

DOI: 10.33184/dokbsu-2021.1.1

Математическое моделирование электрических полей в электролизных технологиях

А. М. Болотнов*, А. Ф. Купцова, В. Н. Иванов

Башкирский государственный университет

Россия, Республика Башкортостан, 450076 г. Уфа, улица Заки Валиди, 32.

*Email: bolotnovam@mail.ru

Предложен алгоритм расчета электрического поля в многоэлементной электрохимической системе на примере алюминиевого электролизера. Элементы системы сгруппированы в три зоны: анод, катод и электролит. На границах элементов одной и той же зоны задаются простые условия сопряжения. Между электролитом и электродами учитывается наличие двойного электрического слоя. Алгоритм основан на последовательном решении краевых задач в каждой зоне методом граничных элементов. Проект предназначен для численного исследования электрических полей в электролизных технологиях.

Ключевые слова: электрохимические системы, технологии электролиза, метод граничных элементов, итерационная процедура.

Введение. Электрохимическими системами (ЭХС) называют промышленные и экспериментальные установки и технологии, основанные на электролизе: нанесение гальванических покрытий, электролитическое формование, электролитно-плазменная обработка деталей, электрохимическая защита подземных и подводных металлических сооружений от коррозии, производство цветных и редких металлов. Важную роль в современном машиностроении играет алюминий, производство которого является необходимым условием успешного развития космической, авиационной, автомобильной и других отраслей промышленности. Вопросам проектирования и оптимизации процессов электролиза алюминия посвящены экспериментальные исследования [1–3], математические модели и алгоритмы расчета электрических, тепловых и магнитных полей в электролизерах [4–6]. Сложность моделирования процессов, происходящих в электролизере, обусловлена взаимным влиянием многих факторов: магнитного и электрического полей, температуры, состава электролита и др. [7–9]. Целью данной работы является построение алгоритма расчета электрического поля в двумерном сечении алюминиевого электролизера с учетом различной электропроводности отдельных элементов.

Математическая модель. Рассмотрим двумерное сечение алюминиевого электролизера с самообжигающимся анодом. Для построения алгоритма все элементы системы

сгруппируем по трем зонам: анодная зона Z_1 (элементы 1.1–1.3), зона электролита Z_2 (элементы 2.1–2.3) и катодная зона Z_3 (элементы 3.1–3.3). В этом случае вся область решения задачи может быть представлена объединением трех зон: $D = \bigcup_{k=1}^3 Z_k$.

Пусть каждая из зон Z_k состоит, в общем случае, из M_k элементов: $Z_k = \bigcup_{m=1}^{M_k} d_{km}$, $k = 1, 2, 3$. Тогда общее число элементов системы равно $N = \sum_{k=1}^3 M_k$, а вся область решения является их объединением: $D = \bigcup_{k=1}^3 Z_k = \bigcup_{k=1}^3 \bigcup_{m=1}^{M_k} d_{km}$.

Здесь, и далее везде, первый индекс отвечает номеру зоны (1 – анодная зона, 2 – зона электролита, 3 – катодная зона); второй индекс соответствует номеру элемента внутри зоны (рис. 1).

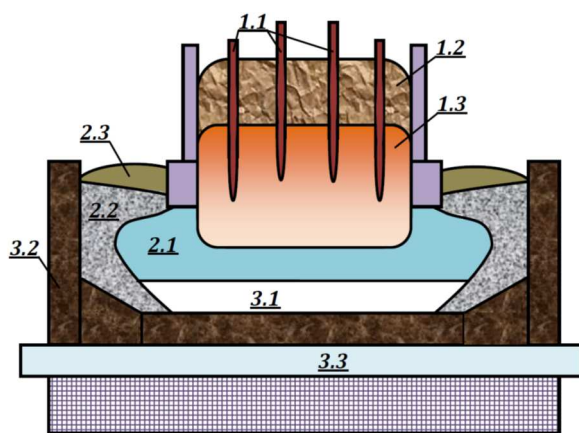


Рис. 1. Сечение алюминиевого электролизера с самообжигающимся анодом. 1.1 – токоподводящие анодные штыри; 1.2 – жидкая анодная масса; 1.3 – спеченный (твердый) анод; 2.1 – жидкий электролит; 2.2 – затвердевший электролит (гарнисаж); 2.3 – глинозем, корка; 3.1 – жидкий алюминий; 3.2 – угольные блоки; 3.3 – катодный токоподвод.

