

С.Ш. Кажикенова¹, А.Ж. Мергембаева¹

¹Карагандинский государственный технический университет,
г. Караганда, Казахстан

АЛГОРИТМ ЧИСЛЕННОГО ИНТЕГРИРОВАНИЯ УРАВНЕНИЙ ГИДРОДИНАМИКИ С ЦЕЛЬЮ ПРОГНОЗИРОВАНИЯ ТЕХНОЛОГИЧЕСКИХ ПАРАМЕТРОВ РОЗЛИВА МЕТАЛЛИЧЕСКИХ РАСПЛАВОВ

Аннотация. Предлагается математическая модель течения высокотемпературных расплавов с учетом природы ближнего порядка в них и учет второго коэффициента вязкости вести методами статистической физики. Цель исследования: реализация методики численного решения уравнений гидродинамики с привлечением корреляционных функций вязкости, определяемых с помощью квантовых потенциалов, исследование распределения профиля скорости течения расплава, получение наиболее простой регуляризации исходной системы уравнений гидродинамики, содержащей в себе физический смысл. Исследование скорости сходимости решений аппроксимирующей задачи к решениям исходной задачи гидродинамики позволило разработать алгоритм численного интегрирования уравнений гидродинамики, позволяющий прогнозировать технологические параметры розлива металлических расплавов. Обоснованность и достоверность теоретических исследований подтверждена сопоставлением результатов с параметрами течения расплава меди в технологическом оборудовании линии Саусвайер – 2000. На основе численных экспериментов построено распределение скоростей течения расплава в технологических оборудованиях. Расчеты оптимальной температуры текучести (вязкости) в равновесной системе и с учетом скорости движения расплава являются согласованными, находясь в интервале оптимума 1423-1558 К, близкого к температурам реального движения расплавов в промышленных условиях.

Ключевые слова: вязкость, потенциал, уравнения гидродинамики, компьютерное моделирование, металлический расплав.

...

Түйіндеме. Осы мақалада біз қысқа қашықтықты тәртібін ескере отырып, жоғары температуралы балқымалардың ағынының математикалық моделін ұсынамыз және статистикалық физика әдістерімен екінші тұтқырлық коэффициентін ескереміз. Зерттеудің мақсаты: кванттық потенциалды қолдану арқылы анықталған тұтқырлықтың корреляциялық функцияларын қамтитын гидродинамикалық теңдеулерді сандық шешу әдістерін енгізу, балқу ағынының жылдамдық профилін белуді зерттеу, физикалық мағынасы бар гидродинамикалық теңдеулердің бастапқы жүйесінің ең қарапайым регуляризациясын алу. Гидродинамиканың түпнұсқа мәселесінің шешіміне жуықтау мәселесі

шешімдерінің конвергенция жылдамдығын зерттеу металл балқымаларын толтырудың технологиялық параметрлерін болжауға мүмкіндік беретін гидродинамика теңдеулерін сандық интегралдау үшін алгоритм құруға мүмкіндік берді. Теориялық зерттеулердің сенімділігі мен дәлдігі Саусвайер - 2000 желісінің технологиялық құрал-жабдықтарындағы мыс балқымасының ағымының параметрлерін салыстыру арқылы расталады. Сандық эксперименттер негізінде технологиялық жабдықта балқымалардың ағынының мелшерлемесі таратылды. Тепе-теңдік жүйесінде икемділіктің (тұтқырлықтың) оңтайлы температурасының есептелуі және балқыманың қозғалыс жылдамдығын есепке ала отырып, өнеркәсіптік жағдайларда балқымалардың нақты қозғалысының температурасына жақын 1423-1558 К оңтайлы аралығы бар.

Түйінді сөздер: тұтқырлығы, әлеуеті, гидродинамикалық теңдеулер, компьютерлік модельдеу, металл қорытпасы.

