

APLICACIÓNS DAS MATEMÁTICAS NA INDUSTRIA METALÚRXICA

Alfredo Bermúdez de Castro
Universidade de Santiago
de Compostela

1. MODELIZACIÓN MATEMÁTICA

¿Son útiles as matemáticas? O grave non é que esta pregunta a formulen os nosos estudantes de bacharelato. O realmente preocupante é que non teñan clara a resposta moitos alumnos da licenciatura ou boa parte dos nosos enxeñeiros. Algo falla no ensino desta disciplina no noso país para que se suscite esta cuestión, cando decote manexamos e gozamos de dispositivos ou servizos que, ben foron deseñados a través de cálculos, ben utilizan para o seu funcionamento algoritmos matemáticos.

Este artigo pretende, mediante algúns exemplos concretos, contribuír a fundamentar unha resposta afirmativa á pregunta de se son útiles as matemáticas. Pero debe quedar ben sentado desde o principio que en absoluto as aplicacións da matemática se restrinxen ó tipo das que aquí imos expor. Deixaremos fóra, por exemplo, especialidades tan importantes desde este punto de vista como a investigación operativa ou a matemática discreta.

O século pasado quedaron ben establecidas as ecuacións que rexen os

fenómenos da mecánica, a termodinámica e o electromagnetismo, tres disciplinas da física que son, moi probablemente, as de maior importancia na enxeñería.

Estas ecuacións relacionan as magnitudes que caracterizan e representan os ditos fenómenos e constitúen, polo tanto, modelos matemáticos que, coa súa resolución, permiten predicir e simular o comportamento de gran número de procesos e dispositivos.

Ata tempos recentes a resolución destas ecuacións (trátase, xeralmente, de 'ecuacións diferenciais en derivadas parciais') non se puidera levar a cabo máis que en casos moi particulares, como aqueles nos que é posible facer unha aproximación lineal e nos que, ademais, a xeometría do recinto é sinxela (esfera, cilindro, rectángulo...). Sen embargo, a partir da introducción dos modernos ordenadores e do desenvolvemento de métodos numéricos robustos, xa é posible calcula-la solución de grandes sistemas de ecuacións en derivadas parciais non lineais, en xeometrías complicadas bi-ou tridimensionais.

A resolución con ordenador de modelos matemáticos que rexen a

evolución de procesos ou o comportamento de dispositivos constitúe unha disciplina de posibilidades enormes para o coñecemento destes e mais para a súa posterior predicción e control. A simulación numérica, nome polo que comeza a denominarse, constitúe a base fundamental dunha nova tecnoloxía chamada 'Enxeñería Asistida por Ordenador', coñecida tamén por CAE, acrónimo do seu nome inglés (Computer Aided Engineering).

Antes de discutir sobre os seus aspectos metodolóxicos e de mencionar algunhas aplicacións, debemos sinalar que o núcleo básico desta disciplina o forman as matemáticas; fundamentalmente, unha parte da análise matemática, que é a teoría das ecuacións diferenciais en derivadas parciais, e a análise numérica que proporciona os métodos para a súa resolución aproximada.

A primeira etapa para proceder á simulación numérica é a construción dun modelo matemático do fenómeno que se quere estudar. Xeralmente trátase de ecuacións ben establecidas pola física e nesta etapa o matemático deberá contar cunha mínima formación neste campo e, posiblemente, coa colaboración de físicos e enxeñeiros (de aí a importancia de incluír nos plans de estudos da licenciatura de Matemáticas algúns cursos de física). Do traballo conxunto xurdirá un modelo o máis simplificado posible e, en casos excepcionais, as ecuacións resultantes poderanse resolver 'á man', é dicir, con técnicas analíticas que proporcionarán a solución 'en forma pechada' ou como suma

dunha serie; pero a maioría das veces a súa complexidade ou a da xeometría fará imposible esta vía.

A continuación ábrese un camiño difícil e tortuoso para o matemático puro: á falta dunha expresión explícita, tratarase de probar que existe algunha solución, que é única e que posúe determinadas propiedades cualitativas como dependencia continua dos datos, estabilidade, etc.

Paralelamente, o 'analista numérico' tentará describir e analizar métodos de resolución aproximada, susceptibles de seren programados en ordenador. En efecto, a enorme cantidade de cálculos involucrados nos algoritmos obrigará, ineludiblemente, a utilizar este instrumento. Da capacidade do ordenador dispoñible dependerá a precisión dos cálculos e a rapidez para os obter. Se o tempo de cálculo non é razoable, estaremos só ante unha potencial aplicación da simulación numérica, que deberá agardar, para ser efectiva, a que os progresos na tecnoloxía das computadoras poñan ó noso dispor máquinas máis velozes.

Nos últimos anos coñecemos un avance enorme neste terreo: entre 1970 e 1992 a velocidade de proceso multiplícase por mil e introducíronse algoritmos numéricos que melloraban nun factor análogo ós preexistentes. Os chamados ordenadores persoais posúen hoxe en día unha velocidade de cálculo que nin sequera tiñan os primeiros superordenadores aparecidos na década dos setenta. Este feito, unido a unha diminución dos custos e a unha maior facilidade de uso, está a facer posible

aplica-la simulación numérica a moitas situacións formuladas pola pequena e a mediana industria. Xa non son a industria aeronáutica, a do automóbil, a nuclear ou a petroleira as únicas consumidoras de CAE. Hoxe en día dificilmente pode atoparse un campo da enxeñería moderna e innovadora que non utilice os ordenadores con este propósito. Os exemplos son innumerables e non só na industria: as traxectorias dos satélites artificiais e das misións planetarias cáculanse rutineiramente; os enxeñeiros aeroespaciais usan as computadoras para simula-lo fluxo do vento arredor dun avión ou doutros vehículos espaciais, con vistas a mellora-lo seu comportamento aerodinámico, e tamén para comproba-la súa integridade estrutural (tales estudos son de crucial importancia na industria aeroespacial para o deseño de avións e enxeños espaciais que sexan económicos e seguros); os enxeñeiros civís estudian as características estruturais de grandes edificios, presas, viaductos, etc.; na industria metalúrxica, o rendemento dunha cuba electrolítica para a obtención do aluminio pode mellorarse se se emprega a simulación numérica no seu proceso de deseño; os meteorólogos usan gran cantidade de recursos de cálculo para resolveren as ecuacións en derivadas parciais que rexen o comportamento da atmosfera e, dese modo, predici-lo tempo que vai facer nos próximos días; os climatólogos empregan modelos matemáticos para estudiaren os posibles cambios no clima da Terra ou para explicaren fenómenos como o Neno; tamén os ecoloxistas, os biólogos e os médicos utilizan de forma crecente a computadora en áreas tan

diversas como a dinámica das poboacións dun ecosistema, a dispersión de contaminantes nos océanos e a atmosfera, o fluxo sanguíneo no corpo humano, a construción de próteses, etc.

