

Simulacija gretja magnetne tekočine v izmeničnem magnetnem polju

Jakob Vizjak, Anton Hamler

Univerza v Mariboru, Fakulteta za elektrotehniko, računalništvo in informatiko, Koroška cesta 46, 2000 Maribor, Slovenija

E-pošta: jakob.vizjak1@um.si

Simulation of the magnetic fluid heating in the alternating magnetic field

Abstract. Today, there is much attention on magnetic fluid hyperthermia. Magnetic fluids used for heating are liquids made of nanoscale magnetic particles suspended in a carrier fluid. Our goal was to develop a numerical model to simulate the heating of a magnetic fluid in the alternating magnetic field. Our model was based on an experimental setup, which is based on the calorimetric method. We used the properties of a commercial magnetic fluid made of maghemite ($\gamma\text{-Fe}_2\text{O}_3$) nanoparticles and mineral oil for the simulation. The simulation results were not in agreement with measured values. Therefore further development is needed.

1 Uvod

Dandanes so deležne velike pozornosti magnetne tekočine pri uporabi hipertermije za namene zdravljenja raka. Gre za to, da se uniči rakave celice, brez da se poškoduje okoliško zdravo tkivo. Pri tem se območje tumorja segreva na temperaturo 40 – 44 °C [1].

Magnetna tekočina je suspenzija majhnih magnetnih delcev v neki nosilni tekočini, ki pod vplivom zunanjega magnetnega polja izkazuje magnetne lastnosti. Sestavljajo jo tri osnovne komponente:

- Magnetni nanodelci,
- Nosilna tekočina,
- Surfaktant.

Gretje magnetnih tekočin se običajno karakterizira s specifično stopnjo absorpcije. Ta vrednost se označi s kratico SAR, ki izvira iz angleškega izraza *Specific Absorption Rate*. Pogosto uporabljena eksperimentalna metoda za karakterizacijo je kalorimetrična metoda. Pri tem gre za to, da se magnetna tekočina segreva v izmeničnem magnetnem polju, pri čemer se meri časovna odvisnost temperature. Iz časovne odvisnosti temperature se določi vrednost SAR, kar se običajno naredi po metodi začetnega naklona, kot je zapisano z enačbo (1). Tak pristop so na primer uporabili v literaturi [1]–[3].

$$SAR = \frac{c_t \rho_t}{m_d} \left(\frac{\Delta T}{\Delta t} \right)_i \quad (1)$$

Pri tej je c_t specifična toplota magnetne tekočine, ρ_t je gostota magnetne tekočine, m_d je masa magnetnih delcev v tekočini in $(\Delta T/\Delta t)_i$ je začetni naklon krivulje.

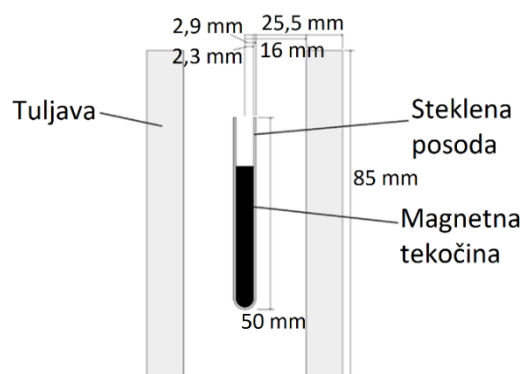
Naš cilj je bil ustvariti numerični model, ki računsko omogoča določanje grelnih karakteristike magnetne tekočine. S takšnim modelom je možno hitrejšo določanje grelnih karakteristik, kot je to izvedljivo z eksperimentom. Poleg tega je možno karakterizirati tekočine različnih parametrov in iskanje optimalnih parametrov tekočine za željeno karakteristiko.

Tekočina, za katero smo izvedli simulacije, je bila komercialna magnetna tekočina, sestavljena iz nanodelcev maghemita ($\gamma\text{-Fe}_2\text{O}_3$) in mineralnega olja, kot nosilne tekočine.

