

УДК 532.5; 532.72
PACS 47.55.pd

О необычном поведении расплава Al – Si в тонких капиллярах

В. А. Демин^a, А. И. Мизев^b, М. И. Петухов^a, А. В. Шмыров^b

^a Пермский государственный национальный исследовательский университет
614990, Пермь, ул. Букирева, 15, email:demin@psu.ru

^b Институт механики сплошных сред УрО РАН, 614013, Пермь, ул. Акад. Королева, 1
email: alex_mizev@icmm.ru

В работе изложены результаты численного моделирования процесса разделения бинарного металлического расплава Al – Si, целиком заполняющего тонкий неоднородно нагретый капилляр. Ранее экспериментально и теоретически было изучено поведение похожих эвтектических расплавов и построена модель изучаемого явления. При этом в качестве рабочих смесей рассматривались следующие пары металлов: Pb – Sn, Pb – Bi, Cd – Bi, Zn – Al, Bi – Sb, Cu – Sn, Cu – Pb. В начальный момент времени распределение компонентов бинарного расплава контролировалось и было однородным по объему. Во всех перечисленных расплавах в ходе экспериментов наблюдалось аномально быстрое перераспределение тяжелого компонента в нижнюю часть капилляра. В опытах характерная разность концентраций на торцах достигала 20 %. Одно из объяснений данного поведения было дано авторами этой статьи и основывалось на предположении о ключевой роли сил поверхностного натяжения для поверхностно-активного компонента в рассматриваемых смесях. На основе закономерностей межфазной гидродинамики была построена модель данного явления, в рамках которой предполагалось, что алундовые или стеклянные стенки капилляров характеризуются несмачиваемостью по отношению к изучаемым парам металлов. Помимо этого в рабочем пространстве печи при выдержке металлов в расплавленном состоянии объективно имеет место неоднородное распределение температуры, соответствующее подогреву сверху (так называемая тепловая шапка). В результате за счет термокапиллярной силы вдоль границы раздела расплав – твердая граница организуется регулярный массоперенос тяжелого поверхностно-активного компонента в нижнюю часть капилляра, где примесь постепенно накапливается до тех пор, пока все потоки, вызванные внешними силами, на поверхности и в объеме не скомпенсируются концентрационно-капиллярной силой и диффузией. В то же время экспериментально было обнаружено, что сплав Al – Si ведет себя аномально по отношению ко всем перепробованным парам металлов. Здесь, наоборот, тяжелый компонент накапливается в верхней части капилляра. Объяснение этой аномалии дается в данной статье и заключается в том, что поверхностно-активным в этой паре металлов является легкий алюминий. Именно этот компонент выдавливается на поверхность и под действием термокапиллярной силы переносится вниз вдоль поверхности капилляра. Затем за счет десорбции он возвращается в объем, где и накапливается. Несмотря на то, что в результате процессов переноса возникает неустойчивая стратификация, легкий компонент не в состоянии конвективно быстро всплыть по причине большого гидродинамического сопротивления тонкого капилляра. Как показывают оценки и прямое численное моделирование, термокапиллярный механизм в данной геометрии доминирует над архимедовой подъемной силой, поэтому приток легкого компонента в нижнюю часть капилляра превалирует над убылью, что и вызывает накопление тяжелого компонента в верхней части канала.

Ключевые слова: эвтектический расплав Al – Si, тонкий капилляр, несмачиваемые стенки, аномальное продольное распределение легкого компонента

Поступила в редакцию 04.01.2018; принята к опубликованию 22.01.2018

On an unusual behavior of the melt Al – Si in thin capillaries

V. A. Demin^a, A. I. Mizev^b, M. I. Petukhov^a, A. V. Smyrov^b

^a Perm State National Research University, Bukireva St. 15, 614990, Perm

email: demin@psu.ru

^b Institute of Continuous Media Mechanics UrB of RAS, Akad. Koroleva St., 1, 614013, Perm

email: alex_mizev@icmm.ru

The numerical simulation is devoted to the division of binary metal melt Al – Si filling the thin aluminum or quartz capillary. The results of calculations have been gotten for cylindrical channel heated from above. Earlier the behaviour of the similar eutectic melts Pb – Sn, Pb – Bi, Zn – Al, Cd – Bi, Bi – Sb, Cu – Sn, Cu – Pb was considered experimentally and theoretically. The adequate theory of the observed physical phenomena was constructed for these pairs of metals. In experiments the binary melt was prepared to be homogeneous at the initial moment of time. The relatively quick and significant division of a mixture on components was observed for each binary melt. The specific feature of the process was found, namely, the heavy component moved to the lower part of the capillary. The character concentrations difference on the edges of the channel reached to the sufficiently big value 20 %. The explanation of the similar phenomenon has been done by the authors of this article and is based on the assumption of the key role of the interfacial tension on the boundary between melt and aluminum wall. It is supposed that the condition of non-wetting is fulfilled on the aluminum or quartz walls of the capillary for the metal pairs listed above. Thus, the surface active component appears on the interphase over the phenomenon of adsorption. In experiments under discussion the small temperature gradient oriented vertically upward takes place always in the working space of the smelting furnace. So the thermocapillary force arises on the interphase and generates the large-scale movement in the volume. The equations and laws of interfacial hydrodynamics are valid in this case and can be applied to describe the heat and mass transfer in the liquid binary metals. The transfer of heavy surface-active agent takes place along the direction where the surface tension increases i.e. to the down edge of the capillary. Heavy component continues to accumulate in lower part of the channel so long as all fluxes, caused by external forces, will be equilibrated in the volume and on the surface by the concentration-capillary force and diffusion. On the other hand it has been discovered experimentally that the alloy Al – Si behaves as anomalous melt in relation to all tested pairs of metals. On the contrary to the previous data the heavy component (silicon) accumulates in the top part of the capillary. The explanation of such anomaly is given in this article. It is necessary only to take into account in theoretical model the fact that the light aluminum is surface-active agent in our pair of metals. This component is pressed out of the volume on the surface and under the action of thermocapillary force is transferred downwards along boundary of a channel. Then it returns inside the volume near the bottom by means of the desorption. This process generates the unstable stratification since the light component is located in lower part and at the same time the heavy one is lifted to the top of the capillary. In spite of convective instability there is no large-scale transfer of the light admixture upwards because of heating from above and big hydrodynamic resistance of a thin capillary. The estimations and direct numerical modeling show that the thermocapillary mechanism dominates above the resulting Archimedean force for given geometry, therefore inflow of a light component to the bottom part of a capillary prevails of a loss that causes accumulation of the aluminum in the bottom of channel.