Известно [10], что потенциал электрического поля $U(p)$ удовлетворяет уравнению эллиптического типа

$$\operatorname{div}(\sigma(p)\operatorname{grad} U(p)) = 0, \quad p \equiv (x, y) \in D, \quad (1)$$

где $\sigma(p)$ – функция электропроводности среды

$$\sigma(p) = \{\sigma_{km} = \text{const}, \quad m = 1, 2, \dots, M_k, \quad k = 1, 2, 3\}. \quad (2)$$

Заданной величиной является внешнее напряжение $V = U_{1.1} - U_{3.3}$, приложенное к анодному и катодному токоподводам. Полагая потенциал катодного токоподвода нулевой точкой отсчета ($U_{3.3} = 0$), условие на анодном токоподводе можно записать как

$$U|_{S_{1.1}} = V. \quad (3)$$

Изоляторами являются внешние поверхности электролизера, а также границы симметрии, вводимые с целью сокращения протяженности границ интегрирования. Условия на таких границах могут быть записаны в виде

$$\left. \frac{\partial U_{km}}{\partial n} \right|_{S_m} = 0, k = 1, 2, 3, \quad (4)$$

где n – вектор нормали к границе; индекс m принимает значения, которые имеют смысл, т.е. соответствуют изолированным границам.

На границах между элементами в каждой зоне ставятся условия сопряжения при идеальном контакте:

$$\left(\sigma_{km} \frac{\partial U_{km}}{\partial n} + \sigma_{kp} \frac{\partial U_{kp}}{\partial n} \right) \Big|_S = 0, k = 1, 2, 3, \quad (5)$$

$$(U_{km} - U_{kp}) \Big|_S = 0, k = 1, 2, 3, \quad (6)$$

где S – граница между элементами d_{km} и d_{kp} .

Так как элементы d_{km} и d_{kp} принадлежат одной зоне, то $m \neq p$. Индексы m и p принимают значения, соответствующие элементам, имеющим общую границу.

На границах электролита, при наличии двойного электрического слоя, возникает разрыв решения, с учетом которого формируются условия сопряжения неидеального контакта:

$$\left(\sigma_{km} \frac{\partial U_{km}}{\partial n} + \sigma_{2p} \frac{\partial U_{2p}}{\partial n} \right) \Big|_S = 0, k = 1, 3, \quad (7)$$

$$(U_{km} - U_{2p}) \Big|_S = \eta(J), k = 1, 3, \quad (8)$$

где S – граница между элементами, один из которых принадлежит зоне электролита ($k=2$); $\eta(J)$ – функция поляризации, построенная на основе экспериментальных данных.

Закон Ома на границах элементов может быть записан в виде:

$$J_{km} = \sigma_{km} \frac{\partial U_{km}}{\partial n} \Big|_S, m = 1, 2, \dots, M_k, k = 1, 2, 3, \quad (9)$$

где J_{km} – плотность тока по нормали.

Для определенности принято, что на внутренних границах вектор нормали направлен от элемента с меньшим номером в элемент с большим номером.

Одним из условий корректности алгоритма является выполнение балансовых соотношений по току, т.е. закон сохранения заряда

$$I_0 = \oint \sigma \frac{\partial U}{\partial n} ds = 0, \quad (10)$$

где интеграл вычисляется по любому контуру, в т.ч. по границам каждого из элементов.

Функция поляризации $\eta(J)$ имеет логарифмический вид. В алгоритме удобнее использовать обратную зависимость $J(\eta)$:

$$J_{km}(\eta) = A_{km}(\exp(B_{km}|\eta|)), m = 1, 2, \dots, M_k, k = 1, 3, \quad (11)$$

где A_{km} и B_{km} – числовые параметры, определяемые по экспериментальным данным.

Алгоритм решения задачи. Метод решения основан на том, что уравнение (1) эквивалентно системе уравнений Лапласа [12] для каждого из элементов d_{km} :

$$\Delta U_{km}(p) = 0, p \in d_{km}, m = 1, \dots, M_k, k = 1, 2, 3, \quad (12)$$

где $\Delta \equiv \partial^2/\partial x^2 + \partial^2/\partial y^2$ – оператор Лапласа.

