

Šis darbs izstrādāts Latvijas Universitātē ar Eiropas
Reģionālās attīstības fonda atbalstu projektā
Nr. 2013/0051/2DP/2.1.1.1.0/13/APIA/VIAA/009



EIROPAS SAVIENĪBA

IEGULDĪJUMS TAVĀ NĀKOTNĒ

Silīcija kausēšanas indukcijas tīģelkrāsnī modelēšana OpenFOAM vidē

Kirils Surovovs, Jānis Virbulis

Latvijas Universitātes 72. zinātniskā konference
LU Fizikas un matemātikas fakultāte, Zeļļu iela 8, Rīga
30.01.2014.

Prezentācijas saturs

- Ievads
- Matemātiskie modeļi un aprēķinu programmas
- Rezultāti
- Secinājumi

Ievads

Silīcija kausēšana tīģelkrāsnī ir viens no iespējamiem sākotnējiem metalurģiskā Si apstrādes posmiem. Tas ļauj attīrīt Si lielos mērogos, ar ķīmisko reakciju palīdzību.

Induktīvās kausēšanas procesa matemātiskās modelēšanas mērķis ir noskaidrot dažādu sistēmas parametru ietekmi uz silīcija sildīšanu un kausēšanu.

Darba uzdevumi ir: izveidot programmu kompleksu uz atvērtā koda bibliotēkas **OpenFOAM** bāzes, izstrādāt atbilstošus robežnosacījumus, veikt parametru studijas.



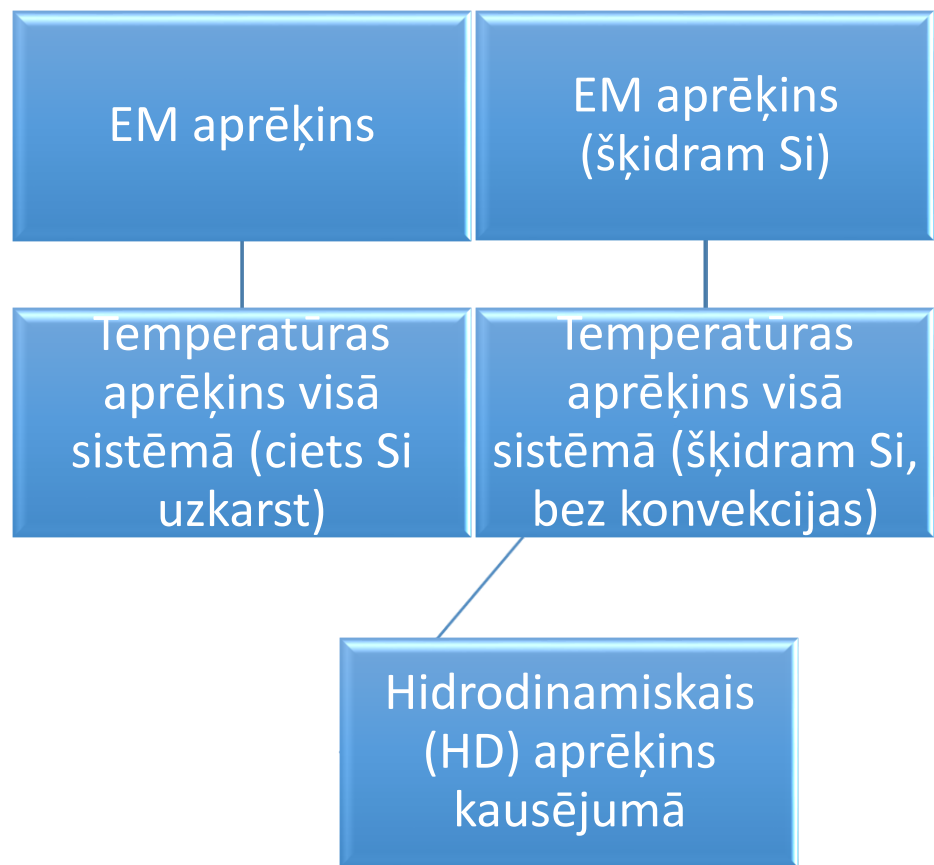
Ievads

Tiek modelēta «ИТПЭ-0,4/0,35 ТГ» induktīvā tīģeļkrāsns. Aplūkota sistēma, kas sastāv no tīģeļa, induktora un siltuma izolācijas.



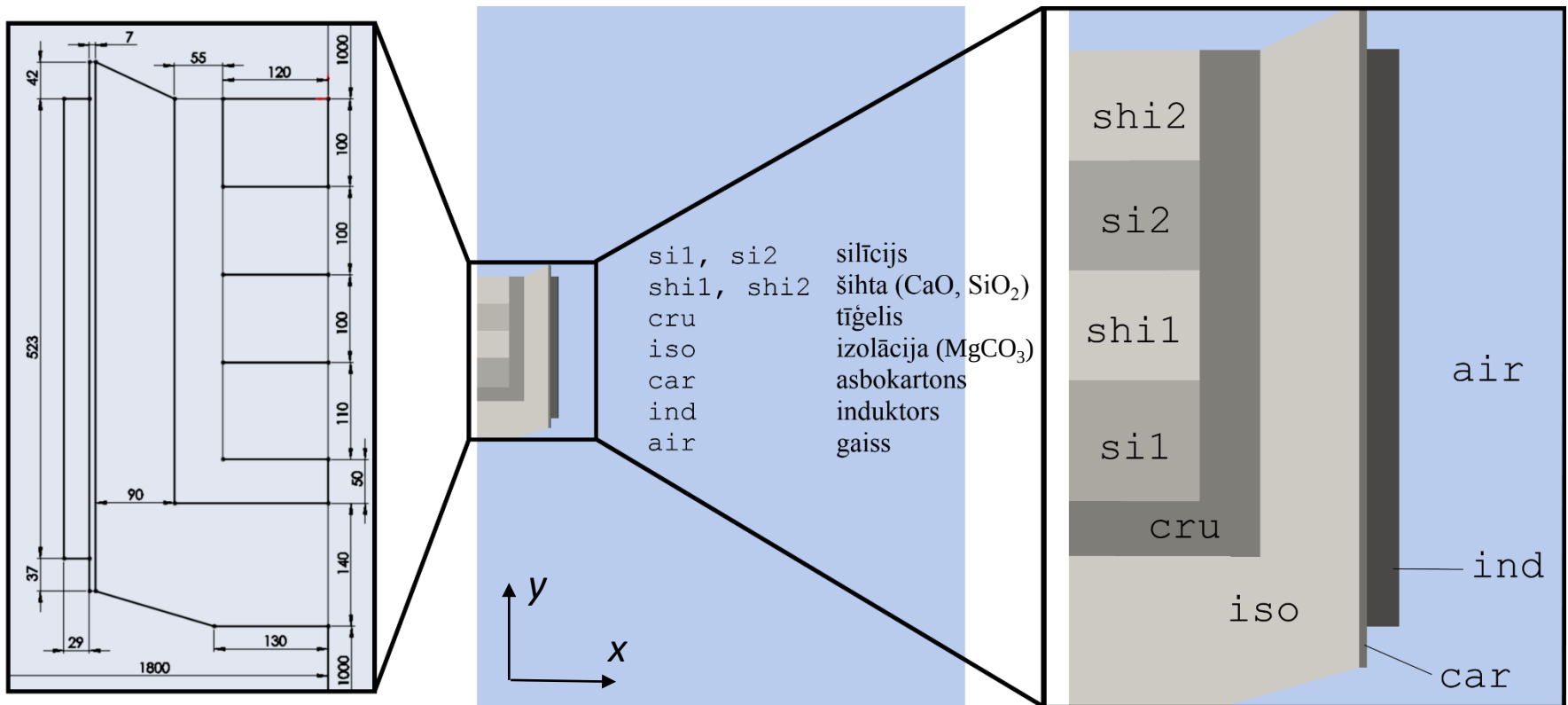
Matemātiskais modelis

- Modelēti divi procesa posmi: silīcija uzsildīšana līdz kušanas temperatūrai un kausējuma plūsma termisko un elektromagnētisko (EM) spēku iedarbībā.
- Induktors sastāv no 9 vijumiem un tiek vienkāršoti pieņemts, ka strāva induktora tilpumā ir sadalīta vienmērīgi.
- Modelī iekļauta arī apkārtējā ar gaisu aizpildītā telpa (pietiekami liela, lai būtiski neietekmētu rezultātus).



Matemātiskais modelis

- Sistēmas ģeometrija: galvenās sastāvdaļas un to izmēri (lietots aksiāli simetrisks tuvinājums).



Matemātiskais modelis: EM aprēķins

$$\Delta \vec{A} - i\omega\sigma\mu\vec{A} = -\mu\vec{I}$$

$$\vec{j} = -i\sigma\mu\vec{A}$$

$$q = |\vec{j}|^2/\sigma$$

$$\vec{B} = \nabla \times \vec{A}$$

$$(\vec{f} = \vec{j} \times \vec{B})$$

Aprēķina harmoniska EM lauka vektorpotenciālu $\vec{A}$ komplekso skaitļu tuvinājumā aksiāli simetriskai sistēmai

Aprēķina inducētās strāvas blīvumu, siltuma avotus, magnētisko lauku un Lorenca spēka blīvumu materiālā.

Robežnosacījumi: $A = 0$ uz apgabala (gaisa) robežām.

