

עלון

אישח"מ

עלון האיגוד הישראלי לשיטות חישוביות במכניקה

מספר 17

מרץ 2007

עורך: דן גבעולי, הפקולטה להנדסת אוירונטיקה וחלל, טכניון, חיפה 32000, טל. 8293814 (04), פקס 8292030 (04), דואר אלקטרוני: givolid@aerodyne.technion.ac.il,
חברי ועד אישח"מ: עמנואל אור (מזכיר-גזבר), מיכאל אנגלמן, פנחס בר-יוסף, דן גבעולי, יצחק הררי (נשיא), יונתן טל (אחראי האתר), זהר יוסיבש

איש-קשר עם ECCOMAS: מישל ברקובייד

ועדת ביקורת: משה איזנברגר ועמיאל הרשאה

אתר אישח"מ (IACMM) באינטרנט: <http://www.iacmm.org.il>

רישום לחברות באגוד פרטים נוספים: באתר האיגוד הנ"ל, או פנו למזכיר-גזבר, ד"ר עמנואל אור, טל. 9908640 (04), פקס 9908164 (04), דואר אלקטרוני: emanuelo@rafael.co.il

הערות העורך:

נא שלחו לכתובת המערכת (בדואר אלקטרוני או רגיל) חומר לפרסום בעלון. ניתן ורצוי לצרף ציורים ותמונות. לידיעת חברות: ניתן גם לפרסם חומר מסחרי- פרסומי בתשלום. לפרטים נא לפנות למערכת. גירסה צבעונית של עלון זה מופיעה באתר האיגוד (ראה לעיל).

חידוש רישום באגוד:

אנא הרשמו כחברים באגוד או חדשו את חברותכם! טופס רישום עם פרטים מלאים ניתן למצוא באתר

<http://www.iacmm.org.il/member>

להיות מעניין ביותר, ויכלול הרצאת אורח של פרופ' Ekkehard Ramm מאוניברסיטת שטוטגרט, מומחה בעל שם בנ"ל במכניקה חישובית, על שיטות אלמנטים סופיים למבני קליפות, שני מושבי הרצאות, הרצאת סקירה של דן גבעולי על "מה חם היום במכניקה חישובית?" והרצאת לומדה של יצחק הררי על שיטות צעידה בזמן באנליזת אלמנטים סופיים דינמית.

הדמיה נומרית של תהליך גידול גביש ספיר

מדרכי סנטור^{1,2} ואילן גלעד²
¹רותם תעשיות² ואוניברסיטת בן-גוריון בנגב
mszan@bgu.ac.il

במסגרת פיתוח תהליכי גידול של גבישי ספיר (גביש יחיד של אלומינה Al_2O_3) בחברת רותם, נעשה מאמץ לפתח תהליך אמין לתצורת מטילים בעלי סימטריה סיבובית בקטרים שונים. לספיר מספר שימושים ייחודיים. לדוגמא, זהו החומר האולטימטיבי עבור חלונות בהם נדרשת עמידות גבוהה בהלם תרמי בטמפרטורות גבוהות ושקיפות אופטית לאורכי גל בתחום האינפרא אדום. בעבודה

ISCM-21

יום העיון ה-21 התקיים ב-19.10.06 באוניברסיטת בן-גוריון בנגב. המארגן המקומי היה זהר יוסיבש. יום העיון היה מוצלח מאד וכלל הרצאת פתיחה של פרופ' Ernst Rank, סגן הנשיא של האוניברסיטה הטכנית של מינכן, על שימוש באלמנטים מסדר גבוה למקרים בהם קוי הרשת אינם מתלכדים עם הגיאומטריה הנתונה. יום העיון נגמר בהרצאת לומדה של יצחק הררי על אנליזת אלמנטים סופיים דינמית. ההרצאה היתה מרתקת וגררה מעורבות חזקה של הקהל. חלקה השני ינתן ביום העיון הבא.