Mediante esta nova tecnoloxía é posible substituír, polo menos parcialmente, os experimentos físicos, e facilitar e fomenta-lo progreso e a comprensión no estudio dos fenómenos. Experimentos custosos e complexos, ou mesmo imposibles de realizar (pensemos nun accidente nunha central nuclear), serán cambiados en gran medida por modelos de computador, que revelarán os máis finos detalles máis aló dos límites de calquera experimento real. Así por exemplo, o comportamento dun automóbil nunha colisión pode ser simulado nun ordenador e estudado con detalle antes de construír un prototipo.

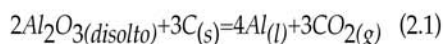
Para isto, como sinalamos, son necesarias tres ferramentas fundamentais: un bo modelo de comportamento, un algoritmo numérico rápido e un ordenador de gran potencia. En xeral, cando se dispón delas, a simulación permite cambia-los parámetros e as condicións externas a vontade e dispor de moita máis información da que se pode obter probando prototipos.

Nas seccións seguintes imos presentar, de forma moi sucinta, dúas aplicacións da simulación numérica na industria metalúrxica. A primeira delas refírese á obtención do aluminio por electrólise da alumina, mentres que a segunda trata sobre os electrodos que se empregan nos fornos de arco eléctrico.

2. UNHA APLICACIÓN NA INDUSTRIA DO ALUMINIO

2.1 INTRODUCCIÓN

A cuba de electrólise constitúe a unidade básica na produción de aluminio onde ten lugar o proceso chamado Hall-Héroult. O aluminio prodúcese por redución electrolítica da alumina (Al_2O_3) disolta nun baño de criolita fundida (Na_3AlF_6) (para os detalles pódese consulta-lo libro de Grjotheim e Kvande [10]). A reacción química global é a seguinte:



A cuba consta de dúas partes fundamentais: un ánodo de carbón consumible que reacciona co osíxeno procedente da descomposición da alumina para formar dióxido de carbono. Un cátodo de diversos materiais, con dúas misións fundamentais: facilita-lo paso da corrente eléctrica a través del, e exercer de contedor de aluminio líquido e, sobre este, do baño de criolita.

A redución é un proceso moi complexo que involucra múltiples fenómenos de transporte, reaccións químicas e electroquímicas, fenómenos termoeléctricos e magnetohidrodinámicos e complexos equilibrios de fase. Logo de máis de cen anos de aplicación comercial (C. M. Hall, en USA, e P. L. T. Héroult, en Francia, patentaron o proceso en 1886), unha gran cantidade de traballo experimental foi levado a cabo, para conseguir unha boa comprensión daquel.

O aluminio fórmase arredor de $960^\circ C$ e queda contido nun crisol de materiais carbonosos que proporcionan a estanquidade, conectados electricamente a barras de aceiro que dan saída á corrente do cátodo. Por baixo e na periferia deste conxunto, varias capas de materiais illantes e refractarios encárganse de proporcionarlle á cuba o balance térmico adecuado. Por último, un caixón de chapa de aceiro reforzado proporciónnalle contención ó conxunto. Na figura 1 aparece representada unha sección transversal da cuba.

A vida do cátodo é limitada e a súa reposición supón un dos custos máis elevados na produción de aluminio. Outro aspecto fundamental é o rendemento enerxético; a caída de potencial nel, non é senón unha perda irrecuperable de enerxía. Da optimización do seu deseño depende a súa lonxevidade e a redución da factura eléctrica.

Por outra parte, unha serie de parámetros, como son a intensidade, o nivel dos líquidos, o contido de aditivos, etc., resultan determinantes no rendemento e na duración das cubas.

Agora ben, a posta en marcha dun novo deseño de cátodo ou a modificación dun parámetro de marcha, esixen a realización de experimentacións de elevado custo e lenta obtención de conclusións, de aí a necesidade de dispor dun modelo sobre o cal simular estas variacións.

A simulación numérica do comportamento das cubas utilízase hoxe en día polos grandes fabricantes de aluminio como axuda para o deseño de novos

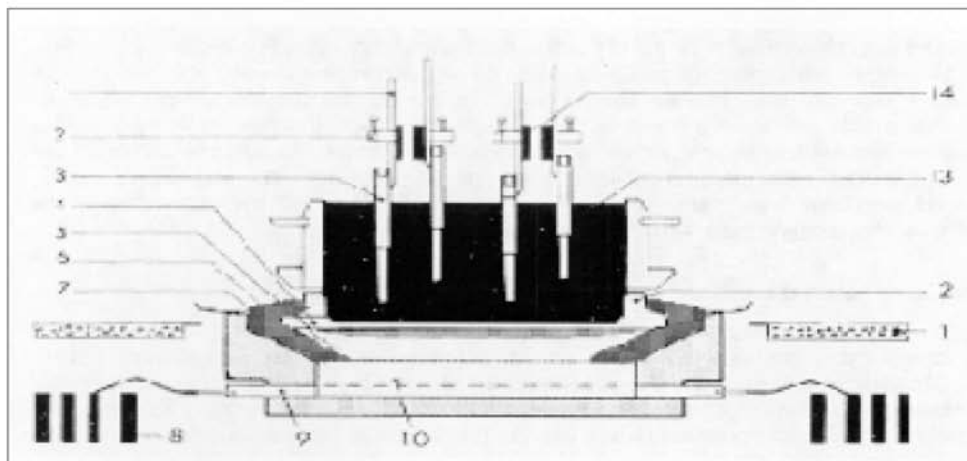


Figura 1: Sección vertical dunha cuba electrolítica.

cátodos ou para a modificación dos existentes. Citemos por exemplo os traballos de Bruggemen e Danka [6], Kryukowski e Scherbinin [12], Bermúdez, Muñiz e Quintela [4], [5].