No sistēmas simetrijas seko,
ka $\vec{A} = (0,0,A_z)$,
 $\vec{j} = (0,0,j_z)$, $B_z = 0$

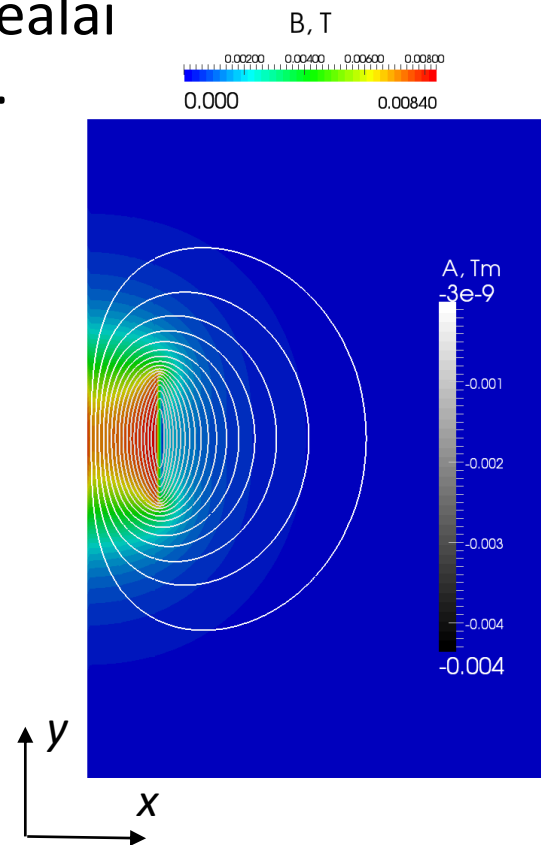


$$\begin{cases} f_x = \frac{1}{2} (Re[j_z] \cdot Re[B_y] + Im[j_z] \cdot Im[B_y]) \\ f_y = \frac{1}{2} (Re[j_z] \cdot Re[B_x] + Im[j_z] \cdot Im[B_x]) \\ f_z = 0 \end{cases}$$

EM aprēķinu programma

- Speciāla aprēķinu programma (*solveris*) izstrādāta lietojot atvērtā koda bibliotēku OpenFOAM.
- Tiek rēķināti «siltuma pārneses» vienādojumi reālai un imaginārai vektorpotenciāla z-komponentei.
- Iteratīvi atrod stacionāru atrisinājumu.

```
solve
(
    fvm::ddt(Are) - fvm::laplacian(DT, Are) +
    DT*multConst*sigma*omega*mu0*Aim +
    DT*multConst*mu0*Ire
);
solve
(
    fvm::ddt(Aim) - fvm::laplacian(DT, Aim) -
    DT*multConst*sigma*omega*mu0*Are
);
```

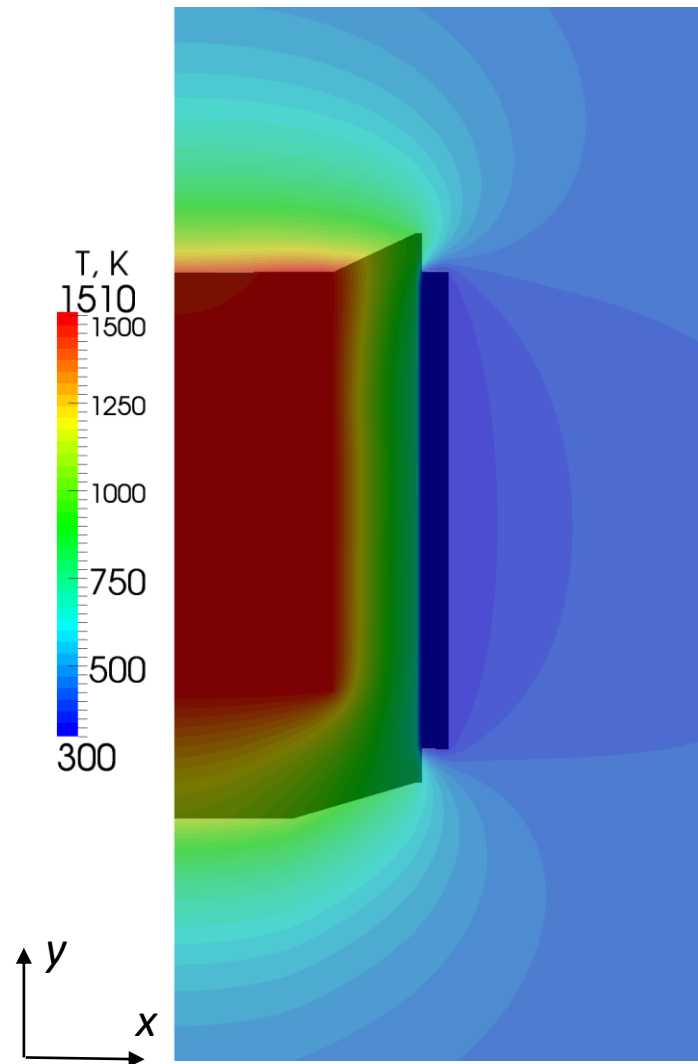


Matemātiskais modelis: temperatūras aprēķins

$$\frac{\rho c_p}{\lambda} \frac{\partial T}{\partial t} = \Delta T + q_{EM}$$

Atrisina nestacionāru siltumvadīšanas vienādojumu ar siltuma avotiem q_{EM} , kas iegūti no EM aprēķina.

Robežnosacījumi: $T = 300$ K uz apgabala (gaisa) robežām un uz induktora, kas tiek dzesēts ar ūdeni.



Temperatūras aprēķina programma

- Balstīta uz brīvi pieejamo ***chtMultiRegionFoam***
- Gaisā tiek ņemts vērā siltuma starojums, kurš aprēķināts ar metodi ***P1***
- Tranzients modelis, ar kuru var noteikt, kā process attīstās laikā
- Nav iespējams iekļaut konvektīvo siltuma pārnesei šķidrā Si

```
fvm::ddt(betav*rho, h)
    - fvm::laplacian(betav*alpha, h, "laplacian(alpha,h)")
    - qEM
== fvOptions(rho, h)
    // + radiation.Sh(thermo)
```

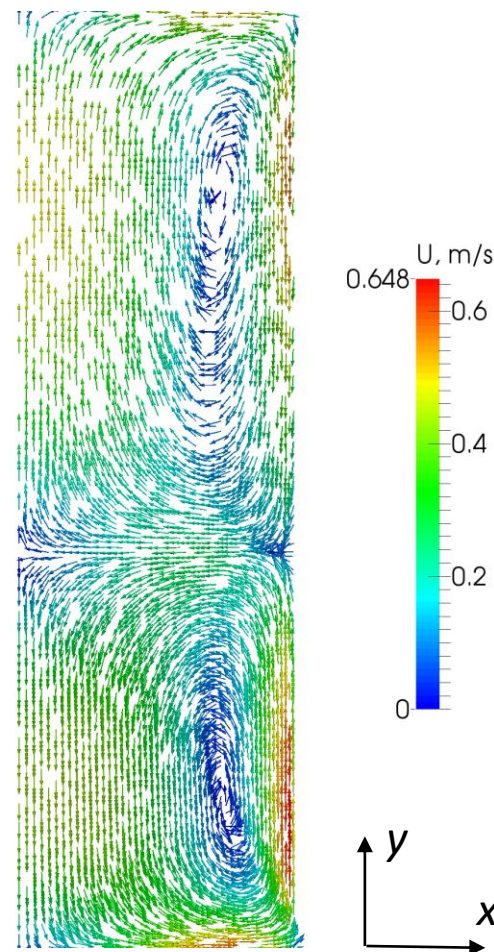
Matemātiskais modelis: HD aprēķins

$$Re = \frac{2580 \cdot 0,1 \cdot 0,3}{8,6 \cdot 10^{-4}} \approx 90\,000$$

Šķidrums Si tiek modelēts kā nespiežamais šķidrums, termiskās konvekcijas aprakstam izmantojot Businesska tuvinājumu. Izmantots turbulences modelis $k-\omega$ SST, jo aprēķinu rezultāti norāda uz lielu Reynoldsa skaitļu vērtību. Navjē-Stoksa vienādojumam tiek pievienots Lorenca spēka blīvuma loceklis f no EM aprēķina.

Robežnosacījumi:

- $T = 1720$ K uz tīģeļa dibena, siltuma plūsmas uz sāniem un brīvās virsmas (izstrādāts 2. veida robežnosacījums **testFlux**, kas dod iespēju norādīt siltuma plūsmas, nevis temperatūras gradientus)
- «Slīdēšanas» nosacījums ātrumam uz brīvās virsmas un «pielipšanas» nosacījums uz tīģeļa sienām



