Моделирование движения электростатических и электромагнитных полей применительно к процессам электролиза

А.Ш. Любанова
Сибирский федеральный университет
e-mail: lubanova@mail.ru

К.В. Митин
Сибирский федеральный университет
e-mail: kmitin@sfu-kras.ru

В работе моделируется движение заряженных частиц в электрическом поле и потенциалы электродов применительно к задачам электролиза. Закон движения и траектории построены с помощью сплайнов второго порядка. Был разработан эмулятор для 3D моделирования потока ионов меди между катодом и анодом в электролизной ванне. Для построения графики использовалась библиотека для работы с 3D графикой OpenGL.

1. Введение

Изучение процессов управления многими системами связано с моделированием потоков заряженных частиц, электрических и электромагнитных полей. Особенно большое практическое значение такие исследования имеют для оптимального управления электроприводами, электростатическими устройствами очистки газов, агрегатами для покраски крупных объектов, металлургическими процессами (в частности, электролизом алюминия и других металлов), что позволяет эффективно использовать энергию электрического тока.

Моделирование электрических и электромагнитных полей позволяет изучать электрические и магнитные потоки, а также потоки нерелятивистских заряженных частиц (пыли, газов), что актуально как для разработки новых датчиков, так и для проектирования промышленных фильтров. Кроме того моделирование электрических полей, возникающих в процессе электролиза между поверхностью электродов, помогает исследовать природу взаимодействия катода с анодом. Это позволяет оптимизировать управление процессом.

Целью данной работы является моделирование движения заряженных частиц в электрическом поле электродов применительно к задачам электролиза меди.

2. Математическая модель движения заряженных частиц

В основу математической модели движения заряженной частицы положены законы движения электрона под действием электрической силы. Предполагается, что частицы распределены равномерно на катоде. 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.

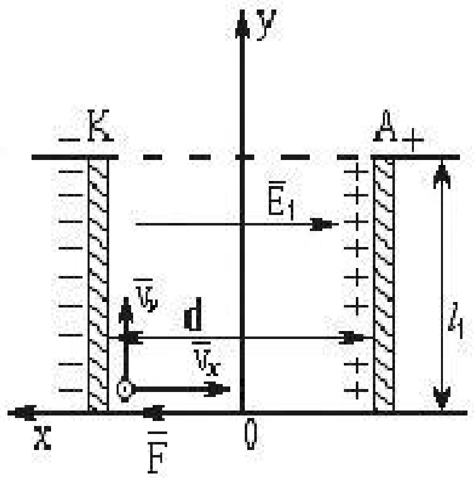

Рис. 1. Движение частицы: l_1 – длина пластин электродов; d – расстояние между пластинами; $\mathbf{v}_x$, $\mathbf{v}_y$ – проекции вектора скорости по осям X и Y; К – катод; А – анод.

Напряженность электростатического поля определяется как отрицательный градиент потенциала поля f (см. [1], Часть 2)

$$\mathbf{E} = -\mathrm{grad} f.$$

Согласно уравнениям Максвелла

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

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

$$f(-d/2, y) = q, \qquad f(d/2, y) = q_{\mathrm{A}}, \qquad f(x, 0) = f(x, l_1) = 0,$$

где q_{A} - заряд на аноде.

Пусть частица достигает второго электрода за время T, то есть t изменяется в промежутке от 0 до T. Уравнения движения частицы имеют вид:

$$mx'' = q\ E_x, \qquad (2)$$
$$my'' = q\ E_y. \qquad (3)$$

Для однозначного определения закона движения необходимо задать начальные условия:

$$x(0) = x_0, \qquad x'(0) = v_{0x}, \qquad (4)$$
$$y(0) = y_0, \qquad y'(0) = v_{0y}. \qquad (5)$$

Напряженность электростатического поля зависит от координат точки между электродами, в которой находится частица в момент времени t, то есть от координат x, y и, следовательно, от t. Поэтому решение задачи Коши (2)–(5) построим приближенно с помощью сплайнов.