• • •

Abstract. This work presents a mathematical model of the flow of high-temperature melts, taking into account the nature of the short-range order in them, and taking into account the second viscosity coefficient by methods of statistical physics. The purpose of the study: the implementation of methods for the numerical solution of the equations of hydrodynamics involving the correlation functions of viscosity, determined using quantum potentials, the study of the distribution of the velocity profile of the melt flow, obtaining the most simple regularization of the original system of hydrodynamic equations containing physical meaning.

The study of the rate of convergence of solutions of the approximating problem to the solutions of the original problem of hydrodynamics made it possible to develop an algorithm for the numerical integration of the equations of hydrodynamics, which makes it possible to predict the technological parameters of the filling of metal melts. The validity and reliability of theoretical studies is confirmed by comparing the results with the flow parameters of the copper melt in the processing equipment of the Southwier-2000 line. Based on numerical experiments, the distribution of the flow rates of the melt in the process equipment is built. Calculations of the optimum temperature of fluidity (viscosity) in the equilibrium system and taking into account the speed of movement of the melt are consistent, being in the interval of optimum 1423-1558 K, close to the temperatures of the real movement of melts in industrial conditions.

Keywords: viscosity, potential, hydrodynamic equations, computer simulation, metal melt.

Введение. Теоретическая гидродинамика давно привлекала к себе внимание ученых разных специальностей. Сравнительная простота основных уравнений, четкая постановка задач и наглядность ее экспериментов вселяли надежду получить полное описание динамических явлений, происходящих в расплавах. В работе предлагается математическая модель течения высокотемпературных расплавов с

учетом природы ближнего порядка в них. С возрастанием температуры меняется не только протяженность ближнего порядка, но и число атомов в фрагментах твердой структуры, то есть в кластерах. И все эти процессы приводят к изменению физических параметров, в частности вязкости и других кинетических коэффициентов. В связи с этим возникают две проблемы: во-первых, квантово-статистическое описание поведения вязкости; во-вторых, влияние коэффициента вязкости на решения уравнений гидродинамики для расплавов. На основании обширных классических исследований Регеля А.Р., Глазова В.М. [1] можно утверждать, что металлические и полупроводниковые расплавы являются пространственно-неоднородными. Пространственная неоднородность обусловлена их атомно-молекулярной природой. Поэтому физико-химические, металлургические свойства металлических и полупроводниковых расплавов должны быть описаны с учетом ближнего порядка. Это возможно сделать только в рамках статистической и квантовой физики.

Цель работы - разработка математической модели течения высокотемпературных расплавов с учетом природы ближнего порядка в них. Методы квантовой статистической физики позволяют выразить коэффициенты сдвиговой и объемной вязкостей с помощью корреляционных функций [1,2]. Это дает возможность вскрыть физическую природу строения вещества через операторы вторичного квантования, тем самым для исследования может быть подключен мощный аппарат квантовой физики. Одним из наиболее конструктивных методов изучения физических свойств расплавов является компьютерное моделирование [3-6].

Методы исследований. Рассмотрим течение расплава в наклонном желобе. Общий вид уравнений приведен в работе [7]. Для конкретной конструкции можно трактовать и записывать их следующим образом. Направим ось Oz по оси желоба, предполагая, что конструкция желоба бесконечно длинная, а поток расплава направлен вдоль оси желоба так, что из трех компонентов u, v, w , остается лишь один w , поэтому $u = 0, v = 0$. Пусть поток расплава будет изотермическим, тогда плотность ρ и коэффициент вязкости $\mu = const$.

Следовательно, уравнения гидродинамики запишем в виде:

$$-\frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial x} = 0, -\frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial y} = 0, w \frac{\partial w}{\partial z} = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial z} + \gamma \left(\frac{\partial^2 w}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 w}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 w}{\partial z^2} \right), \frac{\partial w}{\partial z} = 0. \quad (1)$$

Таким образом, как видно из системы уравнений (1), скорость W представляет функцию только от x, y , кроме того, функция давления P является функцией от z . На основании (1) получаем уравнение:

$$\frac{dp}{dz} = \mu \left(\frac{\partial^2 w}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 w}{\partial y^2} \right) \quad (2)$$

Правая часть (2) представляет функцию от x, y , тогда как левая часть является функцией z . Из основных положений гидродинамики следует:

$$\frac{dp}{dz} = - \frac{\Delta p}{\ell},$$

где Δp – падение давления на произвольно выбранном участке, ℓ – длина желоба.