ISCM-22

יום העיון ה-22 יתקיים ב-15.3.07 בטכניון. ראו פרטים באתר האיגוד במסמך "call for papers". יום העיון צפוי

רקע תיאורטי

בנוסף לקרינה בין המשטחים החיצוניים של מרכיבי התנור השונים, בתוך גביש הספיר מתקיימים תהליכי בליעה, פליטה ופיזור חום ולכן הוא "תווך המשתתף בקרינה" (Participating media). בתהליכים בהם מנגנון של קרינה בתווך משתתף הוא דומיננטי, חישוב מעבר החום מורכב ומתבצע למעשה באמצעות מודלים מקורבים וכלים סטטיסטיים. מאפיינים נוספים הגורמים למורכבות חישוב מעבר החום במערכת הם:

- במהלך הגידול, הספיר משנה מצב צבירה והופך מנוזל למוצק, מיקומו של משטח הגבול נוזל/מוצק וצורתו משתנים בזמן והם תוצאה של החישוב. יש להתחשב בכך שבזמן מעבר הפאזה, חל שנוי של התכונות הפיזיקליות ונפלט או נקלט חום כמוס (תלוי בכיוון שינוי הפאזה).
- לספיר המותך, ערך מקדם בליעת החום עקב קרינה גבוה בסדר גודל מערכו במוצק ולכן אופי מעבר החום בגביש שונה מזה שבהתך.
- בתנור מצויים אזורים בהם משטחים קורנים מסתירים חלקית אלה את אלה ומסבכים בכך את חישוב מעבר החום בקרינה.

משואת מעבר החום בתווך מוליך ומשתתף הנה [1]:

$$\rho C_p \frac{\partial T}{\partial t} = \nabla(k\nabla T) - \nabla \bar{q}_{rad} + q''' \quad (1)$$

כאשר: T – טמפרטורה מוחלטת (K), t – זמן, ρ – משקל סגולי, Cp – קיבול חום, k – מוליכות תרמית, q''' – יצור חום פנימי ליחידת נפח, בנוסף לקרינה (במקרה הנוכחי ייצור החום על ידי חימום חשמלי של גוף החימום), ו- ∇q_{rad} הוא חום הנבלע/נוצר ליחידת נפח בגלל הקרינה. פתרון משואה זו, בתוספת תנאי שפה מתאימים תיתן את פילוג הטמפרטורות בתווך המחושב. בכדי לפתור את המשואה, יש לחשב תחילה את ערך החום הנבלע בגלל הקרינה. יש להתחשב בסיכום הערכים המגיעים (או יוצאים) מכלל הכיוונים המרחביים. לשם כך נשתמש במושג של עוצמת קרינה - i, כאשר הקשר של עוצמת הקרינה לחום העובר בקרינה נתון על ידי:

$$\bar{q}_{rad} = \int_{\omega=0}^{4\pi} i(\theta, \varphi) \cdot \vec{S} \cdot d\omega \quad (2)$$

כאשר \vec{S} הנו וקטור יחידה בכיוון כלשהו, ו- $d\omega = \sin \theta \cdot d\theta \cdot d\varphi$ יחידת זווית מרחבית. משואת עוצמת הקרינה $i(\vec{r}, \vec{S})$ (בנקודה \vec{r} וכיוון \vec{S}) בתווך משתתף הנה [1]:

$$\frac{di(\vec{r}, \vec{S})}{d\vec{S}} = \underbrace{(a + \sigma_s)}_{\text{פיזור בליעה}} \cdot i(\vec{r}, \vec{S}) + \underbrace{an^2 \frac{\sigma T^4}{\pi}}_{\text{פליטה בתווך}} + \underbrace{\frac{\sigma_s}{4\pi} \int_{\omega=0}^{4\pi} i(\vec{r}, \vec{S}') \cdot \Phi(\vec{S}, \vec{S}') \cdot d\omega}_{\text{פיזור מהסביבה לתוך התווך}} \quad (3)$$