A investigación en modelización de cubas lévase a cabo en tres campos diferentes aínda que profundamente relacionados: a modelización das condicións térmicas e eléctricas no seo da cuba, a modelización magnetohidrodinámica dos movementos dos fluídos no seu interior, e a modelización dos estados tensionais nos diferentes materiais que a constitúen. Nunha primeira aproximación, o modelo termoeléctrico pode considerarse independente dos outros dous.

Asociados ás isothermas e equipotenciais que o modelo traza no seo do cátodo, ocorren unha serie de fenómenos termodinámicos e de reaccións químicas que, en función da súa localización,

poden resultar prexudiciais ou beneficiosas para a duración da cuba.

A máis característica de tódalas isothermas é aquela á cal o baño de criolita pasa ó estado sólido, formando unha capa que se adhire ó lateral do cátodo chamado *talude*, que o protexerá das infiltracións dos elementos corrosivos. Por outra parte este talude reduce as perdas de calor e traballa coma un sumidoiro cando a cuba está demasiado quente: ó se fundir diminúe a súa capacidade illante, co que a cuba arrefría. Ademais, a forza electromagnética que se orixina ó paso da corrente (forza de Lorentz) produce un movemento convectivo horizontal do metal líquido. Como o talude é electricamente illante, a súa forma determina a aparición ou non de compoñentes horizontais da corrente eléctrica, que desempeñan unha función importante no comportamento da cuba. O grosor do talude e a súa extensión

baixo a chamada 'sombra do ánodo' afectan as compoñentes da corrente. A forza debida a esta corrente horizontal causa oscilacións horizontais na superficie do aluminio líquido. Deste xeito o perfil do talude inflúe na estabilidade da voltaxe e na eficiencia das cubas comerciais.

Por tódalas razóns expostas, un dos obxectivos do deseño das paredes dunha cuba é promover a formación dun talude adecuado para dar unha operación da cuba estable e eficiente e unha vida longa.

Nos últimos oito anos, no Departamento de Matemática Aplicada da Universidade de Santiago de Compostela abordamos, por encargo da empresa INESPAL METAL S.A. e en colaboración cos seus enxeñeiros, a simulación termoeléctrica dunha cuba de electrólise, que incorpora un módulo de axuste automático do modelo ó caso de calquera cuba en funcionamento, a través de medidas das temperaturas no seu interior, das temperaturas do seu caixón ou dos fluxos de calor que o atravesan.

Para validar os seus resultados monitorizáronse varias cubas da fábrica da Coruña, picándolas no seu seo con termopares conectados vía *datatakers* a ordenadores persoais, para a toma de temperaturas en continuo. Os resultados foron excelentes xa que se estableceron diferencias entre as temperaturas calculadas polo modelo e as medidas polos termopares, de arredor da decena de graos centígrados.

Os primeiros froitos xa se recolleron coa elaboración e a revisión de novos deseños de cátodos que reducen as perdas enerxéticas e aumentarán previsiblemente a súa lonxevidade, aínda que non se pode confirmar este aspecto a curto prazo debido á extensa duración do ciclo vital das cubas.

A seguir escribiremo-las ecuacións do modelo termoeléctrico e daremos unha idea sucinta sobre a súa resolución numérica. Finalmente, mostraremos algúns resultados correspondentes á simulación de cubas industriais.

2.2 DESCRICIÓN DO MODELO

Na práctica é suficiente con modelizalo cátodo. Ademais, por razóns de simetría abonda con incluí-la metade dunha destas seccións. Referímonos á figura 2 para as notacións:

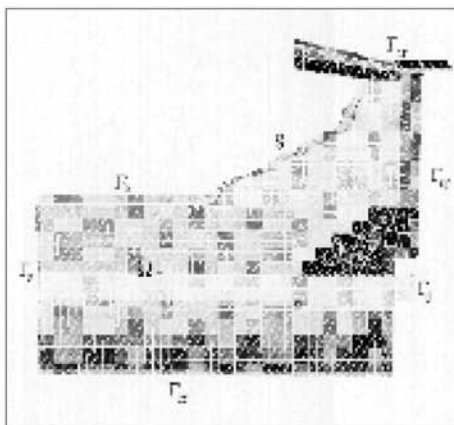


Figura 2: O dominio do submodelo térmico.

Sexa Ω_T o conxunto aberto ocupado pola parte da cuba que estamos modelizando. Denotamos por Γ_T a fronteira de Ω_T e considerámo-la seguinte descomposición de Γ_T (véxase a figura 2):

$$\Gamma_T = \Gamma_d \cup \Gamma_{cr} \cup \Gamma_b \cup \Gamma_s \cup S. \quad (2.2)$$

O conxunto S representa a superficie do talude, que é unha 'fronteira libre'; determinala é unha parte do noso problema.

Denotemos por Ω_E o subconxunto de Γ_T ocupado polos materiais electricamente conductores do cátodo (ver figura 3). A ecuación básica para calculalo potencial e a densidade de corrente é a ecuación de continuidade da carga, dada por:

$$\nabla \cdot J(x) = 0 \quad (2.3)$$

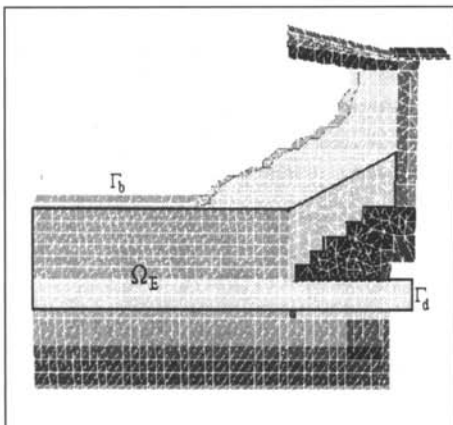


Figura 3: O dominio do submodelo eléctrico.

onde J é o vector densidade de corrente, que está relacionado co potencial eléctrico da forma:

$$J(x) = -\sigma(x, T) \nabla V(x), \quad (2.4)$$

sendo σ a conductividade eléctrica, que depende da temperatura. De (2.3) e (2.4) dedúcese a seguinte ecuación en derivadas parciais en Ω_E :

$$-\nabla \cdot (\sigma(x, T) \nabla V(x)) = 0. \quad (2.5)$$

Por outra parte, a calor desprendida por efecto Joule incrementa a temperatura de acordo coa ecuación en derivadas parciais non lineal:

$$\begin{aligned} & -\nabla \cdot (k(x, T) \nabla T(x)) \\ & = \sigma(x, T) |\nabla V(x)|^2 \text{ en } \Omega_E \end{aligned} \quad (2.6)$$

onde k denota a conductividade térmica, que tamén depende da temperatura.