Keywords: eutectic melt Al – Si; thin capillary; non-wetting boundaries; anomalous longitudinal distribution of light component

Received 04.01.2018; accepted 22.01.2018

doi: 10.17072/1994-3598-2018-1-26-35

1. Введение

1.1. Исходные экспериментальные данные

Задача гомогенизации расплавов металлов всегда являлась и продолжает оставаться актуальной

проблемой в металлургии. Однородность физических свойств металлов определяется множеством факторов. В первую очередь в их число входят внешние физические (как термодинамические, так и механические) условия. Однако даже в случае одинаковых внешних условий структура сплава в

твердом состоянии оказывается сильно зависящей от эволюционной составляющей процесса солидификации. В частности, один из серьезных дискуссионных многоаспектных вопросов связан со свойством неполной смешиваемости металлов. В конечном счете, проблема неполной растворимости одних металлов в других при нахождении обоих компонентов в расплавленном состоянии обусловило проведение исследований [1–3], результаты которых обсуждаются ниже.

В экспериментах [1] изучалось поведение расплавов следующих пар металлов: Pb – Sn, Cd – Bi, Zn – Al, Bi – Sb, Cu – Sn, Cu – Pb. Смеси в расплавленном состоянии перед началом эксперимента тщательно перемешивались. Концентрации компонентов, как правило, были сопоставимыми. После перемешивания расплав засасывался в тонкий алундовый или кварцевый капилляр диаметром порядка $1 \div 2$ мм. Длина капилляра варьировалась в пределах от 40 до 220 мм. Далее капилляр помещался на $1 - 2$ ч в печь в вертикальном положении. Образец располагался в той части пространства печи, в которой распределение температуры было почти однородным (разница между верхом и низом контролировалась до $1 - 5$ К). Абсолютная температура в рабочем пространстве печи превышала точку плавления на несколько десятков градусов, так что оба компонента всегда находились в расплавленном состоянии. По окончании выдержки капилляр быстро охлаждался путем погружения его в холодную воду, покрытие удалялось, после чего исследовались продольное распределение компонентов и другие характеристики образца.

В результате во всех опытах было обнаружено специфическое продольное перераспределение обоих компонентов. В частности, зависимость концентрации тяжелого компонента от высоты напоминала барометрическое распределение. Это послужило причиной того, что в работе [2] была сделана попытка теоретического объяснения, основанного на эффекте седиментации кластеров тяжелого компонента в поле тяжести. Однако различные оценки показывают несостоятельность этой гипотезы, так как время осаждения даже достаточно больших кластеров должно быть чрезвычайно велико. И это время на многие порядки превышает продолжительность процесса выдержки расплава в печи. Позднее результаты рентгеноструктурного анализа [4] не подтвердили предположения о наличии кластеров атомов нужных размеров в структуре сплава после охлаждения.

1.2. Теоретическая модель явления

Более адекватная теоретическая модель явления была предложена в работах [5–7]. В ее основе лежит учет сил поверхностного натяжения на границе раздела расплава и алундовой поверхности

капилляра. Следует заметить, что в опытах эффект разделения наблюдался только в алундовых и стеклянных капиллярах. За счет эффекта несмачивания на боковой поверхности канала возникает монотонное опускное движение тяжелого поверхностно-активного компонента в нижнюю часть канала, где за конечное время порядка одного – двух часов происходит его постепенное накопление. Сначала на основе уравнений межфазной гидродинамики были проделаны пробные расчеты для модельных чисел Прандтля с учетом только термокапиллярной силы на поверхности [5]. Позднее в модель был включен концентрационно-капиллярный механизм, и расчеты были распространены на реалистичные для жидких металлов значения чисел Прандтля [6,7].

Прямое численное моделирование позволило воспроизвести в расчетах все основные особенности экспериментов [1,4]. Удалось правильно воспроизвести время разделения ($1-2$ ч), была получена характерная концентрационная вилка с разделением на компоненты порядка $20-30\%$, качественно правильно были описаны радиальные распределения компонентов в поперечном сечении капилляра. Показана принципиальная роль поверхностно-активного компонента в рассматриваемых процессах.

1.3. Исключение из правила для поверхностно-активного легкого компонента

Однако, как оказалось при аккуратном анализе свойств смесей, из общего правила имеются исключения [8]. Иными словами, есть примеры, когда смесь при разделении ведет себя нетипично и даже в некотором смысле неожиданно с точки зрения теории конвективной устойчивости. Подобное anomальное поведение свойственно эвтектическому расплаву Al – Si (алюминий, кремний).

Любопытно, что в твердом состоянии плотность алюминия больше, чем плотность кремния ($\rho_{Al} = 2.69$ г/см³, $\rho_{Si} = 2.33$ г/см³). Однако при увеличении температуры тот факт, что атомный вес кремния больше, чем у алюминия, все же дает о себе знать, и в жидком состоянии плотность кремния становится больше, чем у алюминия ($\rho_{Al} = 2.3$ г/см³ при $T = 950$ °С, $\rho_{Si} = 2.33$ г/см³ при $T = 1450$ °С). Оказывается, что в опытах по разделению расплава Al – Si избыток тяжелого компонента в жидком состоянии наблюдается не в нижней, а в верхней части капилляра. С точки зрения теории конвективной устойчивости это распределение является anomальным и, вообще, необъяснимо с точки зрения седиментационных эффектов. Однако, как будет показано ниже, теоретическая модель, предложенная и развитая в [5–7], позволяет объяснить, в том числе, и нетипичное поведение расплава Al – Si. Вместе с тем в ходе численного моделирования необходимо учитывать то, что

поверхностно-активным в этой паре является алюминий, а не кремний.