כאשר:

- a - מקדם הבליעה, (absorption coefficient)
- σ_s - מקדם הפיזור, (scattering coefficient)
- n - אינדקס השבירה (refractive index)
- S' - הכיוון ממנו מגיע הפיזור,
- σ - קבוע סטפן-בולצמן (5.672 · 10⁻⁸ W/m² · K)

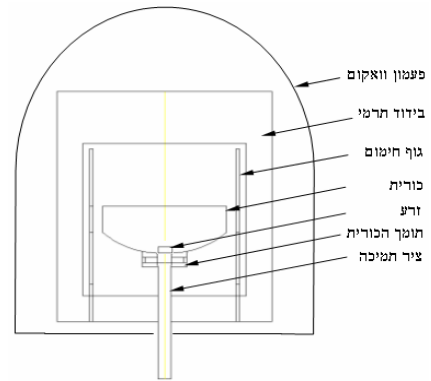
הנוכחית מוצגת הפעילות לביצוע הדמיה נומרית לתהליכי מעבר החום, ההתכה וההתמצקות של הגבישים.

בעבודות רבות בתחום הנומרי מושם דגש על דיוק הפתרון. בהשוואה בין שיטות הנומריות שונות ואפילו בין קודים שונים העובדים בשיטה זהה, דיוק הפתרון מהווה קריטריון מרכזי. אולם, בתהליכים רבים, חוסר המידע המדויק בנתונים פיזיקליים עולה בהרבה על אי הדיוקים הנומריים. ההדמיה הנומרית מספקת תמונה איכותית של התהליך, מאפשרת בדיקה פרמטרית ומוסיפה להבנה עמוקה יותר של פרטיו. שילוב הדמיה בפיתוח, מספק תשובות לעצם התהליך ולתכנון המערכות והמתקנים ובכך מושג חיסכון בניסויים. בתהליך אמיתי מעורבים מספר מנגנונים פיזיקליים כאשר בהדמיה לא כולם זוכים להתייחסות מלאה. חלקם מחנחים בכדי לפשט (ולעיתים בכלל לאפשר) את החישוב. על כן, אי אפשר לפתח תהליכים מורכבים על סמך הדמיה בלבד ולהימנע מניסויים.

בתהליך הגידול המפותח ברום ומפורט בהמשך, קיימת אי ודאות רבה באשר לנתונים הפיזיקליים, בעיקר בתחום הטמפרטורות הגבוהות. על כן, ההדמיה משמשת בעיקר להבנת המנגנונים ולמתן כיוונים נכונים. המטרה היא לחסוך בניסויי פיתוח יקרים וממושכים, לקצר את משך הפיתוח, לרכוש הבנה בפיזיקה של התהליך, לאתר נקודות תורפה, להציע פתרונות ולבחון אותם בדרך חישובית.

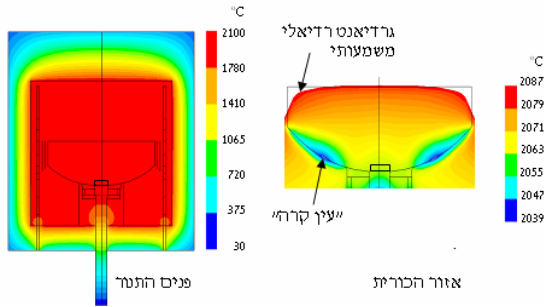
תיאור התהליך

גידול הגבישים נעשה בטמפרטורות גבוהות בתנור מיוחד בשיטת Gradient Solidification Method - GSM. גוף החימום בתנור מגיע לטמפרטורה של כ- 2200 °C זאת כדי להשיג התכה של הספיר בעל טמפרטורת ההיתוך של 2050 °C. בתנור אווירת מגן של הליום בריכוז נמוך. סכימת התנור מוצגת באיור 1.