2 Metode in materiali

2.1 Model za izračun

Simulacije smo izvedli v programskem orodju Altair Flux3D, ki omogoča numerične izračune na osnovi metode končnih elementov. Reševali smo v načinu sklopitve magnetnega stacionarnega stanja in tranzientnega termičnega (*Steady State Magnetic coupled with Transient Thermal*). Geometrijske podatke, ki smo jih vnesli v model prikazuje 2D presek modela (slika 1).



Slika 1. 2D presek modela za izvedbo simulacije.

Podatki tuljave:

- Notranji polmer: 32 mm,
- Zunanji polmer: 51 mm,
- Dolžina: 85 mm
- Število ovojev: 36.

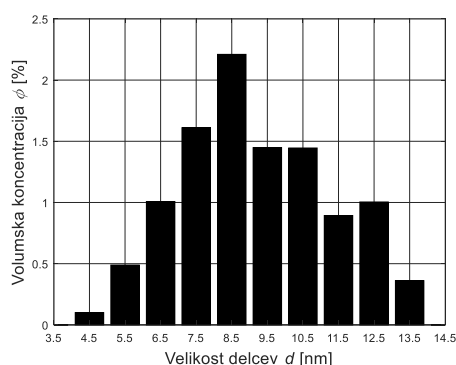
Podatki steklene posode:

- Premer posode: 5,8 mm,
- Debelina stekla: 0,6 mm,
- Dolžina: 50 mm.

Dno stekla smo dimenzionirali kot polkrog z enakim polmerom, kot je polmer posode. Količino magnetne tekočine v posodi smo določili z njeno višino v posodi. To smo postavili na 30 mm.

2.2 Matematični model

Da smo zagotovili sklopitev med magnetnim in termičnim izračunom, smo uporabili matematični model opisan v tem poglavju. Pri tem smo upoštevali, da delci v tekočini niso enaki po velikosti, ampak imajo neko porazdelitev. Delce smo razdelili v deset velikostnih skupin, s pripadajočimi volumnskimi koncentracijami. Pri izračunu smo upoštevali prispevke posamezne skupine. Porazdelitev delcev po velikosti prikazuje slika 2.



Slika 2. Porazdelitev delcev po velikosti. Delci so razdeljeni v deset velikostnih skupin.

Moč gretja, v enotah W/m^3 , smo izračunali po enačbi (2) [4], [5].

$$P = \mu_0 \pi \chi'' f H^2, \quad (2)$$

kjer je μ_0 permeabilnost praznega prostora, f frekvenca magnetnega polja, H amplituda magnetne poljske jakosti in χ'' imaginarna komponenta kompleksne susceptibilnosti magnetne tekočine. Ta se zapiše kot [4]:

$$\chi'' = \frac{\omega \tau}{1 + (\omega \tau)^2} \chi_0. \quad (3)$$

Pri tem je $\omega = 2\pi f$ kotna frekvenca, τ relaksacijski čas magnetizacije in χ_0 ravnovesna susceptibilnost magnetne tekočine. Ta sledi iz obravnave magnetizacijske krivulje magnetne tekočine s pomočjo Langevinove funkcije $L(\alpha)$ [4]:

$$\frac{M}{M_s} = L(\alpha) = \coth(\alpha) - \frac{1}{\alpha}, \quad (4)$$

kjer je M magnetizacija, M_s je magnetizacija nasičenja magnetne tekočine in α je Langevinov parameter:

$$\alpha = \frac{\mu_0 M_d V_d H}{k_B T}. \quad (5)$$

Tukaj je M_d magnetizacija nasičenja materiala magnetnega delca, V_d volumen delca, k_B Boltzmannova

konstanta in T temperatura. Povezava med M_s in M_d je $M_s = \phi M_d$, kjer je ϕ volumnska koncentracija delcev v magnetni tekočini. Ravnovesno susceptibilnost lahko na podlagi tega določimo kot:

$$\chi_0 = \chi_i \frac{3}{\alpha} \left(\coth(\alpha) - \frac{1}{\alpha} \right). \quad (6)$$