2. Постановка задачи

2.1. Геометрия задачи

Будем рассматривать длинный цилиндрический капилляр (рис. 1), целиком заполненный жидкой бинарной смесью легкоплавких металлов. Пусть капилляр расположен вертикально в поле тяжести и нагревается сверху так, что на его боковой границе имеет место продольное линейное распределение температуры $T = \Theta z/h$ (Θ – разность температур между торцами, h – длина канала в размерных единицах).

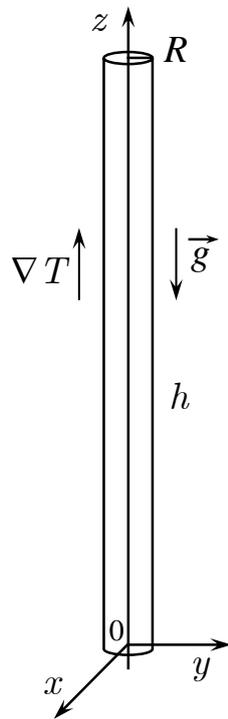


Рис. 1. Капилляр цилиндрической формы при нагреве сверху. Система координат

За счет специфики жидкой смеси и свойств стенок капилляра на внешней цилиндрической поверхности расплава имеет место условие полного несмачивания. По причине неоднородности температурного натяжения в зависимости от температуры на свободной поверхности возникает тангенциальная сила, направленная в сторону уменьшения температуры. Иными словами, эта сила направлена вертикально вниз. Интегральный расход жидкости в горизонтальном сечении на любой высоте должен быть равен нулю. Поэтому в середине канала должно возникать слабое возвратное движение, обеспечивающее отток жидкости в верхнюю часть капилляра.

2.2. Основные уравнения

При описании процессов тепло- и массообмена в жидкой неоднородной по температуре бинарной смеси металлов воспользуемся системой уравнений тепловой конвекции для несжимаемой жидкости в приближении Буссинеска [9]:

$$\frac{\partial \vec{v}}{\partial t} + (\vec{v}\nabla)\vec{v} = -\frac{1}{\rho}\nabla p + \nu\Delta\vec{v} + g(\beta_T T + \beta_C C)\vec{\gamma} \quad (1)$$

$$\frac{\partial T}{\partial t} + (\vec{v}\nabla)T = \chi\Delta T, \quad \text{div}\vec{v} = 0, \quad (2)$$

$$\frac{\partial C}{\partial t} + (\vec{v}\nabla)C = D\Delta C. \quad (3)$$

Здесь \vec{v} , p , T , C – соответственно, поля скорости, давления, температуры и объемной концентрации легкого компонента смеси, β_T , β_C – коэффициенты температурного и концентрационного изменения плотности, ρ – плотность смеси, χ , ν , D – соответственно, коэффициенты теплопроводности, кинематической вязкости и диффузии в объеме жидкости, g – ускорение свободного падения, $\vec{\gamma}$ – единичный вектор, направленный вертикально вверх.

На свободной боковой поверхности поведение поля концентрации легкого компонента описывается отдельным уравнением, в котором учитываются эффекты адсорбции и десорбции [10]:

$$\frac{\partial \Gamma}{\partial t} + \nabla^s(\vec{v}\Gamma) = D_s\Delta^s\Gamma + k_A C - k_D\Gamma. \quad (4)$$

где Γ – поверхностная концентрация, k_A , k_D – размерные коэффициенты адсорбции и десорбции, D_s – коэффициент поверхностной диффузии. Индекс s над операторами набла и Лапласа в уравнении (4) означает дифференцирование по координатам поверхности.

Далее будем считать, что горизонтальные торцы капилляра являются твердыми и непроницаемыми для вещества, поэтому пусть на них выполняются условия прилипания и отсутствия потока вещества через границу:

$$z = 0, h: \quad \vec{v} = 0, \quad \partial\Gamma/\partial z = 0, \quad \partial C/\partial z = 0. \quad (5)$$

На свободной вертикальной границе учтем простейшим образом явления адсорбции и десорбции. Закон сохранения массы на поверхности с учетом всех возможных потоков вещества позволяет связать объемную и поверхностную концентрации следующим условием [11]:

$$r = R: \quad -D\frac{\partial C}{\partial r} = k_A C - k_D\Gamma. \quad (6)$$

Перепишем уравнения (1) – (4) и граничные условия (5), (6) в безразмерном виде, приняв за единицы измерения расстояния, времени, скорости, температуры, давления, объемной и поверх-

ностной концентрации следующие величины: R , R^2/ν , χ/R , Θ , $\rho\chi\nu/R^2$, C_0 , RC_0 . Здесь R – радиус канала, C_0 – начальная объемная концентрация. После процедуры обезразмеривания уравнения и граничные условия записываются в следующей форме:

$$\frac{\partial \bar{v}}{\partial t} + \frac{1}{\text{Pr}}(\bar{v}\nabla)\bar{v} = -\nabla p + \Delta \bar{v} + (\text{Ra}_T + \text{Ra}_c C)\bar{\gamma}, \quad (7)$$

$$\text{Pr} \frac{\partial T}{\partial t} + (\bar{v}\nabla)T = \Delta T, \quad \text{div} \bar{v} = 0, \quad (8)$$

$$\frac{\partial C}{\partial t} + \frac{1}{\text{Pr}}(\bar{v}\nabla)C = \frac{1}{\text{Sc}} \Delta C, \quad (9)$$

$$\frac{\partial \Gamma}{\partial t} + \frac{1}{\text{Pr}} \nabla^s (\bar{v}\Gamma) = \frac{1}{\text{Sc}_s} \Delta^s \Gamma + k_+ C - k_- \Gamma, \quad (10)$$

$$r = 1: \quad -\frac{1}{\text{Sc}} \frac{\partial C}{\partial r} = k_+ C - k_- \Gamma, \quad (11)$$

$$z = 0, H: \quad \bar{v} = 0, \quad \partial \Gamma / \partial z = 0, \quad \partial C / \partial z = 0. \quad (12)$$

