УДК 004.94

МОДЕЛИРОВАНИЕ ПОТОКОВ ИОНОВ В ПРОЦЕССЕ ЭЛЕКТРОЛИТИЧЕСКОГО РАФИНИРОВАНИЯ МЕТОДОМ ЧАСТИЦ

Любанова А.Ш., Митин К.В.

ФГАОУ ВПО «Сибирский федеральный университет», Красноярск, e-mail: KMitin@sfu-kras.ru, lubanova@mail.ru

Работа посвящена моделированию потоков заряженных частиц в электростатическом поле в процессе электролитического рафинирования между поверхностью катода и анода. Большое значение такие исследования имеют для повышения эффективности металлургических процессов, в частности электролитического рафинирования меди и других металлов. Кроме того, моделирование электростатических полей между поверхностями электродов помогает исследовать природу взаимодействия катода с анодом. Приведен смешанный метод частиц, адаптированный к моделированию миграционной диффузии потока ионов в процессе электролитического рафинирования. На эйлеровом этапе моделируются потенциалы электростатического поля с помощью уравнений Максвелла. На лагранжевом этапе строятся законы движения и траектории ионов в виде квадратичных сплайнов. Приведены результаты компьютерного моделирования миграционных потоков ионов в процессе электролитического рафинирования меди.

Ключевые слова: метод частиц, уравнения Максвелла, электролитическое рафинирование, поток ионов, квадратичный сплайн, математическая модель, миграционная диффузия

MODELLING OF THE FLOWS OF IONS IN THE COURSE OF ELECTROLYTIC REFINEMENT BY THE METHOD OF PARTICLES

Lyubanova A.S., Mitin K.V.

Siberian Federal University, Krasnoyarsk, e-mail: KMitin@sfu-kras.ru, lubanova@mail.ru

The work is devoted to modeling of flows of the charged particles in an electrostatic field arising in the course of electrolysis between a surface of the cathode and the anode. Such researches have great value for increase of efficiency of metallurgical processes in particular, electrolytic refinement of copper and other metals. Besides, modeling of electrostatic fields between surfaces of electrodes, helps to investigate the nature of interaction of the cathode with the anode. The mixed method of particles adapted for modeling of the migratory diffusion of a stream of ions in the course of electrolytic refinement is given in the article. At the Eulerian stage potentials of an electrostatic field are modelled by means of Maxwell's equations. At the Lagrangian stage laws of movement and a trajectory of ions in the form of the square-law splines are developed. The results of computer modeling for the electrolytic refinement of copper are given.

Keywords: method of particles, Maxwell's equations, electrolytic refinement, flow of ions, square-law spline, mathematical model, migratory diffusion

Изучение потоков заряженных частиц в электростатических и электромагнитных полях представляет собой весьма актуальную научно-техническую задачу. Большое значение такие исследования имеют для совершенствования управления электростатическими устройствами очистки газов и повышения эффективности металлургических процессов, в частности электролитического рафинирования меди и других металлов. Кроме того, моделирование электростатических полей между поверхностями электродов помогает исследовать природу взаимодействия катода с анодом.

Перенос вещества в процессе электролитического рафинирования осуществляется по трем механизмам: молекулярная диффузия, миграция, конвекция. В соответствии с этим говорят о потоках диффузии, миграции и конвекции. Суммарный поток складывается из трех указанных потоков [8]. Данная статья посвящена вопросам моделирования миграционного потока ионов в электростатическом поле электродов применительно к задачам электролитического рафинирования.

В современном математическом моделировании все более распространяются алгоритмы, известные под общим названием «методы частиц» [9]. Характерной особенностью этих методов является специальный способ дискретизации, при котором вводится множество дискретных объектов – модельных частиц, рассматриваемых как некоторая сетка подвижных узлов. Методы частиц применяются к задачам, в которых рассматривается эволюция во времени некоторой среды или результат такой эволюции (см., например, работы [6, 9, 13] и ссылки в них). Изначально методы частиц получили наибольшее развитие в тех научно-прикладных областях, где требовались масштабные вычислительные эксперименты, для проведения которых сосредотачивались большие интеллектуальные и вычислительные ресурсы. Примерами могут служить работы в области управляемого термоядерного синтеза [1], вычислительной физики плазмы [4, 10, 13], газовой динамики [2–4, 9, 15] и других областях [5, 7, 12]. В формировании современного представления о методах частиц большую роль сыграла работа

[14], где впервые была использована идеи расщепления в данных методах.