χ_i predstavlja začetno susceptibilnost in velja [4]:

$$\chi_i = \left(\frac{\partial M}{\partial H} \right)_i = \frac{\mu_0 \phi M_d^2 V_d}{3 k_B T}. \quad (7)$$

Relaksacijski čas τ je kombinacija dveh prispevkov, saj se lahko magnetizacija relaksira po dve mehanizmi. Prvi mehanizem je fizično obračanje delca znotraj tekočine. Ta se imenuje Brownova relaksacija in jo opisuje Brownov relaksacijski čas [5]:

$$\tau_B = \frac{3\eta V_h}{k_B T}, \quad (8)$$

kjer je η viskoznost okolice delca in V_h hidrodinamični volumen delca (skupni volumen delca V_d in nanosa surfaktanta na delcu).

Drugi mehanizem je obrat magnetizacije delca znotraj delca samega, imenovana Néelova relaksacija. Opiše jo Néelov relaksacijski čas [5]:

$$\tau_N = \tau_0 e^{\frac{K_{ef} V_d}{k_B T}}, \quad (9)$$

kjer je τ_0 čas, ki je lastnost materiala (ang. *Attempt time*) in K_{ef} je efektivna konstanta anizotropije magnetnih delcev.

Skupni relaksacijski čas:

$$\frac{1}{\tau} = \frac{1}{\tau_B} + \frac{1}{\tau_N}. \quad (10)$$

Pri izračunu moči smo porazdelitev po velikosti upoštevali z vsoto:

$$P = \sum_{j=1}^N \mu_0 \pi \chi_j'' f H^2. \quad (11)$$

Pri tem vsota predstavlja seštevek prispevkov posamezne velikostne skupine delcev, kjer je N število skupin, indeks j pa predstavlja posamezno skupino.

Iz tega se SAR direktno izračuna kot:

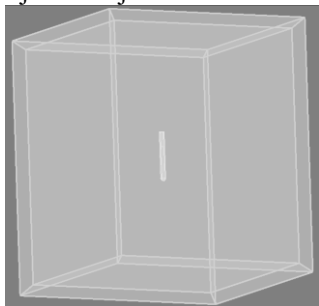
$$SAR = \frac{P}{\rho_m}. \quad (12)$$

Tukaj je ρ_m gostota magnetnih nanodelcev v volumnu magnetne tekočine. SAR ima enoto W/g_m (Watt na gram magnetnih nanodelcev).

2.3 Vnos modela v programsko orodje

V programskem orodju Altair Flux3D smo sestavili 3D model glede na podatke opisane v poglavju 2.1. Robne

pogoje smo definirali z uporabo funkcije *Infinite Box*. Slika 3 prikazuje sestavljen model.



Slika 3. 3D model, sestavljen v programskem orodju Altair Flux3D. Na sredi je steklena posoda, rob problema pa je definiran s funkcijo *Infinite Box*.

Model smo razmrežili tako, da je bila mreža gostejša v območju posode in redkejša na robu problema. Okoli posode smo, kot kaže slika 1, definirali ne-mreženo tuljavo, ki vzbuja magnetno polje.

V program smo vnesli podatke o materialih (zrak, steklo in magnetna tekočina). Materiale smo dodelili ustreznim območjem modela. Za sklopitev med magnetnim in termičnim izračunom smo matematični model iz poglavja 2.2 vstavili v program s pomočjo prostorskih veličin (ang. *Spatial Quantities*).

Parametri materialov, ki smo jih vstavili, so bili naslednji:

Zrak:

- Gostota [6]: $\rho = 1,204 \text{ kg/m}^3$,
- Specifična toplota [7]: (tabela 1)

Tabela 1. Temperaturna odvisnost specifične toplote zraka [7].

$T [^{\circ}\text{C}]$	$c [\text{kJ/kgK}]$
0,0	1,006
6,9	1,006
15,6	1,006
26,9	1,006
46,9	1,007
66,9	1,009
86,9	1,010
107,0	1,012

- Relativna permeabilnost: $\mu_r = 1$,
- Toplotna prevodnost [8]: (tabela 2)

Tabela 2. Temperaturna odvisnost toplotne prevodnosti zraka [8].

