

Н.П. Савенкова, А.В. Калмыков

О СТАБИЛИЗАЦИИ АЛГОРИТМА РАСЧЁТА РАСПРЕДЕЛЕНИЯ МАГНИТОГИДРОДИНАМИЧЕСКИХ ПОЛЕЙ ВНУТРИ ЭЛЕКТРОЛИЗНОЙ ВАННЫ

Введение. Современную жизнь невозможно представить без алюминия. Этот блестящий легкий металл, прекрасный проводник электричества, получил в последние десятилетия самое широкое применение в различных отраслях производства. Между тем известно, что в свободном виде алюминий не встречается в природе, и вплоть до XIX века наука даже не знала о его существовании. Только в последней четверти прошлого столетия была разрешена проблема промышленного производства металлического алюминия в свободном виде.

Современные технологии добычи электролиза далеки от совершенства и требуют серьёзных исследований в данной области. Однако в силу очень агрессивных условий, в которых протекает процесс электролиза, фактически единственным инструментом по его изучению является математическое моделирование. В связи с этим существует множество математических моделей основанных на различных приближениях и критериях [1,2,3], однако большинство из них не могут дать достаточно информации для качественного прогнозирования работы промышленного электролизёра.

В данной работе рассматривается гомогенная модель достаточно с высокой степенью адекватности [4], а так же представлен метод повышения устойчивости разностного метода, построенного на основе этой модели.

Математическая постановка. В основе предлагаемой модели [4] находится многофазный подход. Предполагается, что в каждом малом элементарном объёме ΔV присутствует и алюминий, и криолит, при этом их смесь совокупно занимает объём целиком, а каждая из жидкостей – некоторую часть этого объёма – ΔV_1 (для алюминия) и ΔV_2 (для электролита). В каждой точке объёма, занятого смесью, можно ввести макроскопические скорости компонент смеси \vec{v}_m , давление p . Для

каждой среды (компоненты смеси) вводится параметр α_m - объёмная доля фазы (или объёмное содержание фазы):

$$\alpha_1 = \frac{\Delta V_1}{\Delta V}, \alpha_2 = \frac{\Delta V_2}{\Delta V},$$

при этом

$$\alpha_1 + \alpha_2 = 1.$$

Здесь и далее переменные с индексом $m = 1$ относятся к среде алюминия, с индексом 2 – к среде криолита.

Основными неизвестными являются: скорости движения сред металла и электролита $\vec{v}_m = (u_m, v_m, w_m), m = 1, 2$; объёмные доли металла α_1 и криолита α_2 , давление p , а так же электромагнитное поля H и E .

Рассмотрим трёхмерную двухфазную модель алюминиевого электролизёра. Математическая постановка представляет собой систему уравнений Навье-Стокса для двух фаз в декартовой системе координат.

Параметры сред:

α_m - объёмное содержание фаз алюминия и электролита в элементарном объёме;

$\vec{v}_m = (u_m, v_m, w_m)$ – векторное поле скоростей;

ρ_m – плотность;

μ_m – динамическая вязкость;

σ_m – электрическая проводимость;

где $m = 1, 2$.

Общие для обеих сред параметры:

$\vec{F} = (F_x, F_y, F_z)$ – объёмная плотность электромагнитных сил;

p – давление;

$M \approx 7.6 \cdot 10^{-6} \text{ м}^3 / \text{сек}$ – массовая скорость превращения глинозёма, в алюминий, отнесённая к единице объёма, характеризует интенсивность перехода массы из 1-й среды во 2-ю среду в единице объёма смеси в единицу времени;

$\vec{H} = (H_x, H_y, H_z)$ – вектор напряженности магнитного поля.

Уравнение сохранения m -ой компоненты смеси имеет вид:

$$\frac{\partial \alpha_m \rho_m}{\partial t} + \text{div}(\alpha_m \rho_m \vec{v}_m) = M_m, \quad m = 1, 2 \quad (1)$$