HD aprēķina programma

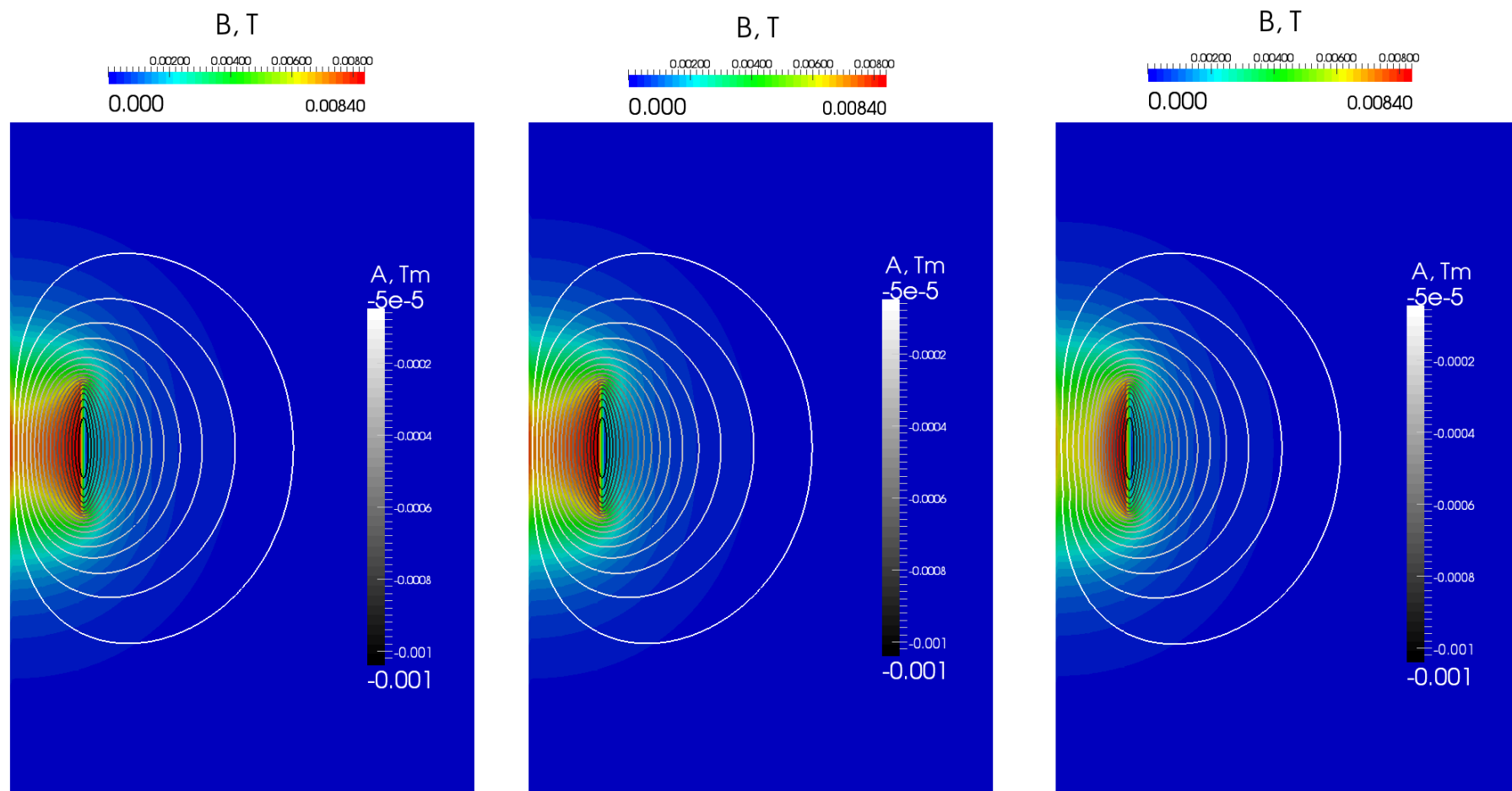
- Balstīta uz brīvi pieejamo ***buoyantBousinesqSimpleFoam***
- Meklē stacionāru atrisinājumu (vienādojumos neieiet laika atkarība)

```
fvm::div(phi, U)
    + turbulence->divDevReff(U)
    - LorForce/2580
== fvOptions(U)
```

```
fvm::div(phi, T)
    - fvm::laplacian(alphaEff, T)
    - qEM/(960*2580)
== fvOptions(T)
```

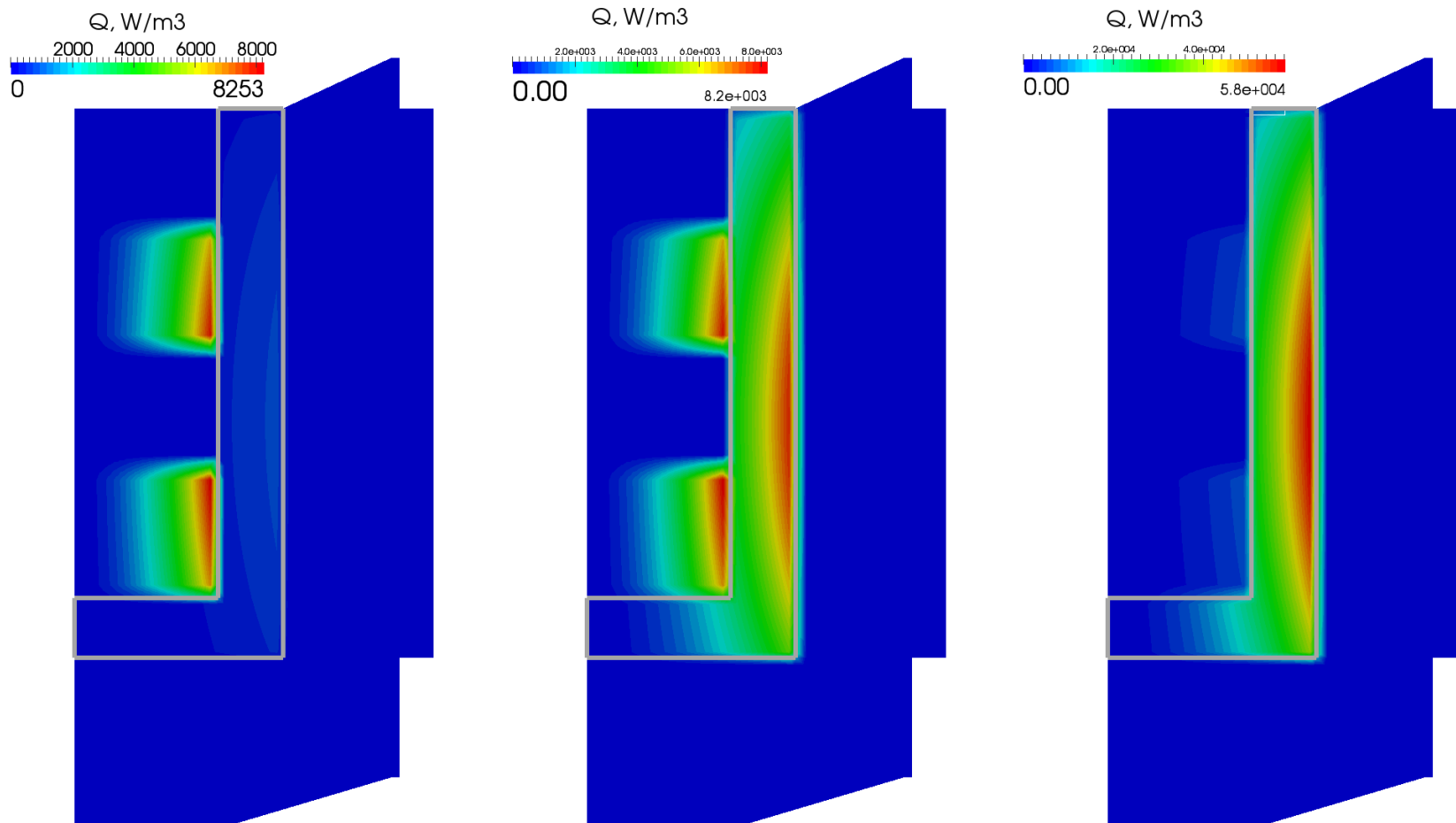
Si īpašības – blīvums $\rho = 2580 \text{ kg/m}^3$ un siltumietilpība $c_p = 960 \text{ J/kgK}$ ierakstītas kā skaitliskās vērtības, jo aprēķinu programma pirmajā pētījumu posmā paredzēta tikai Si aprēķinam. Ja vajadzēs veikt parametru studijas, tiks ievesti atbilstošie mainīgie, kas kodā aizvietos skaitļus.

Rezultāti: EM programma



Magnētiskā lauka vektorpotenciāla moduļa A izolīnijas (pelēkā krāsu skalā) un magnētiskā lauka intensitāte B (krāsu skala) variantiem ar dažādu tīģeļa elektrovadītspēju ($2 \cdot 10^3$ Si/m – pa kreisi, $2 \cdot 10^4$ Si/m – vidū, $2 \cdot 10^5$ Si/m – pa labi). $I = 500$ A.