Среди методов частиц различают чисто лагранжевы и смешанные алгоритмы. Алгоритмы первой группы сводятся к численному интегрированию систем дифференциальных уравнений динамического типа [6], которые описывают траектории взаимодействующих частиц. Для смешанных алгоритмов характерно то, что эволюция системы частиц на каждом временном шаге разбивается на два этапа. На одном из них при фиксированном положении частиц предварительно вычисляется результат их взаимодействия и (или) их коллективного воздействия на среду. Расчет ведется на неподвижной («эйлеровой») сетке. Поэтому этап называется эйлеровым. На другом, лагранжевом, этапе выполняется интегрирование на очередном временном шаге динамической системы, правая часть которой вычислена на эйлеровом этапе.

Для методов частиц, как правило, характерна относительно невысокая точность. Обычный уровень погрешностей составляет несколько процентов. Это является результатом установившегося компромисса между разумным объемом вычислительной работы и возможностью моделировать сложные явления. Такой подход дает существенную экономию машинного времени.

В отличие от упомянутых выше задач, решаемых методами частиц, где рассматриваемые процессы протекают за короткие промежутки времени и при высоких скоростях, процесс электролитического рафинирования занимает продолжительное время (не меньше трех недель) и является медленно текущим. Это обуславливает выбор методов частиц-в-ячейках для моделирования данного процесса, поскольку они обладают большим запасом устойчивости и допускают относительно быстрое продвижение по эволюционной переменной. Метод моделирования потока ионов в процессе электролитического рафинирования, предлагаемый в данной работе, близок к идеям, выдвинутым в [10]. Однако из-за длительности данного процесса применение метода быстрого преобразования Фурье для расчета потенциала поля, использованного в [10], не оправдано вследствие существенного накопления погрешности с течением времени. Кроме того, в настоящей работе используется другая динамическая модель движения частиц, учитывающая особенности процесса электролитического рафинирования. Аналогичный метод применялся авторами для компьютерного моделирования потока частиц пыли в электрофильтре газоочистки [9].

Математическая модель потока ионов металла в процессе электролитического рафинирования

В основу математической модели движения заряженной частицы положены законы движения иона под действием электрической силы. Предполагается, что частицы распределены равномерно на аноде. Для каждого участка траектории строятся отдельные уравнения движения, с помощью которых находятся координаты и скорость частицы в любой момент времени t. Поскольку вдоль оси z перемещений нет, мы будем рассматривать движение в плоскости xOy (рис. 1). Реальная траектория движения частицы является случайной, поскольку скорость и ускорение заряженной частицы в каждой точке ее траектории зависят от случайных столкновений с другой заряженной частицей или стенкой ёмкости, являющейся диэлектриком. Поэтому в каждой точке рассчитывается свой вектор ускорения, который определяется напряженностью электрического поля и используется для расчета скорости в этой точке.

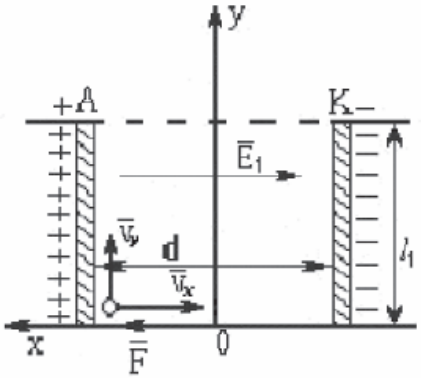


Рис. 1. Движение частицы:
l_1 – длина пластин электродов;
d – расстояние между пластинами;
$\overline{v}_x$, $\overline{v}_y$ – проекции вектора скорости
по осям X и Y; K – катод; A – анод

Напряженность электростатического поля определяется как антиградиент потенциала поля f (см. [9]) $\mathbf{E} = -\,grad f$.

Согласно уравнениям Максвелла

$$-div\,\mathbf{E} = div\,grad\,f \equiv \frac{\partial^2 f}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 f}{\partial y^2} = 0. \quad (1)$$

Таким образом, потенциал f удовлетворяет уравнению Лапласа в области $x \in (-d/2,\ d/2)$, $y \in (0,\ l_1)$ (см. рис. 1) и граничным условиям

$$f(-d/2, y) = q, \quad f(d/2, y) = q_A,$$
$$f(x, 0) = f(x, l_1) = 0, \quad (2)$$

где q_A – заряд на аноде.

