Здравствуйте, меня зовут Сапожников Кирилл Эдуардович, я представляю представля. «Математическое моделирование криолитового отношения в промышленной электролизной ванне».

2 слайд

Промышленный электролиз алюминия происходит в электролизных ваннах при температуре порядка 950°C и сопровождается рядом химических реакций, в результате которых расплав электролита состоящий из криолита и глинозёма под действием постоянного тока 250 кА распадается на ионы алюминия, натрия, фтора и их солей. (Na, AlF4 (тетрафторид алюминия), AlF6, F, Al2O2F4, Al2OF6).

Циркуляция электролита ведёт к обратному окислению алюминия с анодным газом, что приводит к потерям выхода алюминия по току.

В электролизной ванне все происходящие физико-химические процессы тесно связаны между собой, что отражено на рисунке 1.

Поэтому математическое моделирование электролиза алюминия в промышленной ванне обязательно должно учитывать эти взаимосвязи.

В настоящей работе обсуждается модификация классического уравнения Нернста-Планка.

Первый управляющий параметр – криолитовое отношение. На производстве замер КО делается 1-3 раз в неделю путём взятия пробы расплава криолита в нескольких точках рабочего пространства и дальнейшего проведения химического анализа, что даёт большую погрешность в его определении.

3 слайд

В блоке, рассчитывающем электродинамику электрохимических процессов, основным уравнением является классическое уравнение Нернста-Планка, связывающее изменения концентрации ионов и катионов химических элементов во времени в зависимости от распределения электродного потенциала окислительно-восстановительных пар.

Это уравнение разрабатывалось для сред, в которых гидродинамическими процессами можно пренебречь. Математическое моделирование электролиза в промышленной ванне предусматривает учёт гидродинамических процессов, поскольку вихревые образования в расплаве электролита способствуют активному переносу выделенных ионов и катионов в рабочем пространстве электролизёра. В настоящей работе предлагается использовать модифицированное авторами доклада уравнение Нернста-Планка, учитывающее перенос основных ионов и катионов, возникающих в результате химических реакций под действием вектора скорости.

Граничные условия на аноде и жидком катоде выписываются в соответствии с химическими реакциями, при этом уравнение для анионов натрия выводится из условия электронейтральности среды. Концентрация анионов алюминия вычисляется путём решения задачи Коши, в правой части которой фигурирует плотность катодного тока. (выделение алюминия происходит под действием вертикального эл тока (закон Фарадея))

4 слайд

Поставленная задача решалась разностным методом. Использовалась разностная схема Мак-Кормака со вторым порядком точности по пространству и времени.

5 слайд

На слайде представлены результаты численного эксперимента для сечения рабочего пространства плоскостью XY на глубине 3 см от подошвы анода. На рисунке 2 представлен график векторного поля скоростей в расплаве криолита на расстоянии 3 см от подошвы анода. Можно заметить, что присутствует обводящий вихрь по периметру ванны и завихрения в центре ванны. На рисунке 3 представлено распределение значений КО. Видно, что полученное распределение коррелирует с графиком скоростей

6 слайд.

На слайде представлены результаты численного эксперимента для сечения рабочего пространства плоскостью XY на глубине 3 см от подошвы анода. На рисунке 4 представлен график векторного поля скоростей в расплаве криолита на расстоянии 1,34 м от короткого борта. Можно заметить, что присутствует обводящий вихрь. На рисунке 5 представлено распределение значений КО.

7 слайд.

На слайде представлены результаты численного эксперимента для сечения рабочего пространства плоскостью XY на глубине 3 см от подошвы анода. На рисунке 6 представлен график векторного поля скоростей в расплаве криолита на расстоянии 22 см от длинного борта. На рисунке 7 представлено распределение значений КО.

8 слайд.

На слайде представлены результаты расчёта трёхмерной задачи в плоскостном срезе рабочего плоскости XY на глубине 3 см от подошвы анода (расчёт на такой же глубине был проведён с помощью двумерной математической модели) На рисунке 9 представлено распределение значений КО. Видно, что положение наибольших и наименьших значений криолитового отношения коррелирует с местами образований вихрей. Сравнение c рисунком 3 показывает, что значения КО, полученные с помощью трёхмерной модели незначительно отличаются от результата, полученного с помощью двухмерной модели.

9 слайд

Сравнение рисунков 11 и 5 демонстрирует, что распределение КО равномерно в плоскости среза и в основном находятся в допустимом диапазоне, что соответствует результатам двумерной модели. На трёхмерной модели более сильно выражено влияние обводящего вихря, что проявляется в точках с красным и синим цветом у правого борта.

На рисунке 13 изображено распределение значений КО в срезе YZ. В трёхмерном случае на основном жёлто-оранжевом фоне, соответствующем допустимому диапазону КО наблюдаются единичные вкрапления значений КО, примерно равных 2,8 и соответствующих граничному значению допустимого диапазона 2,6-2,8. В двумерном случае также основные значения не выходят из допустимого диапазона.

Заключение.

Таким образом, на основе математического моделирования, учитывающего взаимовлияние всех физико-химических процессов, происходящих в электролизной ванне, возможно провести математическое моделирование основных управляющих параметров, таких как криолитовое отношение, выход по току, потери выхода по току. Численные значение которых более точно отражают динамику процесса электролиза алюминия, чем соответствующие управляющие параметры, полученные опытным путем. Внесение в АСУТП производства поправок на основе проведенных исследований позволит увеличить эффективность его работы.

Картинки изменить

Отметить борт, где берут пробу, отметить важность КО.

Уравнение Нернста-Планка описывает динамику заряженных частиц в электромагнитном поле, 1ое слагаемое – диффузия заряженных частиц, второе – перенос.

Картинки качественно совпадают

Граничные условия для XY

Нормальная компонента вектора по току d/dn (граничное условие – черта n)

Аналог гран усл третьего рода для теплопроводности, определяют нормальную компонента вектора движения через границу (гран усл ньютона)

Нормальная производная решения – линейно связана с условием на границе

Нормальная компонента потока на других границах рабочего пространства (стенки ванны) равна нулю.

Поток через границу

Начальные условия для алюминия.

Скалярное умножение на n

«Палочка n» - скалярное произведение

\kappa C d\phi/dn = G

Inkscape

Моделирование проводилось для стабильного режима работы ванны