$T [^{\circ}\text{C}]$	$\lambda [\text{W/mK}]$
0	0,02436
5	0,02474
10	0,02512
15	0,02550
20	0,02587
25	0,02624
30	0,02662
40	0,02735
50	0,02808
60	0,02880
80	0,03023
100	0,03162

Steklo:

- Gostota [9]: $\rho = 2500 \text{ kg/m}^3$,

- Specifična toplota [9]: $c = 0,8 \text{ kJ/kgK}$,
- Relativna permeabilnost: $\mu_r = 1$,
- Toplotna prevodnost [9]: $\lambda = 0,8 \text{ W/mK}$.

Magnetna tekočina:

- Gostota: $\rho = 2500 \text{ kg/m}^3$,
- Specifična toplota: $c = 1214,9 \text{ J/kgK}$
- Začetno relativno permeabilnost μ_{ri} smo izrazili iz začetne susceptibilnosti (7), kjer smo upoštevali porazdelitev delcev po velikosti:

$$\mu_{ri} = 1 + \chi_i. \quad (13)$$

Vrednosti smo tabelirali za temperaturo od 0 do 100°C , po koraku $2,5^{\circ}\text{C}$.

- Magnetizacija nasičenja: $M_s = 42,3 \text{ kA/m}$,
- Toplotna prevodnost: $\lambda = 0,187 \text{ W/mK}$.

Z uporabo prostorskih spremenljivk smo vstavili še parametre, ki nastopajo v matematičnem modelu. Čas τ_0 smo postavili na vrednost 10^{-9} s , kot v literaturi [5]. Za efektivno konstanto anizotropije smo izbrali vrednost magnetokristalne anizotropije maghemita. Ta je $K_{ef} = 4,6 \text{ kJ/m}^3$ [4]. Magnetizacija nasičenja maghemita pa je $M_d = 400 \text{ kA/m}$ [5]. Za viskoznost, ki nastopa v enačbi (8), smo podatkom prilagodili naslednjo temperaturno odvisno funkcijo:

$$\eta = a_1 e^{a_2 T [^{\circ}\text{C}]} + a_3 e^{a_4 T [^{\circ}\text{C}]}, \quad (14)$$

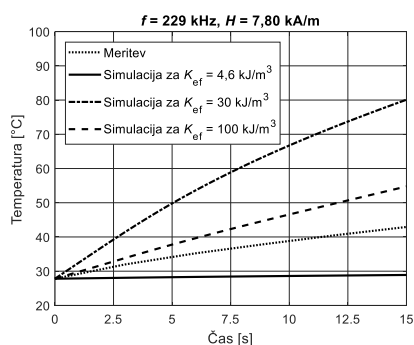
kjer so konstante: $a_1 = 1,021$, $a_2 = -0,1018$, $a_3 = 0,3066$ in $a_4 = -0,03526$, $T [^{\circ}\text{C}]$ pa je temperatura v enotah $^{\circ}\text{C}$.

Potek simulacije je bil naslednji:

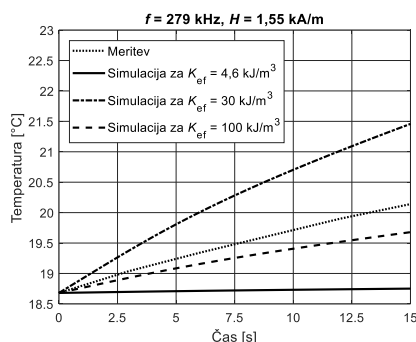
- (1) Ob času $t = 0 \text{ s}$ je temperatura $T = T_0$ začetna temperatura in skozi tuljavo teče definiran izmeničen tok v stacionarnem stanju in zagotavlja izmenično magnetno polje.
- (2) Izvede se magnetni izračun za celotno območje.
- (3) Glede na temperaturno porazdelitev in magnetni izračun se izvede izračun prostorskih veličin, na podlagi matematičnega modela. Pri tem koraku se izračuna tudi moč gretja v magnetni tekočini.
- (4) Preveri se, če je zadoščeno pogoju za zaključek simulacije (če je časovni korak višji od definiranega maksimalnega časa) in če je, se simulacija zaključí.
- (5) Če ni, gre program v naslednji časovni korak, kjer najprej izvede temperaturni izračun glede na izračunano moč gretja in nadaljuje s točko (2).