Пусть частица достигает второго электрода за время T, то есть t изменяется в промежутке от 0 до T. Рассмотрим промежуток времени Δt настолько малый, чтобы на участке траектории движения частицы от точки $(x(t), y(t))$ до точки $(x(t + \Delta t), y(t + \Delta t))$ напряженность $\overline{E} = (E_x, E_y)$ можно было приближенно считать постоянной. Тогда приближенная модель закона движения заряженной частицы представляет собой вектор-функцию

$$\overline{S}(t) = (S_x(t), S_y(t)),$$

где $S_x(t)$ и $S_y(t)$ – это квадратичные сплайны, построенные на сетке ω: $t_i = i\Delta t$, $i = 1, \ldots, n$, $n = T / \Delta t$. На каждом промежутке $[t_i, t_{i+1}]$ вектор-функция $\overline{S}(t)$ задается функциями [9]:

$$S_x^i(t) = \frac{qE_{xi}}{m}\frac{(t-t_i)^2}{2} + v_{xi}(t-t_i) + S_x^{i-1}(t_i); \quad (3)$$

$$S_y^i(t) = \frac{qE_{yi}}{m}\frac{(t-t_i)^2}{2} + v_{yi}(t-t_i) + S_y^{i-1}(t_i). \quad (4)$$

Если происходит столкновение двух частиц в момент $t^* \in [t_i, t_{i+1}]$, летящих со скоростями $\overline{v}_1(t^*)$ и $\overline{v}_2(t^*)$ (рис. 2), то траектория первой частицы меняется по следующему закону:

$$S_{1x}(t) = \begin{cases} \dfrac{qE_x(t_i)}{m}\dfrac{(t-t_i)^2}{2} + v_{1x}^i(t-t_i) + x_1(t_i), & t_i \le t < t^*, \\ \dfrac{qE_x(t_i)}{m}\dfrac{(t-t^*)^2}{2} + v_{1x}^i(t-t^*) + \dfrac{qE_x(t_i)}{m}\dfrac{(t-t_i)^2}{2} + \\ +v_{1x}^i(t-t_i) + x_1(t_i), & t^* \le t < t_{i+1}; \end{cases} \quad (5)$$

$$S_{1y}(t) = \begin{cases} \dfrac{qE_y(t_i)}{m}\dfrac{(t-t_i)^2}{2} + v_{1y}^i(t-t_i) + y_1(t_i), & t_i \le t < t^*, \\ \dfrac{qE_y(t_i)}{m}\dfrac{(t-t^*)^2}{2} + v_{1y}^i(t-t^*) + \dfrac{qE_y(t_i)}{m}\dfrac{(t-t_i)^2}{2} + \\ +v_{1y}^i(t-t_i) + y_1(t_i), & t^* \le t < t_{i+1}. \end{cases} \quad (6)$$

Аналогичным образом изменяется траектория второй частицы:

$$S_{2x}(t) = \begin{cases} \dfrac{qE_x(t_i)}{m}\dfrac{(t-t_i)^2}{2} + v_{2x}^i(t-t_i) + x_2(t_i), & t_i \le t < t^*, \\ \dfrac{qE_x(t_i)}{m}\dfrac{(t-t^*)^2}{2} + v_{2x}^i(t-t^*) + \dfrac{qE_x(t_i)}{m}\dfrac{(t-t_i)^2}{2} + \\ +v_{2x}^i(t-t_i) + x_2(t_i), & t^* \le t < t_{i+1}; \end{cases} \quad (7)$$

$$S_{2y}(t) = \begin{cases} \dfrac{qE_y(t_i)}{m}\dfrac{(t-t_i)^2}{2} + v_{2y}^i(t-t_i) + y_2(t_i), & t_i \le t < t^*, \\ \dfrac{qE_y(t_i)}{m}\dfrac{(t-t^*)^2}{2} + v_{2y}^i(t-t^*) + \dfrac{qE_y(t_i)}{m}\dfrac{(t-t_i)^2}{2} + \\ +v_{2y}^i(t-t_i) + y_2(t_i), & t^* \le t < t_{i+1}. \end{cases} \quad (8)$$