Из закона сохранения массы при различных физико-химических превращениях имеем

$$M_1 = -M_2.$$

Уравнения импульсов каждой составляющей можно представить в виде[5]:

$$\frac{\partial \alpha_m \rho_m \vec{v}_m}{\partial t} + (\vec{v}_m, \vec{\nabla})(\alpha_m \rho_m \vec{v}_m) = \alpha_m \vec{\nabla} p + \alpha_m \rho_m \vec{g} + \mu_m \alpha_m \Delta \vec{v}_m + \vec{P}_m + \alpha_m \vec{F}, \quad (2)$$

$$m = 1, 2,$$

где второе слагаемое левой части соответствует притоку импульса m -й составляющей через поверхность контрольного объёма; первое, второе и третье слагаемые правой части – воздействию градиента давления, массовых сил и динамической вязкости, приходящихся на m -ю компоненту смеси и характеризуемых вектором \vec{g} и силой Лоренца \vec{F} :

$$\vec{F} = \frac{1}{4\pi} [\text{rot} \vec{H} \times \vec{H}]; \quad (2a)$$

\vec{P}_m представляет интенсивность обмена импульсом между 1-й и 2-й компонентами смеси за счёт вязкого трения. Из закона сохранения импульса следует, что

$$P_1 = -P_2.$$

Интенсивность обмена импульсом между компонентами смеси за счёт вязких сил (Стоксова сила) может быть описана следующим соотношением:

$$\vec{P}_1 = -\vec{P}_2 = \alpha_1 \alpha_2 K (\vec{v}_1 - \vec{v}_2),$$

где $K = \alpha_1 \mu_1 + \alpha_2 \mu_2$.

Для уравнения (2) на границе области поставим условия прилипания:

$$\vec{v}_m \Big|_{\Gamma} = 0. \quad (2b)$$

Для поиска электромагнитных полей используются уравнения из системы уравнений Максвелла.

Уравнения для потенциала внутри ванны получим из закона Гаусса уравнения которое описывает связь электрического потенциала с полем. При этом считаем, что элементарный объем, рассматриваемый нами, электро нейтральный и. В результате получим следующую задачу для потенциала:

$$\begin{aligned} \Delta \varphi &= 0 \\ \varphi \Big|_{\text{анод}} &= \Phi = \text{const}, \quad \varphi \Big|_{\text{катод}} = 0, \\ \frac{\partial \varphi}{\partial n} \Big|_{\text{инч}} &= 0. \end{aligned} \quad (3)$$

Граничные условия ставятся из следующих соображений:

1. Потенциал на катоде равен нулю
2. Потенциал на аноде равен константе отличной от нуля

3. Производная по нормали в непроводящей части $\left. \frac{\partial \varphi}{\partial n} \right|_{\text{нпч}} = 0$ ванны равна нулю.

Ток, который протекает внутри ванны, состоит из двух частей: ток, создаваемый разностью потенциалов и индуцированный ток, который возникает при изменении магнитного поля внутри ванны. Первую компоненту $\vec{j}_{\text{рез}}$ результирующего тока находится из закона Ома, записанного в дифференциальной форме:

$$\vec{j}_{\text{анод}} = \sigma \vec{E}, \quad \vec{E} = -\text{grad} \varphi \quad (4)$$

Для нахождения индуцированного тока используем теорему о циркуляции магнитного поля:

$$\vec{j}_{\text{инд}} = \text{rot} \vec{H} + \frac{\partial \vec{E}}{\partial t} \quad (5)$$

Результирующий ток будет суммой токов найденных выше:

$$\vec{j}_{\text{рез}} = \vec{j}_{\text{анод}} + \vec{j}_{\text{инд}} \quad (6)$$

Для поиска магнитного поля, которое появляется в ванной, воспользуемся законом индукции Фарадея. Принимая во внимание движение среды, получим следующее уравнение для магнитного поля:

$$\frac{\partial \vec{H}}{\partial t} = \text{rot} [\vec{v}, \vec{H}] - \text{rot} \frac{\vec{j}_{\text{рез}}}{\sigma}. \quad (7)$$

Граничные условия для уравнения имеют следующий вид: $\left. \frac{\partial \vec{H}}{\partial t} \right|_{\Gamma} = 0$.

Моделирование давления внутри ванны является отдельной задачей, поскольку для него нет явного представления, которое могло бы адекватно описать процесс. В работах [3],[4] представлены модели по нахождению поля давлений при дополнительных предположениях о его граничном значении, в данной работе такого рода предположения не требуются.

Получим искомое уравнение из уже имеющихся, для этого сложим уравнения изменения импульса обеих фаз. Заметим, что суммарная производная по времени в получившемся уравнении равна приращению массы, отнесённому к плотности. Это вытекает из уравнений неразрывности. Уравнение для давления примет вид:

$$\Delta p = \text{div} \left(\sum_{m=1,2,3} ((\vec{v}_m, \vec{\nabla})) (\alpha_m \vec{v}_m) + \mu_m \Delta \vec{v}_m + \alpha_m \vec{F} \right) + \vec{g}. \quad (8)$$

Граничные условия второго рода имеют вид:

$$\left. \frac{\partial p}{\partial n} \right|_{\Gamma} = \left(\sum_{m=1,2} ((\vec{v}_m, \vec{\nabla})) (\alpha_m \vec{v}_m) + \mu_m \Delta \vec{v}_m + \vec{F} \right) + \vec{g}. \quad (8a)$$

Таким образом, математическая постановка представляет собой систему уравнений (1) – (8). Ниже представлена блок схема, которая описывает алгоритм численного решения системы уравнений (1) – (8).