Кроме того, благодаря наличию свободной поверхности расплава в желобе давление равно атмосферному [8]. Поскольку желоб наклонен к горизонту под некоторым углом α , то возникает объемная сила, проекция которой на ось Oz равна $F_z = g \sin \alpha = \frac{\rho g y}{\ell}$. Тогда уравнение движения (2) в направлении Oz примет вид:

$$\mu \left(\frac{\partial^2 w}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 w}{\partial y^2} \right) + \rho g \sin \alpha = 0. \quad (3)$$

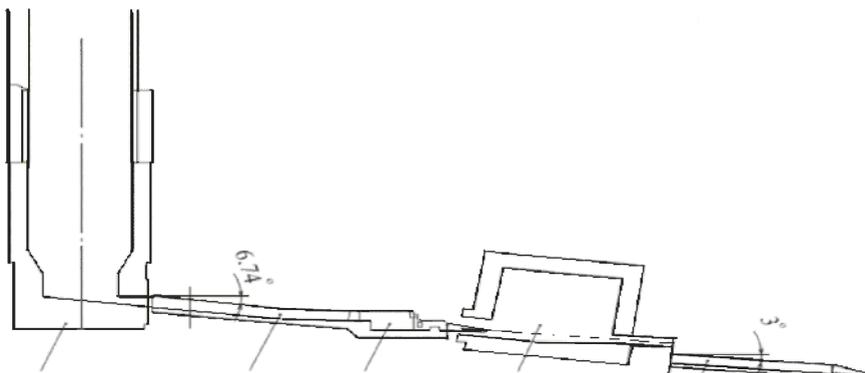
Для решения полученного уравнения необходимы граничные условия. Эти условия будут определяться прилипанием расплава к дну желоба и отсутствием трения на свободной поверхности расплава. Обозначим глубину потока через h_1 , а ширину желоба через h_2 . Тогда граничные условия задачи записываются следующим образом:

$$w = 0 \text{ при } y = 0, \quad \frac{\partial w}{\partial y} = 0 \text{ при } y = h_1, \quad \frac{\partial w}{\partial x} = 0 \text{ при } x = h_2. \quad (4)$$

Таким образом, уравнение (3) с граничными условиями (4) будут описывать процесс течения расплава в конкретных конструкциях типа желоба. Данная модель составлена для плавильного оборудования линии SCR – 2000, эскиз которого представлен в соответствии с рисунком 1. Расчеты произведены для нижнего желоба с углом наклона 3° . Сечение нижнего желоба представлено в соответствии с рисунком 2 и в нем показан уровень расплава. Численные параметры определены по следующим расчетам: площадь сегмента $S = \frac{[lr - a(r-h)]}{2}$, где l – длина дуги, a – хорда, h – стрела сегмента

$$a = 83 \text{ мм}, h = 18 \text{ мм}, l \approx \sqrt{a^2 + (16h^2/3)} = \sqrt{83^2 + (16 \cdot 18^2/3)} = 92,8 \text{ мм}.$$

Следовательно $S = \frac{\left[92,8 \cdot \frac{115}{2} - 83 \left(\frac{115}{2} - 18 \right) \right]}{2} = 1029 \text{ мм}^2$ Тогда секундный расход расплава составляет $Q = 3,61 \text{ кг/с}$. С учетом этого можно определить среднюю скорость течения расплава, которая равна $v_{\text{ср}} = 0,45 \text{ м/с}$. В расчетах использовались постоянные размеры шагов $\Delta x = \Delta y = 0,02$.



