01;03

Математическое моделирование гидродинамики и теплообмена в реакторе плазмотрона при высокотемпературной обработке дисперсных материалов

© Л.П. Холпанов, А.К. Некрасов

Институт проблем химической физики РАН, Черноголовка
Московский государственный университет инженерной экологии
E-mail: nekrasov55@yandex.ru

Поступило в Редакцию 22 марта 2010 г.

Представлена математическая модель относительного движения и теплообмена дисперсной частицы с переменным диаметром и массой и несущей вязкой несжимаемой жидкости при смешанной конвекции неоднородной гетерогенной среды в реакторе плазмотрона. Модель основана на совместном решении системы уравнений Навье–Стокса, неразрывности и энергии для несущей среды в переменных Эйлера, уравнения движения в переменных Лагранжа и нелинейного уравнения теплопроводности для дисперсной частицы. Модель позволяет рассчитывать гидродинамику и теплообмен неоднородной, гетерогенной дисперсной среды в реакторе плазмотрона, динамику относительного движения и теплообмен дисперсных частиц в несущей сплошной среде с учетом фазовых превращений при высокотемпературной обработке дисперсных материалов.

Математическое моделирование физических процессов при высокотемпературной обработке дисперсных материалов в плазмотронах с целью получения порошков повышенной диперсности вплоть до наноразмеров с заданными свойствами представляет практический и теоретический интерес [1–3]. Процесс получения перегретого пара при испарении частиц дисперсного материала и последующего охлаждения считается одним из основных. Данный процесс достаточно сложный и состоит из следующих стадий: нагрев частиц до температуры плавления; плавление; нагрев до температуры испарения; испарение; перегрев пара; охлаждение полученных продуктов.

Продолжительность отмеченных стадий обработки дисперсного материала, влияющая на производительность процесса переработки и качество конечного продукта, в значительной степени определяется интенсивностью тепло- и массообмена, зависящего от траекторий движения дисперсных частиц в неоднородной несущей высокотемпературной среде и их относительной скорости.

Сложность экспериментального исследования динамического и теплового взаимодействия дисперсных частиц с нагретым потоком газа при их относительном движении способствует активной разработке математических моделей гидродинамики и процессов тепло- и массообмена, протекающих при межфазном взаимодействии дисперсной и несущей фаз [4], а также эффективных методов их решения с целью оценки возможных путей управления процессами и качеством продукта.

В работе рассмотрены гидродинамика и теплообмен при движении неоднородной многофазной гетерогенной среды с дисперсными сферическими частицами в условиях смешанной конвекции в реакторе плазмотрона, а также нестационарный теплообмен при относительном движении дисперсной частицы и несущей вязкой несжимаемой среды с учетом всех стадий: нагрева частиц до температуры плавления; плавления; нагрева до температуры испарения; испарения; охлаждения полученных продуктов.

Реактор плазмотрона представляет собой вертикальный цилиндрический канал диаметром D и длиной L. На вход реактора сверху вниз из плазмотрона со скоростью V_{10} подается нагретый до температуры T_{10} воздух плотностью ρ_1. Одновременно с воздухом в реактор подаются сферические частицы обрабатываемого дисперсного материала диаметром d_{p0} с плотностью ρ_2. Начальные значения температуры и скорости частиц соответственно T_{20} и $\mathbf{V}_{20}$. Течение несущего газа осесимметричное, а профили скорости и температуры на входе в реактор однородные. Рассматривается случай малой объемной концентрации частиц. Основное внимание уделено локальному динамическому и тепловому воздействию несущей среды на частицы, а взаимодействие частиц между собой и их влияние на несущую среду принимались малыми. В начальный момент времени несущая среда в реакторе имеет однородную начальную температуру T_0. Наружная поверхность стенки реактора охлаждается жидкостью, имеющей постоянную по времени и однородную по поверхности температуру T_f. Термическое сопротивление стенки реактора не учитывалось.

Для нахождения абсолютной и относительной скорости дисперсных частиц и определения траекторий их движения в неоднородной гетерогенной среде применен метод, основанный на совместном решении уравнений для несущей среды, записанных в переменных Эйлера, и уравнения для дисперсной частицы, записанного в переменных Лагранжа. Этот метод подробно изложен в работах [5,6] и успешно применен для моделирования относительного движения фаз в дисперсных потоках с частицами постоянной массы и размеров как при вынужденной [6], так и при естественной конвекции [7].