В краевой задаче (7)–(12) имеем следующий набор безразмерных управляющих параметров:

$$\begin{aligned} \text{Ra} &= \frac{g\beta_l \Theta R^3}{\nu\chi}, \quad \text{Ra}_c = \frac{g\beta_c C_0 R^3}{\nu\chi}, \\ \text{Pr} &= \frac{\nu}{\chi}, \quad \text{Sc} = \frac{\nu}{D}, \quad \text{Sc}_s = \frac{\nu}{D_s}, \\ k_+ &= \frac{k_A R}{\nu}, \quad k_- = \frac{k_D R^2}{\nu}, \end{aligned} \quad (13)$$

где Ra , Pr , Sc – числа Рэлея, Прандтля и Шмидта, Sc_s – поверхностное число Шмидта, H – безразмерная высота капилляра в граничном условии (12). Параметры k_+ , k_- имеют смысл безразмерных коэффициентов адсорбции и десорбции, Ra_c – концентрационный аналог числа Рэлея.

Задача решалась в осесимметричной постановке: $\partial/\partial\phi = 0$, где ϕ – угловая переменная в цилиндрических координатах. В дополнение предполагалось, что $v_\phi = 0$, поэтому описание течения производилось в терминах функции тока ψ и вихря φ , которые в цилиндрических координатах вводятся следующим образом:

$$\begin{aligned} v_r &= \frac{1}{r} \frac{\partial \psi}{\partial z}, \quad v_z = -\frac{1}{r} \frac{\partial \psi}{\partial r}, \\ \varphi &= \frac{1}{r} \frac{\partial^2 \psi}{\partial r^2} - \frac{1}{r^2} \frac{\partial \psi}{\partial r} + \frac{1}{r} \frac{\partial^2 \psi}{\partial z^2}. \end{aligned}$$

В терминах функции тока и вихря уравнения переноса тепла и Навье – Стокса, а также уравнения для объемной и поверхностной концентраций (7)–(10) окончательно имеют вид

$$\begin{aligned} \frac{\partial \varphi}{\partial t} + \frac{1}{r\text{Pr}} \left(\frac{\partial \psi}{\partial z} \frac{\partial \varphi}{\partial r} - \frac{\partial \psi}{\partial r} \frac{\partial \varphi}{\partial z} - \frac{\varphi}{r} \frac{\partial \psi}{\partial z} \right) = \\ = \Delta \varphi - \frac{1}{r^3} \frac{\partial^2 \psi}{\partial z^2} - \left(\text{Ra} \frac{\partial T}{\partial r} + \text{Ra}_c \frac{\partial C}{\partial r} \right), \end{aligned} \quad (14)$$

$$\text{Pr} \frac{\partial T}{\partial t} + \frac{\partial \psi}{\partial z} \frac{\partial T}{\partial r} - \frac{\partial \psi}{\partial r} \frac{\partial T}{\partial z} = \Delta T, \quad (15)$$

$$\frac{\partial C}{\partial t} + \frac{1}{\text{Pr}} \left(\frac{\partial \psi}{\partial z} \frac{\partial C}{\partial r} - \frac{\partial \psi}{\partial r} \frac{\partial C}{\partial z} \right) = \frac{1}{\text{Sc}} \Delta C, \quad (16)$$

$$\frac{\partial \Gamma}{\partial t} - \frac{1}{r\text{Pr}} \frac{\partial}{\partial z} \left(\frac{\partial \psi}{\partial r} \Gamma \right) = \frac{1}{\text{Sc}_s} \frac{\partial^2 \Gamma}{\partial z^2} + k_+ C - k_- \Gamma, \quad (17)$$

где оператор Лапласа в цилиндрических координатах с учетом осесимметричности решения имеет вид:

$$\Delta = \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}.$$

На оси капилляра были приняты стандартные для осесимметричных конвективных задач граничные условия

$$r = 0: \quad \psi = \partial \psi / \partial r = \varphi = 0. \quad (18)$$

При учете на свободной боковой границе термо- и концентрационно-капиллярного механизмов зависимость поверхностного натяжения от температуры и поверхностной концентрации рассматривалась в линейном приближении. В этом случае уравнение баланса касательных напряжений дает на границе дополнительное условие:

$$r = R: \quad \eta \frac{\partial v_z}{\partial r} = -\sigma_T \frac{\partial T}{\partial z} - \sigma_C \frac{\partial \Gamma}{\partial z}.$$

где η – динамическая вязкость, σ_T и σ_C – соответственно, коэффициенты, описывающие зависимость поверхностного натяжения от температуры и концентрации. После обезразмеривания это граничное условие приводится к виду:

$$r = 1: \quad \varphi = \text{Ma}_T \frac{\partial T}{\partial z} + \text{Ma}_C \frac{\partial \Gamma}{\partial z}, \quad (19)$$

Здесь и далее Ma_T и Ma_C – температурное и концентрационное числа Марангони:

$$\text{Ma}_T = \sigma_T \frac{\Theta R}{\eta\chi}, \quad \text{Ma}_C = \sigma_C \frac{C_0 R^2}{\eta\chi}. \quad (20)$$

В результате имеем десять безразмерных параметров (13), (20) в рассматриваемой краевой задаче, включая дополнительно безразмерную длину капилляра H .

2.3. Методика решения

Система дифференциальных уравнений в частных производных (14)–(17) совместно с крайними условиями (11), (12), (18) и (19) решалась методом конечных разностей. Алгоритм был разработан в соответствии с явной схемой решения подобных задач [12] и основан на двухполевой методике [13]. При аппроксимации производных по времени и производных по координатам использовались, соответственно, односторонние и центральные разности. Шаг по времени выбирался из соображений устойчивости численной процедуры и вычислялся по формуле $dt = \text{Pr} \cdot \min(h_r^2, h_z^2)/a$, где h_r и h_z – шаги вдоль координат r и z ; a – параметр,

значение которого для принятого обезразмеривания оценивается неравенством $a > 4$ [12]. При решении уравнения Пуассона для функции тока использовался метод последовательной верхней релаксации [12]. В ходе расчетов по времени применялась процедура установления. Компьютерный код был реализован на языке программирования FORTRAN-90. Задача решалась на суперкомпьютере “ПГУ–Кеплер” Научно-образовательного центра Пермского государственного национального исследовательского университета “Параллельные и распределенные вычисления”. При создании машинного кода использовался компилятор Intel Parallel Studio XE 2017 с высокими оптимизационными характеристиками. При проведении численного моделирования осуществлялась регулярная запись искомым полей концентрации, завихренности, функции тока и температуры на диск, что позволяло анализировать структуру течения в каждый момент времени.

