

МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ ПРИ РАЗРАБОТКЕ НОВЫХ ТЕХНОЛОГИЙ ПОЛУЧЕНИЯ АЛЮМИНИЯ

*П.В. Бурков д.т.н., профессор,
У.П. Кундянова, студент гр. 10710
Юргинский технологический институт (филиал)
Томского политехнического университета
652055, г. Юрга, ул. Ленинградская, 26
тел. (983)-328-09-97
E-mail: ursula93.28@mail.ru*

Математическое моделирование физико-химических процессов является важным инструментом для прогнозирования поведения физико-химических систем в условиях нестандартных технологических режимов, в частности при разработке новых или совершенствовании известных технологий получения алюминия.

Одним из мощных методов анализа поведения многофазных реагирующих систем, требующих минимальной информации о физико-химических свойствах реагирующих веществ, является метод расчета химического равновесия системы, [1]. В настоящей работе, на основе расчета химического равновесия многофазных систем, рассмотрены некоторые альтернативные электролизу методы получения алюминия [4-6]. Метод карботермического восстановления окиси алюминия в дуговой плазме [4,5] давно привлекает внимание промышленников возможностью прямого восстановления алюминия. Несмотря на то, что первые заводы карботермического восстановления алюминия появились более ста лет назад, основным способом восстановления алюминия является электролизное производство. По мнению авторов [5], метод электротермического восстановления перспективнее электролизного, поскольку он базируется на переработке алюмосиликатного сырья, которого значительно больше, чем бокситов, требует меньших затрат на подготовку сырья, расходует значительно меньше электроэнергии и электродов. В то же время способ электротермического восстановления обладает и рядом недостатков, которые сдерживают его широкое применение. К ним можно отнести высокую чувствительность метода к однородности соотношения окислов и восстановителя, к равномерности прогрева и подачи шихты и ее электрической проводимости, предельному содержанию окиси алюминия в алюмосиликатах. Кроме этого, необходимость добавок окислов кремния или железа для предотвращения образования карбида алюминия, в стандартной технологии карботермического восстановления алюминия из окисла, требует дополнительных технологий отделения алюминия от других компонентов получаемого сплава при необходимости получения чистого алюминия.

Оценки показывают, что при взаимодействии окиси алюминия с углеродом, с образованием окиси углерода и алюминия, минимальный расход подводимой энергии не может быть меньше 24,9 Мдж на 1 килограмм получаемого алюминия и 20,1 Мдж при окислении углерода до CO_2 . Согласно [4], в реальных процессах электролизного восстановления алюминия затрачивается 14-16 квт·ч (50,4-64,8 Мдж) электроэнергии на килограмм производимого алюминия. При высокотемпературном карботермическом восстановлении алюминия из окиси, полное восстановление происходит при подводе 45 Мдж на килограмм

производимого алюминия, поскольку часть энергии затрачивается на нагрев смеси, фазовые переходы и образование промежуточных продуктов.

Следует отметить, что при концентрациях углерода более 15,0% (эта концентрация соответствует реакции $2\text{Al}_2\text{O}_3 + 3\text{C} = 4\text{Al} + 3\text{CO}_2$, однако в расчетах во всем диапазоне концентраций углерода окиси углерода на пять порядков больше, чем двуокиси) в системе остается значительное количество непрореагировавшего углерода, что приводит к реакциям алюминия с углеродом с образованием карбида алюминия. Кроме этого, при указанной температуре, во всем диапазоне концентраций углерода остается значительное количество невосстановленной окиси алюминия. Поскольку создание полностью однородной системы углерод-окись алюминия требует глубокого измельчения реагентов и тщательного перемешивания, представляет интерес процесс восстановления окиси алюминия газообразными восстановителями, использование которых позволяет создать более однородные условия контакта окиси алюминия с восстановителем.

Интересные результаты по восстановлению алюминия водородной плазмой получены экспериментально в работе [6]. В настоящей работе было проведено моделирование процесса восстановления алюминия водородом. Равновесные расчеты восстановления алюминия водородом в смеси 6 молекул водорода на молекулу Al_2O_3 показывают, что при 3000 К восстанавливается не более 3,5% алюминия, содержащегося в окислах, тогда как при восстановлении углеродом при этих температурах восстанавливался практически весь алюминий. Однако, из экспериментальных результатов работы [6] можно сделать вывод, что плазменная активация водорода в качестве восстановителя приводит к восстановлению до 60% алюминия из окиси, что указывает на существенную неравновесность процесса восстановления из-за образования радикалов в плазме. Хотя восстановление алюминия водородом и не приводит к образованию карбидов, но процесс требует больших затрат энергии – по экспериментальным данным [6] процесс восстановления требует 226 Мдж на килограмм восстановленного алюминия, что значительно превышает расходы энергии на электролиз окиси алюминия. Кроме этого, требуется значительное количество водорода для проведения процесса восстановления.

