

代尔夫特理工大学, 荷兰

使用数值方法设计环保的阳极焙烧工艺

荷兰代尔夫特理工大学的研究人员与 Aluchemie 公司使用多物理场仿真技术, 合作设计了一种环保的阳极焙烧工艺。

作者 RACHEL KEATLEY

铝是地壳中含量第三的元素, 从保存剩饭的箔纸到环球飞行的飞机机身上, 都能找到它的身影。在制造各种铝制产品之前, 必须先通过 Hall-Héroult 工艺利用生阳极将铝从铝土矿中熔炼并提取出来。

生阳极需要具有低反应活性、高强度和导电性才能被用于 Hall-Héroult 工艺。在实际生产中, 通常采用对阳极进行焙烧的方法来获得这些特性。

来自荷兰代尔夫特理工大学 (Delft

University of Technology, TU Delft) 的一个研究团队正在与荷兰 Aluchemie 公司合作研究阳极焙烧工艺设计。为了深入了解和优化阳极焙烧工艺过程, 提高铝的产量, 团队采用了数值模拟的方法进行设计。

» 多物理场问题: 阳极焙烧工艺

烘焙蛋糕时, 我们需要各种配料才能获得合适的稠度、质地和风味。阳极焙烧过程就像烤蛋糕一样, 只是它烤出来的不是蛋糕, 而是可用于 Hall-Héroult 工艺中提取铝的阳极。在这个工艺中, 需要考虑多种物理现象, 例如湍流、燃烧过程、共轭传热和辐射。研究团队的成员 Prajakta Nakate 说: “我对该项目感兴趣, 主要因为它是一个多物理场问题。” 与烘焙蛋糕不同, 阳极焙烧过程需要实现包括均匀加热、降低能耗以及减少燃烧过程中烟灰的形成等多个目标。

Hall-Héroult 阳极焙烧工艺非常耗



图 1 Aluchemie 公司的阳极焙烧炉。

费能源, 并会释放出对环境有害的排放物。例如排放气体中的氮氧化物 (NO_x) 是常见的空气污染物之一, 会形成烟雾和酸雨。Nakate 的研究包括减少阳极焙烧过程中 NO_x 的排放, 从而降低对环境的不良影响。“每当谈到环境问题时, 人们总是会责怪各种化工过程。我希望能够通过优化阳极焙烧工艺来降低对环境的影响。” Nakate 说道。

为了减少阳极焙烧过程中 NO_x 的形成, 首先要了解该过程中涉及的各项参数。Nakate 介绍: “通常, 我们需要通过复杂的实验方法了解不同的参数, 而建立数学模型是较为简便的方法。”

» 数值模拟: 设计理想阳极焙烧工艺的秘方

在与 TU Delft 合作之前, Aluchemie 公司曾尝试使用耗时的试错法优化阳极焙烧炉 (图 1)。“该项目中最重要的是确定阳极焙烧过程中可能出现问题的区域, 我认为只有通过仿真的方法才能实现。” Nakate 评论道。在模拟阳极焙烧过程中, TU Delft 的研究团队选择了 COMSOL

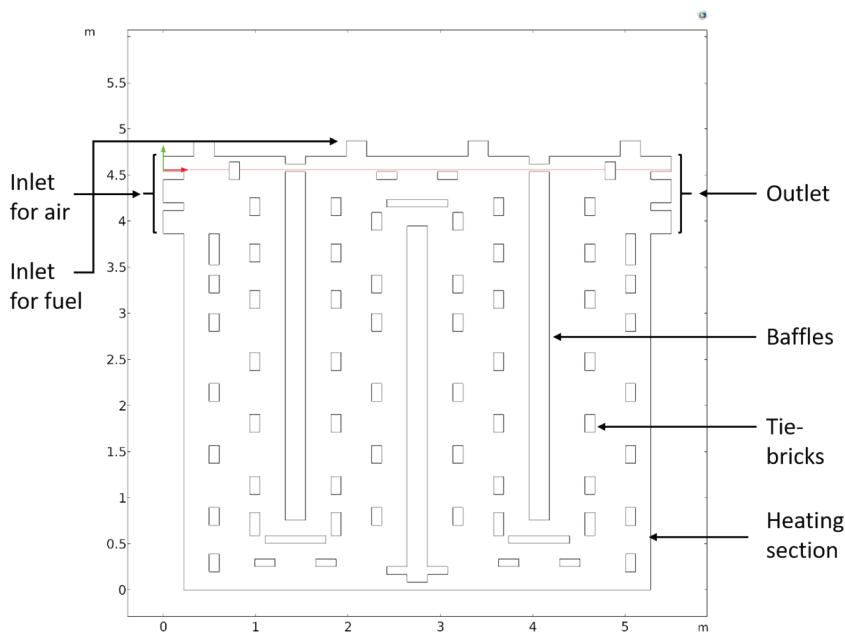


图 2 使用 COMSOL® 多物理场仿真软件模拟的阳极焙烧炉的几何形状及边界。(水平红线下方为熔炉最重要的区域。)