Для повышения точности и, как следствие, устойчивости счета в граничном условии (11) на поток вещества, а также в нелинейном слагаемом уравнения (17) для поверхностной концентрации производные полей функции тока и концентрации находились при помощи многоточечных аппроксимационных формул. Начальными условиями служили невозмущенные поля функции тока ($\psi = 0$), завихренности ($\varphi = 0$), объемной ($C = 0.05$) и поверхностной концентраций ($\Gamma = 4 \cdot 10^{-3}$). Возмущения в поле температуры внутри капилляра в начальный момент времени также отсутствовали ($T = 0$), однако на поверхности задавалось ее линейное распределение таким образом, чтобы градиент был направлен вверх и соответствовал нагреву сверху, что позволяло моделировать тепловую шапку в рабочем пространстве печи. В расчетах по координатам r и z использовалась рабочая сетка 21:311, при этом высота канала бралась много больше толщины и варьировалась в пределах $H = 60 \div 70$.

2.4. Анализ результатов на сходимость

Расчеты проводились при некоторых фиксированных значениях параметров: $Ra = 0.015$, $Ra_c = 0.05$, $Pr = 0.045$, $Sc = 300$, $Sc_s = 180$, $k_+ = 2 \cdot 10^{-5}$, $k_- = 0.006$. С целью контроля сходимости результатов были выполнены расчеты на разных сетках. В таблице приведены значения относительной погрешности расчета (в процентах) в зависимости от общего числа узлов на этапе установления: показаны изменения величин при переходе с предыдущего уровня точности на текущий.

Представленные табличные данные, визуализированные графически на рис. 2, демонстрируют удовлетворительную сходимость как по максимуму функции тока (локальной характеристике), так и суммарной кинетической энергии течения.

Таблица 1. Оценка сходимости метода

n	N_1	N_2	$\Delta E, \%$	$\Delta \psi_{max}, \%$
1	7	121	-	-
2	9	141	$\Delta E_{12} = 23.18$	$\Delta \psi_{12} = 3.764$
3	11	161	$\Delta E_{23} = 14.66$	$\Delta \psi_{23} = 1.084$
4	13	177	$\Delta E_{34} = 10.14$	$\Delta \psi_{34} = 0.574$
5	15	199	$\Delta E_{45} = 7.44$	$\Delta \psi_{45} = 0.399$
6	17	229	$\Delta E_{56} = 5.70$	$\Delta \psi_{56} = 0.398$
7	19	265	$\Delta E_{67} = 4.51$	$\Delta \psi_{67} = 0.323$
8	21	311	$\Delta E_{78} = 3.66$	$\Delta \psi_{78} = 0.313$
9	23	369	$\Delta E_{89} = 3.03$	$\Delta \psi_{89} = 0.244$

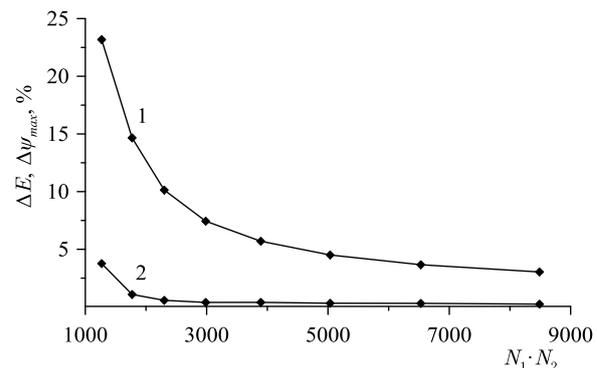


Рис. 2. Относительная ошибка для кинетической энергии (% , кривая 1) и максимума функции тока (% , кривая 2) в зависимости от общего числа узлов сетки

3. Результаты и обсуждение

В отличие от работ [5–7] интерес при обсуждении теперь представляет легкий компонент. Именно он является поверхностно-активным, и расчет распределения проводится для него. За счет неоднородности температуры условие полного несмачивания на поверхности раздела расплав-алунд порождает тангенциальную термокапиллярную силу на вертикальной границе. Это приводит к генерации опускного течения легкого компонента вблизи стенки капилляра, что является весьма неожиданным для конвекции, когда легкая составляющая не всплывает, а тонет. Далее легкий компонент смеси накапливается в нижней части образца по причине его переноса в объем благодаря эффекту десорбции. В объеме примесь лишь частично переносится вверх, так как, во-первых, капилляр подогревается сверху, а, во-вторых, обладает большим гидродинамическим сопротивлением вследствие малой площади поперечного сечения.

Поля функции тока, температуры и концентрации (в долях) изображены на рис. 3 в один из моментов времени на этапе установления. Результаты расчета на рис. 3 приведены для следующих значений чисел Марангони и высоты канала: $Ma_T = 0.8$, $Ma_F = 0.4$, $H = 60$. Из рис. 3а видно, что легкий компонент накапливается внизу полости вблизи

нижнего торца в полном соответствии с теоретическими предпосылками. Изолинии концентрации имеют конусообразный вид с максимумом при $r = 0$, что указывает на наличие слабого подъемного движения вдоль оси. Изолинии температуры наклонены похожим образом, но совсем незначительно и тоже отвечают увеличению температуры при приближении к оси канала. В отличие от плоской задачи в полости цилиндрической формы область поля функции тока, которая отвечает опускному движению, не является теперь симметричной по отношению к той части, которая отвечает подъемному движению. Иными словами, изолинии функции тока распределены заметно плотнее вблизи стенки капилляра (рис. 3б).