A mesma ecuación verifícase no resto de Ω_T substituíndo o seu segundo membro por cero.

Para completa-lo modelo é necesario precisa-las condicións de contorno para as ecuacións eléctricas

$$J(x) \cdot n = -j(x) \text{ en } \Gamma_d, \quad (2.7)$$

$$V(x) = 0 \text{ en } \Gamma_b, \quad (2.8)$$

$$J(x) \cdot n = 0$$

$$\text{en } \partial\Omega_E \setminus (\Gamma_d \cup \Gamma_b), \quad (2.9)$$

e térmicas

$$k \frac{\partial T(x)}{\partial n} = \alpha (T_c(x)) - T + \beta (T_r(x) - (T(x) + 273)^4) \text{ en } \Gamma_{cr} \quad (2.10)$$

$$k(x, T) \frac{\partial T(x)}{\partial n} = 0 \text{ en } \Gamma_s \quad (2.11)$$

$$T(x) = T_d \text{ en } \Gamma_d \quad (2.12)$$

$$T(x) = T_o \text{ en } \Gamma_b \quad (2.13)$$

As funcións que aparecen nas ecuacións (2.7)-(2.13) representan os seguintes parámetros físicos:

- $\alpha(x, T)$: coeficiente de transferencia de calor por convección no punto x da fronteira á temperatura T .

- $\beta(x, T)$: coeficiente de transferencia de calor por radiación no punto x da fronteira á temperatura T .

- $T_c(x)$: temperatura do aire que baña o exterior da cuba no punto x da fronteira.

- $T_r(x)$: temperatura do medio co que intercambia calor por radiación o punto x da fronteira

- $j(x)$: densidade de corrente no punto x da fronteira Γ_d .

- T_d : temperatura da barra catódica a 11 cm do caixón da cuba.

- T_o : temperatura de operación.

A ecuación (2.10) establece que o fluxo de calor a través da fronteira exterior Γ_{cr} se debe ás perdas por convección e radiación, mentres que a condición de tipo Neumann homoxénea (2.11) se verifica por simetría.

Nótese que Γ_d representa a parte da fronteira onde se subministran como dato a temperatura e a densidade de corrente; de xeito análogo, supoñemos que a temperatura e o potencial eléctrico son coñecidos en Γ_b .

Por outra parte, obsérvase que os dous problemas, térmico e eléctrico, están eucaixados: o primeiro depende do potencial eléctrico mentres que no segundo a conductividade eléctrica depende da temperatura.

Por último damos condicións sobre a superficie de talude S . Lembremos que esta interfase non se coñece de antemán. De feito, como xa se mencionou, a súa posición é unha información que se pretende obter mediante a simulación numérica.

Notemos primeiro que o campo electromagnético provocado polo paso da corrente xera un movemento horizontal das fases líquidas de grande intensidade. Como consecuencia disto a temperatura destas é bastante uniforme (é a chamada temperatura de operación da cuba) e cae bruscamente nunha capa delgada ata a temperatura do *liquidus* do baño (ver figura 4).

Esta capa delgada, chamada 'zona pastosa', é unha mestura de sólido e líquido a nivel microscópico, de maneira que a súa modelización resulta moi complicada.

Nós supoñemo-las seguintes ecuacións na superficie do talude:

$$T(x) = T_0 \quad (2.14)$$

$$k \frac{\partial T(x)}{\partial n} = f(x_2) n_1(x_2), \quad (2.15)$$

onde n_1 representa a primeira compoñente do vector unitario, normal a S no punto considerado x e $f(x_2)$ é unha función que debe subministrarse para cada cuba. Na práctica f debe ser identificada a partir de medidas experimentais.

A inclusión de n_1 resulta, non só conveniente desde o punto de vista matemático, senón tamén xustificable desde o punto de vista físico; en efecto o fluxo de calor depende da pendente da

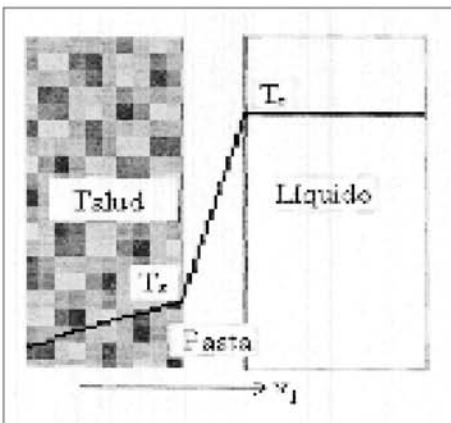


Figura 4: Transferencia de calor das fases líquidas ó talude.

fronteira libre, sendo tanto maior canto maior é esta.

2.3 RESOLUCIÓN NUMÉRICA

As ecuacións establecidas no parágrafo anterior non se poden resolver con técnicas analíticas, polo que se recorre a métodos numéricos. Unha posibilidade, desenvolvida en [4], consiste en utilizar unha discretización mediante un 'método de elementos finitos'. A presentación deste así como a descrición dos algoritmos iterativos para resolve-lo problema non lineal que se obtén están fóra do alcance deste artigo; o lector interesado encontrará os detalles na referencia citada.

Aquí limitáremos a presentar algúns resultados tipo, obtidos para cubas electrolíticas reais mediante un programa de ordenador que implementa estes algoritmos.

As figuras 6 e 5 mostran as isolíneas obtidas para o campo de temperaturas e para o de potenciais eléctricos. Na primeira pode observarse a superficie do talude.

3. ELECTRODOS DE FORNOS METALÚRXCOS

Os electrodos constitúen unha das pezas fundamentais dos fornos de arco, que se utilizan na industria metalúrxica para a obtención de ferroalixes, silicio, carburo de calcio, acero e outros. A súa

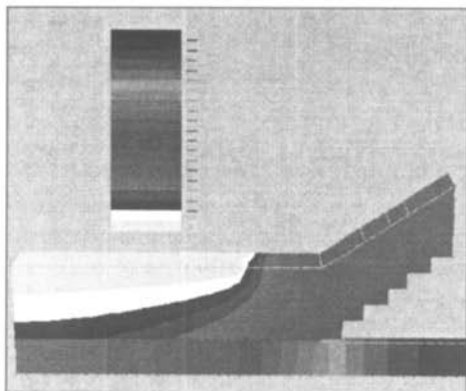


Figura 5: Ispotenciais.

misión é produci-las altas temperaturas que se necesitan para que teñan lugar as reaccións químicas de redución. Para isto xérase unha gran cantidade de enerxía nun arco eléctrico que se produce no seu extremo inferior, no centro do forno (ver figura 7).