Предлагается двухуровневый метод последовательных приближений в комбинации с методом граничных элементов [11, 12]. Опишем внутренний итерационный процесс в одной из зон. Пусть в анодную зону входят M_1 элементов. Для построения интегрального уравнения воспользуемся формулой Грина, которую с учетом (12) для каждого элемента d_{1m} ($m = 1, \dots, M_1$) запишем в виде [12]:

$$k(p)U(p) = \int_S \left(U(q) \frac{\partial}{\partial n_q} \left(\ln \frac{1}{r(p,q)} \right) - \ln \frac{1}{r(p,q)} \frac{\partial U(q)}{\partial n_q} \right) ds_q, \quad (13)$$

где p – точка, в которой ищется решение; q – точка интегрирования; $k(p) = 2\pi$, если $p \in d_{1m}$; $k(p) = \pi$, если $p \in S$; $r(p,q)$ – расстояние между p и q .

Умножив обе части уравнения (13) на σ_{1m} и просуммировав по m от 1 до M_1 , получим:

$$\sum_{m=1}^{M_1} k(p)U_{1m} = \sum_{m=1}^{M_1} \int_{S_{1m}} \left(U_{1m} \frac{\partial}{\partial n_q} \left(\frac{1}{r(p,q)} \right) - \frac{1}{r(p,q)} \frac{\partial U_{1m}}{\partial n_q} \right) ds_q. \quad (14)$$

Предполагая, что точка p принадлежит границе элементов, и учитывая условия (5), (6), после некоторых преобразований из (14) получим интегральное уравнение для потенциала:

$$U_1(p) = \left(2\pi \sum_{m=1}^{M_1} \sigma_{1m} \right)^{-1} \int_{S_1} K(p, q, U_1(q)) ds_q. \quad (15)$$

Ядро $K(p, q, U_1(q))$ в (15) определяется соотношениями:

$$K = (\sigma_{1m} - \sigma_{1p}) U_1(q) \frac{\partial}{\partial n} \left(\frac{1}{r(p,q)} \right), m < p, \quad (16)$$

если точка q принадлежит общей границе элементов d_{1m} и d_{1p} ;

$$K = \sigma_{1m} U_1(q) \frac{\partial}{\partial n} \left(\frac{1}{r(p,q)} \right), \quad (17)$$

если точка q принадлежит границе, являющейся изолятором;

$$K = \sigma_{1m} U_1(q) \frac{\partial}{\partial n} \left(\frac{1}{r(p,q)} \right) + J_1(q) \frac{1}{r(p,q)}, \quad (18)$$

если точка q принадлежит границе электролита.

Интегрирование в уравнении (15) осуществляется только по внешним границам анодной зоны, что в итоге сокращает время расчета. Уравнения для электролита и катода строятся аналогично.

Для решения уравнения (15) в каждой из зон поочередно выполняется процедура [11]:

$$U_k^{n+1}(p) = U_k^n(p) - \alpha \left(U_k^n(p) - \frac{1}{\pi} \int_{S_k} K(p, q, U_k^n(q)) ds_q \right), \quad (19)$$

где n – номер итерации; $\alpha > 0$ – параметр, определяемый из условия сходимости процесса. Процедура (19) повторяется до выполнения $|U_k^{n+1}(p) - U_k^n(p)| < \varepsilon$, ($k = 1, 2, 3$) для всех $p \in S_1$ и заданного $\varepsilon > 0$. Процесс (19) – внутренний, выполняемый в зонах Z_k при последовательном вызове из внешней итерационной процедуры.

Общий алгоритм итерационного процесса содержит следующие этапы.

1. Выбирается начальное приближение потенциала на границах электролита с элементами анода и катода; определяется скачок потенциала по формуле (8), затем $J(p)$ из формулы (11).
2. Процедура (19) последовательно выполняется в анодной и в катодной зонах; вычисляются очередные приближения потенциала на границах с электролитом. Далее вычисляется приближение $\eta(p)$, после чего – новые значения $J(p)$ на границах элементов анодной и катодной зон.
3. Процедура (19) выполняется в зоне электролита; уточняются значения потенциала на границах с анодом и катодом; уточняется $\eta(p)$, затем – новые значения плотности тока $J(p)$.
4. Проверяется выполнение балансовых соотношений (10). При невыполнении условий с наперед заданной точностью, повторяются пункты 2 и 3 изложенного алгоритма.