3 Rezultati

Simulacijo smo naredili pri magnetnem polju s parametri $H = 7,80 \text{ kA/m}$, $f = 229 \text{ kHz}$ in $H = 1,55 \text{ kA/m}$, $f = 279 \text{ kHz}$. Rezultate prikazujeta slika 4 in slika 5, kjer so prikazane časovne odvisnosti spreminjanja temperature magnetne tekočine v izbrani točki znotraj tekočine. Poleg magnetokristalne anizotropije ($K_{ef} = 4,6 \text{ kJ/m}^3$), smo samo za primerjavo izvedli še simulacije za dve različni vrednosti efektivne konstante anizotropije in sicer za 30 kJ/m^3 in 100 kJ/m^3 . Rezultate simulacije smo primerjali z meritvijo pri danih parametrih polja.



Slika 4. Temperatura magnetne tekočine v odvisnosti od časa pri parametrih polja: $H = 7,80 \text{ kA/m}$ in $f = 229 \text{ kHz}$.



Slika 5. Temperatura magnetne tekočine v odvisnosti od časa pri parametrih polja: $H = 1,55 \text{ kA/m}$ in $f = 279 \text{ kHz}$.

Boljša primerjava rezultatov, kot časovna odvisnost temperature, je primerjava začetnih vrednosti SAR, ki jo kaže tabela 3 in tabela 4. V teh tabelah predstavljajo Simulacija 1, Simulacija 2 in Simulacija 3 simulacije, pri vrednostih efektivne konstante anizotropije $K_{ef} = 4,6 \text{ kJ/m}^3$, $K_{ef} = 30 \text{ kJ/m}^3$ in $K_{ef} = 100 \text{ kJ/m}^3$.

Tabela 3. Rezultati vrednosti SAR za polje $H = 7,80 \text{ kA/m}$ in $f = 229 \text{ kHz}$.

Tip podatkov	SAR [W/g _m]
Meritev	4,296
Simulacija 1	0,283
Simulacija 2	14,016
Simulacija 3	5,977

Tabela 4. Rezultati vrednosti SAR za polje $H = 1,55 \text{ kA/m}$ in $f = 279 \text{ kHz}$.

Tip podatkov	SAR [W/g _m]
Meritev	0,370
Simulacija 1	0,018
Simulacija 2	0,718
Simulacija 3	0,257

Pri $K_{ef} = 4,6 \text{ kJ/m}^3$, so vrednosti simulacije bistveno nižje od vrednosti meritev, kjer je začetna izmerjena vrednost SAR 15,2 – 20,6 krat višja od izračunane vrednosti. Pri drugih vrednostih K_{ef} je rezultat drugačen. V našem primeru, je pri $K_{ef} = 100 \text{ kJ/m}^3$ ujemanje z meritvami najboljša, vendar pa vrednost SAR pri tem ni najvišja pri najnižjih temperaturah, kot je to značilno pri meritvah.

4 Zaključek

Sestavili smo numerični model za simulacijo gretja magnetne tekočine v izmeničnem magnetnem polju, na podlagi kalorimetrične metode za eksperimentalno karakterizacijo grelnih lastnosti magnetne tekočine.

Ugotovili smo, da je model nepopoln, saj prihaja do velikih odstopanj med meritvijo ter simulacijo (15,2 – 20,6 krat višja vrednost pri meritvi, pri $K_{ef} = 4,6 \text{ kJ/m}^3$). Magnetokristalna anizotropija torej ni dovolj dober približek efektivne anizotropije delcev. Poleg izbire anizotropije in drugih parametrov je možno, da na rezultate vpliva tudi sama struktura modela. Pri tem modelu nismo upoštevali prispevka sevanja in konvekcije na robu posode k prenosu toplote, kar lahko povzroča dodatna odstopanja.