O diámetro típico dos electrodos é de 1-2 metros mentres que a súa lonxitude é de arredor de 10 metros. As correntes que se utilizan son de alta intensidade (ata 150 kA).

Ata principios desta década, os electrodos máis utilizados na industria eran os de grafito puro, os precocidos e os Soderberg. Este últimos xéranse in situ, ó cocerse unha pasta carbonosa que se introduce nun recipiente cilíndrico de aceiro chamado *virola*. Para facilita-la cocción existen unhas varas que partindo desta virola se introducen na pasta. A gran cantidade de calor desprendida ó paso da corrente polo efecto Joule emprégase parcialmente na cocción da pasta. Este é un proceso crucial durante o cal a pasta, que inicialmente é non conductora e branda na parte superior do electrodo, se converte nun conductor

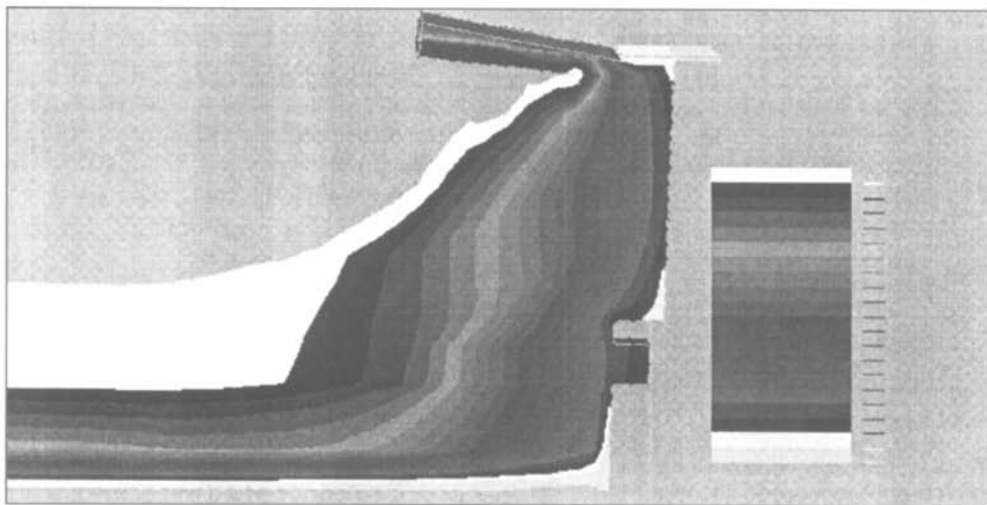


Figura 6: Isotermas.

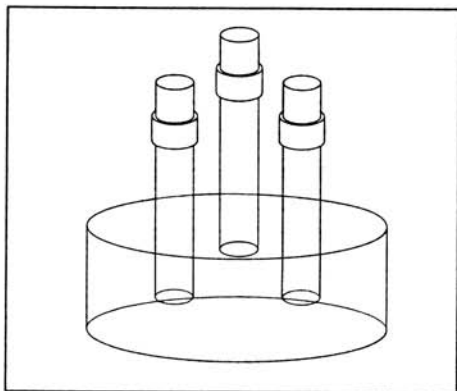


Figura 7: Un forno de redución.

sólido. Deste xeito, a súa conductividade eléctrica sofre cambios moi importantes dun lugar a outro do electrodo, debido ás fortes diferencias de temperatura. De feito é esta última variable a que determina o grao de cocción da pasta, polo que é importante conseguir no electrodo unha distribución correcta da temperatura. En particular, a posición da rexión de cocción inflúe enormemente na operación do electrodo.

Entre as vantaxes dun electrodo Soderberg fronte ós de grafito puro ou os precocidos, está o feito de que o primeiro é meirande e o seu custo é menor. Sen embargo, como os electrodos se consomen na punta, periodicamente deben ser desprazados cara a abaixo, tipicamente 0,5 m por día. Ó existí-las varas mencionadas para a cocción da pasta, este movemento vertical cara a abaixo non é posible sen escorregar tamén a virola, a cal se funde e contamina o produto final. Este é o motivo polo que os electrodos

Soderberg non se poden utilizar para a obtención de silicio metal (silicio puro que se utiliza, por exemplo, para producir aliaxes de aluminio).

Por esta razón, ata comezos desta década os electrodos precocidos eran a única alternativa para a obtención de silicio metal. Sen embargo, recentemente, un novo electrodo 'composto', o chamado ELSA, foi desenvolvido pola empresa española Ferroatlántica na súa factoría do polígono industrial de Sabón (Arteixo, A Coruña) (ver Bullón e Gallego [7]). Este electrodo consta dun núcleo de grafito que actúa como soporte mecánico central, e dunha coroa exterior limitada por unha virola, constituída por pasta tipo Soderberg que flúe contra a parte inferior do electrodo ata que se coce na zona por onde entra a corrente eléctrica a través dunhas zapatas de cobre chamadas 'placas'.

O electrodo posúe dous sistemas de escorregamento independentes: un para a virola e outro para a columna central. Por outra parte, a diferenza do que ocorre cos electrodos Soderberg, non son necesarias as varas para a cocción da pasta. Xa que logo, é posible proceder ó escorregamento do electrodo mantendo a virola fixa, de tal xeito que esta funciona simplemente como unha 'camisa de extrusión'.

Noutras palabras, este electrodo funciona de modo moi similar a un precocado. En particular, non existe a penas contaminación do produto polo aceiro da virola, o que permite utilizalos para a

obtención do silicio metal. Sen embargo o seu comportamento termoeléctrico global cambia con respecto ós electrodos Soderberg puros ou con respecto ós precocidos. A razón é que o grafito é un conductor moito mellor cá pasta e deste modo o chamado 'efecto pel' é menos importante ca nos de grafito puro, nos precocidos ou nos Soderberg clásicos.

A gran vantaxe dos electrodos compostos é o seu menor custo fronte ós precocidos. Así, cando se utilizan para a produción de silicio metal, o aforro é superior ó 12 por cento. Un inconveniente é que a operación é máis delicada porque a velocidade de escorregamento está condicionada pola cocción da pasta. En efecto, como a virola non escorrega hai que estar seguros de que a parte do electrodo que esvara baixo placas está completamente cocida, para evitar que a pasta líquida se derrame. Isto fai necesario que transcorra un tempo mínimo entre escorregamentos.