При ударе частицы о дно электролитической ванны угол падения частицы на стенку будет равен углу отражения от нее (рис. 3). В этом случае траектория движения частицы моделируется следующим образом:

$$S_x(t) = \begin{cases} \dfrac{qE_x}{m}\dfrac{t^2}{2} + v_x t + x_0, & t < t^*, \\ \dfrac{qE_x}{m}\dfrac{(t-t^*)^2}{2} + v_x(t-t^*) + qE_x\dfrac{(t^*)^2}{2} + v_x t^* + x_0, & t^* \le t < t_{i+1}; \end{cases} \quad (9)$$

$$S_y(t) = \begin{cases} \dfrac{qE_y}{m}\dfrac{t^2}{2} + v_y t + y_0, & t < t^*, \\ \dfrac{qE_y}{m}\dfrac{(t-t^*)^2}{2} - v_y(t-t^*) + qE_y\dfrac{(t^*)^2}{2} + v_y t^* + y_0, & t^* \le t < t_{i+1}. \end{cases} \quad (10)$$

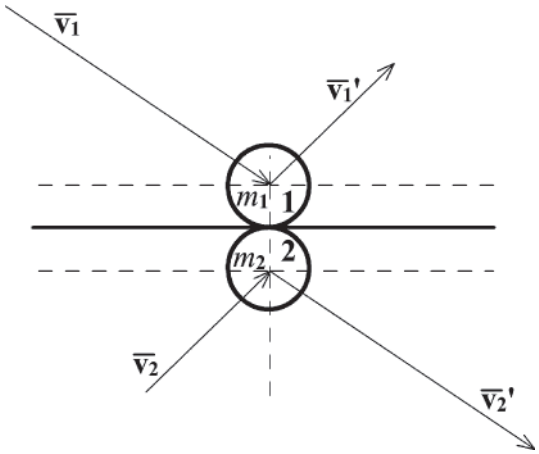


Рис. 2. Столкновение двух частиц: m_1, m_2 – массы частиц; $\overline{v}_1$, $\overline{v}_2$ скорости движения частиц до столкновения; v_1', v_2' – скорости движения частиц после столкновения

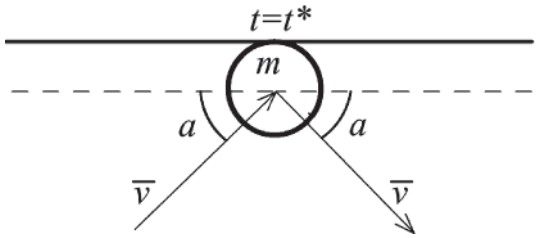


Рис. 3. Изменение направления движения частицы при ударе о стенку: m – масса частицы; $\overline{v}$ – скорость движения частицы; a – угол падения частицы

В любом из описанных случаев координата z остается постоянной, то есть $z = z_0$.

Данная модель может быть использована не только для моделирования потока катионов металла, но и анионов кислотного остатка. В отличие от катионов металла, анионы кислотного остатка при миграции свободно движутся в электролитической ванне, не осаждаясь на электроды.

Компьютерное моделирование потока ионов

Ионы меди являются заряженными частицами одного и того же типа и имеют одинаковую массу. Для таких частиц масса не учитывается и берется равной единице для всех частиц. В начальный момент времени заряженная частица находится в точке $(0, y_0, z_0)$. В случае соударения частиц или удара частицы о стенку емкости траектории движения частиц формируются по законам (3)–(10) с $m = 1$.

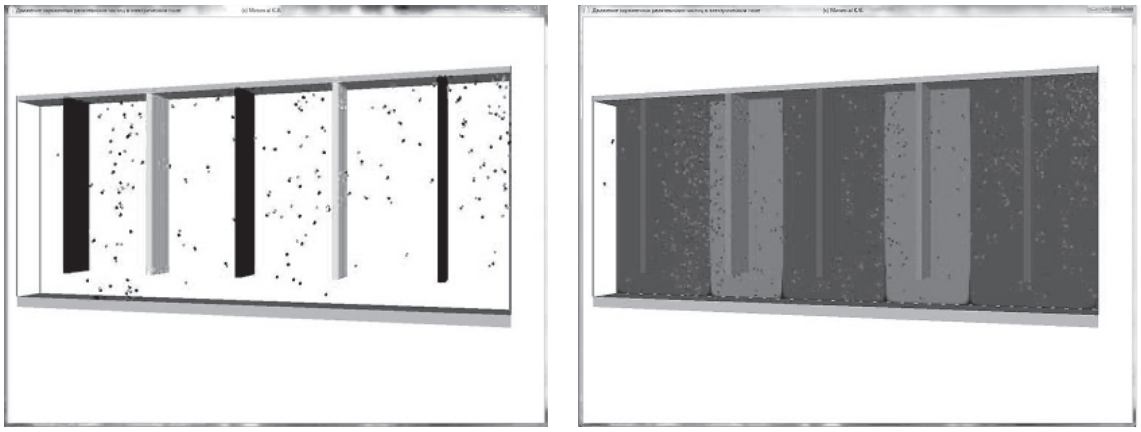
В электролизной ванне электроды расположены параллельно друг другу. При таком расположении электродов $v_{0x} = 0$. Начальные координаты y_0, z_0 заряженной частицы моделируются методом Монте–Карло как случайные величины, подчинённые равномерному закону распределения. В силу кинематических уравнений (6), (7) плоского движения частицы при постоянной напряженности электростатического поля первый участок сплайна рассчитывается по формулам (3), (4) при $i = 1$.

