

*Ф.А. Аникеев С.В. Анпилов, Ф.С. Зайцев, Н.П. Савенкова,  
А.В. Калмыков*

## **МОДЕЛИРОВАНИЕ РЕЛАКСАЦИИ КОЛЕБАНИЙ ЭЛЕКТРОЛИЗЁРА СО СВОБОДНОЙ ГРАНИЦЕЙ**

**Введение.** Одной из важных прикладных задач является задача моделирования промышленного алюминиевого электролизера. Электролиз алюминия является достаточно дорогим и ресурсоемким процессом. Внутри электролизной ванны происходят сложные физические и химические процессы. Эффективность производства алюминия существенно зависит от степени понимания и умения управлять этими процессам. В частности, сильные всплески на границе раздела электролита и алюминия, перемешивание с накапливающейся вблизи анода газовой фазой могут существенно увеличить потери выхода первичного алюминия по току. В связи с этим, важнейшим направлением изучения процесса электролиза алюминия является исследование МГД стабильности электролизной ванны, то есть устойчивости колебаний границы раздела сред алюминий-электролит. Считается, что началом развития МГД неустойчивости ванны является поднятие алюминия в реакционную область, где происходит его обратное окисление, которое ведёт к потере алюминия по току. Поэтому крайне важной является задача разработки высокоадекватных физико-математических моделей электролиза алюминия и численных методов их решения.

Математическая модель производства алюминия базируется на трёхмерной системе уравнениях Навье-Стокса, уравнениях Максвелла и уравнениях химической кинетики [1,2,3]. Аналитическое решение такой системы уравнений получить не представляется возможным, поэтому для решения задачи предлагается проводить дискретизацию и использовать численные методы.

Сложность численного моделирования обусловлена наличием в ванне многокомпонентной среды твердой, жидкой и газообразных фаз. Традиционно для расчета процессов электролиза алюминия применялись классические разностные численные методы. Эти методы хорошо зарекомендовали себя на практике. Однако адекватное описание границы раздела фаз алюминий-электролит и границы газовой области в трехмерном случае с реалистическими параметрами сред требует сильного измельчения сетки, что значительно затрудняет практические исследования. Часто исследователя интересует не только глубина распространения газа в среде электролита, но и эволюция пузырьков газа в частности слипание пузырьков газа в домены, что представляет

опасность развития анодного эффекта в случае, когда диаметр домена превосходит 10 см. При использовании разностного метода решения описать образование доменов пузырьков газа весьма затруднительно, так как, как правило, рассчитывается только граница зоны их распространения в электролите. Поэтому авторами предлагается использовать для исследования эволюции пузырьков метод SPH, который в последние годы широкое применение для численного решения задач механики сплошной среды находит так называемый метод сглаженных частиц SPH (Smoothed Particles Hydrodynamics [4-8]). В отличие от традиционных подходов SPH основан на интегральной аппроксимации искомых функций и позволяет свести решение системы уравнений в частных производных к решению системы обыкновенных дифференциальных уравнений. Метод SPH работает в Лагранжевой системе координат в отличие от использованного ранее разностного метода и обладает целым рядом преимуществ перед разностными методами [4-7]. К ним относятся: отсутствие сетки по фазовым переменным, простое и естественное описание разделов многокомпонентных сред, узко локализованных течений, источников и стоков, границ сложной геометрии. В методе SPH не требуется расщепления по физическим процессам одного характерного масштаба и все уравнения для всех компонент среды и фазовых состояний могут решаться одновременно. Кроме того, SPH хорошо распараллеливается, в том числе, на относительно недорогих и компактных гетерогенных CPU/GPU вычислительных архитектурах.

В настоящей работе проводится сравнение решения, полученного разностным методом и методом SPH при описании физических процессов электролиза алюминия в условиях близких к промышленным. Подчеркнем, что ранее метод SPH не применялся для моделирования электролиза алюминия.

Сравнение проводится для модельной задачи релаксации колебаний жидкости со свободной границей жидкой фазы. Такая модельная задача выделяет гидродинамику процесса. В работе приводится сравнительный анализ результатов, полученных разностным методом и методом SPH, их вычислительных характеристик и точности. Рассмотрены достоинства и недостатки методов, перспективы их применения для реалистического моделирования процесса электролиза алюминия.

**Математическая постановка.** Промышленный алюминиевый электролизёр представляют собой прямоугольную ванну со сглаженными краями. На развитой стадии процесса внизу ванны находится жидкий металл – алюминий, сверху находится расплавленный глинозем со

специальными добавками, а так же газ, образовавшийся в процессе реакции электролиза. Сверху в ванну на глубину, составляющую треть от глубины ванны, погружены 22 графитовых анода, катодом является жидкий алюминий. При прохождении вертикального тока порядка 250 кА. и температуре 960 °С в электролите проходит электролиз алюминия, сопровождающийся рядом химических реакций, в ходе которых выделяется алюминий, углекислый и угарный газ. Соединений, содержащие алюминий, диффундируют до границы жидкого катода, где происходит процесс восстановления первичного алюминия.