Возможным более эффективным вариантом, по сравнению с восстановлением алюминия водородом, был бы процесс восстановления активированным в плазме природным газом. Расчеты показывают, что в этом случае расходы энергии близки к расходу при карботермическом восстановлении, а равновесный выход алюминия приближается к 100%. При этом, в отличие от электролиза, в качестве расходного углеродосодержащего материала используется не углеродный анод, а природный газ.

Список литературы:

1. Дворников Н.А. Равновесное и кинетическое моделирование пиролиза и окисления углеводородов при высоких давлениях // Физика горения и взрыва .– 2011. – № 3. – С. 20–28.
2. Дворников Н.А. Моделирование тепломассообменных и химических процессов в пристенных и струйных течениях // Автореф. дисс. д.т.н, спец. теплофизика и теоретическая теплотехника. – Новосибирск: 2010. – 39 с.
3. Дворников Н.А. Метод моделирования радиационно – конвективного теплообмена в печах. // IV Минский международный форум. Тепломассообмен ММФ 2010. – Т. 2. – С. 11–15.

4. Шейн Я.П., Гудима Н.В. Краткий справочник металлурга по цветным металлам. – М.: Металлургия, 1964. – 412 с.

5. Беляев А.И., Рапопорт М.Б., Фирсанова Л.А. Электрометаллургия алюминия. М.: Государственное научно-техническое издательство литературы по черной и цветной металлургии, 2010. – 720 с.

ВЛИЯНИЕ ПАРАМЕТРОВ РАСПРЕДЕЛЕНИЯ ЭМИТИРУЕМЫХ ЧАСТИЦ ПО УНОСИМЫМ ИМИ УГЛОВЫМ МОМЕНТАМ НА ОСНОВНЫЕ НАБЛЮДАЕМЫЕ ВЕЛИЧИНЫ ПРОЦЕССА ДЕЛЕНИЯ ВОЗБУЖДЁННЫХ ЯДЕР

А.Л. Литневский, к.ф.-м.н.,

*Омский государственный технический университет, 644050, г. Омск, пр. Мира, 11,
тел.(3812)-668-740*

E-mail: a_lit@list.ru

Теоретические исследования процесса деления возбужденных атомных ядер проводятся уже на протяжении нескольких десятилетий. Основным методом этих исследований – моделирование. Для получения адекватных результатов теоретических исследований необходимо создать модель, наиболее приближенную к реальности, но при этом чрезмерное усложнение модели является нежелательным, потому что каждое усложнение модели значительно увеличивает затраты компьютерного времени на проведение расчетов. В связи с этим, целесообразно исследовать влияние каждого фактора в отдельности, а затем принять решение о том, какие из них являются наиболее значимыми, а какими можно пренебречь. Одним из рассматриваемых факторов является унос углового момента эмитируемыми в процессе деления ядра лёгкими частицами.

В большинстве моделей деления ядер полагается, что каждая эмитируемая частица уносит фиксированный угловой момент (см., например, [1-5]). В работах [6, 7] мы рассматривали вопрос о необходимости рандомизации значений угловых моментов, уносимых лёгкими эмитируемыми частицами, при моделировании процесса деления возбужденных ядер. Процедура, позволяющая проводить расчеты с учётом стохастического характера уносимых частицами моментов, описанная в [7], была встроена в компьютерную программу, реализующую модифицированную версию комбинированной динамическо-статистической модели (КДСМ1) [5]. С этой целью во входные параметры программы добавлен ключ, отвечающий за использование распределения, а в саму программу – процедура, содержащая расчёт распределений и метод Монте-Карло. Это позволяет на основании рассчитанных вероятностей каждого из допустимых значений случайным образом определить угловой момент, который унесёт очередная испущенная частица. Процедура эта вызывается из основной программы непосредственно перед оператором, изменяющим угловой момент ядра. Таким образом, распределение испускаемых частиц по уносимым ими угловым моментам вычисляется для текущих параметров ядра (массовое число A , зарядовое число Z , угловой момент L , полная энергия