Далее моделируются координаты частицы (x_1, y_1, z_0) в момент $t = t_1$ и средняя скорость перемещения частицы в точку с этими координатами с помощью формул (3)–(10). Процесс продолжается до тех пор, пока частица не достигнет границы области моделирования. Когда частица достигает нижней горизонтальной границы области, моделируется ее столкновение с дном емкости. Если в какой-то момент времени координаты двух различных частиц совпадают, то моделируется столкновение частиц. В случае совпадения координат частицы с координатами точки на катоде происходит осаждение.

Область моделирования представляет собой пространство между чередующимися катодами и анодами, заполненное электролитом (рис. 4). Оно окружено стенками и дном ванны, являющимися диэлектриками. Область имеет геометрическую форму параллелепипеда.

Заряд на электродах предполагается распределенным равномерно с одинаковой плотностью, так же как в [9]. Потенциалы электродов моделируются в плоскости координат x и y, потому что они не зависят от ширины электродов z. Для расчета потенциала используется пятиточечная разностная схема для задачи (1), (2), построенная на сетке с одинаковым шагом h по x и у [10].

Для моделирования потока ионов меди между катодом и анодом в электролизной ванне было разработано CAE – средство в интегрированной среде разработки приложений Delphi. Для визуализации использовалась библиотека для работы с 3D графикой OpenGL (Open Graphics Library).



а б

Рис. 4. Моделирование потока ионов при электролитическом рафинировании: а – поток ионов меди и электролита; б – потенциалы катодов (темные) и анодов (светлые)

На рис. 4 представлены результаты моделирования потока катионов меди и анионов кислотного остатка для лабораторной электролизной ванны при стандартном напряжении 0,2 В с тремя катодами и двумя анодами.

Заключение

Создан алгоритм позволяющий применять метод частиц-в-ячейках для моделирования потока ионов между анодом и катодом при электролитическом рафинировании. Метод применен для моделирования потоков ионов металла и кислотного остатка в лабораторной установке электролитического рафинирования меди, проведены численные эксперименты по компьютерному моделированию.

Список литературы

1. Теоретические основы и конструирование численных алгоритмов задач математической физики / К.И. Бабенко и др. – М.: Наука, 1979. – 295 с.
2. Белоцерковский О.М., Давыдов Ю.М. Метод крупных частиц в газовой динамике. –М.: Наука, 1982. – 392 с.
3. Белоцерковский О.М. Численное моделирование в механике сплошных сред. – М.: Наука, 1984. – 518 с.
4. Березин Ю.А., Вшивков В.А. Метод частиц в динамике разреженной плазмы. – Новосибирск: Наука, 1980. – 94 с.
5. Вшивков В.А., Романов Д.В., Снытников В.Н. Проблема саморазогрева модельной плазмы в методе частиц // Вычислительные технологии. – 1999. – Т. 4, № 3. – С. 62–72.
6. Григорьев Ю.Н., Вшивков В.А., Федорук М.П. Численное моделирование методами частиц-в-ячейках. – Новосибирск: Изд-во СО РАН, 2004. – 360 с.
7. Григорьев Ю.Н. Метод вихрей-в-ячейках для плоских сжимаемых течений // Вычислительные технологии. – 2004. – Т. 9, № 5. – С. 41–53.
8. Дамаскин Б.Б., Петрий О.А. Введение в электрохимическую кинетику. – М.: Высшая школа, 1983. – 400 с.
9. Любанова А.Ш., Митин К.В. Моделирование потока заряженных частиц применительно к процессам газоочистки // Журнал Сибирского федерального университета. Техника и технологии. – 2011. – Т. 4, № 6. – С. 642–652.
10. Метод емкостей в моделировании движения ионных ансамблей в ионных ловушках и системах транспорта ионов с электродами произвольной формы / П.А. Рюмин и др. // Труды Московского физико-технического института. – 2011. – Т. 3, № 3. – С. 17–21.
11. Самарский А.А. Теория разностных схем. – М.: Наука, 1977. – 656 с.
12. Снытников В.Н. и др. Численное моделирование гравитационных систем многих тел с газом // Вычислительные технологии. – 2002. – Т. 7, № 3. – С. 72–84.
13. Хонки Р., Иствуд Дж. Численное моделирование методом частиц: пер. с англ. – М.: Мир, 1987. – 640 с.
14. О методах расчета задач газовой динамики с большими деформациями / Н.Н. Яненко и др. // Числ. мет. мех. спл. среды. – 1970. – Т. 1. – С. 40–62.
15. Yanenko N.N., Grigoryev Yu.N. and Ivanov M.S. Numerical simulation of the rarefied gas flows // Lecture Notes in Physics. – 1981. – V. 141. – P. 454–460.