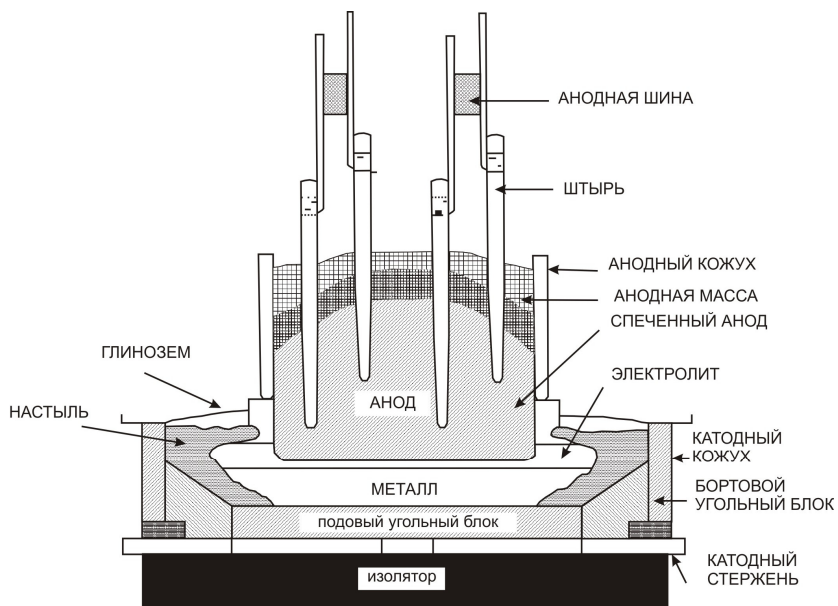


Рис. 1. Схематичное изображение электролизёра.

В работе представлена трёхфазная модель, описанная в [1], в основе которой лежит система уравнений Навье-Стокса и система уравнений Максвелла. В каждой точке объёма, занятого смесью, вводятся объёмные доли  $\alpha_m$ , макроскопические скорости компонентов смеси  $\vec{v}_m$ , давление  $p$ , напряжённость магнитного поля  $\vec{H}$ , сила Лоренца  $\vec{F}$ , плотность электрического тока  $\vec{j}$  и температура  $T$ . В качестве вспомогательных величин вводятся потенциал электрического поля  $\phi$  и векторный потенциал магнитного поля  $\vec{A}$ . Все вышеперечисленные величины являются основными неизвестными математической модели. Соответствующая система дифференциальных уравнений имеет вид:

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

$$\frac{\partial \alpha_m \rho_m \vec{v}_m}{\partial t} + (\vec{\nabla}, \vec{v}_m) (\alpha_m \rho_m \vec{v}_m) = -\alpha_m \vec{\nabla} p + \alpha_m \rho_m \vec{g} + \alpha_m \mu_m \Delta \vec{v}_m + \alpha_n \alpha_m \mu_{mn} (\vec{v}_n - \vec{v}_m) + \alpha_m \mu_m [\vec{j}, \vec{H}], \quad (2)$$

$$\nabla \cdot \left( \sum_{m=1,2,3} \left( \frac{\alpha_m}{\rho_m} \vec{\nabla} p \right) \right) = \nabla \cdot \left( \sum_{m=1,2,3} \left( \begin{aligned} & -(\vec{\nabla}, \vec{v}_m) (\alpha_m \vec{v}_m) + \alpha_m \frac{\mu_m}{\rho_m} \Delta \vec{v}_m + \\ & + \frac{\alpha_m}{\rho_m} (\mu_0 [\vec{j} \times \vec{H}]) \end{aligned} \right) \right), \quad (3)$$

$$\nabla \cdot \left( \sum_{m=1,2,3} (\alpha_m \sigma_m) \nabla \varphi \right) = \nabla \cdot \left( \mu_0 [\vec{v}, \vec{H}] \sum_{m=1,2,3} (\alpha_m \sigma_m) \right), \quad (4)$$

$$\vec{j} = \sum_{m=1,2,3} (\alpha_m \sigma_m) (\mu_0 [\vec{v}, \vec{H}] - \nabla \varphi), \quad (5)$$

$$\vec{H} = \text{rot} \vec{A}, \quad \Delta \vec{A} = -\vec{j}, \quad (6)$$

$$\frac{\partial \rho T}{\partial t} + \text{div}(\rho T \vec{v}) = \frac{1}{\zeta} \text{div}(\lambda \text{grad}(T)) + \frac{1}{\zeta} (\vec{j}, \vec{E}) \quad (7)$$