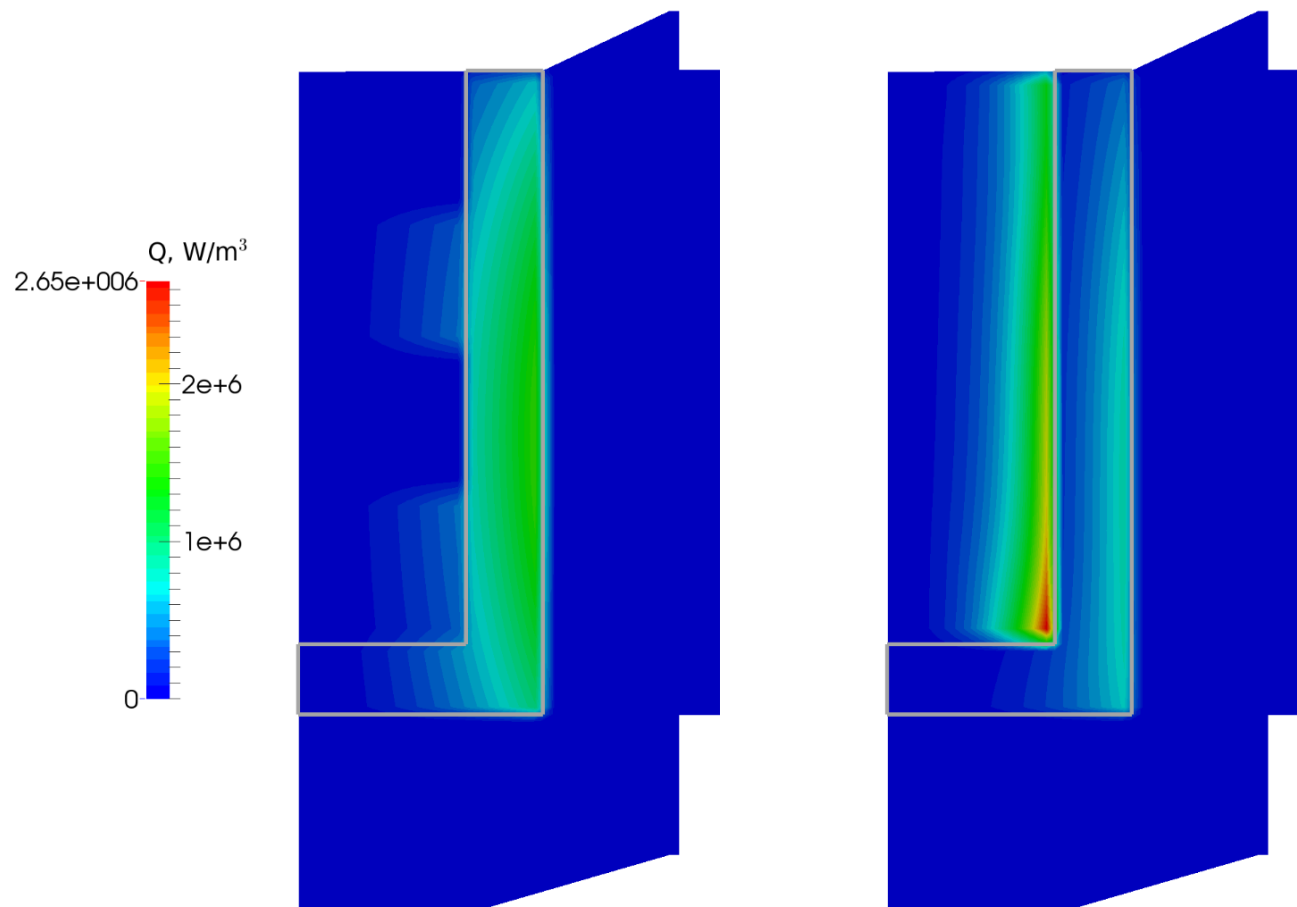
Rezultāti: EM programma



Inducētie Džoula siltuma avoti variantiem ar dažādu tīģeļa elektrovadītspēju ($2 \cdot 10^3$ Si/m – pa kreisi, $2 \cdot 10^4$ Si/m – vidū, $2 \cdot 10^5$ Si/m – pa labi). Ar pelēko līniju apzīmētas tīģeļa robežas. $I = 500$ A.

Rezultāti: EM programma

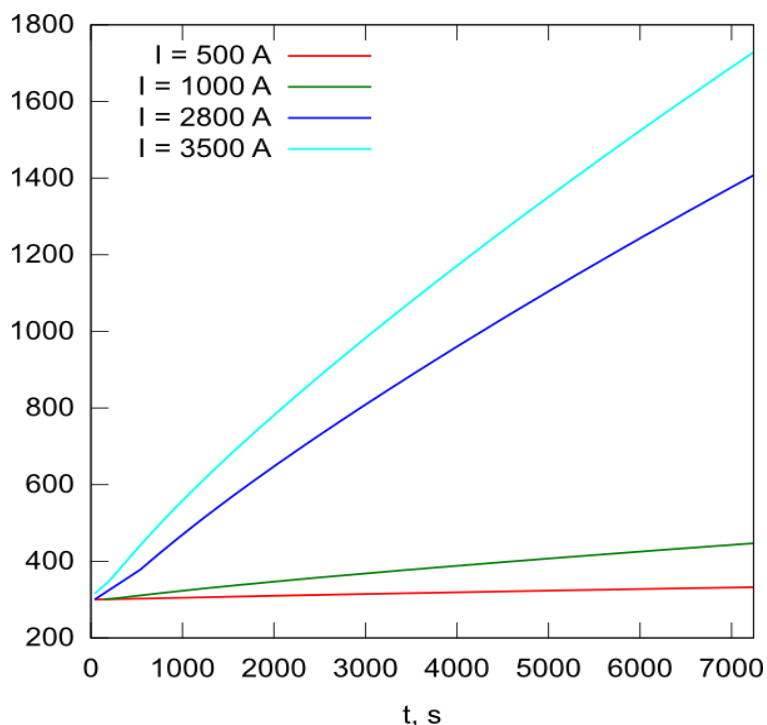
Precizēta grafīta tīģeļa elektriskā vadītspēja: $\sigma_g = 8 \cdot 10^4 \text{ Si/m}$.



Inducētie Džoula siltuma avoti iekārtā. Pa kreisi – gadījums ar cieto Si un šīhtu, pa labi – gadījums ar šķidro Si. Ar pelēko līniju apzīmētas tīģeļa robežas. Induktora strāva $I = 3500 \text{ A}$.

Rezultāti: temperatūras aprēķins

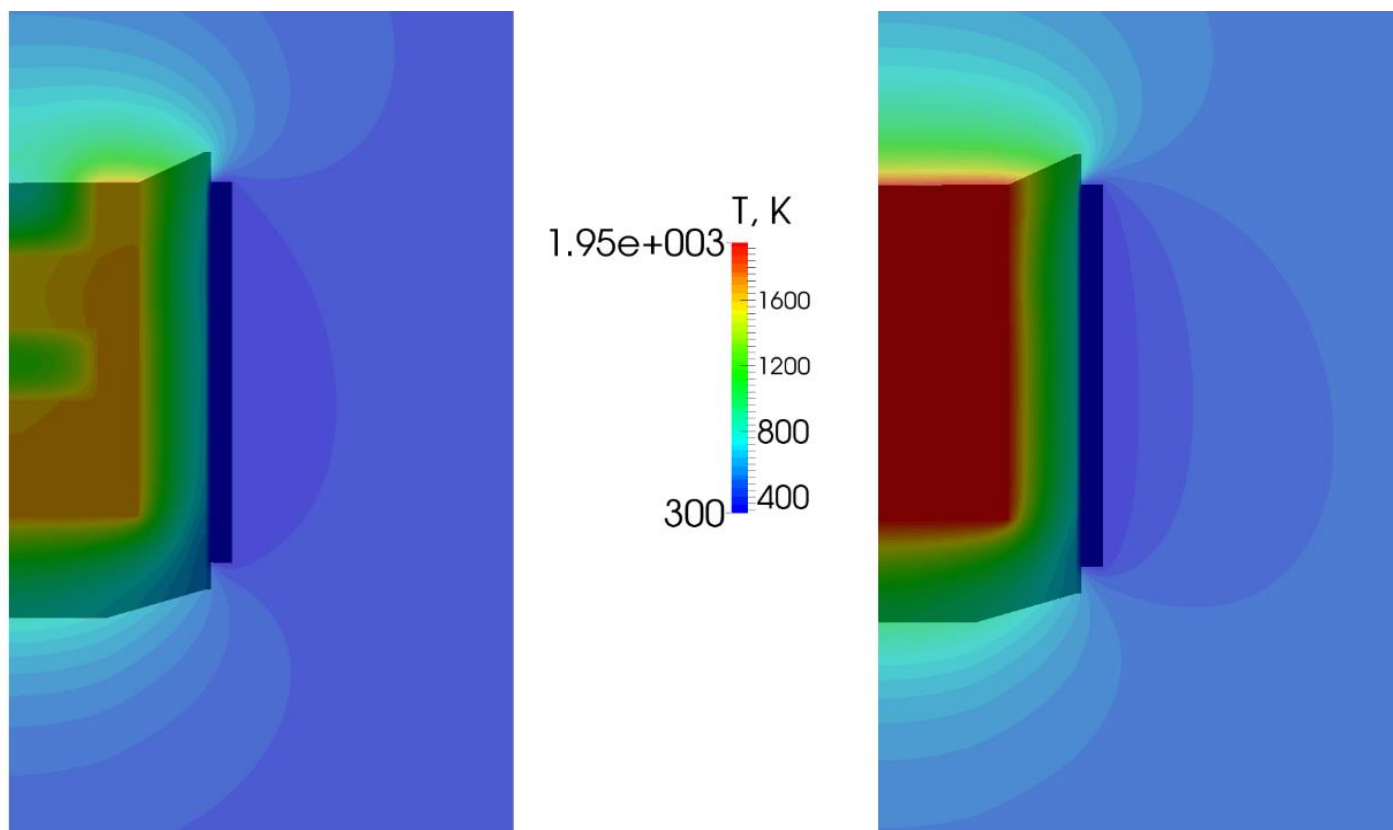
Izmantojot iepriekšējos attēlos redzamos siltuma avotus tika izdarīti sildīšanas aprēķini ar dažādām strāvām. Vadoties no šiem aprēķiniem tika izvēlēta induktora strāva 3500 A. Ar šo strāvu summārie sistēmā izdalītie siltuma avoti ir 28 660 W.



Temperatūra punktā $x = 50 \text{ mm}$, $y = -352 \text{ mm}$, atkarībā no laika pie dažādām induktora strāvas vērtībām. $I = 3500 \text{ A}$, $\sigma_g = 8 \cdot 10^4 \text{ Si/m}$.