איור 1: תיאור מערך הגידול בשיטת GSM

כחומר גלם לגידול משתמשים בפירורי ספיר הממלאים כורית שצורתה בצורת המוצר הסופי. בתחתית הכורית מונח "זרע" שהוא גביש ספיר עם כיוונית קריסטלוגרפית ידועה. חימום הכורית נעשה עד התכת כל חומר הגלם, תוך הקפדה על התכה חלקית של ה"זרע". בגמר ההתכה מורידים את ההספק בהדרגה. בכדי להבטיח התמצקות כיוונית מה"זרע" כלפי מעלה וקבלת גביש יחיד בגיאומטריית הכורית, יש להבטיח פינוי חום מבוקר מבטיח הכורית. בתהליך שאינו מבוקר נכון מתקבל גביש פגום עם גבולות-תאומים, סדקים, חללים או רב-גביש. בטמפרטורה הגבוהה השוררת בתנור עיקר החום מועבר בקרינה, אולם חלק מהחום מפונה בהולכה מתומך הכורית, דרך ציר התמיכה, אל מחוץ לתנור. שליטה על משטר מעבר החום ופינוי מבטיח השגת גרדיאנט תרמי מתאים לקבלת גביש תקין.

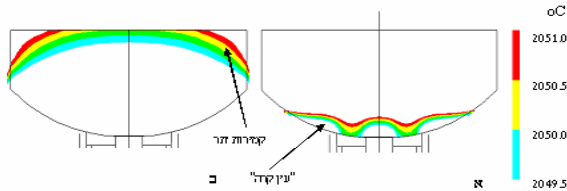


אי 3: שדה טמפרטורות בתנור ובכורית.

בחינת התוצאה מבליטה שני אזורים בעייתיים לגידול: (א) בתחתית הכורית, מחוץ לתומך הכורית נראה אזור קר, מעין "עין קרה", שם הטמפרטורה נמוכה מטמפרטורת ההיתוך של הספיר. (ב) בחלק העליון של הכורית, בקרבת הדופן, האיותרמות כמעט אנכיות כלומר קיים גרדיאנט רדיאלי משמעותי, במיוחד בפינה העליונה.

היווצרותן של בועות ופגמי מבנה באזור ה"עין הקרה" בניסויים, מאשרת את התוצאה האיכותית שהתקבלה בחישוב הנומרי. התנדפות ניכרת של ספיר מהאזור העליון אל מכסה הכורית ואל חלקי התנור תואמת את תוצאת החישוב המצביעה על טמפרטורה גבוהה בשפה העליונה של הכורית. הופעת סדיקה רדיאלית בגביש שלם, סדיקה המתחילה מהשפה העליונה, מתאימה לאפשרות של מאמצי מתיחה היקפיים בפרופיל ההתמצקות הנראה בחישוב.

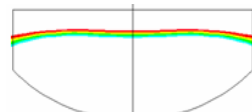
בחינת משטחי ההתמצקות בחישוב מצב מעבר (Transient), כמוצג באיור 4, מראה ביתר בהירות את התופעות הנ"ל.



אי 4: משטחי ההתמצקות: א' – בתחתית הכורית; ב' – בחלק העליון של הכורית.

תכן: "שיטוח" האיותרמות בחלק העליון של הכורית ושיפור פרופיל הטמפרטורות בתחתית הגביש

מתוך ניתוח תרמי של צורת האיותרמות, נראה כי שיטוח אפשרי הן על ידי הקטנת הפסד החום כלפי מעלה, והן על ידי הקטנת הגרדיאנט הרדיאלי בשוליים על ידי הפחתה באספקת החום המוקרן ישירות אל הדופן העליונה של הכורית. משטח ההתמצקות המתקבל לאחר שיפור הבידוד ודירוג גוף החימום מוצג באיור 5.