С условиями на границе:

$$\vec{v}_m|_{\Gamma} = 0, \quad \frac{\partial \varphi}{\partial n} \Big|_{\substack{\text{непроводящая} \\ \text{часть}}} = 0, \quad \varphi|_{\text{анод}} = \Phi, \quad \varphi|_{\text{катод}} = 0, \quad (8)$$

$$\frac{\partial p}{\partial t} \Big|_{\Gamma} = \left( \sum_{m=1,2,3} \left( \begin{aligned} & -(\vec{\nabla}, \vec{v}_m) (\alpha_m \vec{v}_m) + \alpha_m \frac{\mu_m}{\rho_m} \Delta \vec{v}_m + \\ & + \alpha_m \vec{g} + \frac{\alpha_m}{\rho_m} (\mu_0 [\vec{j} \times \vec{H}]) \end{aligned} \right) \right) \Big/ \left( \sum_{m=1,2,3} \frac{\alpha_m}{\rho_m} \right), \quad n$$

$$\frac{\partial \vec{A}}{\partial n} \Big|_{\Gamma} = 0, \quad \frac{\partial T}{\partial n} \Big|_{\substack{\text{гарнисаж} \\ \text{настыль}}} = \frac{1}{\zeta} Q, \quad T|_{\substack{\text{верхняя} \\ \text{корка}}} = T_0.$$

Постоянными величинами в модели являются плотности смеси  $\rho_m$ , константы химической реакции  $J_m$ , динамическая вязкость среды  $\mu_m$ , величина потенциала на анодах  $\Phi$ , магнитная постоянная  $\mu_0$  и проводимость компонент смеси  $\sigma_m$ .

**Разностный метод решения.** Рассматриваемая область разбивается на прямоугольные параллелепипеды. При этом в центре объёмов вычисляются скалярные величины, такие как объёмные доли, давление и электрический потенциал. На боковых гранях перпендикулярных оси X задаются x-ые компоненты потоковых величин, на боковых гранях перпендикулярных оси Y задаются y-ые компоненты потоковых величин и на боковых гранях перпендикулярных оси Z задаются z-ые компоненты потоковых величин. К потоковым величинам относятся скорости, плотность электрического тока, силы Лоренца и векторный потенциал магнитного поля. На ребрах задаются вихревые величины, причём на ребре задаётся та компонента вектора, оси которой параллельно ребро. К вихревым величинам относится магнитное поле.

Численный метод решения описанной в пункте 2 системы уравнения расщепляется по физическим процессам. Остановимся на его основных этапах.

При численной аппроксимации эволюционных уравнений использовались явные разностные методы, что позволяет легко распараллелить их. Для уравнений Пуассона для поиска давления, электрического потенциала и компонентов векторного потенциала магнитного поля применялась разностная аппроксимация второй производной «крест». Соответствующие уравнения решались итерационными методами.

Основная сложность при построении разностного метода заключается в аппроксимации конвективного члена уравнения Навье-Стокса  $(\bar{\nabla}, \bar{v}_m)(\alpha_m \rho_m \bar{v}_m)$ , в связи с этим используется хорошо зарекомендовавший себя метод Мак-Кормака. Рассмотрим применение метода Мак-Кормака к одномерному уравнению Бюргера:

$$\frac{\partial u}{\partial t} + \frac{\partial u^2}{\partial x} = \mu \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} - \frac{1}{\rho} \nabla p + \vec{f}$$

Метод Мак-Кормака в данном случае имеет следующий вид:

Предиктор:

$$\frac{u_i^{n+1} - u_i^n}{\Delta t} + \frac{(u_i^n)^2 - (u_{i-1}^n)^2}{\Delta x} = \mu \frac{u_{i+1}^n - 2u_i^n + u_{i-1}^n}{\Delta x^2} - \frac{1}{\rho} \frac{p_{i+1}^n - p_i^n}{\Delta x} + f_i^n$$

Корректор:

$$\frac{2u_i^{n+1} - u_i^{n+1} - u_i^n}{\Delta t} + \frac{(u_{i+1}^{n+1})^2 - (u_i^{n+1})^2}{\Delta x} = \mu \frac{u_{i+1}^{n+1} - 2u_i^{n+1} + u_{i-1}^{n+1}}{\Delta x^2} - \frac{1}{\rho} \frac{p_{i+1}^{n+1} - p_i^{n+1}}{\Delta x} + f_i^{n+1}$$

При построении метода Мак-Кормака в трёхмерном случае для поиска величин в полужелтых узлах используется линейная интерполяция.