图注: Inlet for air – 气体入口; Inlet for fuel – 燃料入口; Outlet – 出口; Baffles – 折流板; Tie-bricks – 联结砖; Heating section – 加热区。

Multiphysics® 软件, 因为它提供了一个多物理场建模环境, 这是该项目研究中必不可少的因素。

研究人员使用了两种模型来研究阳极焙烧过程。第一个模型分析了熔炉中空气

和燃料 (甲烷) 的无反应湍流; 第二个模型分析了熔炉中含辐射的反应流, 作为第一个模型的扩展。模型通过一组数学方程描述阳极焙烧过程中涉及的多种物理现象, 这些数学方程是数值模型的基础。

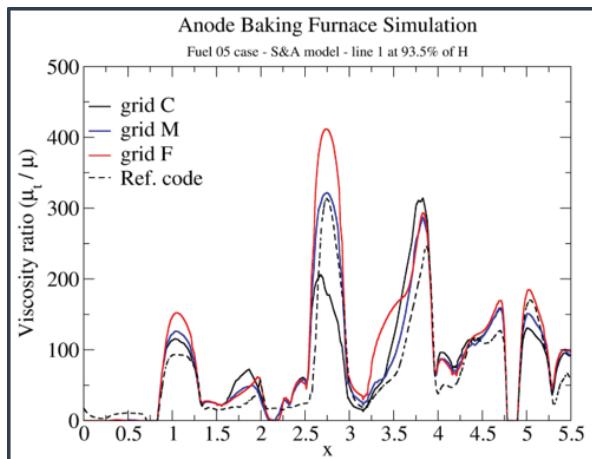
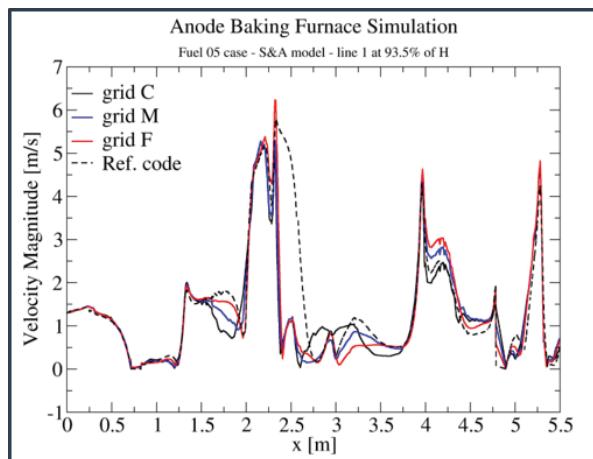


图 3 使用 COMSOL Multiphysics® 和 IB Raptor 代码仿真得到的速度 (左) 和黏度比 (右) 结果对比。

图注: Anode Baking Furnace Simulation – 阳极焙烧炉模拟; grid C – 格栅 C; grid M – 格栅 M; grid F – 格栅 F; Ref. code – 参考结果; Velocity Magnitude – 速度; Viscosity ratio – 黏度比。