V nadaljnjem delu načrtujemo izboljšanje modela, s vključitvijo sevanja in konvekcije ter podrobnejšo analizo parametrov, potrebnih za izračun.

Literatura

- [1] O. Lanier *idr.*, „Evaluation of magnetic nanoparticles for magnetic fluid hyperthermia“, *Int. J. Hyperthermia*, let. 36, str. 687–701, jan. 2019, doi: 10.1080/02656736.2019.1628313.
- [2] G. Kandasamy, A. Sudame, P. Bhati, A. Chakrabarty, S. N. Kale, in D. Maity, „Systematic magnetic fluid hyperthermia studies of carboxyl functionalized hydrophilic superparamagnetic iron oxide nanoparticles based ferrofluids“, *J. Colloid Interface Sci.*, let. 514, str. 534–543, 2018, doi: <https://doi.org/10.1016/j.jcis.2017.12.064>.
- [3] S. Khoramian, M. Saacidifar, A. Zamanian, in A. A. Saboury, „Synthesis and characterization of biocompatible ferrofluid based on magnetite nanoparticles and its effect on immunoglobulin G as an immune protein“, *J. Mol. Liq.*, let. 273, str. 326–338, 2019, doi: <https://doi.org/10.1016/j.molliq.2018.10.045>.
- [4] R. E. Rosensweig, „Heating magnetic fluid with alternating magnetic field“, *J. Magn. Magn. Mater.*, let. 252, str. 370–374, 2002, doi: [https://doi.org/10.1016/S0304-8853\(02\)00706-0](https://doi.org/10.1016/S0304-8853(02)00706-0).
- [5] M. Beković *idr.*, „Numerical Model for Determining the Magnetic Loss of Magnetic Fluids“, *Materials*, let. 12, str. 591, 2019, doi: 10.3390/ma12040591.
- [6] E. ToolBox, „Air - Density, Specific Weight and Thermal Expansion Coefficient at Varying Temperature and Constant Pressures“, 2003. https://www.engineeringtoolbox.com/air-density-specific-weight-d_600.html (pridobljeno apr. 13, 2021).
- [7] E. ToolBox, „Air - Specific Heat at Constant Pressure and Varying Temperature“, 2004. https://www.engineeringtoolbox.com/air-specific-heat-capacity-d_705.html (pridobljeno apr. 13, 2021).
- [8] E. ToolBox, „Air - Thermal Conductivity“, 2009. https://www.engineeringtoolbox.com/air-properties-viscosity-conductivity-heat-capacity-d_1509.html (pridobljeno apr. 13, 2021).
- [9] Saint-Gobain Sekurit, „Glass properties“. <https://www.saint-gobain-sekurit.com/global-excellence/our-production-processes/glossary> (pridobljeno maj 03, 2021).

Uporaba modeliranja in simulacije v digitalizaciji procesa elektroobločne peči

Vito Logar

Univerza v Ljubljani, Fakulteta za elektrotehniko, Tržaška 25, 1000, Ljubljana
E-pošta: vito.logar@fe.uni-lj.si

The use of modelling and simulation in the digitalization of the electric arc furnace process

Abstract. *In the past decade, the steelmaking industry has been undergoing an important and significant process of digitalization and informatization. Whether in the past, data acquisition systems, i.e., SCADAs, were used mainly for process monitoring and detection of equipment malfunctions, large amounts of acquired historical data facilitate the use of advanced software-support methods, aiming to improve the key performance indicators of various steelmaking processes. The following paper presents the concept and methodology of digital transformation of the electric-arc-furnace (EAF) process in SIJ Acroni steelworks, in the scope of an EU Horizon 2020 project INEVITABLE. Different aspects and approaches of digitalization, and more important, proper software tools, to support and enhance the EAF process, are briefly presented. First, the EAF digitalization concept is presented, followed by the presentation of the methodology, explaining the envisioned concepts of modelling and optimization. Afterwards, the planned implementation of the developed tools into industrial environment is presented. Finally, some of the expected goals of the proposed solutions are given.*