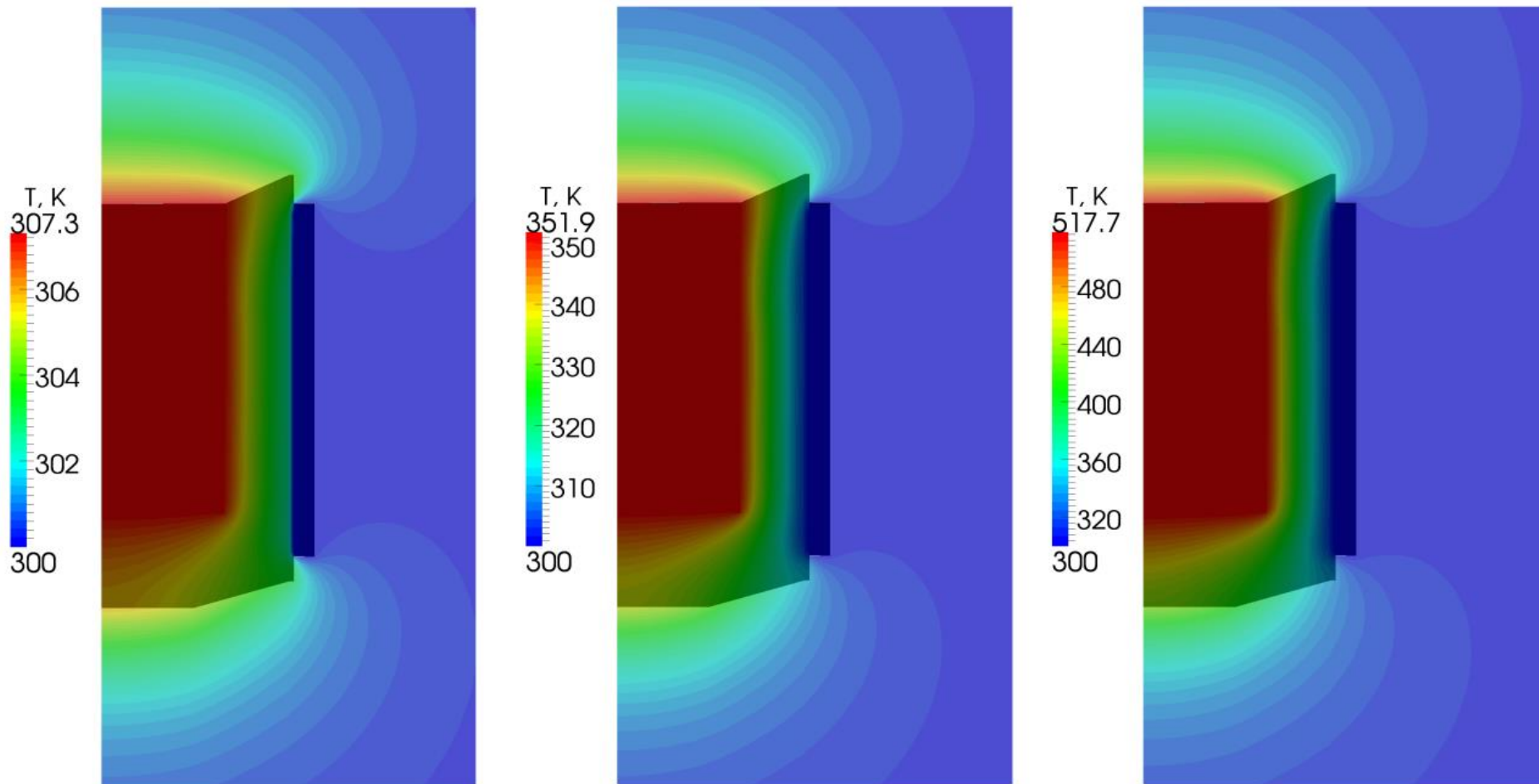
Rezultāti: temperatūras aprēķins

Izmantojot izvēlēto strāvu 3500 A, palaists aprēķins ar cietu Si un attiecīgajiem siltuma avotiem. Pēc divām stundām T sadalījums tika pārinterpolēts uz šķidrā Si gadījumu un aprēķins turpinājās 10 minūtes, lai iegūtu eksperimentam līdzīgu stāvokli (pieņemam, ka Si var būt pārkarsēts), no kura var iegūt siltuma plūsmas kā robežnosacījumus HD aprēķinam.



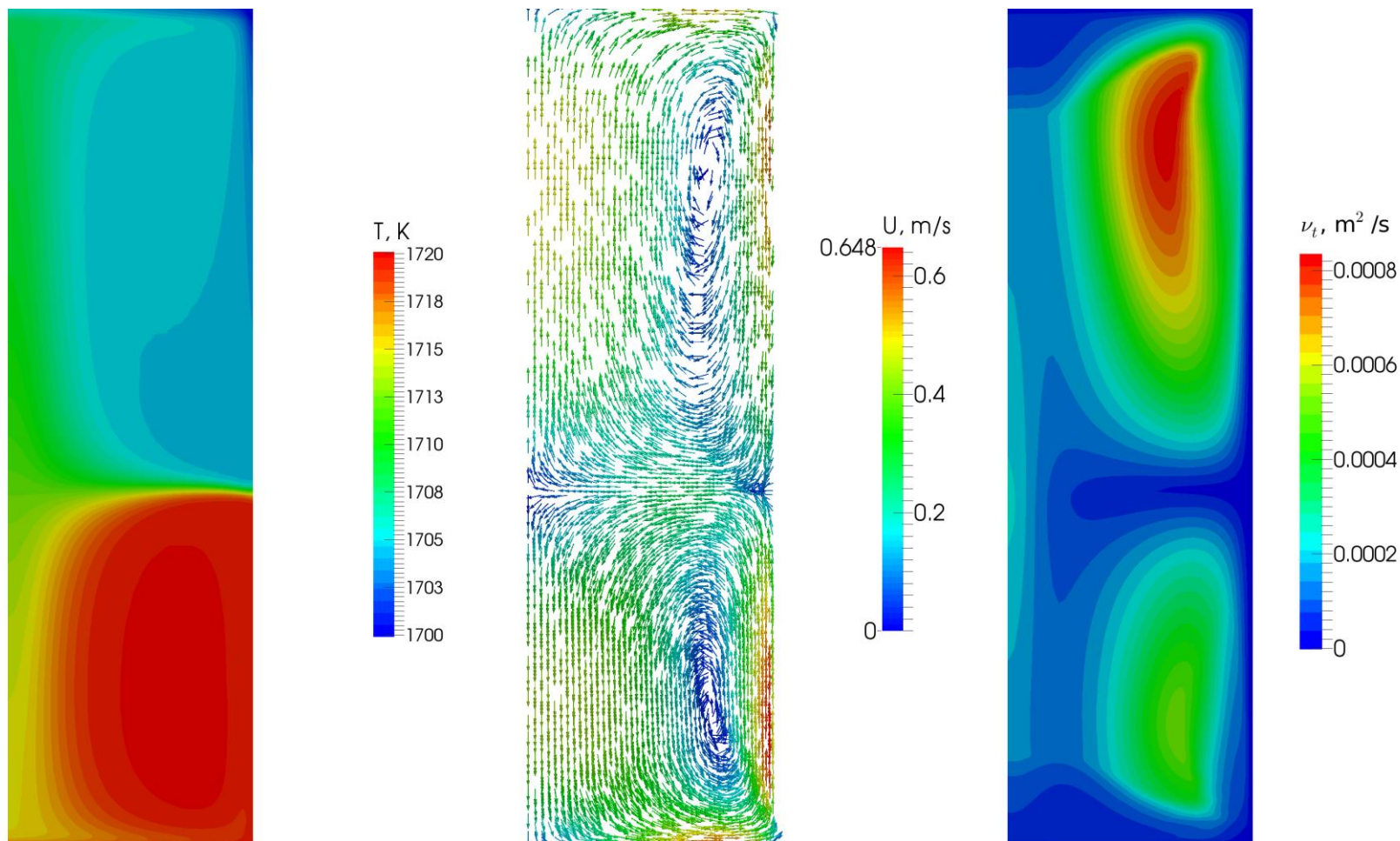
Temperatūras sadalījums iekārtā un atmosfērā pēc 2 stundām no eksperimenta sākuma. Pa kreisi – gadījums ar cieto Si un šihu, pa labi – gadījums ar šķidro Si. $I = 3500$ A, $\sigma_g = 8 \cdot 10^4$ Si/m.

Rezultāti: temperatūras aprēķins



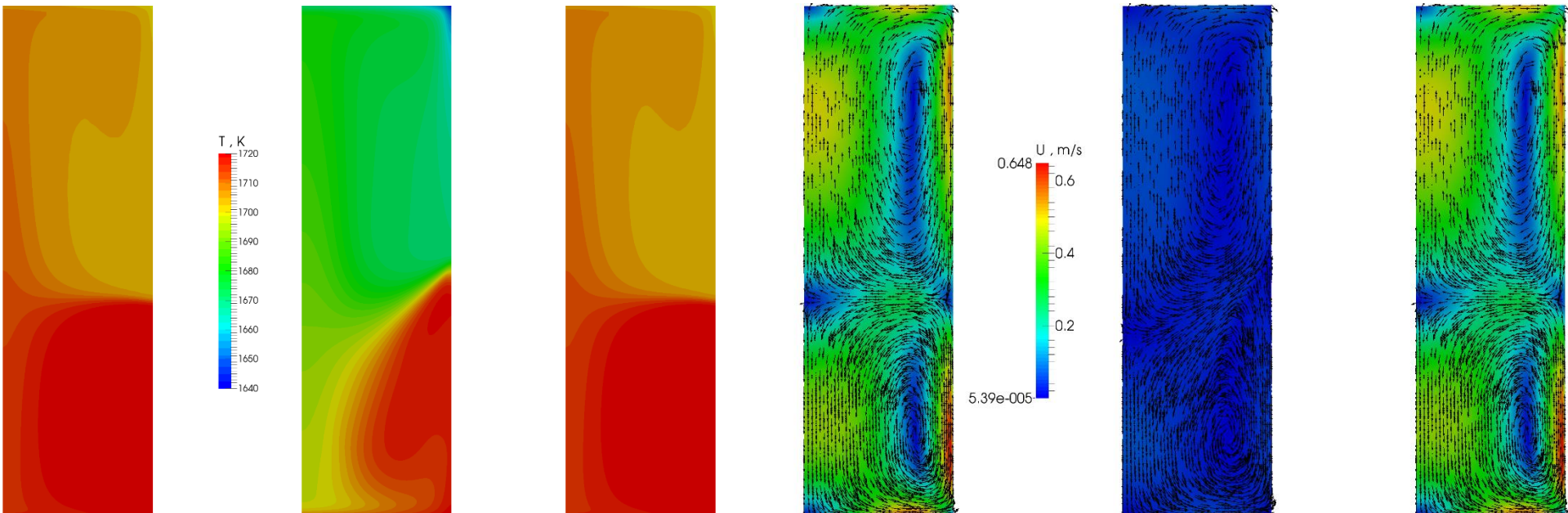
Parametru studijas piemērs. Temperatūras sadalījums iekārtā laika momentā 14 h variantiem ar dažādu siltumizolācijas siltumvadītspēju (4 W/Km – pa kreisi, 2 W/Km – vidū, 0.5 W/Km – pa labi). $I = 500$ A. $\sigma = 2 \cdot 10^5$ Si/m.