אי 5: משטח התמצקות בשלב מתקדם של התהליך, לאחר שיפור הבידוד ודירוג גוף החימום

הופעתה של "עין קרה" באזור התחתון, הקעור, של הכורית נגרמת מקירור יחסי מוגבר של אזור זה. קבלת קטע קר יחסית באזור התחתון של הכורית נגרמת מבריחת חום מוגברת באזור זה וממשיכת חום קטנה מדי דרך הציר

Φ - פונקצית פאזה (Phase function), מבטא את תלות הקרינה המגיעה מהסביבה בזווית ההגעה.

בחישובים הנחננו פיזור איזוטרופי ובהתאם ערך פונקצית הפאזה הנו 1. האיבר הראשון בצד ימין של משוואה (3) מבטא את הפסדי הקרינה באלמנט בגלל בליעה ופיזור לסביבה ואילו האיברים השני והשלישי הנם אברי מקור המבטאים את התוספות בגלל הקרינה הנפלטת והקרינה המגיעה מהסביבה.

משוואה (3) הנה אינטגרל-דופרנציאלי, ומצומדת למשוואה (1) במשתנים T ו- i . דהיינו יש לפתור מערכת מצומדת. תנאי השפה לדופן בעלת אמיסיביות ϵ , מוגדר על פי ההספק המגיע/נגרע מהדופן:

$$q_{out} = (1 - \epsilon) \cdot q_{in} + n^2 \epsilon \sigma T_w^4 \quad (4)$$

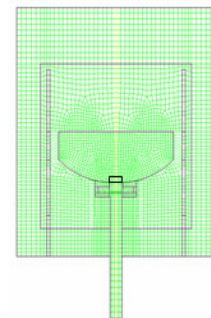
ותנאי השפה לעוצמה (בהנחת החזרה איזוטרופית אחידה לכל הכיוונים) יהיה: $i_0 = q_{out} / \pi$

משוואה (3) הנה משוואת דיפרוזיה עם איברים לא לינאריים ואיבר אינטגרציה של פיזורים מהסביבה. בחישובים הנוכחיים נעשה שימוש בשיטת ה- Discrete Ordinate (DO) [2-4] לחישוב שדה עוצמות הקרינה.

איבר האינטגרציה על מרכז דופן התא מחושב על ידי חיבור הקרניים מכל הזוויות המרחביות, כאשר בכל כיוון ערך האינטגרל קבוע ומחושב על פי הערך מנקודה על הקרן אל נקודת מרכז הדופן. מספר החלוקות המרחביות מכפיל את מספר משוואות ה-DO שיש לפתור. ערך העוצמה בנקודה על הקרן, אשר באופן כללי אינו בהכרח נקודת רשת, מבוטא על ידי אינטרפולציה של ערכי העוצמה בכיוון הרצוי, מנקודות רשת סמוכות. בדרך זו כל משוואה מכילה ערכים של מספר צמתים. אוסף המשוואות המתקבלות נפתרות כמשוואת דיפרוזיה עם אברים לא לינאריים. ניתן לפתור את משוואות (1) ו-(3) בכל סכימה נומרית רצויה, כאשר בעבודה הנוכחית, השתמשנו בתוכנת FLUENT® המבוססת על שיטת נפחים סופיים [2]. בשיטה זו נערך מאזן של כמות החום העוברת דרך דפנות אלמנטי הנפח, כך שחישוב ערך השטף עקב קרינה דרך דופן, כפי שתואר, הנו טבעי. כמו כן, מכיוון שעיקר יעוד התוכנה לפתור משוואות זרימה, ניתן לכלול הדמית זרימת גז לקירור.

תוצאות הדמיה נומרית

לאחר בחירת הסכימה הנומרית לחישוב קרינה בתווך משתתף, נבנה מודל ראשוני של התהליך לגידול מטילים עם תחתית כדורית. באיור 2 מובאת דיסקרטיזציה לתאים סופיים ובאיור 3 שדה הטמפרטורות ב"מצב עמיד" (Steady State) בהספק המרבי (התמונות מוכפלות סביב ציר הסימטריה לצורך המחשה).