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 $\mathbf{E}$ можно было приближенно считать постоянной. Как известно (см. [2] гл. 1), при однородном заряде q и постоянной напряженности $\mathbf{E}$ система кинематических уравнений плоского движения частицы в электрическом поле имеет вид:

$$x = \frac{qE_x}{m}\frac{t^2}{2} + v_{0x}t + x_0, \tag{6}$$

$$y = \frac{qE_y}{m}\frac{t^2}{2} + v_{0y}t + y_0. \tag{7}$$

Тогда приближенная модель закона движения заряженной частицы представляет собой вектор-функцию $\mathbf{S}(t) = (S_x(t), S_y(t))$, где $S_x(t)$ и $S_y(t)$ - это квадратичные сплайны, построенные на сетке $\omega : t_i = i\Delta t$, $i = 1, 2, \ldots, n$, $n = T/\Delta t$. На каждом промежутке $[t_i, t_{i+1}]$ вектор-функция $\mathbf{S}(t)$ задается функциями $S_x^i(t)$ и $S_y^i(t)$, которые являются решением задачи Коши (2) - (3) с

$$E_x = E_{xi} \equiv E_x(S_x^{i-1}(t_i), S_y^{i-1}(t_i)),$$

$$E_y = E_{yi} \equiv E_y(S_x^{i-1}(t_i), S_y^{i-1}(t_i))$$

и начальными данными:

$$S_x^i(t_i) = S_x^{i-1}(t_i),$$

$$S_y^i(t_i) = S_y^{i-1}(t_i).$$

Таким образом,

$$S_x^i(t) = \frac{qE_{xi}}{m}\frac{(t-t_i)^2}{2} + v_{xi}(t-t_i) + S_x^{i-1}(t_i), \tag{8}$$

$$S_y^i(t) = \frac{qE_{yi}}{m}\frac{(t-t_i)^2}{2} + v_{yi}(t-t_i) + S_y^{i-1}(t_i). \tag{9}$$

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

$$S_{1x}^i(t) = \begin{cases} \frac{qE_{xi}}{m}\frac{(t-t_i)^2}{2} + v_{1x}^i(t-t_i) + S_{1x}^{i-1}(t_i), & t_i \le t \le t^*, \\ \frac{qE_{xi}}{m}\frac{(t-t^*)^2}{2} + v_{1x}^i(t-t^*) + \frac{qE_{xi}}{m}\frac{(t^*-t_i)^2}{2} & \\ +v_{1x}^i(t^*-t_i) + S_{1x}^{i-1}(t_i), & t^* \le t \le t_{i+1}; \end{cases} \tag{10}$$

$$S_{1y}^i(t) = \begin{cases} \frac{qE_{yi}}{m}\frac{(t-t_i)^2}{2} + v_{1y}^i(t-t_i) + S_{1y}^{i-1}(t_i), & t_i \le t \le t^*, \\ \frac{qE_{yi}}{m}\frac{(t-t^*)^2}{2} + v_{1y}^i(t-t^*) + \frac{qE_{yi}}{m}\frac{(t^*-t_i)^2}{2} & \\ +v_{1y}^i(t*-t_i) + S_{1y}^{i-1}(t_i), & t^* \le t \le t_{i+1}; \end{cases} \tag{11}$$

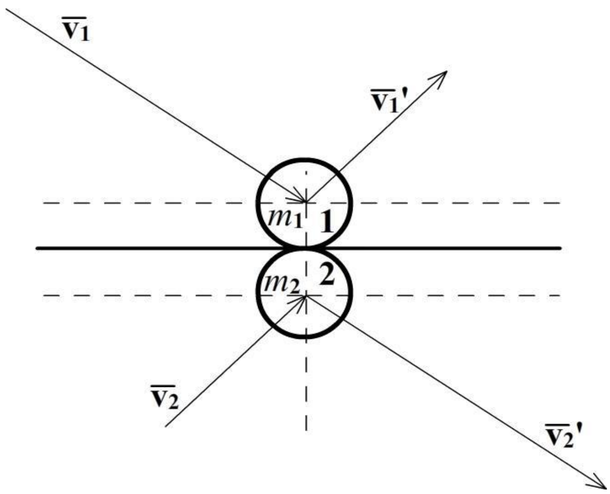

Рис. 2. Столкновение двух частиц: m_1, m_2 - массы частиц; $\mathbf{v}_1$, $\mathbf{v}_2$ - скорости движения частиц до столкновения; $\mathbf{v}_1'$, $\mathbf{v}_2'$ - скорости после столкновения.