Плавильная печь Верхний желоб Верхний шлакосборник Миксер Нижний желоб

Рисунок 1 - Эскиз расположения плавильного оборудования линии SCR – 2000

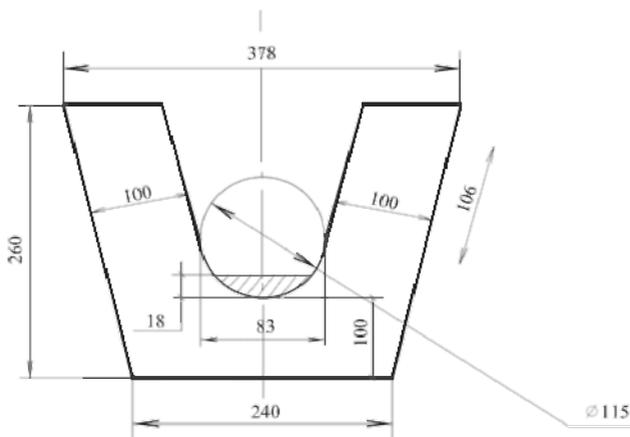


Рисунок 2 - Сечение нижнего желоба

Временной шаг в расчетах был выбран равным $\Delta t = 0,001$. Установившиеся результаты для профилей скоростей v и u течения расплава в плоском канале представлены в соответствии с рисунком 3.

Достижение установившегося течения потребовало 3000 шагов. Анализ полученных результатов показывает следующие факты относительно точности примененных численных расчетов. Во-первых, при расчете течения во входной ячейке сетки ошибка вычисления приводит к потере массы величиной 8-9%. Как только уменьшаем размер ячейки в 10 раз, потеря массы сокращается до 4-6%.

При расчете с большой точностью с учетом особенностей граничных условий потребовалось применение специальной численной схемы. Во-вторых, максимальная скорость на центральной линии тока равна $0,63 \frac{M}{c}$. Это значение примерно на 15% выше, чем экспериментальное значение. Полученные результаты показывают, что предложенная вычислительная схема достаточно экономична и без особых проблем ее можно использовать для расчета течения при достаточно малых числах Рейнольдса. Анализ полученных данных подтверждает, что замена условия неразрывности на уравнение для давления типа Пуассона, приводит к численной схеме, свободной от сложной вычислительной процедуры.

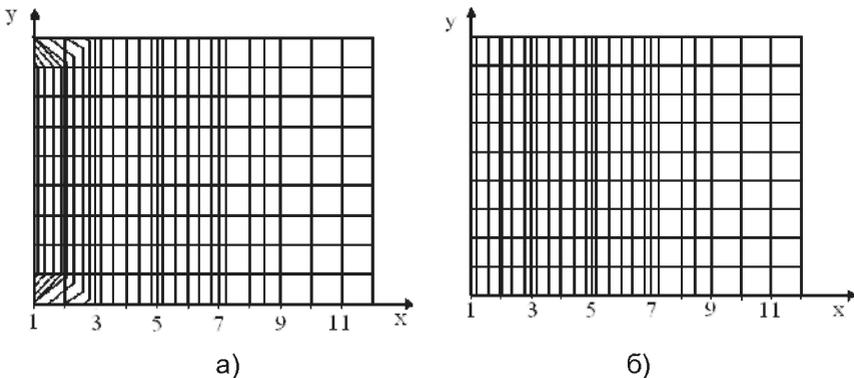


Рисунок 3 - Профили а) – поперечной v и б) – продольной u скоростей

Как известно [8], на расплав, покоящийся в желобе, действует сила тяжести, которая является источником потенциальной энергии частиц расплава. Следует отметить, что потенциальная энергия любой частицы расплава равна энергии положения этой частицы на свободной поверхности и не зависит от его положения относительно дна. Объемная сила F_z , действующая на расплав меди, приводит к преимущественной направленности скачков частиц расплава с преодолением потенциального барьера вдоль направления действия силы. Атомы расплава меди в момент соударений максимально сближаются и находятся под действием электрических сил. В промежуток времени между тепловыми соударениями атомы расплава меди перестраиваются во взаимном расположении, перескакивают в направлении действия силы, происходит тепловое перемещение атомов. При течении расплава в желобе не происходит перемешивание различных слоев расплава, таким образом, поток расплава меди можно представить в виде отдельных слоев, которые перемещаются с различными скоростями, увеличивающимися к поверхности расплава.