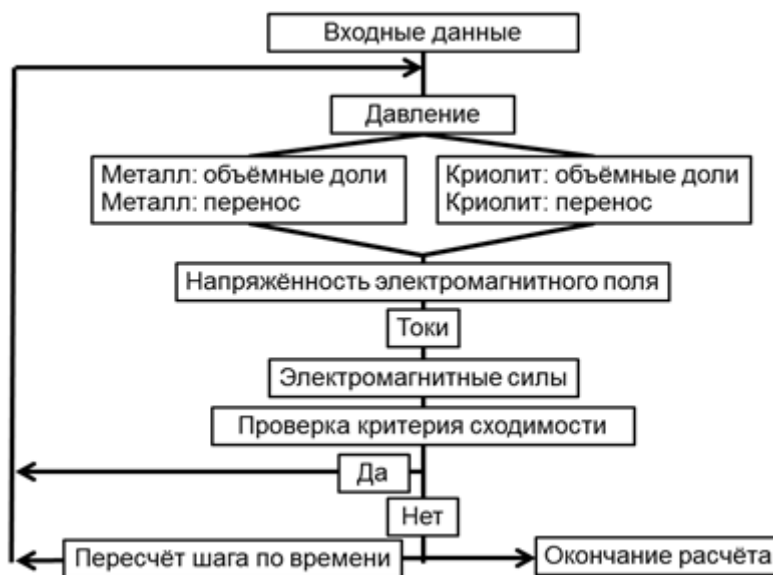


Рис.1 Блок схема численного алгоритма решения.

Описанная модель определяет функцию давления как функцию из C^2 . Однако на границе раздела фаз давление в предельном случае может иметь разрывную первую производную. В результате такого моделирования при численном решении возникают вертикальные скорости в фазах, направленные в противоположные стороны: в середе алюминия вниз, в середе электролита – вверх. Такое направление скоростей обусловлено тем, что значение градиента «сглаженного» поля давлений после численного моделирования в точке раздела фаз не может корректно компенсировать силу тяжести фазы, и оказывается или больше (для электролита рис.2) или меньше (для алюминия рис.3) необходимого значения. Наиболее ярко этот эффект наблюдается при статичном моделировании электролизной ванны, т. е. когда начальные поля скоростей равны нулю, а поверхность раздела представляет собой горизонтальную плоскость.

Выберем оси координат таким образом, что ось Ox направлена горизонтально вдоль длинной стороны ванны, ось Oy направлена вертикально.

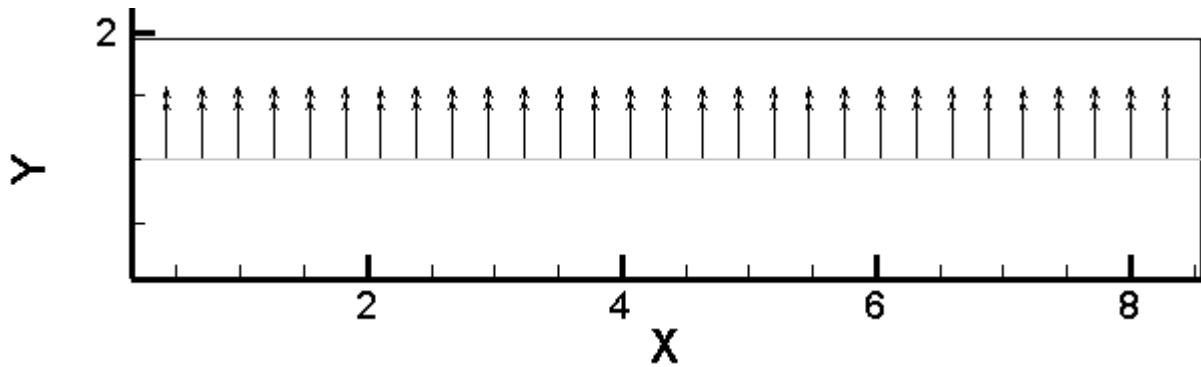


Рис.2. Поле скоростей в среде электролита.

На рисунке 2 представлен поперечный ванны в плоскости XY со скоростями электролита, которые возникают в случае статичной модели.