Аналогичным образом изменяется траектория второй частицы:

$$S^i_{2x}(t) = \begin{cases} \frac{qE_{xi}}{m}\frac{(t-t_i)^2}{2} + v^i_{2x}(t-t_i) + S^{i-1}_{2x}(t_i), & t_i \le t \le t^*, \\ \frac{qE_{xi}}{m}\frac{(t-t^*)^2}{2} + v^i_{2x}(t-t^*) + \frac{qE_{xi}}{m}\frac{(t^*-t_i)^2}{2} & \\ +v^i_{2x}(t^*-t_i) + S^{i-1}_{2x}(t_i), & t^* \le t \le t_{i+1}; \end{cases} \quad (12)$$

$$S^i_{2y}(t) = \begin{cases} \frac{qE_{yi}}{m}\frac{(t-t_i)^2}{2} + v^i_{2y}(t-t_i) + S^{i-1}_{2y}(t_i), & t_i \le t \le t^*, \\ \frac{qE_{yi}}{m}\frac{(t-t^*)^2}{2} + v^i_{2y}(t-t^*) + \frac{qE_{yi}}{m}\frac{(t^*-t_i)^2}{2} & \\ +v^i_{2y}(t^*-t_i) + S^{i-1}_{2y}(t_i)(t_i), & t^* \le t \le t_{i+1}. \end{cases} \quad (13)$$

При ударе частицы о стенку емкости угол падения частицы на стенку будет равен углу отражения от нее (рис. 3). В этом случае траектория движения частицы модели-

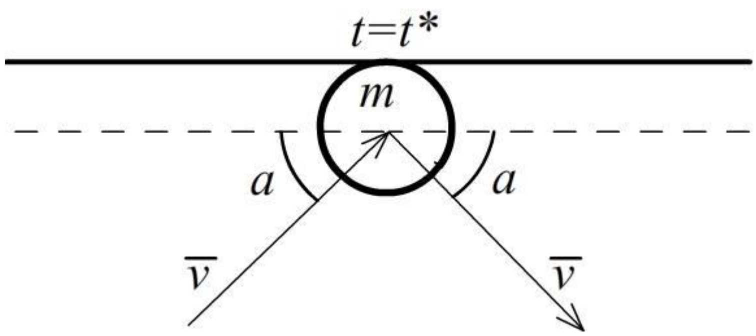

Рис. 3. Изменение направления движения частицы при ударе о стенку: m - массf частиц; $\mathbf{v}$ - скоростm движения частицs; a - угол падения частицы.

руется следующим образом:

$$S^i_{x}(t) = \begin{cases} \frac{qE_{xi}}{m}\frac{(t-t_i)^2}{2} + v^i_{x}(t-t_i) + S^{i-1}_{x}(t_i), & t_i \le t \le t^*, \\ \frac{qE_{xi}}{m}\frac{(t-t^*)^2}{2} - v^i_{x}(t-t^*) + \frac{qE_{xi}}{m}\frac{(t^*-t_i)^2}{2} & \\ +v^i_{x}(t^*-t_i) + S^{i-1}_{x}(t_i), & t^* \le t \le t_{i+1}; \end{cases} \quad (14)$$

$$S_y^i(t) = \begin{cases} \frac{qE_{yi}}{m}\frac{(t-t_i)^2}{2} + v_y^i(t-t_i) + S_y^{i-1}(t_i), & t_i \le t \le t^*, \\ \frac{qE_{yi}}{m}\frac{(t-t^*)^2}{2} + v_y^i(t-t^*) + \frac{qE_{yi}}{m}\frac{(t^*-t_i)^2}{2} & \\ +v_y^i(t^*-t_i) + S_y^{i-1}(t_i), & t^* \le t \le t_{i+1}. \end{cases} \tag{15}$$