С момента перескока атомов в направлении действия объемной силы происходит разделение потока на придонный слой и основной [8]. Атомы придонного слоя удерживаются у поверхности дна силами межатомного сцепления с поверхностью, атомы основного слоя под действием объемной силы движутся вдоль границы придонного слоя. Стенки желоба вследствие внутреннего трения тормозят движение ближайшего к нему слоя расплава меди, и это торможение передается от одного слоя к другому по всему потоку расплава до поверхности, где течение происходит быстрее всего.

С учетом сдвиговой и объемной вязкостей расплава меди распределение скоростей течения в нижнем желобе при температурах 1358 К, 1398 К, 1438 К, 1478 К, 1518 К, 1558 К, 1598 К, 1638 К в проекциях на плоскость XOY и также в пространстве XYZ представлены в соответствии с рисунками 6-9.

Видно, что линии постоянной скорости, изотахи, меняются от $0,64$ м/с до $0,01$ м/с. Причем максимальная скорость течения достигается на самой поверхности, а на дне желоба она практически равна нулю, то есть полностью согласуется с условиями уравнений (3), (4). Средняя величина изолинии скорости примерно равна средней скорости течения расплава $v_{\text{ср}} \sim 0,40$ м/с.

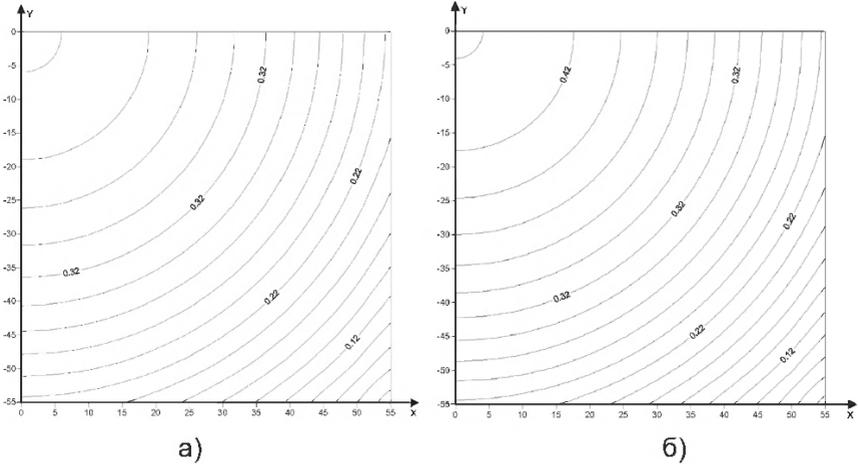