Описание ламинарного движения вязкой несжимаемой несущей среды при смешанной (естественной и вынужденной) конвекции выполнено в приближении Буссинеска [8]. Относительно соответствующих масштабов (для пространства — D; для скорости — V_{10}; для времени — D/V_{10}; для давления — $\rho_1 \nu^2/D^2$; для температуры — $\vartheta_{10} = T_{10} - T_0$) векторная запись системы безразмерных уравнений имеет вид

$$\frac{\partial}{\partial t}\mathbf{V}_1 + (\mathbf{V}_1\nabla)\mathbf{V}_1 = -\nabla p + \frac{1}{\mathrm{Re}}\Delta\mathbf{V}_1 + \mathbf{n}\frac{\mathrm{Gr}}{\mathrm{Re}^2}\theta_1, \tag{1}$$

$$\mathrm{div}\mathbf{V}_1 = 0, \tag{2}$$

$$\frac{\partial}{\partial t}\theta_1 + (\mathbf{V}_1\nabla)\theta_1 = \frac{1}{\mathrm{Re\,Pr}}\Delta\theta_1, \tag{3}$$

где $\mathbf{V}_1$, t, p — соответственно безразмерные вектор скорости несущей среды, время и давление; $\mathrm{Re} = V_{10}D/\nu$ — критерий Рейнольдса; $\mathrm{Gr} = gD^3\vartheta_{10}\beta_T/\nu^2$ — критерий Грасгофа; ν — коэффициент кинематической вязкости, $\mathrm{m^2/s}$; g — ускорение свободного падения, $\mathrm{m/s^2}$; β_T — коэффициент термического расширения, 1/K; $\mathbf{n}$ — единичный вектор направления силы тяжести; $\theta_1 = \vartheta_1/\vartheta_{10}$ — безразмерная температура; $\mathrm{Pr} = \nu/a$ — критерий Прандтля; a — коэффициент температуропроводности, $\mathrm{m^2/s}$; $\vartheta_1 = T_1 - T_0$, $\vartheta_{10} = T_{10} - T_0$ — относительные температуры несущей среды, соответственно текущая и на входе в реактор, K.

Краевыми условиями для системы (1)–(3) принимались:

$$t = 0: \qquad \mathbf{V}_1 = 0, \quad \theta_1 = 0, \tag{4}$$

$$r = 0, \quad 0 \leqslant z \leqslant L/D: \qquad \partial\theta_1/\partial r = 0, \quad \partial\mathbf{V}_1/\partial r = 0, \tag{5}$$

$$z = 0, \quad 0 \leqslant r \leqslant 0.5: \qquad \theta_1 = 1, \quad \mathbf{V}_1 = 1, \tag{6}$$

$$r = 0.5, \quad 0 \leqslant z \leqslant L/D: \qquad \partial\theta_1/\partial r = -\mathrm{Bi}(\theta_1 - \theta_f), \quad \mathbf{V}_1 = 0, \tag{7}$$

$$z = L/D, \quad 0 \leqslant r \leqslant 0.5: \qquad \partial\theta_1/\partial z = 0, \quad \partial\mathbf{V}_1/\partial z = 0, \tag{8}$$

где r, z — безразмерные координаты; $\theta_f = \vartheta_f/\vartheta_{10}$ — безразмерная температура охлаждающей жидкости; $\vartheta_f = (T_f - T_0)$ — относительная температура охлаждающей жидкости, K; Bi — число Био для боковой поверхности реактора.

Скорость $\mathbf{V}_2$ дисперсной сферической частицы с зависящими от времени массой $m(\tau)$ и диаметром $d_p(\tau)$, движущейся в неоднородном поле скорости вязкой несжимаемой несущей среды, в общем случае находится из решения уравнения движения, которое в переменных Лагранжа имеет вид [9]

$$m d\mathbf{V}_2/d\tau = -0.5 C\pi r_p^2 \rho_1 w^2 \mathbf{e} + \mathbf{F} + \mathbf{\Phi} \tag{9}$$

где τ — время, s; C — коэффициент сопротивления; $r_p(\tau) = d_p/2$ — текущий радиус частицы, m; $w = |\mathbf{V}_{rel}|$ — модуль вектора относительной скорости частицы, m/s; $\mathbf{e} = \mathbf{i} \cdot \cos\alpha + \mathbf{j} \cdot \sin\alpha + \mathbf{k} \cdot 0$ — единичный вектор направления относительной скорости; $\mathbf{F}$ — вектор массовой силы, равной сумме силы тяжести и подъемной силы Архимеда; α — угол поворота от оси координат r до единичного вектора $\mathbf{e}$; $\mathbf{\Phi} = -dm/d\tau(\mathbf{u} - \mathbf{V}_2)$ — вектор импульсной силы; $\mathbf{u}$ — скорость отделяющейся при испарении массы.