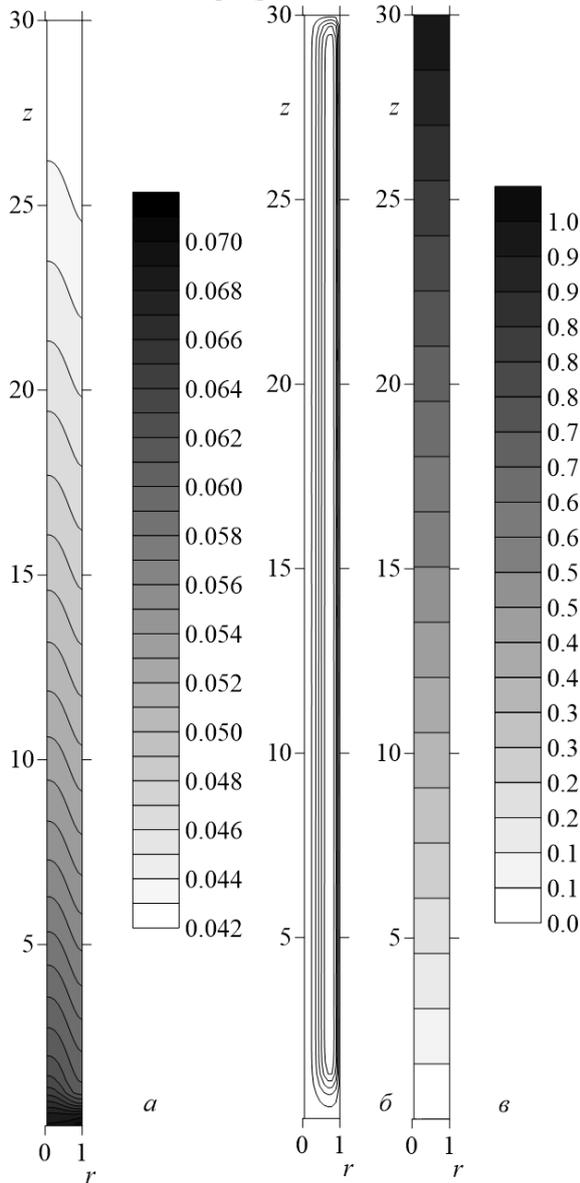


Рис. 3. Поле концентрации легкого компонента (а), функции тока (б) и температуры (в) в капилляре в момент времени $t = 10000$

Обработка полного поля объемной концентрации позволяет получить распределение легкого компонента вдоль вертикальной координаты

(рис. 4,5). Из рис. 4 видно, что возникающее распределение в объеме весьма близко к экспоненциальному, т.е. зависимость напоминает барометрическое распределение, хотя на самом деле его природа совершенно иная. Следует обратить внимание на то, что качественно этот график очень хорошо согласуется с экспериментом. В частности, как и в опыте, при определенном соотношении параметров это распределение может вырождаться в практически линейную зависимость.

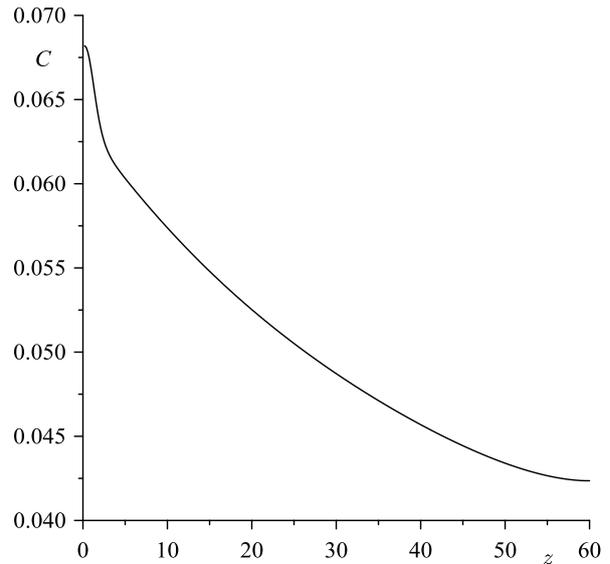


Рис. 4. Профиль объемной концентрации легкого компонента вдоль оси симметрии капилляра

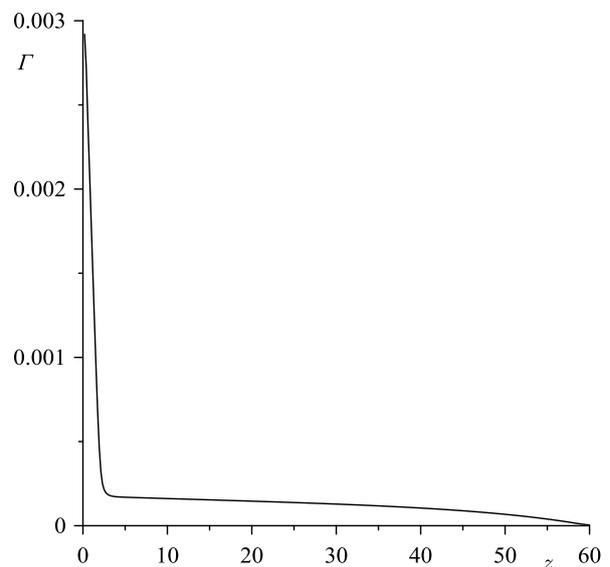


Рис. 5. Профиль поверхностной концентрации легкого компонента вдоль оси симметрии капилляра

На рис. 5 изображен профиль поверхностной концентрации (в долях). Так как течение на поверхности является достаточно интенсивным, поверхностно-активный компонент активно сносится

вниз капилляра, поэтому при определенных значениях теплового числа Марангони распределение поверхностной концентрации может принимать пограничный характер.

Проведенные расчеты показывают, что установление течения в объеме происходит за очень короткое время (рис. 6) по сравнению с продолжительностью процесса разделения изначально однородной смеси на компоненты. Этот эффект не является удивительным и согласуется со всеми на сегодняшний день имеющимися данными по намыванию примесей конвективными потоками [14, 15].