אי 2: דיסקרטיזציה לתאים סופיים (מוכפלת סביב ציר הסימטריה לצורך המחשה).

פינת השגיאה הקטנה

בגליון מס' 14 דנו בשגיאת המודל המתמטי ובגליון 16 בשגיאת הדיסקרטיזציה. הפעם נדון בשגיאת העיגול.

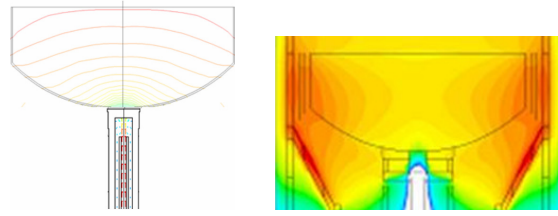
כפי שצויין בדיון על שגיאת הדיסקרטיזציה, רוב השיטות החישוביות מייצרות, ע"י קרוב של הבעיה הדיפרנציאלית המקורית, מערכת של N משוואות אלגבריות עבור N הנעלמים, למשל הטמפרטורות בצמתי הרשת. נהוג לקרוא לחלק השיטה האחראי על פתרון המערכת האלגברית הזו "פותרן" (solver). בדיון הנוכחי נניח כי הבעיה כולה היא לינארית. (באחד הגליונות הבאים נדון בשגיאות הקשורות לפותרן לא-לינארי). שני הסוגים העיקריים של פותרנים לינאריים הם פותרנים ישירים ופותרנים איטרטיביים. נתמקד כאן בפותרנים ישירים. הפותרן הישיר העיקרי הוא שיטת האלימינציה של גאוס, שלה גירסאות מימוש שונות.

כידוע השגיאה הנומריית העיקרית הכרוכה בשיטה נומרית נובעת מהדיסקרטיזציה. מבט תמים עלול להביא למסקנה כי לאחר שביצענו את הדיסקרטיזציה, בתהליך הפתרון של המערכת האלגברית בשיטה ישירה לא טמונה שגיאה נוספת. אולם, יש לזכור כי המחשב עובד עם מספר סופי וקבוע של ספרות (בינאריות). כאשר משתמשים ברוטינה הפותרת מערכת משוואות בשיטת האלימינציה של גאוס, בכל שלב המספרים המחושבים "מעוגלים" (או מקוטעים) לאחר מספר מסויים של ספרות. לפיכך קיימת שגיאה הכרוכה בפתרון המערכת האלגברית – שגיאת העיגול. מתבקשת השאלה: האם שגיאת עיגול זו אינה זניחה לחלוטין? אם אנו מתעניינים בפילוג הטמפרטורה בלוויין עם דיוק עד הספרה השניה לאחר הנקודה העשרונית, מדוע אנו צריכים להיות מוטרדים מעיגול הספרה השמינית? אכן, שגיאת העיגול היא זניחה כאשר המטריצה המגדירה את המערכת הלינארית – מטריצת הקשיחות – היא "בריאה" (well-conditioned), אולם היא בלתי זניחה כלל כאשר המטריצה היא "חולנית" (ill-conditioned). במקרה האחרון, עיגול של הספרה השמינית באחד השלבים הראשונים של האלימינציה של גאוס עלול להשפיע על הספרה הראשונה של התוצאה הסופית עבור הטמפרטורות! דבר זה מראה עד כמה חשוב לבחור שיטה נומרית שתבטיח מטריצת קשיחות בריאה.

גודל שגיאת העיגול נקבע ע"י מספר המצב (condition number) של מטריצת הקשיחות (נוותר על ההגדרה המדויקת). אם מספר המצב של מטריצת הקשיחות K הוא C אזי בד"כ בפתרון המערכת האלגברית "נאבד" $\log_{10} C$ ספרות עקב שגיאות עיגול. למשל, אם המחשב שלנו שומר 16 ספרות עשרוניות ומספר המצב של מטריצת הקשיחות הוא 10^9 (ביליון), אזי רק 7 הספרות הראשונות בתוצאות שנקבל צפויות להיות נכונות.

