

- 2. Массоперенос при электролизе ионных расплавов / С.А. Воденников, В.А. Скачков, В.И. Иванов [и др.] // Теория и практика металлургии. – 2007. – № 2–3 (57–58). – С. 135–138.
- 3. К вопросу математического описания массопереноса металла покрытия при электролизе ионных расплавов / С.А. Воденников, В.А. Скачков, О.С. Воденникова [и др.] // Нові матеріали і технології в металургії та машинобудуванні. - 2007. - № 1. - С. 106-109.

УДК 621.365.22:536.24

МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССА МАССОПЕРЕНОСА ИОНОВ ЭЛЕКТРОЛИТА В ОБЪЕМЕ ЭЛЕКТРОЛИЗНОЙ ВАННЫ

С.А. Воденников

Доктор технических наук, доцент, профессор, декан металлургического факультета, заведующий кафедрой*
 Контактный тел.: (061) 223-82-03
 E-mail: mf@zgia.zp.ua

В.А. Скачков

Кандидат технических наук, доцент*
 Контактный тел.: (061) 223-83-10
 *Кафедра МЧМ

Запорожская государственная инженерная академия
 пр. Ленина, 226, г. Запорожье, Украина, 69006

Запропоновано математичну модель процесу масоперенесення іонів електроліту у об'ємі для прогнозованого забезпечення функціональних властивостей пористих матеріалів

Ключеві слова: іонні розплави, масоперенесення, математична модель, концентрація

Предложена математическая модель процесса массопереноса ионов электролита в объеме для прогнозированного обеспечения функциональных свойств пористых материалов

Ключевые слова: ионные расплавы, массоперенос, математическая модель, концентрация

Mathematical model of transferring process of ions in the electrolyte volume for the forecast providing functional properties of porous materials

Key words: ionic fusions, mass transformation, mathematical model, concentration

1. Введение

Широкая применимость ионных расплавов обусловлена тем, что они обладают высокой теплоэлектропроводностью, а электрохимические превращения протекают с большими скоростями. Раскрытие механизмов прохождения ионов в объеме электролита позволит более точно прогнозировать как развитие диффузионных процессов, так и качественные характеристики металлопокрытия [1].

2. Постановка задачи

Основной задачей данной работы является разработка совершенно новой математической модели про-

цесса массопереноса ионов электролита под воздействием различных физико-химических характеристик процесса электролитического осаждения покрытий.

3. Результаты исследований

Ранее массоперенос электролитических активных частиц в объеме ионного расплава может быть описан уравнением [2,3]:

$$\frac{\partial C_i}{\partial \tau} = D_i \cdot \nabla^2 C_i + \frac{z_i \cdot F \cdot D_i}{R \cdot T} \cdot \nabla(C_i \cdot \Delta \phi) - \vec{\vartheta} \cdot \nabla C_i, \quad (1)$$

где: C_i - концентрация частиц сорта i ; D_i - коэффициент диффузии частиц сорта i ; $\Delta \phi$ - градиент потенциала; $\vec{\vartheta}$ - скорость движения гидродинамического

потока; F - число Фарадея; z_i - заряд частиц сорта i ; ∇ - знак дивергенции; τ и T - время и температура процесса электролиза соответственно.

Первый член правой части уравнения (1) представляет перенос частиц сорта i путем диффузии, второй член характеризует перенос частиц сорта i под воздействием градиента потенциала $\Delta\phi$, третий член соответствует переносу частиц гидродинамическим потоком со скоростью \bar{v} .

Общее уравнение (1) можно значительно упростить для каждой конкретной технологической схемы. Так в случае плоского катода с площадью S_K и плоского анода с площадью S_A при расстоянии между электродами $2L$, то есть, когда электролиз реализуется по нормали к электродам, уравнение будет иметь вид:

$$\frac{\partial C_i}{\partial \tau} = D_i \frac{\partial^2 C_i}{\partial x^2} + \frac{z_i \cdot F \cdot D_i}{R \cdot T} \cdot \frac{\partial(C_i \cdot \Delta\phi)}{\partial x} - \bar{v} \cdot \frac{\partial C_i}{\partial x}, \quad (2)$$

где: x - координата, перпендикулярная к плоскости электродов.