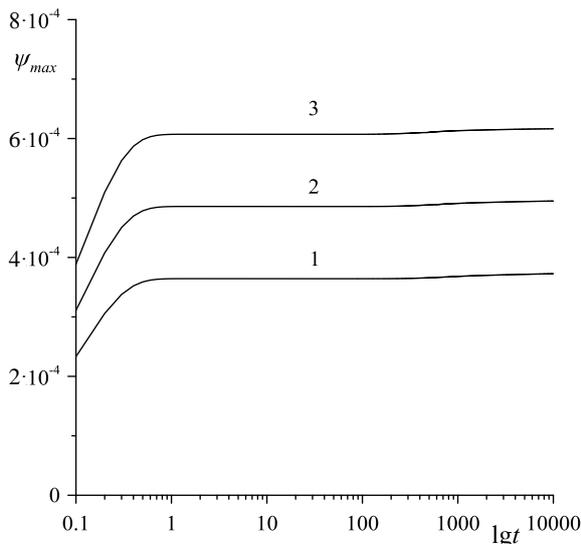


Рис. 6. Максимум функции тока в зависимости от времени; номера кривых 1–3 соответствуют $Ma = 0.6, 0.8, 1.0$

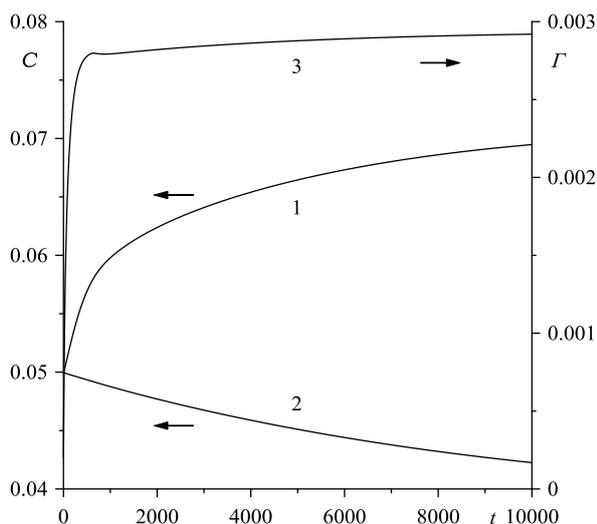


Рис. 7. Максимальное (1) и минимальное (2) значения объемной концентрации и максимум поверхностной концентрации (3) в зависимости от времени

В ходе численного моделирования разделение первоначально однородной смеси металлов на

компоненты происходит за время, сравнимое с экспериментальным.

Так, из рис. 7 видно, что перепад концентрации в 40 % достигается за 10000 безразмерных временных единиц, что соответствует при переходе к размерным единицам приблизительно 2.5 ч. При этом фиксируется постепенный выход системы на стадию насыщения. Кривая 1 на рис. 7 отвечает максимуму объемной концентрации легкого компонента внизу капилляра, кривая 2 – минимуму в верхней части образца. Полученная концентрационная вилка неплохо согласуется с экспериментальной. Очевидно, что в системе реализуется потенциально неустойчивая конфигурация, когда легкий компонент постепенно аккумулируется в нижней части капилляра. Однако помимо концентрационного механизма неустойчивости не следует забывать о наличии подогрева сверху конвективной системы. Подогрев сверху и диффузия, наоборот, делают состояние конвективной системы более устойчивым.

Скорость движения даже на поверхности образца очень мала (рис. 6), поэтому по мере стекания вниз легкий компонент сразу приобретает температуру границ на той высоте, на которой находится. Иными словами, в ходе опускного движения смесь быстро приходит в состояние теплового равновесия с внешней границей. В результате возвратное движение в верхнюю часть канала вдоль оси симметрии является следствием напорного поверхностного течения. Расплавы считаются несжимаемой жидкостью, поэтому расход в поперечном сечении на любой высоте должен быть равен нулю. Иными словами, оказывается, что термокапиллярный и адсорбционно-десорбционный механизмы создают опускное течение на поверхности, которое в состоянии привести к крупномасштабному продольному перераспределению компонентов расплава.

4. Заключение

Таким образом, теоретическая модель явления, предложенная в работе [5] и развитая в [6,7], позволяет не только адекватно воспроизвести результаты, касающиеся стандартных эвтектических расплавов, но и описать исключения из общего правила. А именно, поведение расплава Al – Si, в котором, в отличие от других рассматривавшихся ранее смесей, поверхностно активным является более легкий алюминий, правильно описывается общими уравнениями и приводит в расчетах к аномальному потенциально неустойчивому продольному распределению тяжелого компонента. Это распределение является неожиданным с точки зрения теории конвективной устойчивости, но надежно подтверждается экспериментом.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (грант № 16-01-00662).