Deste modo a cocción da pasta é un punto crucial na operación deste tipo de electrodos e para coñece-la fronteira que separa a pasta crúa da cocida resultan de grande utilidade os modelos matemáticos.

En xeral, sexa cal for o tipo de electrodo, a gran complexidade no deseño e na operación fai moi conveniente utiliza-la simulación numérica. Por iso, nas últimas dúas décadas, varias se dedicaron a calcula-la distribución de temperaturas nos electrodos Soderberg (ver por exemplo [11] e as referencias bibliográficas que alí aparecen) e, máis recen-

temente, de electrodos compostos (ver Bermúdez, Bullón e Pena [2]).

A modelización termoeléctrica conduce a un sistema de ecuacións en derivadas parciais non lineal que gobernan o campo electromagnético (ecuacións de Maxwell) e a distribución de temperaturas (ecuación da calor). O encaixe entre ambas prodúcese por dous motivos: en primeiro lugar o efecto Joule, que depende da densidade de corrente, actúa como fonte na ecuación da calor. En segundo lugar, a conductividade eléctrica dos materiais que compoñen o electrodo depende fortemente da temperatura. Como antes mencionamos, a pasta Soderberg non é conductora a temperatura ambiente; sen embargo é un bo conductor, similar ó grafito puro, ás temperaturas que se acadan na punta do electrodo (arredor de 2500° C).

3.1 MODELO MATEMÁTICO

A figura 8 representa un esquema do electrodo ELSA. Unha corrente eléctrica de intensidade e frecuencia coñecidas entra a través das 'placas', especie de zapatas de cobre que arrodean o electrodo nun certo nivel. Entón baixa verticalmente e abandona o electrodo a través da súa parte inferior, onde se forma un arco eléctrico. Para coñece-la distribución da corrente no interior do electrodo, e a partir dela a da calor liberada ó seu paso (efecto Joule), debemos consideralas ecuacións de Maxwell que gobernan o campo electromagnético

$$\text{rot } H = J \quad (3.16)$$

$$\frac{\partial B}{\partial t} + \text{rot } E = 0 \quad (3.17)$$

$$\text{div } B = 0 \quad (3.18)$$

$$B = \mu H \quad (3.19)$$

$$J = \sigma E \quad (3.20)$$

onde o termo que inclúe o desprazamento eléctrico foi desprezado porque a corrente é de baixa frecuencia (50-60 Hz). As notacións utilizadas son as seguintes:

- J é a densidade de corrente
- E é o campo eléctrico
- B é a inducción magnética
- H é o campo magnético
- μ é a permeabilidade magnética
- σ é a conductividade eléctrica

Xa que estamos supoñendo que a corrente é alterna, tódolos campos terán unha dependencia espacio-temporal da forma:

$$F(x, t) = \text{Re}(e^{i\omega t} F(x)) \quad (3.21)$$

sendo ω a frecuencia angular.

$$d(x, T) c(x, T) \left(\frac{\partial T}{\partial t} + v \cdot \text{grad } T \right) - \text{div}(k(x, T) \text{grad } T) = J \cdot E \quad (3.26)$$

onde d , c e k denotan, respectivamente, a densidade de masa, a calor específica e a conductividade térmica, que tamén dependen da temperatura, e

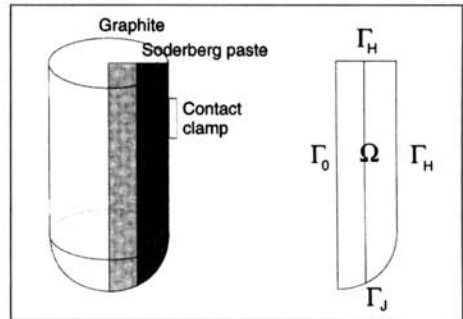


Figura 8: Esquema do ELSA.

Substituíndo estas expresións nas ecuacións de Maxwell resultan as seguintes:

$$i\omega B + \text{rot } E = 0 \quad (3.22)$$

$$\text{rot } H = J \quad (3.23)$$

$$J = \sigma E \quad (3.24)$$

Utilizando (3.19) e (3.20) é posible eliminar tódolos campos e obter unha soa ecuación para o campo magnético

$$i\omega\mu(x, T) + \text{rot} \left(\frac{1}{\sigma(x, t)} \text{rot } H \right) = 0 \quad (3.25)$$

A conductividade eléctrica depende da temperatura T . Por conseguinte, se queremos integrar esta ecuación debemos resolver simultaneamente a ecuación da calor:

v é a velocidade de escorregamento vertical debida ó consumo do electrodo. A fonte de calor no segundo membro da ecuación representa a calor liberada por

unidade de volume e unidade de tempo debido ó efecto Joule. Nótese que este termo produce un encaixe entre a ecuación e (3.25). Por simplicidade, nunha primeira etapa consideramos un modelo estacionario e desprezamos por tanto o consumo do electrodo e o seu escorregamento. Deste modo, os dous primeiros sumandos en (3.26) desaparecen.

Para completa-lo modelo e conseguir un problema matematicamente 'ben formulado' cómpre establecer 'condicións de contorno'. Isto non é unha tarefa doada, polo menos polo que respecta á ecuación (3.25). Sen embargo, o noso

obxectivo nesta etapa preliminar é simular un só electrodo, o que significa despreza-lo chamado 'efecto proximidade', debido á presenza dos outros dous electrodos; isto vainos permitir supoñer que os campos teñen simetría cilíndrica, e a partir de aí escribir unhas condicións de contorno axeitadas.

En efecto, baixo esta hipótese todos os campos son independentes da variable angular θ . Ademais, a densidade de corrente non ten compoñente na dirección tanxencial e_θ . Denotémo-lo operador rotacional en coordenadas cilíndricas, utilizando letras itálicas

$$\text{rot } H(r, z) = -\frac{\partial H_\theta}{\partial z} e_r + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial z} (r H_\theta) e_z \quad (3.27)$$

onde (r, z) pertence ó dominio bidimensional Ω que se mostra na figura 8,

Entón de (3.25) dedúcese

$$i\omega\mu H_\theta - \frac{\partial}{\partial z} \left(\frac{1}{\sigma((r, z), T)} \frac{\partial H_\theta}{\partial z} \right) - \frac{\partial}{\partial r} \left(\frac{1}{\sigma((r, z), T)r} \frac{\partial (r H_\theta)}{\partial r} \right) = 0. \quad (3.28)$$

Por outra parte, de (3.16) obtense

$$\text{rot } H(r, z) \cdot v = J \cdot v \quad (3.29)$$

onde $v = (v_r, v_z)$ denota o vector unitario normal a $\Gamma = \partial\Omega$ e dirixido cara ó exterior de Ω .