Rezultāti: HD aprēķins



Hidrodinamiskā aprēķina rezultāti. No kreisās puses uz labo: kausējuma temperatūra, kausējuma ātrums, turbulentā viskozitāte. $I = 3500$ A, $\sigma_g = 8 \cdot 10^4$ Si/m.

Rezultāti: HD aprēķins



Temperatūras sadalījums kausējumā – bāzes variants, variants bez Lorenca spēka un variants bez Arhimēda spēka. $I = 3500 A$ $\sigma_g = 8 \cdot 10^4 Si/m$.

Ātruma sadalījums kausējumā – bāzes variants, variants bez Lorenca spēka un variants bez Arhimēda spēka. $I = 3500 A$, $\sigma_g = 8 \cdot 10^4 Si/m$.

Secinājumi

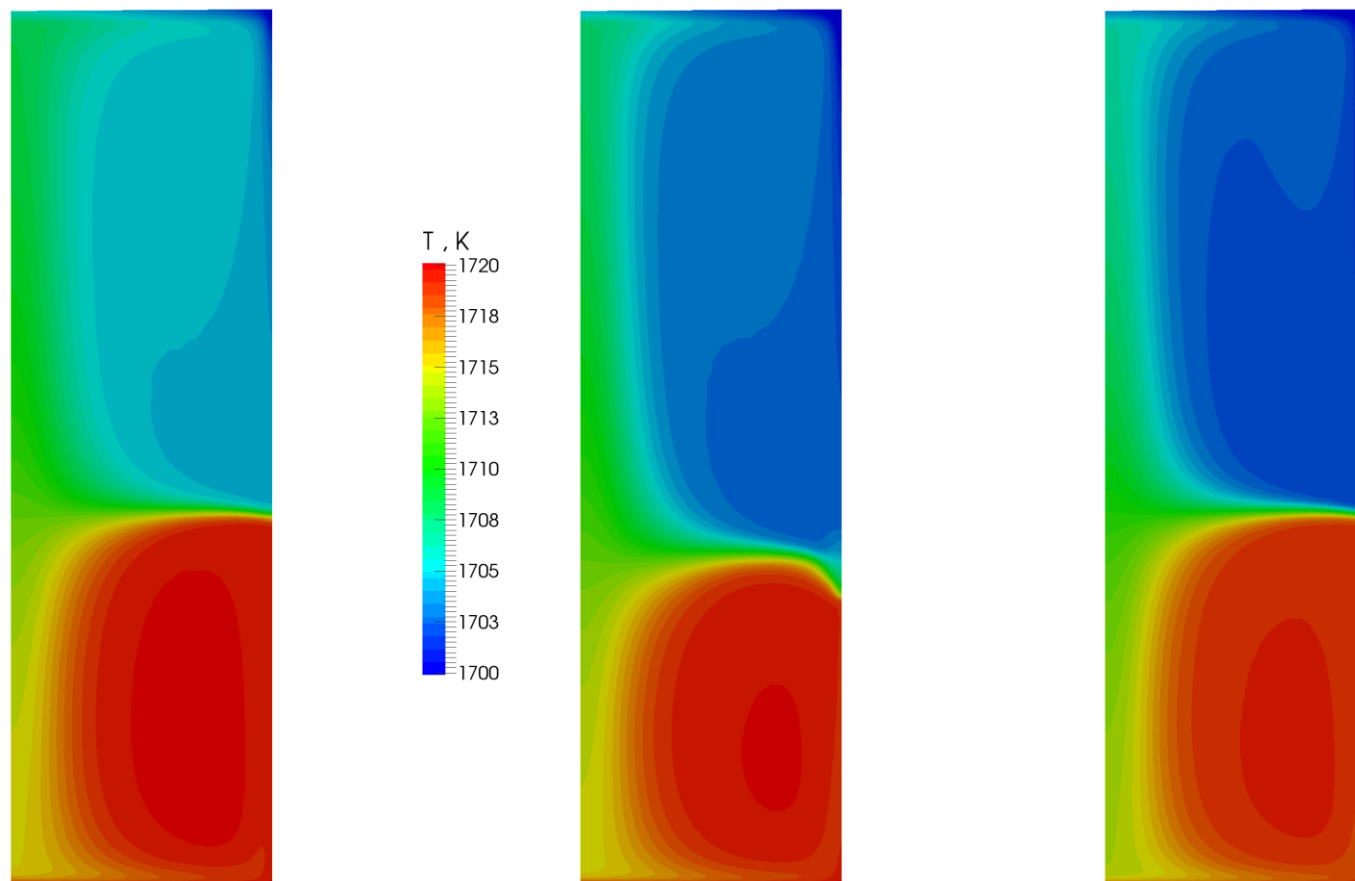
- Darba rezultātā izveidots specializēts programmu komplekss uz **OpenFoam** bibliotēkas bāzes, kas risina induktīvās sildīšanas uzdevumu aksiāli simetriskā tuvinājumā. Ir nodrošināta iespēja ievērot Džoula siltuma avotus un Lorenca spēkus kausējuma plūsmas aprēķinā.
- Uz izveidotā modeļa bāzes tika izpētīta grafīta elektriskās vadītspējas, izolācijas siltumvadītspējas un induktora strāvas ietekme uz temperatūras lauku un tā izmaiņām laikā.
- EM aprēķinu rezultāti rādīja, ka pie izmantotās grafīta vadītspējas lielākā daļa siltuma izdalās grafītā, nevis cietajā silīcijā. Kad silīcijs ir izkusis, tajā izdalās vairāk siltuma nekā grafīta tīgelī.
- Kausējuma konvekcijas izraisīšanā Lorenca spēkiem ir daudz svarīgāka loma kā termiskajai konvekcijai.
- Izveidotās programmas nodrošina turpmāku parametru studiju iespēju un var tikt pielietotas industriālās iekārtas uzlabošanai.
- Netika ievērota sistēmas asimetrija (induktora pievadi, «snīpis» šķidrā Si izliešanai). Turpmāko studiju laikā iespējams pārbaudīt, cik stipri asimetrijas ievērošana ietekmē rezultātu.

Informācijas avoti

- www.energa-corp.ru
- lityo.com.ua
- ERAF projekta atskaite par 3. Kvartālu 2013 nodaļa „Silīcija kausēšanas indukcijas krāsnī matemātiskā modelēšana”
- <http://www.openfoam.org/>
- http://openfoamwiki.net/index.php/Getting_started_with chtMultiRegionSimpleFoam - planeWall2D
- <https://github.com/OpenFOAM/OpenFOAM-2.2.x/tree/master/applications/solvers/heatTransfer/buoyantBoussinesqSimpleFoam>
- Saito, Yoshitoshi, Kinji Kanematsu, and Taijiro Matsui. 2009. “Measurement of Thermal Conductivity of Magnesia Brick with Straight Brick Specimens by Hot Wire Method.” *Materials Transactions* 50(11): 2623–2630.
- P. D. Desai, *Thermodynamic properties of iron and silicon*, J. Phys.-Chem., Vol. 15 No 3, 1986
- <http://www.ioffe.ru/SVA/NSM/Semicond/Si/electric.html>

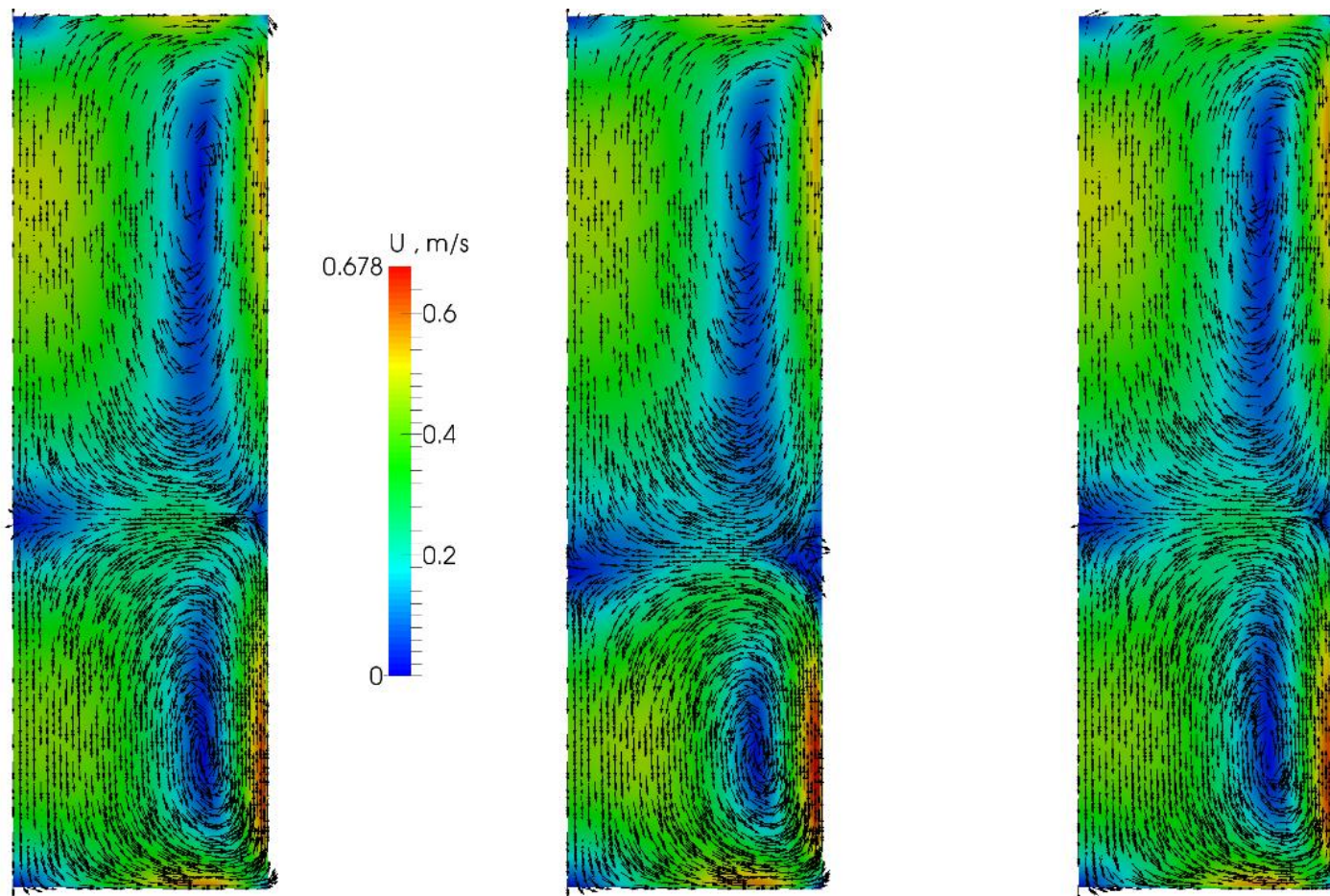
Paldies par uzmanību!