В случае постоянного значения градиента потенциала $\Delta\phi$ уравнение (2) можно представить в виде:

$$\frac{\partial C_i}{\partial \tau} = D_i \frac{\partial^2 C_i}{\partial x^2} + \left(\frac{z_i \cdot F \cdot D_i \cdot \Delta\phi}{R \cdot T} - \bar{v} \right) \frac{\partial C_i}{\partial x}. \quad (3)$$

В правой части уравнения (3) значение скорости \bar{v} должно быть задано. В случае отсутствия внешнего перемешивания электролита и равномерном распределении температуры по всему объему скорость \bar{v} можно задать пропорционально скорости всплытия пузырьков газов, образующихся на электродах. В работе величина скорости всплытия пузырька газа \bar{v}_n определяется как:

$$\bar{v}_n = \left(\frac{\delta}{K} \right)^3, \quad (4)$$

где: δ - толщина диффузионного слоя; K - константа.

Учитывая соотношение (4), скорость движения гидродинамического потока может быть определена согласно выражению:

$$\bar{v} = G \cdot \bar{v}_n = K_{II} \cdot \delta^3, \quad (5)$$

где: G и K_{II} - константы пропорциональности.

При установившемся режиме, когда концентрация не зависит от времени, уравнение (3) имеет вид:

$$\frac{\partial^2 C_i}{\partial x^2} + \left(\frac{z_i \cdot F \cdot \Delta\phi}{R \cdot T} - \frac{\bar{v}}{D_i} \right) \frac{\partial C_i}{\partial x} = 0. \quad (6)$$

Для уравнения (3) краевые условия можно задать в виде:

$$C_i \Big|_{x=0} = C_i^0;$$

$$\frac{\partial C_i}{\partial \tau} \Big|_{x=L} = -\beta_i C_i \Big|_{x=L};$$

$$\int_{-L}^{+L} C_i(x, \tau = 0) dx = 2LC_i^0 - \beta_i C_i; \quad (7)$$

где: C_i^0 - концентрация частиц сорта i в центре электролизной ячейки;

β_i - константа скорости восстановления ионов сорта i .

Решение уравнения (3) с учетом условий (7) представляется в виде:

$$C_i(x, \tau) = C_i^0 \left[e^{-k_1 x} + \frac{(e^{-k_1 x} - e^{-k_2 x}) \cdot (k_1 - 2Le^{-kx})}{F_{12}} \right], \quad (8)$$

$$\text{где: } k_1 = F_3 + \sqrt{(D_i F_3^2 - \beta_i) / D_i};$$

$$k_2 = -F_3 + \sqrt{(D_i F_3^2 - \beta_i) / D_i};$$

$$F_{12} = F_4 - F_5; \quad F_3 = \frac{\bar{v}}{D_i} - \frac{z_i F \Delta\phi}{2RT};$$

$$F_4 = (e^{k_2 L} - e^{-k_2 L} + \beta_i \cdot k_2 e^{k_2 L}) / k_2;$$

$$F_5 = (e^{k_1 L} - e^{-k_1 L} + \beta_i \cdot k_1 e^{k_1 L}) / k_1.$$

Уравнение (8) описывает процесс переноса заряженных частиц сорта i в объеме электролизной ячейки в стационарных условиях при постоянном градиенте потенциала $\Delta\phi$. Результаты проверки данной модели (уравнение 8) с учетом параметров ячейки, начальных и граничных условий электролиза алюминия на пористом титане и кремния на пористой графитированной подложке представлены на рис. 1.