Рассмотрен случай однородного испарения с поверхности сферической частицы, при котором результирующая сила действия вектора $\mathbf{\Phi}$ равняется нулю [10].

При этом скорость дисперсной частицы представляется в виде суммы скоростей несущей среды и относительной скорости частицы $\mathbf{V}_2 = \mathbf{V}_1 + \mathbf{V}_{rel}$, где $\mathbf{V}_{rel} = w\mathbf{e}$.

В работе [5] показано, что для определения скорости движения дисперсной частицы с постоянными параметрами векторное уравнение (9) приводится к двум скалярным уравнениям с начальными условиями относительно двух неизвестных w и α. В настоящей работе этот подход развит на случай движения дисперсной частицы с переменными по времени диаметром и массой. С учетом введенных выше масштабов в безразмерной записи эти скалярные уравнения имеют вид

$$\frac{dw}{dt} = -kw^2 - (A_r - U\bar{r}_p)\cos\alpha - (A_z - F_z - V\bar{r}_p)\sin\alpha + w\bar{r}_p, \tag{10}$$

$$\frac{d\alpha}{dt} = (A_r + U\bar{r}_p)\frac{\sin\alpha}{w} - (A_z - F_z + V\bar{r}_p)\frac{\cos\alpha}{w}, \tag{11}$$

$$t = 0: \qquad w = w_0, \quad \alpha = \alpha_0, \tag{12}$$

где U, V — безразмерные компоненты вектора скорости несущей среды $\mathbf{V}_1$; $A_i = (P_i + E_i)$ — параметры при $i = r, z$; $F_z = -\frac{gD}{V_{10}^2}\left(1 - \frac{\rho_1}{\rho_2}\right)$; $\bar{r}_p = \frac{3}{r_p}\frac{dr_p}{dt}$.

Параметры P_i и E_i, входящие в A_i, являются функциями локальных значений компонентов скорости несущей среды U и V, их производных $\partial/\partial r$, $\partial/\partial z$, а E_i еще и от w и α. Формулы вычисления P_i и E_i приведены в [6].

Для определения текущих координат $r(t)$ и $z(t)$ движущейся дисперсной частицы решались уравнения, также записанные в безразмерном виде

$$\frac{dr}{dt} = U + w\cos\alpha, \tag{13}$$

$$\frac{dz}{dt} = V + w\sin\alpha \tag{14}$$

с начальными условиями

$$\text{при} \;\; t = 0: \qquad r = r_0 \quad \text{и} \quad z = z_0. \tag{15}$$

Распределение температуры в дисперсной частице $T_2(r,\tau)$ при однородном по поверхности конвективном теплообмене определялось по уравнению [4,11]

$$C_{p2}\frac{\partial T_2}{\partial \tau} = \frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(\lambda_2 r^2 \frac{\partial T_2}{\partial r}\right), \quad 0 < r < r_p, \;\; \tau > 0, \tag{16}$$

с начальным

$$\text{при} \;\; \tau = 0: \qquad T_2 = T_{20} \tag{17}$$

и граничными условиями

$$\text{при} \;\; r \to 0: \qquad \frac{\partial T_2}{\partial r} = 0, \tag{18}$$

$$\text{при} \;\; r = r_p: \qquad -\lambda_2\frac{\partial T_2}{\partial r} = \mathrm{Nu}_p\frac{\lambda_1}{2r_p}(T_2 - T_1), \tag{19}$$

где r — радиус, m; C_{p2} — объемная теплоемкость материала частицы, J/m$^3\cdot$K; λ_1, λ_2 — коэффициенты теплопроводности соответственно несущей среды и материала частицы, W/mK; Nu_p — число Нуссельта для сферической частицы.