Уравнение Пуассона для давления, электрического потенциала и компонент вектора магнитного потенциала решаются методом верхних релаксаций с параметром от 1,92 до 1,8. Результирующий численный метод решения задачи имеет первый порядок аппроксимации по пространству и первый порядок аппроксимации по времени.

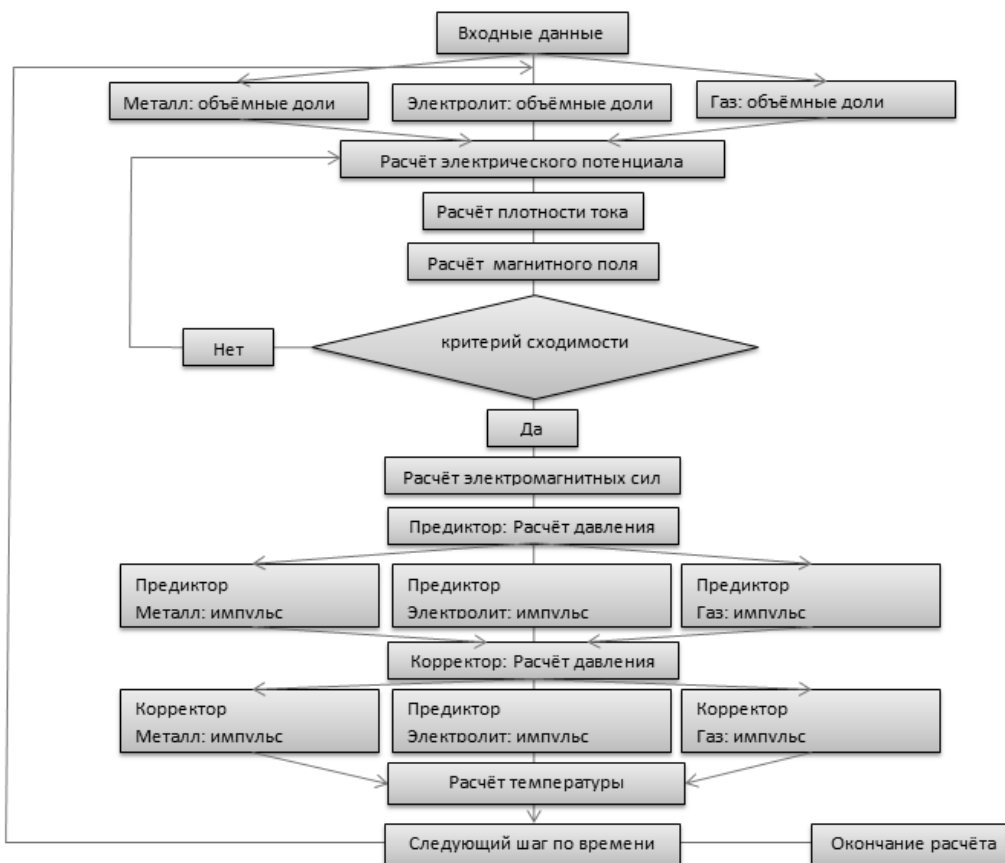


Рис. 2. Алгоритм численного решения.

Еще одной особенностью численного алгоритма является итерационный процесс нахождения плотности электрического тока и магнитного поля. Поскольку искомые величины оказывают взаимное влияние друг на друга, необходимо реализовать алгоритм, позволяющий одновременное нахождение плотности тока и магнитного поля на новом слое по времени.

Блок-схема всего численного алгоритма представлена на рисунке 2.

Условие на шаг по времени получено полуэмпирически:

$$\Delta t_n < C \frac{\min(\Delta x, \Delta y, \Delta z)}{\max\left(\max_{i,j,k} |\vec{v}_1^n|, \max_{i,j,k} |\vec{v}_2^n|, \max_{i,j,k} |\vec{v}_3^n|\right)}$$

где  $C = 0.01$ . Данное условие, конечно, является несколько жестким, однако позволяет избежать некорректного поведения разностного метода.

**Метод сглаженных частиц (SPH).** Название метода SPH, в котором фигурирует слово «частицы», сложилось исторически и отражает лишь некоторую интерпретацию данного метода. Математическое же содержание метода SPH состоит в применении интегральной аппроксимации производных по пространственным переменным и замене интегралов суммами. Метод SPH и его обоснование подробно рассмотрены в работах [4-8]. У метода SPH есть ряд достоинств, важных для детального описания процесса электролитического получения алюминия.

Как уже отмечено выше SPH не требует расщепления задачи по физическим процессам, по компонентам среды и отдельным уравнениям. То есть, позволяет на каждом шаге по времени одновременно решать все входящие в исходную систему уравнения. В результате в дискретной задаче удастся избежать введения дополнительной погрешности, связанной с расщеплением.