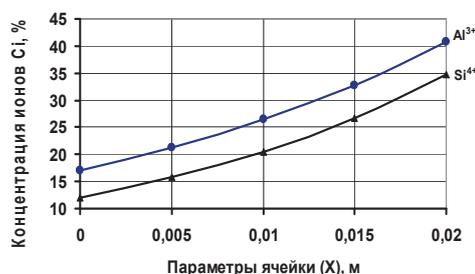


Рис. 1. Распределение концентрации ионов алюминия и кремния по объему электролизных ячеек

Анализ расчетных данных распределения ионов электролита показал, что под воздействием электрического поля, происходит направленное перемещение ионов алюминия и кремния из объема ячейки в прикатодную область. Вблизи электродного слоя происходит накопление заряженных ионов, и их концентрация возрастает в 2,4 раза относительно начальной. Это связано с тем, что при электролизе ионных расплавов происходят характерные деполяризационные явления. К ним можно отнести анодный эффект, двойной электрический слой, образование субионов и др. Именно образование двойного электрического слоя приводит к накоплению ионов при электродном пространстве. Ионы металла сдвигаются и уплотняют двойной слой, что отражается на характере распределения для граничных параметров ячейки.

4. Выводы

Таким образом, разработанная математическая модель процесса массопереноса ионов в объеме электролита позволяет рассчитывать как распределение концентрации ионов покрытия по объему электролизной ячейки, так и прогнозировать возможность образования качественного металлопокрытия с заданными фазовым составом и функциональными свойствами.

Литература

1. Делимарский Ю.К. Химия ионных расплавов / Делимарский Ю.К. – К. : Наукова думка, 1980. – 328 с.
2. Массоперенос при электролизе ионных расплавов / С.А. Воденников, В.А. Скачков, В.И. Иванов [и др.] // Теория и практика металлургии. – 2007. – № 2–3 (57–58). – С. 135–138.
3. О влиянии распределения ионов в объёме расплава электролита на структуру и свойства покрытий пористых материалов / С.А. Воденников, Г.И. Слынько, В.А. Скачков [и др.] // Нові матеріали і технології в металургії та машинобудуванні. - 2008. - № 1. - С. 128-131.

УДК 519.63

ЯВНАЯ СХЕМА ДЛЯ ЧИСЛЕННОГО ИНТЕГРИРОВАНИЯ УРАВНЕНИЙ ГИПЕРБОЛИЧЕСКОГО ТИПА НА НЕСТРУКТУ- РИРОВАННЫХ СЕТКАХ

А. В. Русанов

Доктор технических наук, заведующий отделом
Отдел гидроаэромеханики энергетических машин
Институт проблем машиностроения им. А.Н. Подгорного
НАН Украины
ул. Дм. Пожарского, 2/10, г. Харьков, Украина, 61046
Контактный тел.: (057) 752-33-88
E-mail: rusanov@ipmach.kharkov.ua

Д. Ю. Косьянов

Аспирант
Национальный технический университет «Харьковский
политехнический институт»
ул. Фрунзе, 21, г. Харьков, Украина, 6100
Контактный тел.: (0572) 95-95-21
E-mail: kosyanovdima@rambler.ru

Запропоновано спосіб побудови реконструкції високого порядку точності на неструктурованих сітках. Створено явну різницеву схему для чисельного інтегрування диференціальних рівнянь у часткових похідних гіперболічного типу. Виконано апробацію для ряду модельних задач

Ключові слова: неструктурована сітка, метод контрольного об'єму, реконструкція, явна схема

Предложен способ построения реконструкции высокого порядка точности на неструктурированных сетках. Создана явная разностная схема для численного интегрирования дифференциальных уравнений в частных производных гиперболического типа. Выполнена апробация для ряда модельных задач

Ключевые слова: неструктурированная сетка, метод контрольного объёма, реконструкция, явная схема

A high-order reconstruction method on unstructured grids is presented. The explicit finite volume scheme for hyperbolic conservation laws is constructed. The numerical approximation is executed for several model tasks

Key words: unstructured grid, finite volume method, reconstruction, explicit scheme

1. Введение

При моделировании различных физических процессов с помощью численного интегрирования дифференциальных уравнений в частных производных (ДУЧП) гиперболического типа в областях сложной геометрической формы наиболее удобно выполнять отображение физической области на расчётную с помощью неструктурированной сетки. Такие сет-

ки допускают автоматизацию процесса построения и адаптации к решению (например, области больших градиентов и разрывных решений) [1, 2].

В большей части используемых вычислительных методов для неструктурированных сеток применяется линейная реконструкция, что обеспечивает порядок точности не выше второго [3, 4]. Однако, как показывает опыт, повышение порядка точности разностных схем может увеличить общую эффектив-