O segundo membro da ecuación precedente coñécese sobre a parte da fronteira de Ω chamada Γ_H (ve-la figura

8), porque a densidade de fluxo de corrente eléctrica a través da superficie do electrodo, ou ben é un dato (na zona en contacto coas 'placas') ou ben é nula. Ademais, un cálculo fácil amosa que o termo do primeiro membro é igual a

$$\frac{1}{r} \frac{\partial (r H_\theta)}{\partial \tau} \quad (3.30)$$

onde $\tau = (v_{zr} - v_r)$ é un vector unitario tanxente á fronteira.

A ecuación (3.29) pode ser integrada ó longo da fronteira para calcula-lo

$$s_1(u)H_\theta(s(u)) = \int_0^u s_1(v) \left(-J_r(s(v))s_2'(v) + J_z(s(v))s_1'(v) \right) dv \quad (3.31)$$

Sobre a parte da fronteira en contacto co arco eléctrico, $\Gamma_f = \Gamma \setminus (\Gamma_0 \cup \Gamma_H)$, supoñemos que a compoñente tanxencial da densidade de corrente é nula.

Facemos notar que a distribución de corrente sobre a superficie entre placas e virola influiría de modo significativo na posición da zona na que coce a pasta. Por este motivo, na práctica as placas inclúense no modelo. Tamén a virola

campo electromagnético na superficie do electrodo. Denotemos por $s(u)$ unha parametrización de Γ_H a partir dun punto P situado no eixe. Supoñamos que $\tau \cdot s(u) > 0$. Entón H_θ vén dado por

pode modelizarse; sen embargo, salvo que teña varas, como ocorre cos electrodos Soderberg, a súa influencia é desprezable para o conxunto do electrodo.

Co obxecto de escribi-la ecuación da calor en coordenadas cilíndricas, sinalamos primeiramente que, supoñendo axisimetría, o operador gradiente vén dado por

$$\text{grad} T(r, z) = \frac{\partial T}{\partial r} e_r + \frac{\partial T}{\partial z} e_z, \quad (3.32)$$

de maneira que a ecuación da calor (3.26) se escribe

$$-\frac{1}{r} \left(\frac{\partial}{\partial r} (rk((r, z), T) \frac{\partial T}{\partial r}) + \frac{\partial}{\partial z} (rk((r, z), T) \frac{\partial T}{\partial z}) \right) = \frac{1}{\sigma((r, z), T)} |\text{rot } H|^2. \quad (3.33)$$

Por simplicidade, imos considerar condicións de contorno de tipo Dirichlet en $\Gamma_T = \Gamma \setminus \Gamma_0$, é dicir, suporemos que se coñece a temperatura na superficie do electrodo.

resolve-las ecuacións do modelo termoelectrónico do electrodo. Concretamente poden utilizarse métodos de elementos finitos como o proposto en [2]. Para isto é preciso crear ámbalas formulacións débiles dos problemas eléctrico e térmico, e discretizalas aproximando o campo magnético e a temperatura mediante funcións globalmente continuas e polinómicas de grao un, en cada triángulo dunha malla do dominio de cálculo.

3.2 RESOLUCIÓN NUMÉRICA

De novo neste exemplo cómpre recorrer a métodos numéricos para

Como o problema discretizado é non lineal, para resolvelo é preciso recorrer a un algoritmo iterativo baseado en argumentos de punto fixo. Esencialmente, en cada iteración resólvense, sucesivamente, un problema electro-magnético e un problema de transmisión de calor, pero lineais en ámbolos casos.

A matriz do primeiro deles é complexa e non hermitiana. Para resolve-lo correspondente sistema numérico lineal utilízase un método de dobre gradiente conxugado, preconditionado cunha factorización incompleta da matriz de coeficientes. Sen embargo, o sistema lineal que xorde do problema térmico resólvese mediante o método de Cholesky.

O algoritmo descrito implementouse nun ordenador persoal mediante un programa escrito en linguaxe Fortran. Tamén se realizou un interface de usuario que permite introduci-los datos e visualiza-los resultados. O conxunto constitúe unha aplicación informática que pode utilizarse nun ordenador persoal baixo sistema Windows 95.

Esta aplicación emprégase correntemente para simula-lo comportamento do electrodo ELSA da compañía Ferroatlántica (Arteixo, A Coruña).

As figuras 9 a 12 amosan algúns resultados típicos. As isolíñas para a parte real do campo magnético H_θ recóllense na figura 9 mentres que a figura 10 presenta parte real da densidade de corrente. Como na zona de placas a conductividade eléctrica do grafito é moito maior cá da pasta, a corrente eléctrica 'prefire' pasar a través daquel. Sen embargo, a medida que descendemos a

temperatura aumenta e o mesmo ocorre coa conductividade eléctrica da pasta. De feito, na punta do electrodo compite co grafito pola corrente e, debido ó 'efecto pel', esta tende a saír cara á parte exterior do electrodo. Isto é moi beneficioso porque se desexa que o arco eléctrico sexa o máis grande posible.

Finalmente, as figuras 11 e 12 mostran a isolíñas da densidade de calor liberada por efecto Joule e da temperatura, respectivamente. Nótese que o efecto Joule é moi importante preto das placas porque alí a densidade de corrente é moi elevada. Tamén é importante na interface grafito/pasta, a unha altura de 0,5 m por baixo de placas, porque o efecto pel incrementa a densidade de corrente. Este fenómeno é o responsable da aparición de esforzos de orixe térmica, que poden causa-la rotura do electrodo. Estudos en curso tratan sobre este problema, utilizando modelos da termomecánica dos medios continuos.

BIBLIOGRAFÍA

- [1] Arita, Y., N. Urata, e H. Ikeuchi, "Estimation of frozen bath shape in aluminium reduction cell by computer simulation", *Light Metals*, 1978, 59-72.
- [2] Bermúdez, A., J. Bullón e F. Pena, "Thermoelectrical simulation of electrodes for reduction furnaces", en *Computational Sciences for the 21st Century*, J. Periaux *et al.* Eds., Nova York, John Wiley e Sons, 1997, pp. 471-480.