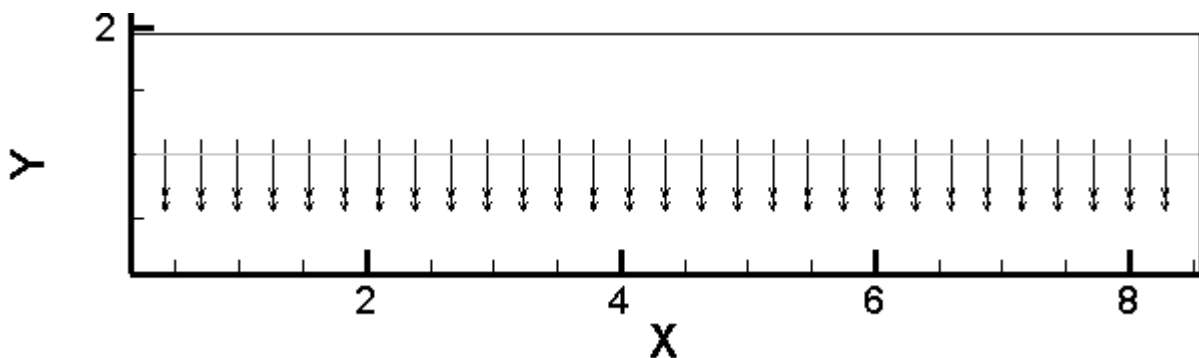


Рис.3. Поле скоростей в среде алюминия.

На рисунке 3 представлен срез электролизной ванны плоскостью XY и скорости, которые возникают в алюминии.

Модификация математической модели

Одним из возможных способов устранения возникающих скоростей – введение неравномерной сетки по пространству таким образом, чтобы её узел в элементарном объёме попадал строго на границу раздела фаз, считая при этом, что фазы в объёме не смешиваются. Однако такой подход существенно усложняет алгоритм расчёта полей в электролизной ванне и существенно уменьшает точность расчёта.

Построим корректировку алгоритма расчёта таким образом, чтобы она обеспечивала выполнение основного предположения модели: $\alpha_1 + \alpha_2 = 1$. Для этого сложим уравнения (1), поделив их на соответствующие плотности веществ, в результате получим:

$$\frac{\partial(\alpha_1 + \alpha_2)}{\partial t} + \text{div}(\alpha_1 \vec{v}_1 + \alpha_2 \vec{v}_2) = \frac{M_1}{\rho_1} + \frac{M_2}{\rho_2}. \quad (9)$$

Уравнения (9) является уравнением неразрывности для смеси в целом. Из него следует, что для выполнения основного предположения модели необходимо, чтобы дивергенция взвешенных скоростей была равна правой части:

$$\operatorname{div}(\alpha_1 \vec{v}_1 + \alpha_2 \vec{v}_2) = \frac{M_1}{\rho_1} + \frac{M_2}{\rho_2}.$$

Данной уравнение является аналогом уравнения несжимаемости для однофазного случая. В расчётной области, где находится только одна фаза в чистом виде, данная корректировка никак не повлияет на поле скоростей, так как в этой расчётной области выполняется условие несжимаемости фазы. Для граничной области, где за счёт давления возникают фиктивные скорости, будет проведён пересчёт поля скоростей и получен результат, отвечающий физическому смыслу процесса.

Модельная задача по разглаживанию границы раздела является наиболее наглядной и показывает преимущества корректировки поля скоростей. Начальное распределение поля скоростей для данной задачи в обеих средах берётся равным нулю. Граница раздела представляет собой «ступеньку» у которой левая часть выше, чем правая, т. е. уровень алюминия в левой части выше, чем в правой. (Рис. 4,5).

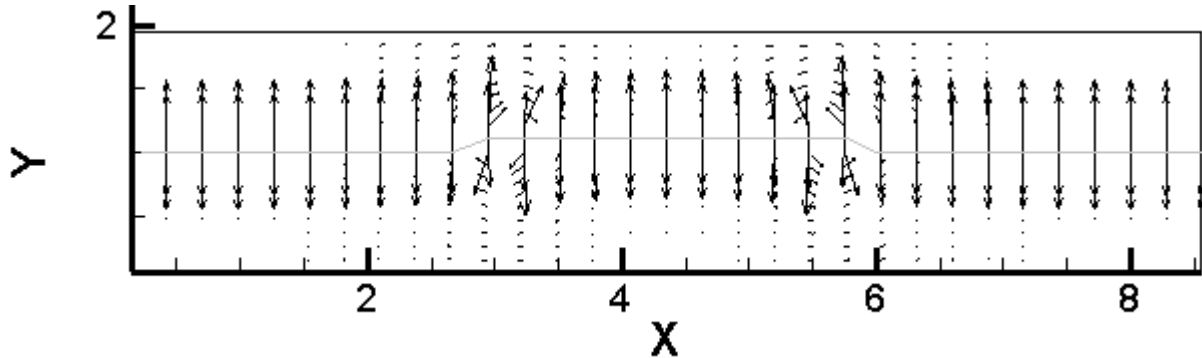


Рис. 4. Разглаживание «ступеньки».

