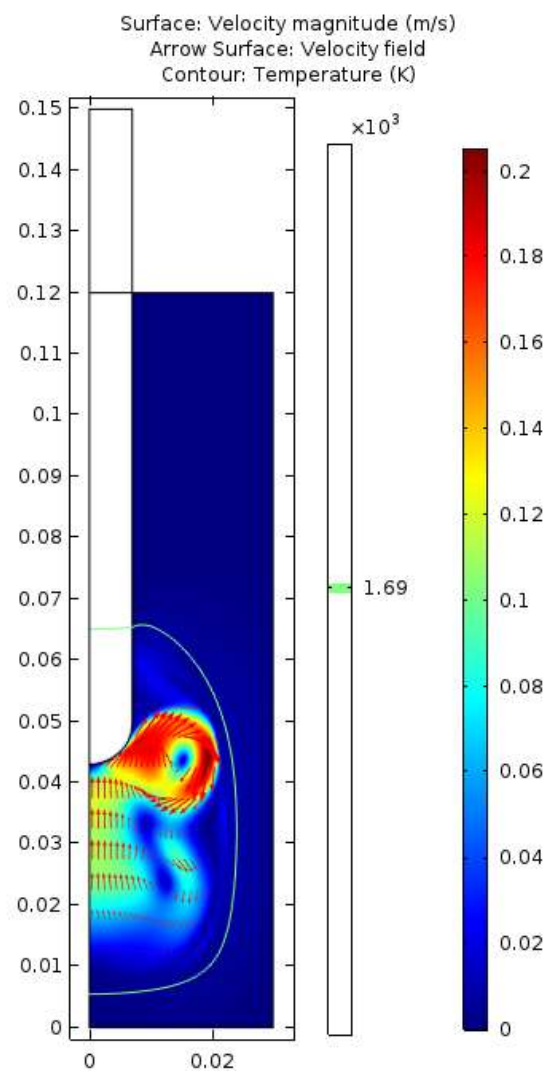


Zīm.3.24. Smaguma spēka sadalījums

Lai modelētu šķidruma kustību tikai aizkausētajā CaF_2 apgabalā tiek lietota strauja solņveida funkcija viskozitātei, kas atkarīga no temperatūras (zīm.3.25.), kur zilajā apgabalā tā ir 0.017 [Pa.s], bet sarkanajā 50 [Pa.s]. Šādā veidā izdodas atrast siltuma konvekcijas ierosināto ātruma sadalījumu, tikai izkausētajā) apgabalā (zīm.3.26.), kas iezīmēts ar zaļu līniju. Redzams, ka konkrētajā gadījumā maksimālais plūsmas ātrums ir ap 0.2 [m/s]



Zīm. 3.25. CaF₂ viskozitātes sadalījums hidrodinamikas aprēķinos



Zīm. 3.26. Siltumkonvekcijas ierosinātais ātruma sadalījums izkausētajā apgabalā

5. Eksperiments ar kūstošu magnija elektrodu

Eksperimenta mērķis. Izpētīt magnija elektroda kušanas ātrumu elektrosārņu procesa apstākļos, ar mērķi ievadīt precīzu magnija dozu (24g) izkausētos sārņos.

Eksperimenta apstākļi: NaCl sārņi ≈ 280 g (kušanas $t = 828$ °C), aizmetnis - nerūsējošais tērauds 304 = 312 g. Elektrods kombinēts: augšējā daļa no nerūsējošā tērauda; apakšējā darba daļa - Mg ($m = 70$ g, $l = 211$ mm), attālums starp elektrodu un aizmetni - 3 mm. $U = 60$ V, $I = 400$ A.

Rezultāti. Konstatēts, ka pēc 4 sekundēm pārtrūkst elektriskā ķēde, t.i. Šajā laika periodā notiek ar diezgan lielu ātrumu noteiktas magnija elektroda daļas kušana. Kā parādīja rentģenafāžu un elementu analīze, magnijs dažāda lieluma (no $\sim 0,1$ mm līdz pat ~ 10 mm) pilienu formā novērojams visā sacietējušu sārņu tilpumā, zīm.



Zīm. 5.1. Magnijs sacietējušu sārņu tilpumā

Pēc eksperimenta atlikusī magnija elektroda daļa tika attīrīta no nosēdumiem un nosvērta. Tās masa sastādīja 46 g, t.i. eksperimenta laikā izkusa 26 gramī. (rezultāts ļoti tuvs eksperimenta prasībām (24g).

Iepriekš veiktajā eksperimentā (bez elektriskā loka, bet ar izkausētiem NaCl sārņiem ($t = 820$ °C) tika konstatēts, ka notiek tikai daļēja magnija elektroda kušana, zīm.5.2.



Zīm.5.2. Daļēji izkūsis magnija elektrods.

Aktivitāte Nr. 4. Zināšanu un tehnoloģijas pārnese.

1. Prezentēti divi referāti konferencē „9th International Symposium on Electromagnetic Processing of Materials (EPM 2018)” Japānā:

1.1. E. Platacis, E. Blumbergs, I. Kaldre, V. Serga; “Electroslag process for better titanium deposition morphology”.

1.2. I. Kaldre, A. Bojarevics, T. Beinerts, R. Baranovskis, R. Nikoluskins, M. Milgravis, M. Kalvans.” Contactless electromagnetic method for aluminium degassing:.

2. Tiek gatavoti divi „Abstract” konferencei „International Conference on Heating by Electromagnetic Sources”; Padua, Itālijā.

Secinājumi.

1. **Saskaņā ar projekta Darba plānu Aktivitātes Nr.1. ietvarā (beigu termiņš 31.08.2018.), uz izstrādātās tehniskās dokumentācijas pamata, izgatavota un samontēta jauna eksperimentālā iekārta – tehnoloģijas prototips.**
2. **Izstrādāta un instalēta iekārtas tehnoloģisko parametru un eksperimentālo datu iegūšanas un izdošanas sistēma (DAQ), kas ir bāzēta uz National Instrument (NI) komponentēm.**
3. **Pārbaudīta un pierādīta Ti/TiAl eksperimentālās iekārtas un tā atsevišķu mezglu un sistēmu darbaspēja.**
4. **Uz Ti/TiAl eksperimentālās iekārtas - tehnoloģijas prototipa veikts eksperiments ar kūstošu magnija elektrodu.**
5. **Turpinās teorētiskā elektrosārņu pārkausēšanas procesa apzināšana un modelēšana, proti elektriskā potenciāla sadalījums reaktorā, temperatūras un sārņu plūsmas ātruma sadalījums reaktorā, ko rada dabīgā konvekcija utt.**
6. **Tiek gatavots eksperiments uz eksperimentālās iekārtas – tehnoloģijas prototipa jau ar reālām titāna iegūšanu elektrosārņu procesā materiālu komponentēm, t.i. Mg (Na) + TiCl₄.**