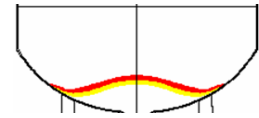
מעניינת ומעט מטרידה היא העובדה שעידון הרשת (בשיטת האלמנטים הסופיים, הפרשים הסופיים, הנפחים הסופיים ועוד), בעוד שהוא גורם להקטנת שגיאת הדיסקרטיזציה, מביא להגדלת שגיאת העיגול! ניתן להראות שמספר המצב של מטריצת הקשיחות פרופורציוני ברוב המקרים ל- $1/h^2$ כאשר h הוא גודל האלמנט הסופי. כלומר, לפחות תיאורטית, כאשר אנו מעדנים את הרשת אנו עלולים להזיק לפתרון. למזלנו, מעשית דבר זה כמעט שאינו קורה, מכיוון שפרט לרשתות שהן עדינות באופן קיצוני שגיאת הדיסקרטיזציה, ולא שגיאת העיגול, היא השגיאה הדומיננטית. אם המצב אינו כזה, הרי שהשיטה הנומרית כולה היא "חולנית" (בד"כ הדבר קשור לחוסר יציבות של השיטה), ויש לחפש דרכים על מנת לשפר ולייצב אותה.

התומך. מניעת ה"עין הקרה" מחייבת לכן בדיקה וטיפול בגורמים אלה. נבחנו שתי אופציות, (א) הקרנה חום מסיבית אל אזור "העין הקרה", (ב) גריעת חום חזקה יותר דרך הציר התומך על ידי הורמת גז קירור דרכו. תוצאות ההדמיה עם גוף חימום קוני בתחתית ועם קירור התומך על ידי הזרמת גז, מוראות באיור 6.



איור 6: הוספת גוף חימום קוני בתחתית (מימין) וקירור התומך על ידי הזרמת גז (שמאל).

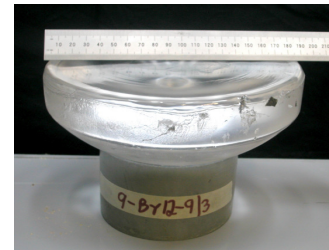
באיור 7 ניתן לראות בברור את העלמות ה"עין הקרה" בהתמצקות החלק התחתון, כתוצאה מקרור הגז.



איור 7: משטח התמצקות בשלבים התחתיתיים של תהליך עם קרור גז.

בחנית תוצאות החישוב מראה בברור כי קרור התומך יעיל יותר, מה עוד שגוף החימום הקוני בתחתית מעלה את הגרדיאנטים הרדיאליים בחלק העליון, על כן נבחרה האופציה של הזרמת גז.

תוצאות החישוב יושמו במערכות הגידול והביאו לשיפור איכות הגבישים. צילום גביש טיפוסי מוראה באיור 8.



איור 8: גביש ספיר טיפוסי בגמר הגידול.

מקורות

1. R. Siegel, J. R. Howell, Thermal Radiation Heat Transfer, Taylor & Francis Pub., 3ed Ed, 1992.
2. R. Peyret, T. D. Taylor, Computational Methods for Flow, Springer Series in Computational Physics, 1983.
3. W. A. Fiveland, Discrete-Ordinate Solution of the Radiative Transport Equation for Rectangular Enclosures, Journal of Heat Transfer, 106, 1984, pp. 699-706 .
4. W. A. Fiveland, Discrete Ordinate Methods for Radiative Heat Transfer in Isotropically and Anisotropically Scattering Media, Journal of Heat Transfer, 109, 1987, pp. 809-812.

תודות

ותודתנו למחלקת גידול גבישים ברותם על ביצוע הניסויים.