Благодаря отсутствию пространственной сетки, описание свободной границы однокомпонентной среды в SPH не требует специальных граничных условий или введения второй среды, которая может повлиять на поведение основной среды. Уравнения решаются только в той области, где присутствует изучаемое вещество.

SPH в случае многокомпонентной среды, вообще говоря, позволяет не использовать предположение о нахождении нескольких компонент в элементе объема. Для каждой компоненты среды может быть записана своя система уравнений. В результате появляется возможность простого описания источников и стоков, границ раздела сложной геометрии, узко локализованных движущихся объектов, например, пузырей, а также образования твердых фаз.

Метод SPH использует запись исходной системы уравнений с полной производной по времени. Поэтому в нем отсутствует проблема аппроксимации конвективного члена  $(\vec{v}, \vec{v}_m)(\alpha_m \rho_m \vec{v}_m)$ . Применение метода SPH позволяет легко изменять граничные условия и учитывать такие эффекты, как затвердевание электролита.

Решения рассматриваемой задачи проводится с помощью стандартных формул метода SPH для аппроксимации дифференциальных операторов и вычисления давления, подробно описанных, например, в работах [4-8]. В книге [8] математически строго показано, что метод SPH, при выполнении некоторых условий, дает решение со вторым порядком аппроксимации по пространству. Порядок аппроксимации по времени зависит от применяемого метода решения системы обыкновенных дифференциальных уравнений (о.д.у.), к которой SPH сводит исходную задачу.

Изложение стандартных деталей метода SPH достаточно громоздко. Поэтому здесь мы остановимся лишь на описании нового алгоритма для решения одной из подзадач SPH, разработка которого потребовалась при применении этого метода к моделированию электролиза алюминия.

Предлагается следующее обобщение метода Verlet, описанного, например, в [5], с. 1728, на случай, когда правая часть в уравнении для ускорения зависит от скорости. Для системы:

$$\frac{du}{dt} = v, \quad \frac{dv}{dt} = f(t, q, v),$$

переход на следующий шаг по времени в нашем обобщении осуществляется по формулам:

$$q^{1/2} = q^0 + \frac{\delta t}{2} v^0, \quad v^{1/2} = v^0 + \frac{\delta t}{2} f^0, \\ \bar{v}^1 = v^{1/2} + \frac{\delta t}{2} f^{1/2}, \quad q^1 = q^{1/2} + \frac{\delta t}{2} \bar{v}^1, \quad v^1 = v^{1/2} + \frac{\delta t}{2} f(t_1, q^1, \bar{v}^1).$$

Предложенный метод имеет второй порядок аппроксимации по времени. В определенных случаях он сохраняет важные свойства исходной системы о.д.у., см., например, [5] и приведенные там ссылки.

Метод SPH является консервативным в смысле сохранения массы каждой компоненты среды с учетом источников и потерь. Кроме того, консервативностью обладают и SP-аппроксимации частных производных, см. [5,8].

**Результаты вычислений.** Условно моделирование электролиза алюминия можно разбить на две части: гидродинамику и динамику электромагнитных полей. При моделировании процессов, протекающих в алюминиевом электролизёре, обычно нельзя рассматривать эти две составляющие отдельно друг от друга, однако при сравнении методов численного решения удобно разбить модель на эти две задачи и сравнивать их отдельно. Наибольшую сложность представляет аккуратное описание гидродинамической части задачи.

Для сравнения точности описания гидродинамических процессов различными методами рассмотрим модельную задачу о релаксации колебаний жидкости со свободной границей в ванне прямоугольной формы. Сравнение удобно проводить в двумерном случае, так как введение третьего измерения приводит лишь к усложнению интерпретации результатов расчетов без существенного добавления информации об особенностях движения изучаемой среды.

Будем рассматривать процессы в прямоугольнике с основанием два метра и высотой в один метр. Пусть в левом нижнем углу области



находится прямоугольный столб жидкости шириной 1.3 метра и высотой 0.9 метра, имеющий плотность  $\rho = 1 \text{ кг/м}^3$  и вязкость  $\mu = 0.2 \text{ Па}\cdot\text{с}$ . В начальный момент времени столб жидкой фазы покоится. Затем начинает двигаться под действием силы тяжести. Предполагается, что жидкость не взаимодействует с окружающей газообразной средой. Необходимо рассчитать процесс релаксации колебаний жидкости. Наибольший интерес с точки зрения задачи электролиза алюминия представляют заключительные стадии колебаний границы раздела фаз, а не детали процесса обрушения столба.