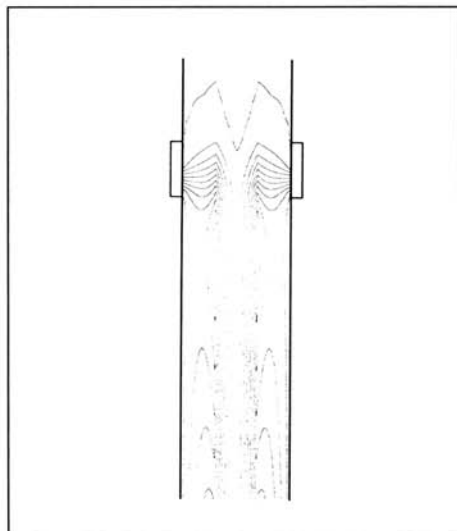


Figura 9: Campo magnético (parte real).

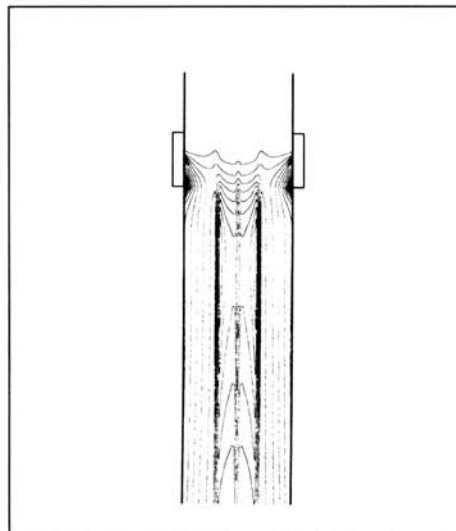


Figura 10: Dens. de corrente (parte real).

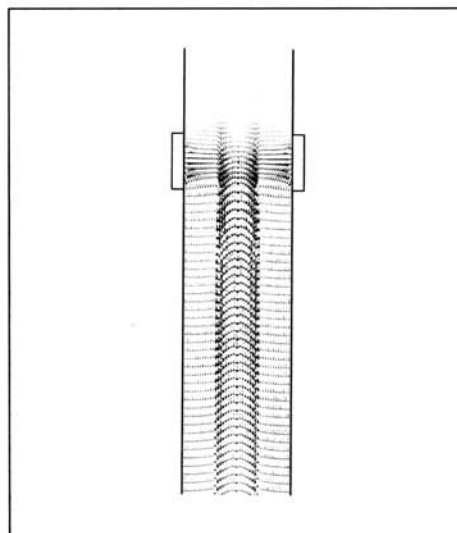


Figura 11: Efecto Joule.

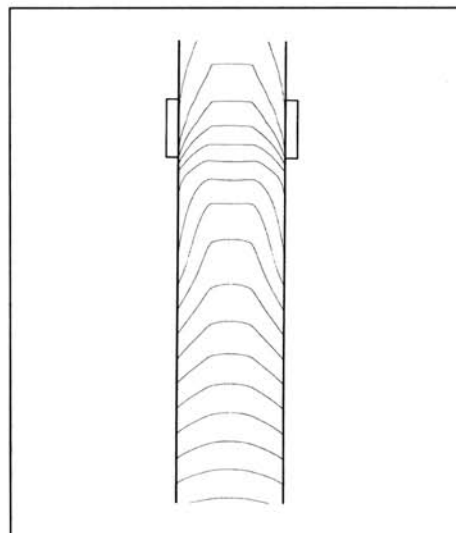


Figura 12: Temperatura.

- [3] —“A Finite element method for the thermoelectrical modelling of electrodes”, Communications in Numerical Methods in Engineering, vol 14, 1998, 581-593.
- [4] Bermúdez A., M. C. Muñiz e P. Quintela, “Numerical solution of a three-dimensional thermoelectrical problem taking place in an aluminium electrolytic cell”, Computer Meth. In App. Mech. e Eng., 106, 1993, 129-142.
- [5] —“Existence of solution for a free boundary problem in a nonlinear piecewise homogeneous medium”, Annales de l'Institut Henri Poincaré, vol. 15, núm. 4, 1998, 399-430.
- [6] Bruggemen, N. J., e D. J. Danka, “Two-dimensional thermal modelling of the Hall-Héroult cell”, Light Metals, 1990, 203-209.
- [7] Bullón, J., e V. Gallego, “New electrode for silicon metal production”, Electric Furnace Conference, Nashville, 1994.
- [8] Bullón, J., e A. Bermúdez, “Development in 1996 of the new electrode for silicon metal”, Electric Furnace Conference, Dallas, 1996.
- [9] Díaz, L. M., “La modelización matemática en la producción primaria de aluminio”, Boletín de la Sociedad Española de Matemáticas Aplicada, 3, 1993
- [10] Elliot, C., e J. R. Ockendon, Weak y Variational Methods for Free Boundary Problems, Londres, Pitman, 1985.
- [11] Grjotheim, K., e H. Kvande, Understanding the Hall-Héroult Process for Production of Aluminium, Aluminium Verlag, Dusseldorf, 1986.
- [12] Innver, R., e L. Olsen, “Practical use of mathematical models for Soderberg electrodes”, Elkem Carbon Technical Paper presented at the A.I.M.E. Conference, 1980.
- [13] Kryukowsky, V. A., e S. A. Scherbinin, “Mathematical modelling of heat transfer in pots lining materials for production of non-ferrous metals”, Light Metals, 1992, 557-562.
- [14] Sulmont, B., e G. Hudault, “Application of thermoelectric model to the investigation of reduction cell thermal equilibrium”, Light Metals, 1978, 73-86.
- [15] Taylor, M. P., e B. J. Welch, “Melt/freeze heat transfer measurements in cryolite-based electrolytes”, Metallurgical Transactions B, vol 18, 1987, 391-398.
- [16] Utne, P., “Freeze profile in side-break cells: calculations y measurements”, Light Metals, 1982, 359-371.
- [17] Wrobel, L. C., e C. A. Brebbia, Computational Modelling of Free y Moving Boundary Problems, Proc. of the 1st Int. Conf. on Computational Modelling of Free y Moving Boundary Problems, Southampton, U. K., 1991. Computatinal Mechanics Publications / de Gruyter, Southampton, 1991.

(Revista Galega do Ensino, 21, novembro, 1998)