При нагреве поверхности до температуры испарения T_V условие (19) заменяется на

$$T_2 = T_V. \tag{20}$$

Движение фронта фазовых превращений при плавлении и изменение радиуса частицы при испарении определялись из условий Стефана соответственно по соотношениям

$$\rho_2 H_L \frac{dr}{d\tau} = \left(\lambda_2 \frac{\partial T_2}{\partial r}\right)_{r+0} - \left(\lambda_2 \frac{\partial T_2}{\partial r}\right)_{r-0}, \tag{21}$$

$$\rho_2 H_V \frac{dr_p}{d\tau} = \mathrm{Nu}_p \frac{\lambda_1}{2r_p}(T_2 - T_1) - \lambda_2 \frac{\partial T_2}{\partial r}, \tag{22}$$

где H_L и H_V — теплоты соответственно плавления и испарения, J/kg.

Конечно-разностное решение сформулированной выше математической модели реализовано в виде комплекса программ на Digital Visual Fortran. Алгоритм совместного численного решения взаимосвязанных частных задач модели на каждом шаге по времени включает в себя несколько этапов: решается система уравнений (1)–(7) и для несущей среды находятся поля скоростей и температуры; для известных с предыдущего шага по времени координат положения частицы r, z определяются температура, компоненты скорости несущей среды U, V и их производные $\partial/\partial r$ и $\partial/\partial z$; решается система уравнений (10)–(12) и для вектора относительной скорости частицы определяются модуль w и угол направления α; по уравнениям (13) и (14) с учетом (15) определяются новые координаты положения движущейся дисперсной частицы и строится траектория движения частицы в пространстве несущей среды; с учетом фазовых превращений решается нелинейная задача теплопроводности (16)–(22) для сферической частицы с зависящими от температуры физико-химическими свойствами и определяются распределение температуры по радиусу частицы и новый диаметр частицы при ее испарении.

Ниже приведены результаты расчетов, полученные для дисперсных частиц кремния в реакторе с диаметром $D = 20$ mm и воздушной плазме при $\mathrm{Pr} = 0.71$, $\mathrm{Bi} = \infty$, $\mathrm{Nu}_p = 2$. Начальные параметры для частиц: температура $T_{20} = 293$ K, скорость $\mathbf{V}_{20} = 0$ m/s, начальные координаты ввода частиц $r_0 = z_0 = 0$.

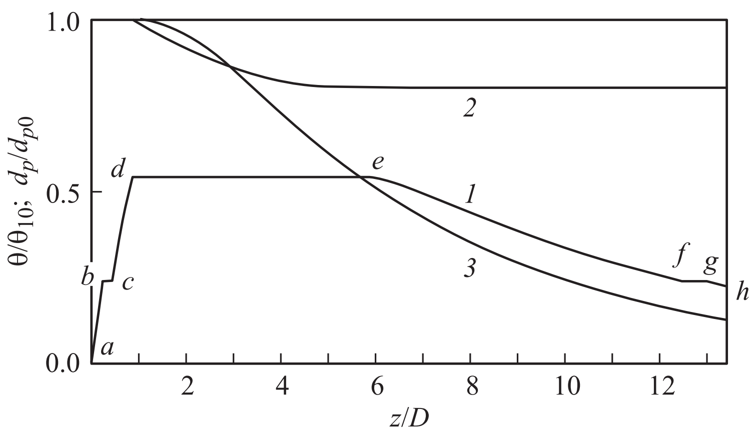

Рис. 1. Графики изменения по длине реактора температуры поверхности частицы (*1*), диаметра частицы (*2*) и температуры газа (*3*) на траектории движения частицы кремния с $d_{p0} = 100\,\mu$m при $T_{10} = 6273$ K и $V_{10} = 2.9$ m/s.

На рис. 1 по длине реактора показаны зависимости относительных значений температуры поверхности дисперсной частицы *1*, диаметра частицы *2* и температуры несущего воздуха *3* для частицы с начальным диаметром $d_{p0} = 100\,\mu$m при температуре и скорости воздуха на входе в реактор соответственно $T_{10} = 6273$ K и $V_{10} = 2.9$ m/s. Видно, что на графике изменения температуры частицы *1* выделяются участки, соответствующие различным стадиям обработки частиц: ab — нагрев до температуры плавления; bc — плавление; cd — нагрев до температуры испарения; de — испарение вещества с поверхности частицы и уменьшение ее диаметра и массы; cf — охлаждение до температуры плавления; fg — отверждение частицы; gh — дальнейшее охлаждение.