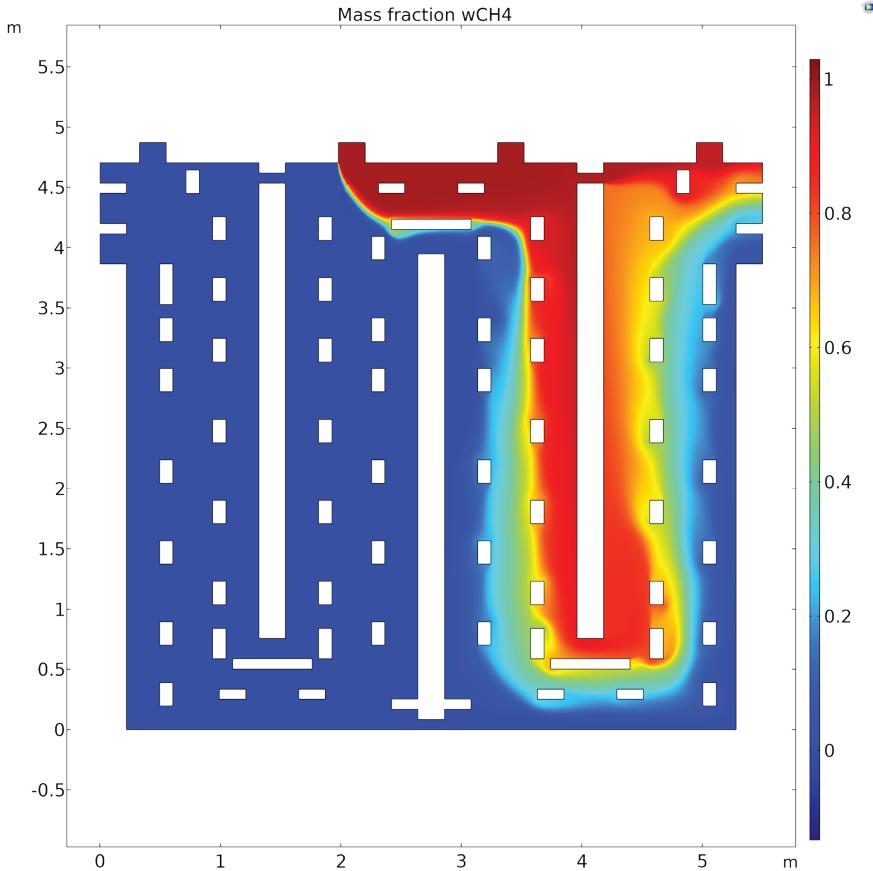


图4 湍流反应流模型中甲烷(CH_4)的质量分数。
图注: Mass fraction - 质量分数。

两种模型都使用了相同的二维几何形状研究熔炉的加热区(图2)。熔炉的几何形状包括三个折流板区域,每个区域约有60~70块连结砖,而复杂的几何形状使问题变得极具挑战性。Nakate提到:“如果更换连结砖的位置,就会改变熔炉中的气流,从而影响阳极焙烧过程中化学物质的分布和温度。”连接砖和折流板还增加了熔炉中用于排放废气的烟道壁的结构强度。

» 湍流反应流模型

在研究不考虑反应的湍流时, Nakate及其团队比较了两种湍流模型: Spalart-Allmaras模型和 $k-\epsilon$ 模型。这两种模型各有其自身的优势,特别是在分析阳极焙

烧方面。

该团队使用IB Raptor代码验证了由Spalart-Allmaras模型生成的流场结果。Nakate解释道:“IB Raptor代码是一个专用的流体求解器,我们希望与一款专注于流体仿真的软件进行对比来验证我们的结果。”仿真结果显示,使用COMSOL Multiphysics®软件和IB Raptor代码得到的熔炉中流体的速度和黏度非常接近(图3)。

在研究发生反应的湍流时,通过使用COMSOL®软件中的化学反应工程模块和传热模块,研究团队添加了甲烷(CH_4)的单步燃烧反应和传热(包括参与介质中的辐射),从而将第一个模型扩展为湍流反应

“该项目中最重要的
是确定阳极焙烧过程中
可能出现问题的区域,
我认为只有通过仿真的
方法才能实现。”

— PRAJAKTA NAKATE,
代尔夫特理工大学

流模型。Nakate的团队使用辐射反应流模型得到了合理的仿真结果(图4),并为进一步改进模型、更加深入地了解和优化 NO_x 熔炉铺平了道路。

» 开发新模型

通过仿真, TU Delft团队和Nakate能够分析和确定阳极焙烧炉中的重要区域,而仅凭实验不可能做到这一点,因为熔炉的尺寸比较大。Nakate说:“我们只能通过移开燃烧炉并使用热像仪从顶部拍照来观察熔炉,但是只有通过仿真才能观察熔炉中的温度或化学物质分布。”

目前, TU Delft团队正在努力将其阳极焙烧工艺的二维模型扩展为三维瞬态模型。他们还计划全面研究新模型中的燃烧反应,这将帮助他们更多地了解阳极焙烧工艺中 NO_x 的减少情况。辐射是阳极焙烧过程中的主要物理现象,也将在扩展模型中得到进一步分析。

在谈到个人研究目标时, Nakate表示:“我想从事一项能直接应用在工业中,并对环境产生积极影响的项目。”因此,与Aluchemie公司一起研究阳极焙烧工艺与她的目标完美契合。凭借所学知识, TU Delft团队和Nakate有信心继续他们的研究,并找到通过仿真设计优化阳极焙烧工艺的新方法。◎