Список литературы

1. Гаврилин И. В., Фролова Т. Б., Захаров В. П. О ликвации в жидких эвтектических расплавах // Известия АН СССР. Металлы. 1984. № 3. С. 191–193.
2. Гаврилин И. В. Седиментационный эксперимент при изучении жидких сплавов // Известия АН СССР. Металлы. 1985. № 2. С. 66–73.
3. Гаврилин И. В. Распределение углерода в жидком чугуне // Литейное производство. 1982. № 4. С. 2–4.
4. Углев Н. П., Дубровина Е. И. Радиальное распределение компонентов при расслоении металлических расплавов в капиллярах // Вестник Перм. нац. исслед. политех. ун-та. Серия: Химическая технология и биотехнология. 2015. № 1. С. 50–59.
5. Демин В. А., Петухов М. И. К вопросу о механизме крупномасштабного переноса компонентов металлических расплавов в неоднородно нагретых тонких капиллярах // Вестник Пермского университета. Физика. 2016. Вып. 3 (34). С. 65–71.
DOI: 10.17072/1994-3598-2016-3-65-71.
6. Demin V. A., Mizev A. I., Petukhov M. I. On thermocapillary mechanism of spatial separation of metal melts // Microgravity Science and Technology. 2017. DOI: 10.1007/s12217-017-9576-3.
7. Демин В. А., Петухов М. И. Крупномасштабный перенос компонентов металлических расплавов в тонких капиллярах // Вестник Томского университета. Серия: Математика и Механика. 2017. № 48. С. 57–69.
DOI: 10.17223/19988621/48/6.
8. Gavrillin I. V., Uglev N. P. Mathematical model of a stratification of metal melts in capillaries // Journal of Physics: Conference Series. 2008. Vol. 98, 022013
DOI:10.1088/1742-6596/98/2/022013
9. Гершуни Г. З., Жуховицкий Е. М. Конвективная устойчивость несжимаемой жидкости. М.: Наука, 1972. 392 с.
10. Братухин Ю. К., Макаров С. О. Гидродинамическая устойчивость межфазных поверхностей. Пермь: Изд-во Пермского ун-та, 2005. 240 с.
11. Бирих Р. В. Устойчивость однородной нестационарной диффузии ПАВ через плоскую границу раздела жидкостей // Вестник Пермского университета. Физика. 2016. Вып. 1 (32). С. 64–70.
DOI: 10.17072/1994-3598-2016-3-64-70.
12. Тарунин Е. Л. Вычислительный эксперимент в задачах свободной конвекции: учеб. пособие. Иркутск: Изд-во Иркут. ун-та, 1990. 228 с.
13. Тарунин Е. Л. Двухполевой метод решения задач гидродинамики: учеб. Пермь: Изд-во Перм. ун-та, 1985. 87 с.
14. Костарев К. Г., Пиеничников А. Ф. Влияние свободной конвекции на термодиффузию в жидкой смеси, заполняющей наклонную прямоугольную полость // Прикладная механика и техническая физика. 1986. № 5. С. 73–76.
15. Демин В. А. Конвективные сепараторы // Прикладная физика. 2013. № 4. С. 60–67.

References

1. Gavrillin I. V., Frolova T. B., Zaharov V. P. On likvatsii v zhidkih ehvtekticheskikh rasplavah (On liquation in liquid eutectic melts). *Russian metallurgy (metally)*, 1984, no. 3, pp. 191–193 (In Russian).
2. Gavrillin I. V. Sedimentatsionniy eksperiment pri izuchenii zhidkih splavov (Sedimentaional experiment in liquid alloy studying). *Russian metallurgy (metally)*, 1985, no. 2, pp. 66–73 (In Russian).
3. Gavrillin I. V. Raspredelenie ugleroda v zhidkom chugune (Carbon distribution in liquid cast iron). *Liteynoe proizvodstvo*. 1982, no. 4, pp. 2–4 (In Russian).
4. Uglev N. P., Dubrovina E. I. Radial distribution of metal melt components due to stratification in capillaries. *PNRPU Bulletin. Chemical Technology and Biotechnology*, 2015, no. 1, pp. 50–59 (In Russian).
5. Demin V. A., Petukhov M. I. On mechanism of large-scale transfer of molten metal components in non-uniformly heated thin capillaries, *Bulletin of Perm University. Physics*, 2016, 3(34), pp. 65–71.
DOI: 10.17072/1994-3598-2016-3-65-71.
6. Demin V. A., Mizev A. I., Petukhov M. I. On thermocapillary mechanism of spatial separation of metal melts. *Microgravity Science and Technology*. 2017. DOI: 10.1007/s12217-017-9576-3.
7. Demin V. A., Petukhov M. I. Large-scale transfer of molten metal components in thin capillaries. *Tomsk State University Journal of Mathematics and Mechanics*, 2017, no. 48, pp. 57–69. DOI: 10.17223/19988621/48/6.
8. Gavrillin I. V., Uglev N. P. Mathematical model of a stratification of metal melts in capillaries. *Journal of Physics: Conference Series* 2008, vol. 98, 022013. DOI:10.1088/1742-6596/98/2/022013
9. Gershuni G. Z., Zhukhovitskii E. M. *Convective stability of incompressible fluids*. Jerusalem: Keter Publishing House, 1976, 330 p.
10. Bratukhin Yu. K., Makarov S. O. *Interfacial convection*. Perm: Perm University Press, 1994, 328 p. (In Russian).
11. Birikh R. V. Stability of homogeneous non-stationary surfactant diffusion through a flat interface between liquids. *Bulletin of Perm University. Physics*, 2016, no. 1 (32), pp. 64–70.
DOI: 10.17072/1994-3598-2016-3-64-70.

12. Tarunin E.L. *Vychislitel'nyy eksperiment v zadachah svobodnoj konvekcii: ucheb. posobie* (Computational experiment in free convection problems: tutorial). Irkutsk: Irkutsk University, 1990. 228 p. (In Russian).
13. Tarunin E. L. *Dvuhpolevoj metod resheniya zadach gidrodinamiki: uchebnoe posobie* (Two-field method in hydrodynamics: tutorial). Perm: Perm University Press, 1985. 87 p.
14. Kostarev K. G., Pshenichnikov A. F. Effect of free convection on thermodiffusion in a liquid mixture filling an inclined rectangular cavity. *Journal of Applied Mechanics and Technical Physics*, 1986, vol. 27, no. 5, pp. 695–697. DOI: 10.1007/BF00916140.
15. Demin V. A. Convective separators. *Applied Physics*, 2013, no. 4, pp. 60–67.

Просьба ссылаться на эту статью в русскоязычных источниках следующим образом:

Демин В. А., Мизев А. И., Петухов М. И., Шмыров А. В. О необычном поведении расплава Al – Si в тонких капиллярах // Вестник Пермского университета. Физика. 2018. № 1 (39). С. 26–35. doi: 10.17072/1994-3598-2018-1-26-35

Please cite this article in English as:

Demin V. A., Mizev A. I., Petukhov M. I., Smyrov A. V. On an unusual behavior of the melt Al–Si in thin capillaries. *Bulletin of Perm University. Physics*, 2018, no. 1 (39), pp. 26–35. doi: 10.17072/1994-3598-2018-1-26-35