После удара частицы о вертикальную стенку меняется знак проекции $\mathbf{v}_y$ на противоположный, и траектория движения определяется по закону:

$$S_x^i(t) = \begin{cases} \frac{qE_{xi}}{m}\frac{(t-t_i)^2}{2} + v_x^i(t-t_i) + S_x^{i-1}(t_i), & t_i \le t \le t^*, \\ \frac{qE_{xi}}{m}\frac{(t-t^*)^2}{2} + v_x^i(t-t^*) + \frac{qE_{xi}}{m}\frac{(t^*-t_i)^2}{2} & \\ +v_x^i(t^*-t_i) + S_x^{i-1}(t_i), & t^* \le t \le t_{i+1}; \end{cases} \tag{16}$$

$$S_y^i(t) = \begin{cases} \frac{qE_{yi}}{m}\frac{(t-t_i)^2}{2} + v_y^i(t-t_i) + S_y^{i-1}(t_i), & t_i \le t \le t^*, \\ \frac{qE_{yi}}{m}\frac{(t-t^*)^2}{2} - v_y^i(t-t^*) + \frac{qE_{yi}}{m}\frac{(t^*-t_i)^2}{2} & \\ +v_y^i(t^*-t_i) + S_y S_x^{i-1}(t_i)^{i-1}(t_i), & t^* \le t \le t_{i+1}. \end{cases} \tag{17}$$

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

3. Моделирование движения ионов меди в процессе электролитического рафинирования

Ионы меди являются релятевистскими частицами одного и того же типа и имеют одинаковую массу. Для релятивистских 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 (8)-(17) 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 случайным образом по равномерному закону распределения. В силу кинематических уравнений (6),(7) плоского движения частицы при постоянной напряженности электростатического поля первый участок сплайна рассчитывается по формулам (8),(9) при $i = 0$:

$$S_x^0(t) = \frac{qE_{x0}}{m}\frac{t^2}{2}, \qquad S_y^0(t) = \frac{qE_{y0}}{m}\frac{t^2}{2} + v_{y0}t + y_0.$$

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 (8)-(17). Прцесс продолжается до тех пор, пока частица не достигнет границы области моделирования. Когда частица достигает границы, не являющейся анодом, моделируется ее столкновение со стенкой 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 аноде происходит осаждение.

Область моделирования представляет собой пространство между катодом и анодом, окруженное стенками, являющимися диэлектриками, она имеет геометрическую форму параллелепипеда. Построение области моделирования начинается с задания фона, затем строятся стенки и сами электроды.

Заряд на электродах предполагается распределенным равномерно с одинаковой плотностью. Потенциалы электродов моделируются в плоскости координат x и y, потому что они не зависят от ширины электродов z [3], [4]. Для расчета потенциала используется пятиточечная разностная схема для уравнения (1), построенная на сетке с одинаковым шагом h по x и y [5]. Разностная задача решается методом простых итераций:

$$f^k(i,j) = \frac{1}{4}\Big[f^{k-1}(i-1,j) + f^{k-1}(i+1,j) + f^{k-1}(i,j-1) + f^{k-1}(i,j+1)\Big],$$

$k = 1, 2, 3, \ldots$, где i - координата узла сетки по оси y, а j - по оси x. Компоненты вектора напряженности вычисляются, с помощью разностных производных:

$$\begin{cases} E_x(i,j) \approx \frac{f(i,j+1)-f(i,j)}{h}, \\ E_y(i,j) \approx \frac{f(i+1,j)-f(i,j)}{h} \end{cases}$$

После этого значения массива f содержат значения потенциалов в каждой точке поля и используются как для построения полета заряженных частиц, так и для отрисовки потенциалов, определяя цвет и его глубину.

Для моделирования потока ионов меди между катодом и анодом в электролизной ванне был разработан эмулятор в интегрированной среде разработки приложений Delphi. Для построения графики использовалась библиотека для работы с 3D графикой OpenGL (Open Graphics Library) [6].

Список литературы

[1] Шимони К. Теоретическая электротехника. М.: Мир, 1964. 775 с.

[2] Тамм И.Е. Основы теории электричества. М.: Наука, 1989. - 504 с.

[3] Любанова А.Ш., Митин К.В. 3D моделирование электрических и электромагнитных полей // Наука и технологии. Труды XXVIII Российской школы: Сб. науч.тр. / М.:РАН, 2008. Т. 2. С. 105-112.

[4] Митин К. В. Моделирование электростатических и электромагнитных полей // Винеровские чтения. Труды IV Всероссийской конференции. Часть I: Сб. науч.тр. / Иркутск: ИрГТУ, 2011. С. 187-194.

[5] Самарский А. А. Теория разностных схем. М.:Наука, 1977. 656 с.

[6] OpenGL: Электрон. Журн. 2011. Режим доступа: http://opengl.org.