Заключение. Алгоритм реализован в программном проекте, с помощью которого проведены расчеты электрических полей при различных входных параметрах. Анализ влияния входных параметров задачи на процесс электролиза является одной из целей проведения численных расчетов. Данные математическая модель, алгоритм и программный код предоставляют возможность проведения расчетов электрических полей в сложных электрохимических системах.

Литература

1. Иванова А. М., Архипов П. А., Руденко А. В., Ткачева О. Ю., Зайков Ю. П. Формирование гарнисажа и настыли в алюминиевом электролизере // Известия высших учебных заведений. Цветная металлургия. 2019. №5. С. 23–31.

2. Макеев А. В., Белолипецкий В. М., Пискажова Т. В., Портянкин А. А. Модель теплообмена в период пуска электролизера для оптимизации снижения напряжения // *Металлург*. 2018. №10. С. 71–75.
3. Пискажова Т. В. Методы эффективного управления технологическим процессом электролитического получения алюминия // *Вестник Сибирского Федерального университета. Техника и технологии*. 2010. Т. 3. №2. С. 159–170.
4. Болотнов А. М., Закиева Г. Н. Применение интервальных вычислений при компьютерном моделировании электрических полей в электролитах // *Вестник Башкирского университета*. 2014. Т. 19. №3. С. 799–803.
5. Болотнов А. М., Хисаметдинов Ф. З. Компьютерное моделирование электрических полей в системах катодной защиты трубопроводов с поврежденной изоляцией // *Доклады Башкирского университета*. 2016. Т. 1. №1. С. 7–13.
6. Иванов В. Т., Болотнов А. М. АСНИ электрических полей в сложных электрохимических системах на основе вычислительного эксперимента // *Электрохимия*. 1991. Т. 27. №3. С. 324–331.
7. Савенкова Н. П., Кузьмин Р. Н., Анпилов С. В., Калмыков А. В. Моделирование влияния динамики изменения внутреннего пространства ванны алюминиевого электролизера на МГД-процессы // *Успехи прикладной физики*. 2016. Т. 4, №4. С. 409–415.
8. Шахрай С. Г., Дектерев А. А., Скуратов А. П., Минаков А. В., Бажин В. Ю. Повышение энергетической эффективности электролизера с самообжигающимся анодом // *Металлург*. 2018. №9. С. 79–83.
9. Иванов В. Т., Болотнов А. М. Пакет прикладных программ для численного исследования электрических полей в неоднородных электрохимических системах // *Известия высших учебных заведений. Электромеханика*. 1991. №6. С. 21–28.
10. Тамм И. Е. Основы теории электричества. М: Физматлит, 2003. 616 с.
11. Болотнов А. М. Методы граничных элементов в расчетах электрических полей электрохимических систем. Уфа: РИО БашГУ. 2002. 143 с.
12. Агошков В. И., Дубовский П. Б., Шутяев В. П. Методы решения задач математической физики. М.: Физматлит, 2002. 320 с.

Статья рекомендована к печати кафедрой информационных технологий и компьютерной математики Башкирского государственного университета
(д-р физ.-мат. наук, проф. Ф. Л. Лубышев).

Mathematical modeling of electric fields in electrolysis technologies

A. M. Bolotnov*, A. F. Kuptsova, V. N. Ivanov

Bashkir State University

32 Zaki Validi Street, 450076 Ufa, Republic of Bashkortostan, Russia.

*Email: bolotnovam@mail.ru

An algorithm for calculating the electric field in a multi-element electrochemical system is proposed on the example of an aluminum electrolyzer. The system elements are grouped into three zones: the anode, the cathode, and the electrolyte. At the borders of elements of the same zone, simple conjugation conditions are set. Between the electrolyte and the electrodes, the presence of a double electric layer is taken into account. The algorithm is based on the sequential solution of boundary value problems in each zone by the boundary element method. The project is intended for the numerical study of electric fields in electrolysis technologies.

Keywords: electrochemical systems, electrolysis technologies, boundary element method, iterative procedure.