Рисунок 6 - Изолинии скорости – а) при 1358 К и б) при 1398 К

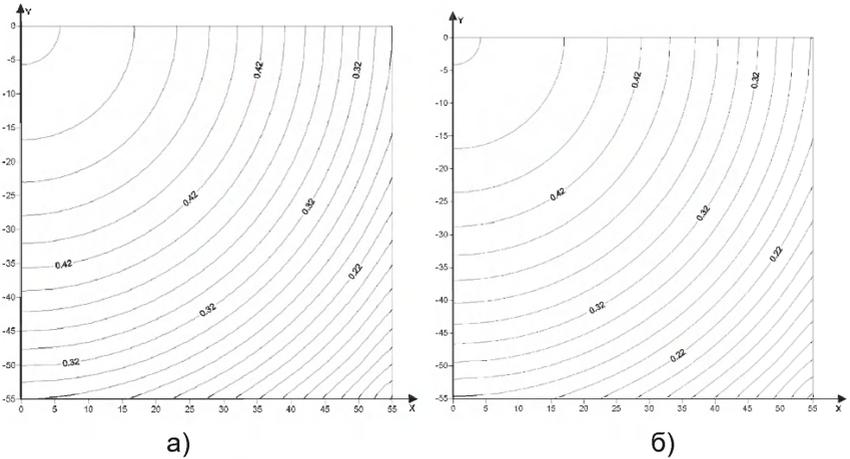


Рисунок 7 - Изолинии скорости – а) при 1438 К и б) 1478 К

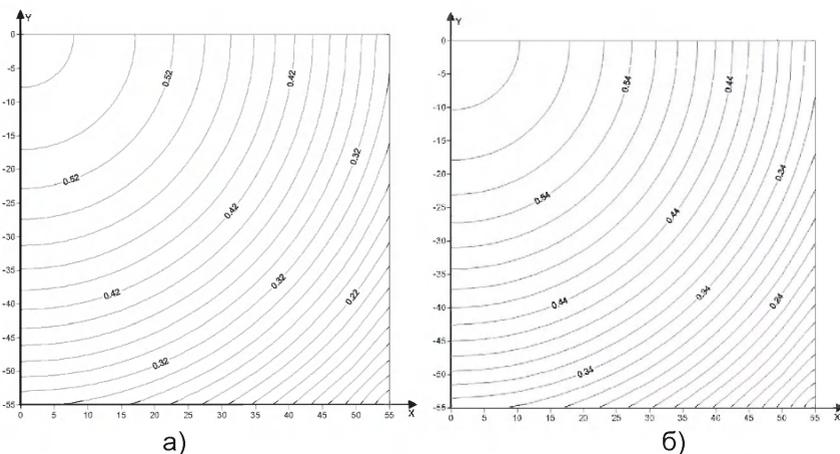


Рисунок 8 - Изолинии скорости а) при 1518 К и б) при 1558 К

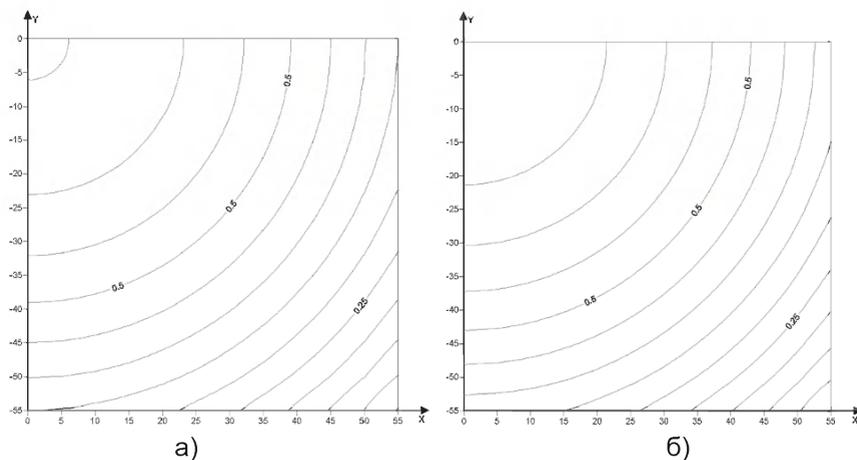


Рисунок 9 - Изолинии скорости –а) при 1598 К и б) при 1638 К

Шаг расчета для всех температур оставался постоянным. По логике построения изолиний количество их должно оставаться постоянным. Но в данном случае ситуация другая. Число изолиний при соответствующих температурах следующее:

T, К	1358	1398	1438	1478	1518	1558	1598	1638
n – число изолиний	19	21	23	24	26	28	12	12

Эти данные показывают, что число изолиний проходит через максимум при температуре 1558 К. При меньших температурах, например при 1358 К, а также при больших температурах, например при 1598 К, распределение скоростей не так плотно. Это, возможно, связано с тем, что расплав вблизи температуры плавления неоднороден из-за существования в нем кластеров образований. А неоднородность при температурах 1598 К и выше связана с тепловым разрыхлением структуры расплавленного металла и не является технологически целесообразной, поскольку приводит к образованию механических дефектов готовой продукции.