Rezultāti: HD aprēķins



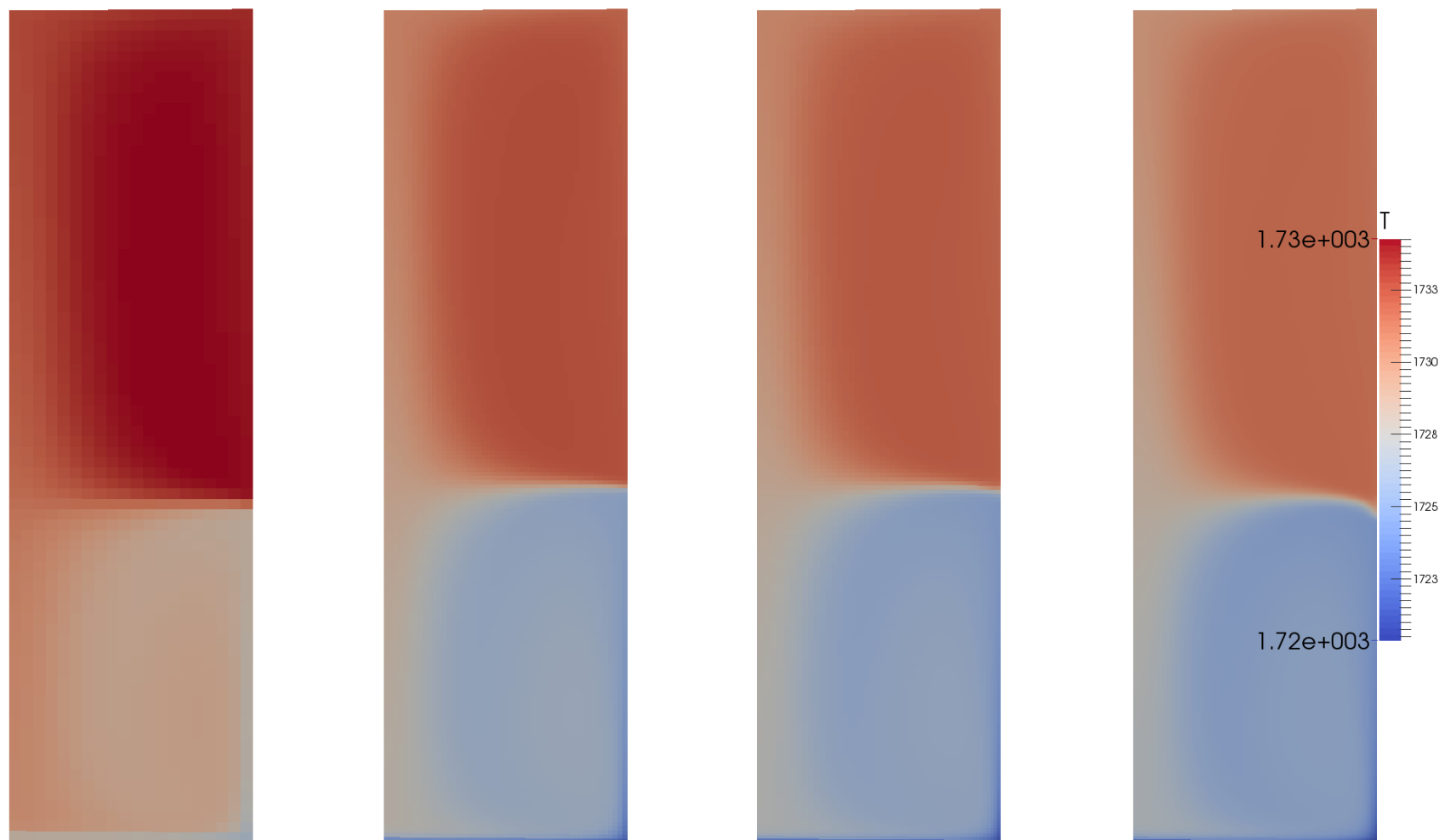
Temperatūras sadalījums kausējumā – bāzes variants (pa kreisi), variants ar 10 reizes lielāku viskozitāti (vidū) un variants ar divreiz lielāku siltumvadītspēju (pa labi). Induktora strāva $I = 3500$ A. $\sigma_g = 8 \cdot 10^4$ Si/m.

Rezultāti: HD aprēķins



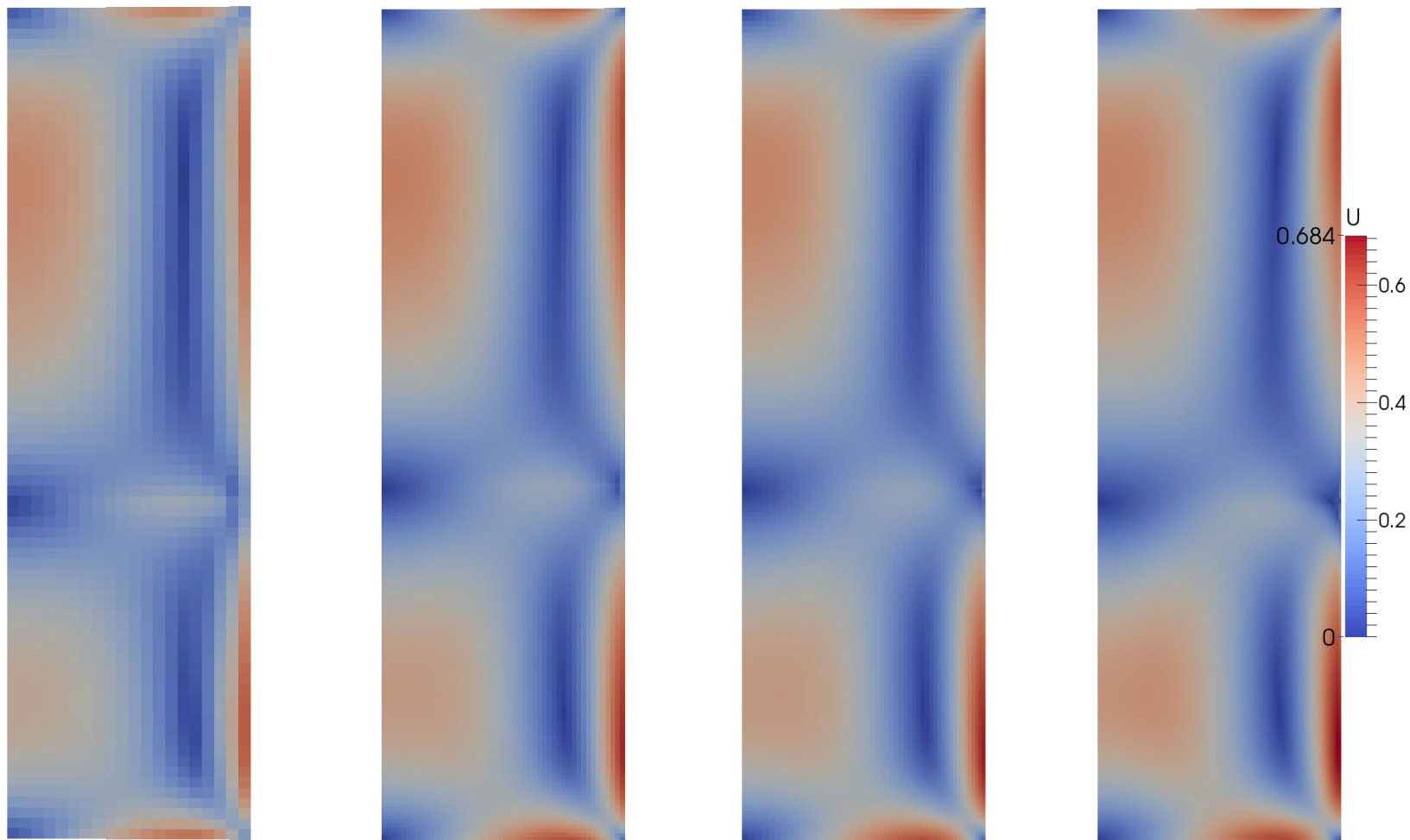
Ātruma sadalījums kausējumā – bāzes variants (pa kreisi), variants ar 10 reizes lielāku viskozitāti (vidū) un variants ar divreiz lielāku siltumvadītspēju (pa labi). Induktora strāva $I = 3500$ A. $\sigma_g = 8 \cdot 10^4$ Si/m.