Заметим, что в случае отсутствия взаимодействия с воздухом метод SPH позволяет рассмотреть только одну среду. В разностном методе необходимо либо ставить специальные условия на свободной границе жидкости, либо использовать две среды.

На рис. 3 показано поле скоростей в некоторый промежуточный момент времени. В случае SPH для большей наглядности отображены скорости только каждой шестой SP-частицы. Начала векторов скоростей находятся в точках расположения SP-частиц. В разностном методе скорости заданы на сетке, граница раздела сред показана сплошной линией.

Видно, что оба метода дают похожие результаты. Однако в разностном методе, происходит некоторое размазывание свободной границы. Также в разностном методе газообразная среда, наличие которой не требуется в SPH, может оказывать влияние на поведение свободной границы жидкости.

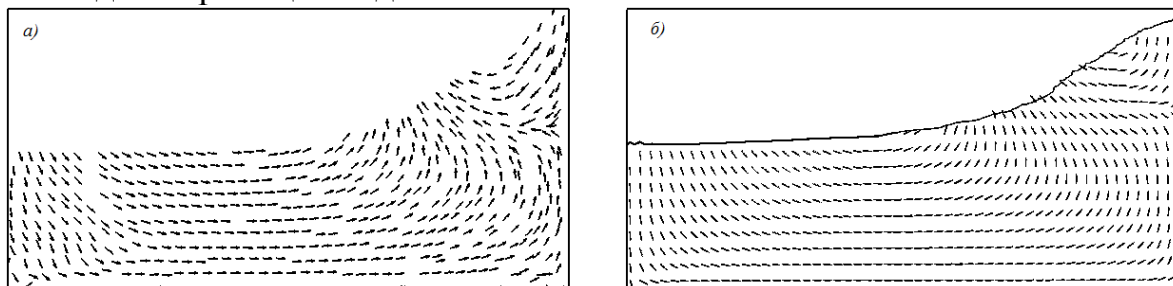


Рис. 3. Поле скоростей ( $t = 0.92 \text{ с}$ ): а - метод SPH, б - разностный метод.

Рис. 4 иллюстрирует решение трехмерной задачи методом SPH. Представленный численный эксперимент проводился в условиях сильного циркуляционного движения вблизи свободных границ раздела фаз. Данный расчёт является модельным с точки зрения штатного протекания электролиза, так как в процессе электролиза обычно не происходит слишком сильного перемешивания сред. Однако такие расчёты хорошо иллюстрируют возможность метода SPH моделировать нежелательные экстренные ситуации: образование, динамику движения и слипания пузырьков газа с формированием крупных доменов.

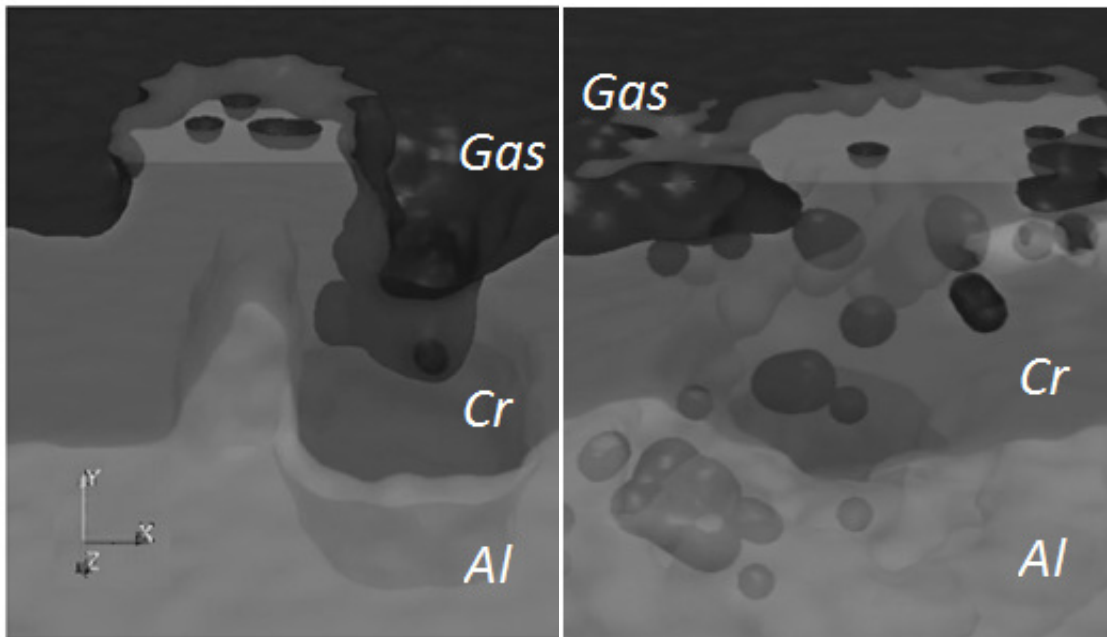


Рис. 4. Решение трехмерной задачи методом SPH в два различных момента времени.