Данный метод расчета может быть применен для расчета движения расплава меди при розливе из конвертеров, из анодных печей, а также в линии непрерывного литья и прокатки при производстве медной катанки. Примечательно, что эта температура близка к оптимальной температуре розлива меди на СП «Казкат» в Жезказгане [7-12].

Вывод. Таким образом, теоретические выкладки по расчету оптимальной температуры текучести (вязкости) в равновесной системе и с учетом скорости движения расплава являются согласованными, находясь в интервале оптимума 1423-1558 К, близкого к температурам реального движения расплавов в промышленных условиях.

Список литературы

- 1 Регель А.Р., Глазов В.М. Физические свойства электронных расплавов. М., 1980.- 296с.
- 2 Anisimov, V.I., Dremov, V.V., Korotin, M.A. First principles electronic structure calculation and simulation of the evolution of radiation defects in plutonium by the density functional theory and the molecular dynamics approach. The Physics of Metals Metallography. 2013.- V.114.- P.1087-1122.- [Режим доступа]: <https://doi.org/10.1134/S0031918X13130012>
- 3 Kato Yasumasa, Tanahashi Takahico. Finite-element method for three-dimensional incompressible viscous flow using simultaneous relaxation of velocity and Bernoulli function. 1st report flow in a lid-driven cubic cavity at Re=5000. Trans. Jap. Soc. Mech. Eng., 1991.- V. 57.- № 540.- P. 2640-2647.
- 4 Honda Itsuro, Ohba Hideki, Tanigawa Yuji, Nakama Tetsuji. Numerical analysis of a flow in a three-dimensional cubic cavity. Trans. Jap. Soc. Mech. Eng., 1991.- V. 57.- № 540.- P. 2627-2631.
- 5 Yan X. Wei L, Lei Yao, Xin Xue, Yanbin Wang, Gang Zhao, Juntao Li, Qingyan Xu Numerical Simulation of Meso-Micro Structure in Ni-Based Superalloy During Liquid Metal Cooling. Proceedings of the 4th World Congress on Integrated Computational Materials Engineer-

ing (ICME 2017). The Minerals, Metals & Materials Series., P. 249-259, [Режим доступа]: https://doi.org/10.1007/978-3-319-57864-4_23

6 *Kazhikenova S. Sh.* Monitoring of Process Flow Diagrams in the Production of Ferrous Metals. Refractories and Industrial Ceramics. – SpringerLink, 2016. - Vol.57.- №4.- P.360-363, [Режим доступа]:<http://link.springer.com/article/10.1007/s11148-016-9984-8>

7 *Кажикенова С.Ш., Шалтаков С. Н., Исагулов А.З.* Физико-химические аспекты теории металлургических процессов. Караганда. Издательство КарГТУ, 2010.- 257с.

8 *Максимов Е.В., Торговец А.К.* Механика жидкостей, газов и сыпучей среды. Алматы: РИК, 1997.- 254 с.

9 *Сулейменов Т.* Квантохимическая природа ближнего порядка в неупорядоченных системах. Диссертация на соискание ученой степени доктора химических наук. Караганда: ДГП ХМИ им. Ж. Абишева, 2004. - 191с.

10 *Назаренко В.И., Полухин В.А., Белякова Р.М., Ухов В.Ф.* Модель жидкого металла при температуре плавления. Металлофизика. 1981.- № 5. - С. 122-126.

11 *Lobodyuk, V.A., Koval', Y.N. & Pushin, V.G.* Crystal-structural features of pretransition phenomena and thermoelastic martensitic transformations in alloys of nonferrous metals. The Physics of Metals Metallography. 2011.-Vol.- 111.- P. 165–189. [Режим доступа]: <https://doi.org/10.1134/S0031918X11010212>

12 *Шпильрайн Э.Э., Фомин В.А., Сковородько С.Н., Сокол Г.Ф.* Исследование вязкости жидких металлов. М.: Наука, 1983. - 244 с.

Кажикенова С.Ш. - доктор технических наук, профессор,
e-mail: sauleshka555@mail.ru

Мергембаева А.Ж. - преподаватель, e-mail: aizhan.mergembaeva@mail.ru