На рис. 2 приведены графики изменения по времени тех же параметров, что и на рис. 1, для полностью испаряющихся частиц кремния с начальными диаметрами $d_{p0} = 20\,\mu$m (рис. 2, a), $40\,\mu$m (b) и $60\,\mu$m (c) и при тех же режимных параметрах. На графиках отмеченные моменты времени τ_1 и τ_2 соответствуют времени нагрева до температуры испарения и времени всего процесса до полного испарения частицы. При построении графиков на рис. 2 при τ_1 увеличивался масштаб по

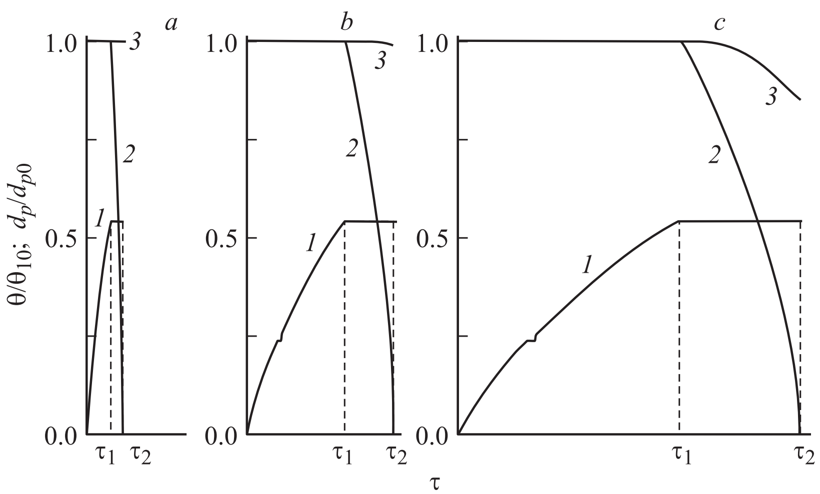

Рис. 2. Изменение по времени тех же параметров, что и на рис. 1, при тех же режимных параметрах для плазмы на входе в реактор для частиц кремния с начальными диаметрами $d_{p0} = 20\,\mu$m (a), $40\,\mu$m (b) и $60\,\mu$m (c).

оси τ: a — $\tau_1 = 0.14\,\mu$s, $\tau_2 = 1.54\,\mu$s; b — $0.62\,\mu$s, $6.16\,\mu$s; c — $1.38\,\mu$s, $15.5\,\mu$s.

Предложенная математическая модель и программный комплекс позволяют расчетным путем определять геометрические и режимные характеристики реакторов плазмотронов, предназначенных для высокотемпературной обработки дисперсных материалов с целью получения частиц с заданными свойствами, в том числе наноразмерного масштаба.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (грант № 08-08-00831-а).

Список литературы

[1] *Агафонов К.Н.* и др. // ТОХТ. 1996. Т. 30. № 1. С. 79–84.
[2] *Тимошенков С.П., Прокопьев Е.П.* и др. // ФХОМ. 2002. № 5. С. 26–32.
[3] *Нигматулин Р.И.* Основы механики и гетерогенных сред. М.: Наука, 1978. 336 с.

[4] *Сурис А.Л.* Плазмохимические процессы и аппараты. М.: Химия, 1989. 304 с.
[5] *Kholpanov L.P., Ismailov B.R.* et al. // Eng. Mech. 2005. V. 12. N 6. P. 1–11.
[6] *Холпанов Л.П., Ибятов Р.И.* // ТОХТ. 2005. Т. 39. № 2. С. 206–215.
[7] *Некрасов А.К.* и др. // ТОХТ. 2008. Т. 42. № 2. С. 152–160.
[8] *Полежаев В.И., Бунэ А.В.* и др. Математическое моделирование конвективного тепломассообмена на основе уравнения Навье–Стокса. М.: Наука, 1987. 272 с.
[9] *Новоселов В.С.* Аналитическая механика систем с переменными массами. Л.: Изд-во ЛОЛГУ, 1969. 240 с.
[10] *Crowe C.* et al. Multiphase Flows with Droplets and Particles. CRC Press, 1998. 480 p.
[11] *Волков К.Н., Емельянов В.Н.* Течения газа с частицами. М.: Физматлит, 2008. 600 с.