Такого рода возможности метода SPH позволяют реалистично моделировать анодный эффект, состоящий в образовании больших доменов газа под подошвами анодов. Описанный выше разностный метод позволят моделировать лишь концентрации пузырьковой фазы в объёме (зона обратного окисления обозначена красным цветом на рис. 5). Для получения качественно похожего на метод SHP результата, в разностный метод необходимо вносить существенные усложнения.

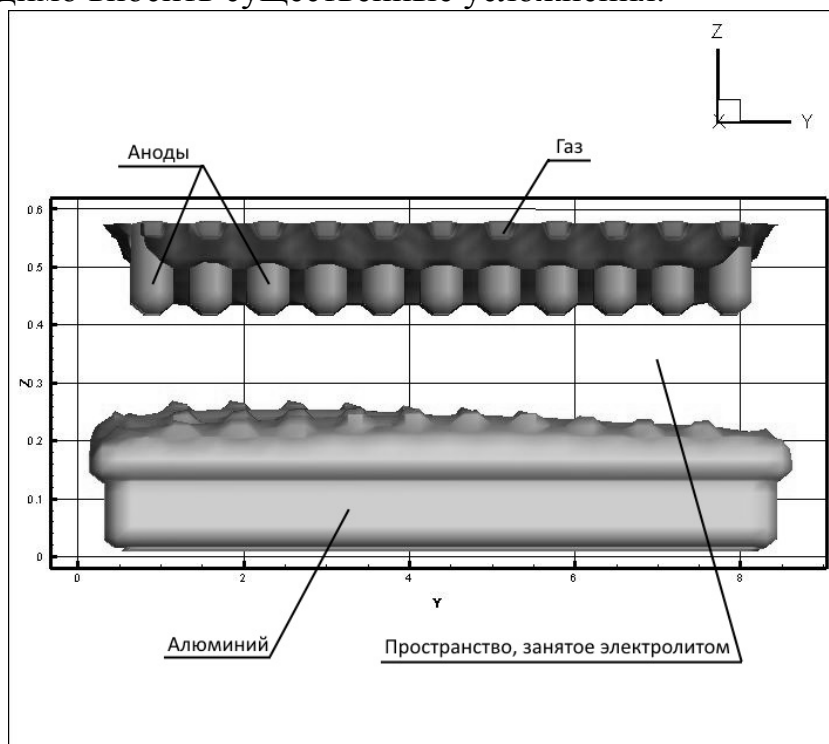


Рис. 5. Решение трехмерной задачи разностным методом.

Основной вынуждающей силой в алюминиевом электролизёре является сила Лоренца, которая характеризуется плотностью протекающего тока и магнитным полем. Для моделирования электромагнитных полей или электромагнитных сил, т. е. величин которые не привязаны к конкретной частице метода SPH, разностный метод имеет некоторое преимущество – наличие стационарной сетки по пространству (Рис. 6).