References

1. Babenko K.I. i dr. Teoreticheskie osnovyi i konstruirovanie chislennyih algoritmov zadach matematicheskoy fiziki. M.: Nauka, 1979. 295 p.
2. Belotserkovskiy O.M., Davyidov Yu.M. Metod krupnyih chastits v gazovoy dinamike. M.: Nauka, 1982. 392 p.
3. Belotserkovskiy O.M. Chislennoe modelirovanie v mehanike sploshnyih sred. M.: Nauka, 1984. 518 p.
4. Berezin Yu.A., Vshivkov V.A. Metod chastits v dinamike razrezhennoy plazmyi. Novosibirsk: Nauka, 1980. 94 p.
5. Vshivkov V.A., Romanov D.V., Snyitnikov V.N. Problema samorazogreva modelnoy plazmyi v metode chastits // Vyichislitelnyie tehnologii. 1999. T. 4. no. 3. pp. 62–72.
6. Grigorev Yu.N., Vshivkov V.A., Fedoruk M.P. Chislennoe modelirovanie metodami chastits-v-yacheykah. Novosibirsk: Izdatelstvo SO RAN, 2004. 360 p.
7. Grigorev Yu.N. Metod vihrey-v-yacheykah dlya ploskih szhimaemyih techeniy // Vyichislitelnyie tehnologii. 2004. T. 9. no. 5. pp. 41–53.
8. Damaskin B.B., Petriy O.A. Vvedenie v elektrohimicheskuyu kinetiku. M.: Vyisshaya shkola, 1983. – 400 p.
9. Lyubanova A.Sh, Mitin K.V. Modelirovanie potoka zaryazhennyih chastits primenitelno k protsessam gazoochistki // Zhurnal Sibirskogo federalnogo universiteta. Tehnika i tehnologii. 2011, tom 4, no. 6 – pp. 642–652.
10. Ryumin P.A. i dr. Metod emkostey v modelirovanii dvizheniya ionnyih ansambley v ionnyih lovushkah i sistemah transporta ionov s elektrodami proizvolnoy formyi // Trudyi Moskovskogo fiziko-tehnicheskogo instituta. 2011. T. 3. no. 3. pp. 17–21.
11. Samarskiy A.A. Teoriya raznostnyih shem. M.: Nauka, 1977. 656 p.
12. Snyitnikov V.N. i dr. Chislennoe modelirovanie gravitatsionnyih sistem mnogih tel s gazom // Vyichislitelnyie tehnologii. 2002. T. 7. no. 3. pp. 72–84.
13. Honki R., Istvud Dzh. Chislennoe modelirovanie metodom chastits: Per. s angl. – M.: Mir, 1987. – 640 p.
14. Yanenko N.N. i dr. O metodah rascheta zadach gazovoy dinamiki s bolshimi deformatsiyami // Chisl. met. meh. spl. sredyi. 1970. T. 1. pp. 40–62.
15. Yanenko N.N., Grigoryev Yu.N. and Ivanov M.S. Numerical simulation of the rarefied gas flows // Lecture Notes in Physics, 1981, Vol. 141. pp. 454–460.

Рецензенты:

Садовский В.М., д.ф.-м.н, профессор, зам. директора по научной работе Института вычислительного моделирования СО РАН, г. Красноярск;

Ловчиков А.Н., д.т.н., профессор кафедры САУ СибГАУ, г. Красноярск.

Работа поступила в редакцию 03.08.2012.