1 Uvod

V zadnjih desetletjih so bili procesi v jeklarstvu podvrženi znatni modernizaciji v smislu digitalizacije in informatizacije, kar lahko pripisujemo povečani konkurenci na trgu, prizadevanjem za učinkovitejšo rabo surovin in energije ter strožjim okoljskim predpisom. Prvi sistemi s področja digitalizacije, ki so se pojavili v jeklarski industriji, so bili sistemi za spremljanje procesov in zajem podatkov (ang. SCADA). Dandanes so praktično vsi jeklarski procesi podprti s tovrstnimi sistemi, vendar pa se zajeti podatki uporabljajo zgolj za spremljanje procesov ter zaznavanje okvar. Skozi leta obratovanja se je v podatkovnih bazah akumulirala ogromna količina procesnih podatkov, ki omogočajo različne možnosti za izboljšave procesov, npr. izgradnjo procesnih modelov in njihovo simulacijo, uporabo metod rudarjenja podatkov, optimizacijo na osnovi podatkov idr.

V članku je na kratko predstavljena metodologija digitalne transformacije procesa elektroobločne peči (EOP) ter orodja, ki slonijo na implementirani digitalni

infrastrukturi, in so namenjena različnim izboljšavam procesa.

Laboratorij za avtomatiko in kibernetiko (FE, UL) sodeluje v tekočem EU Horizon 2020 projektu INEVITABLE (Optimization and performance improving in metal industry by digital technologies), ki primarno naslavlja implementacijo naprednih programskih metod v procese jeklarske industrije, z namenom izboljšanja njihove učinkovitosti. V sklopu projekta je izbranih več jeklarskih procesov, tj. elektroobločna peč, ponovčna peč, naprava za vakuumsko odplinjevanje ter naprava za kontinuirno ulivanje jekla. Vsi ti procesi bodo podvrženi procesu popolne digitalizacije in nadgradenj z modernimi programskimi rešitvami, ki bodo vsebovale matematične modele, modele na osnovi podatkov ter različne optimizacijske metode. Glavni cilji, h katerim stremi omenjena metodologija so nižanje porabe energije, surovin in izpustov toplogrednih plinov. Eden od primerov uporabe je tudi implementacija naprednih programskih rešitev za proces reciklaže jekla v EOP.

V sklopu digitalizacije in programske podpore procesu EOP se razvijajo tako koncepti digitalizacije kot tudi primerna programska orodja, ki so namenjena spremljanju in izboljšavam procesa EOP, njihova implementacija pa je predvidena v obstoječa in nova programska in strojna okolja. Prva naloga digitalizacije EOP je izbira in implementacija primernih metod za zajem procesnih podatkov, komunikacijskih protokolov in načinov za shranjevanje podatkov. Druga, zahtevnejša naloga, zajema razvoj in vrednotenje naprednejših metod obdelave podatkov, procesnih modelov in optimizacije. Tretja, izvedbena naloga, pa zajema integracijo razvitih rešitev v sklop obstoječih sistemov EOP in razvoj ustreznih vmesnikov za prikaz rezultatov operaterjem EOP. Med vsemi tremi, druga naloga predstavlja najpomembnejši korak v celotnem procesu digitalizacije, saj zajema razvoj metod, ki stremijo k izboljšanju vpogleda v delovanje EOP ter k izboljšanju njenih kazalcev učinkovitosti. Slika 1 prikazuje koncept digitalizacije, vključno z vsemi rešitvami, ki so predvidene za implementacijo v industrijsko okolje.

Struktura članka je naslednja. Najprej je podrobneje predstavljen predvideni koncept digitalizacije, vključno z rešitvami za zajem podatkov ter komunikacijskimi protokoli, ki predstavlja osnovo za višje-nivojske rešitve. V drugem sklopu so predstavljene razvite