На рисунке 4 представлено результаты расчёта без корректировки. Срез ванны произведён в плоскости XY, стрелочками обозначены скорости алюминия и электролита, которые направлены вниз и вверх соответственно. Направленность скоростей в противоположные стороны на границе раздела сред является следствием «сглаживания» давления при численном решении. Этот эффект наблюдается только на границе раздела сред и говорит о нарушении предположении модели о сумме фаз.

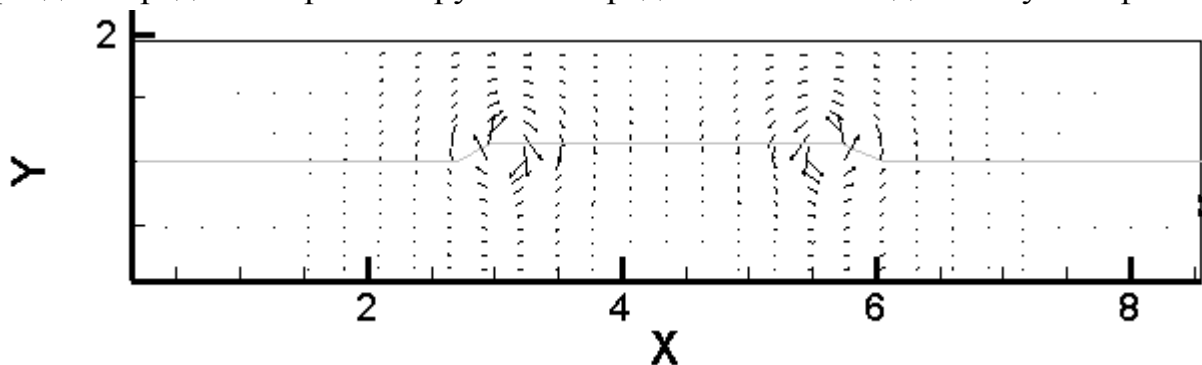


Рис. 5. Разглаживание «ступеньки» с корректировкой алгоритма.

На рисунке 5 изображено поле скоростей алюминия и электролита в срезе ХУ. Данный численный эксперимент показывает процесс разглаживания «ступеньки» на границе раздела с учётом корректировки. Сравнивая рисунки 4 и 5 можно заметить, что вертикальные скорости, направленные вверх и вниз на границе раздела исчезли, что соответствует физическому эксперименту. В расчётной области, где есть только одна фаза, скорости остались прежними. Таким образом, введённая выше корректировка алгоритма является вполне обоснованной, поскольку повышает устойчивость численных вычислений.

Заключение.

Предложенная в статье модифицированная математическая модель двухфазного моделирования электролиза алюминия обладает более высокой степенью адекватности по сравнению с предшествующими моделями, опубликованными в [4], поскольку введённая в алгоритме корректировка вычисления скоростей на границе раздела способствует численной стабилизации вычислительного процесса. Верификация нового алгоритма проводится на хорошо известном физическом эксперименте и показывает хорошие результаты. Новая математическая модель электролиза алюминия позволит проводить расчёты на более длительных промежутках времени, чем это было ранее.

ЛИТЕРАТУРА

1. Белолипецкий В.М., Пискажова Т.В. «Математическое моделирование процесса электролитического получения алюминия. Решение задач управления технологией»// Монография. Красноярск 2012. 237 стр.
2. Wojarevics V.V., Romerio M.V. Long waves instability of liquid metal-electrolyte interface in aluminium electrolysis cells: a generalization of Sele's criterion // Eur. Jour. Mech. B / Fluids. 1994. Vol.13, No.1. P. 33-56.
3. Алаторцев А.В., Кузьмин Р.Н., Проворова О.Г., Савенкова Н.П. Динамическая модель магнитно-гидродинамических процессов в алюминиевом электролизере // Прикладная физика. 2004. № 5. С. 33-42.
4. Анпилов С.В. «Однофазные и многофазные математические модели электролиза алюминия» // Диссертация на соискание ученой степени кандидата наук. Москва 2011. 114 стр.
5. Нигматулин Р.И. Основы механики гетерогенных сред. –М.: Наука, 1978.