Rezultāti: HD aprēķins



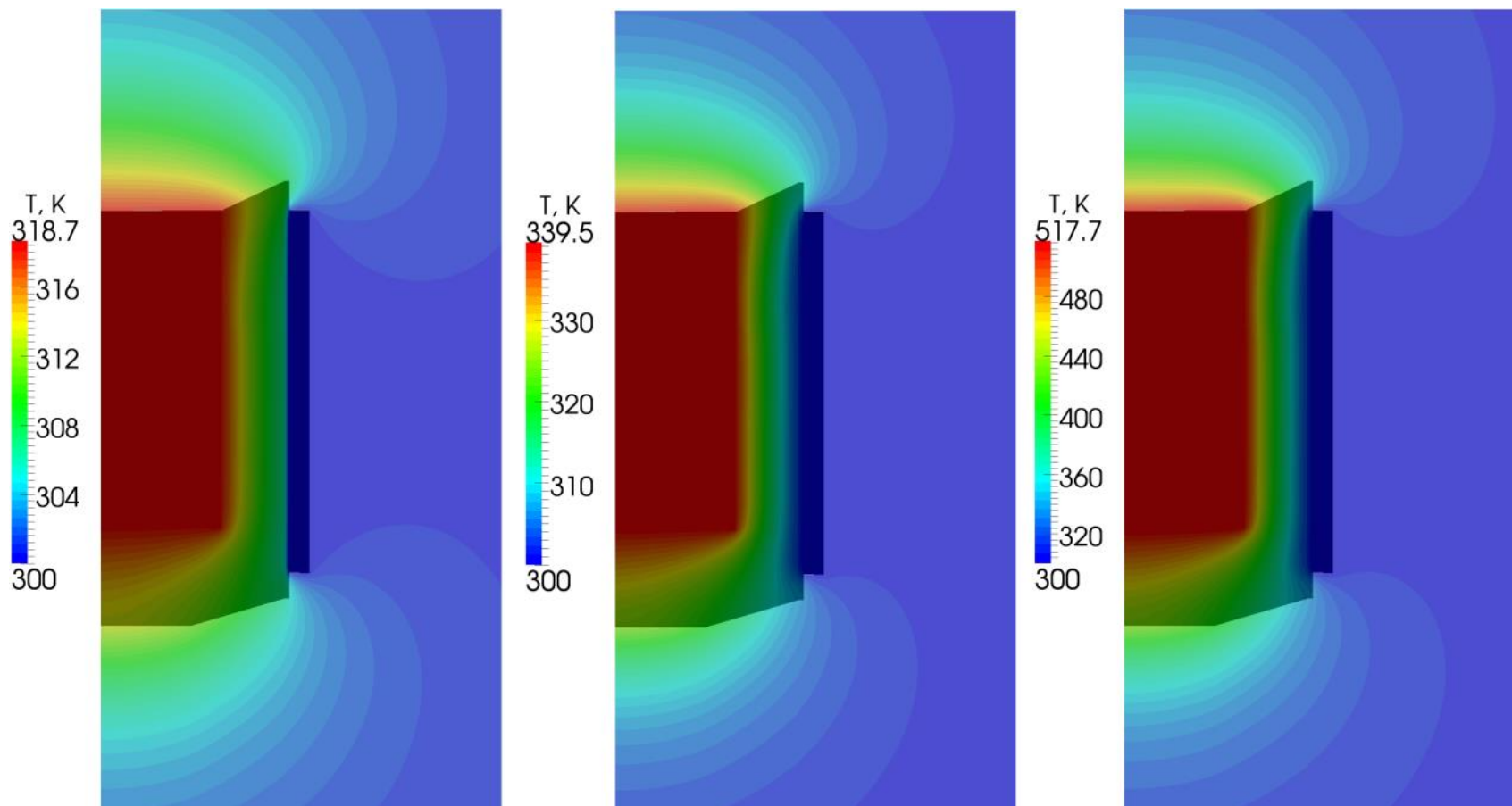
Temperatūras sadalījums kausējumā, dažādi režģi (rupjš – vidējais – nevienmērīgs vidējais - smalks). $I = 3500$ A. $\sigma_g = 8 \cdot 10^4$ Si/m.

Rezultāti: HD aprēķins



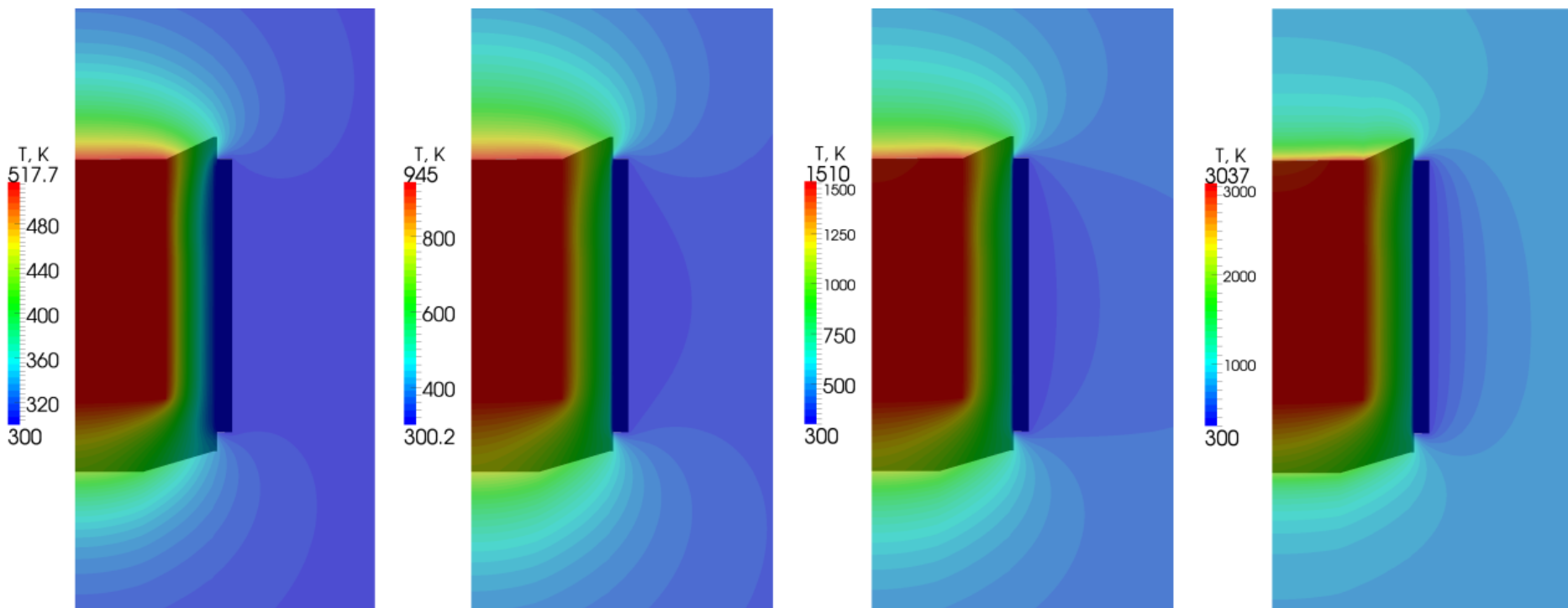
Ātruma sadalījums kausējumā, dažādi režģi (rupjš – vidējais – nevienmērīgs vidējais – smalks). $I = 3500$ A. $\sigma_g = 8 \cdot 10^4$ Si/m.

Rezultāti: parametru studijas



Temperatūras sadalījums iekārtā laika momentā 14 h variantiem ar dažādu tīģeļa elektrovadītspēju ($2e3$ Si/m – pa kreisi, $2e4$ Si/m – vidū, $2e5$ Si/m – pa labi). $I = 500$ A.

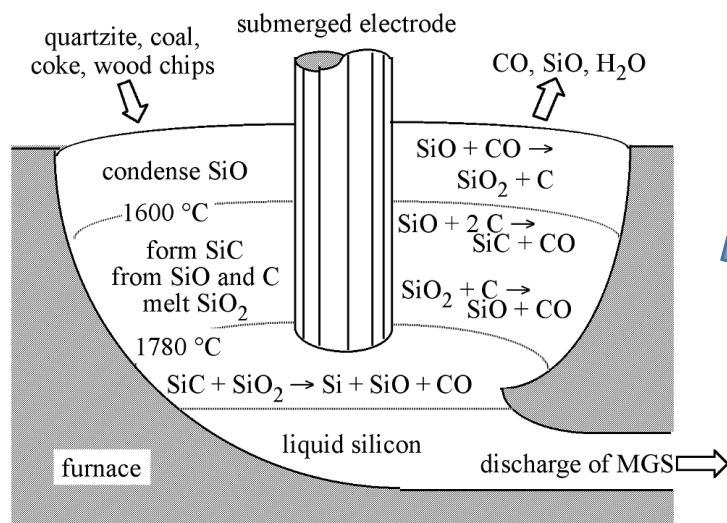
Rezultāti: parametru studijas



Temperatūras sadalījums iekārtā laika momentā 14 h variantiem ar dažādu induktora strāvu (no kreisās uz labo: $I=500\text{A}$, 700A , 1000A , 1500A). $\sigma_g = 2 \cdot 10^5\text{ Si/m}$.

Kas ir šihtha?

Definīcija: šihtha ir viss, kas atrodas tīgelī.



Vienā no iespējamām procesa shēmām, visās detaļās neatbilst darba lietotajai sistēmai

Lielās temperatūrās notiek ķīmiskās reakcijas, piemēram $\text{SiO}_2 + 2\text{C} = \text{Si} + 2\text{CO}$. Metalurģiskais Si satur C – tāda ir izgatavošanas procesa īpatnība.

Savukārt Ca, kas ietilpst šihthā, nedaudz palielina C šķīdību silīcijā. Šihtas sastāvs tiek nedaudz mainīts dažādos eksperimentos, lai procesa beigās iegūt vairāk Si. Katram piemaisījumam atbilst noteiktais ķīmiskais savienojums, kas palīdz «tikt vaļā» no tā.