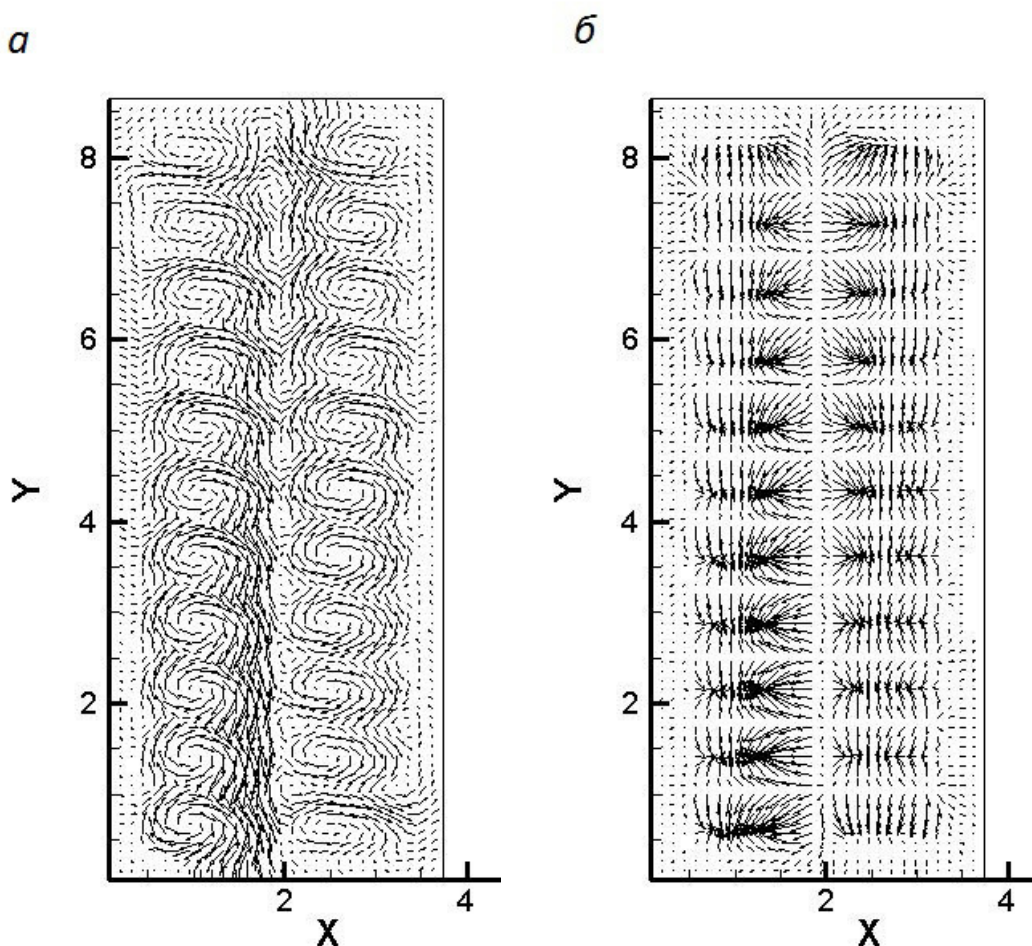


Рис. 6. Разностный метод: а - магнитное поле, срез в плоскости XY, б - сила Лоренца, срез в плоскости XY.

**Заключение.** Впервые изучена возможность решения задач о моделировании электролиза алюминия относительно новым методом SPH. Сравнение SPH с традиционно используемым разностным методом показывает пригодность SPH для моделирования электролиза алюминия и его значительное превосходство по скорости вычислений. К определенному недостатку метода SPH следует отнести необходимость разработки принципиально нового по алгоритмам и структурам данных программного обеспечения.

Оба метода позволяют моделировать электролиз алюминия. Однако метод SPH обладает целым рядом достоинств, которые делают его очень привлекательным для трехмерного реалистического описания процесса электролитического получения алюминия в промышленных условиях, к решению задач управления процессом в реальном времени с обратной связью, а также для визуализации физических и химических процессов. Основными преимуществами SPH для данной задачи являются более точное описание границ разделов многокомпонентных сред, узко локализованных вихрей, пузырей с учетом поверхностного натяжения, границ сложной геометрии (возникающих в результате затвердевания), источников и стоков. Кроме того, Метод SPH допускает эффективную реализацию на параллельных компьютерах, в том числе, на относительно недорогих и компактных гетерогенных CPU/GPU вычислительных архитектурах, что особенно важно для решения задач оперативного предотвращения развития МГД неустойчивости процесса электролиза.

## ЛИТЕРАТУРА

1. Савенкова Н.П., Анпилов С.В., Кузьмин Р.Н., Проворова О.Г., Пискажова Т.В. «Двухфазная 3D модель явлений алюминиевого электролизера»// Сборник докладов третьего международного конгресса «Цветные металлы - 2011», место издания: Красноярск. 2011- С. 282-286.
2. Нигматулин Р.И. Основы механики гетерогенных сред. - М.: Наука, 1978.
3. Белолипецкий В.М., Пискажова Т.В. «Математическое моделирование процесса электролитического получения алюминия. Решение задач управления технологией»// Монография. Красноярск 2012. 237 стр.
4. Евстигнеев Н.М., Зайцев Ф.С., Рябков О.И. «Высокоскоростные параллельные алгоритмы решения задач механики сплошной среды методом сглаженных частиц» Докл. АН. 2014. № 3. С. 280-284.
5. Monaghan J.J. «Smoothed particle hydrodynamics» Rep. Prog. Phys. 2005. P. 1703-1759.
6. Liu M.B., Liu G.R. «Smoothed particle hydrodynamics (SPH): an overview and recent developments», Arch. Comput. Methods. Eng. 2010. P. 25-76.

7. Monaghan J.J., Kajtar J.B. «SPH particle boundary forces for arbitrary boundaries», *Comp. Phys. Comm.* 2009. P. 1811-1820.
8. Zaitsev F.S. «Mathematical modeling of toroidal plasma evolution», English ed. - M.: MAKS Press, 2014.
9. Nikitin N. «Finite-difference method for incompressible Navier-Stokes equations in arbitrary orthogonal curvilinear coordinates» *J. Comput. Phys.* 2016 P. 759-781.