

等离子体反应器流场的数值模拟*

李 国 彦

(昆明工学院流体力学教研室, 1989年11月27日收到)

摘 要

本文采用颗粒轨道模型对等离子体反应器进行数值模拟。数值格式用SIMPLER法。湍流模型用简单的次网格模型。计算结果给出速度场、温度场及颗粒轨道, 对工程设计和工艺过程参数控制有参考价值。

关键词 等离子体 流场 数值模拟 湍流模型

一、前 言

等离子体用于冶金具有广阔前景, 这是由它的一系列特点所决定的。诸如: 热能高度集中; 可以方便地调整温度, 准确地控制热能流的方向; 能造成可控气氛(中性, 还原性, 氧化性); 不带给金属任何污染; 对环境污染极小。根据“电能经济”概念, 采用等离子体这样大功率、高温强化熔炼实际上是节约能耗的, 等等。

但由于冶金过程中涉及复杂的物理化学变化, 单靠实验的方法寻求等离子体反应器设计和冶金过程的最佳工作参数, 显然是很不经济的, 因而在实验研究的同时, 近年来国内外对等离子体加工过程开展了数值模拟工作^[1,2]。国内对反应器流场的数值模拟也做了不少工作^[3,4]。

等离子体流动作为多相流体流动, 有三种数值模拟模型, 即单流体、颗粒轨道和多流体模型。由于颗粒轨道对加热及熔炼过程极为关键, 本文采用颗粒轨道模型。即先计算等离子体反应器中的速度场和温度场, 再计算作为原料喷入的颗粒的运动轨道。数值格式采用著名的SIMPLER法^[5]。

二、基本方程与边界条件

现设计的等离子体反应器如图1所示意的圆锥体, 其壁为石墨材质。采用轴向喷入原料颗粒方式, 即工作气和载气与颗粒均为轴向喷入。工作气和载气均采用氮气。原料颗粒为氧化铁-氧化铜-硫化镍矿石, 颗粒直径为0.079mm, 生成物为高冰镍。

*周光炯推荐。

为简化计算,把原料颗粒的喷入考虑为环状,将问题作为轴对称处理。气体速度场和温度场的计算域为圆锥体。

在柱坐标下,气相场守恒方程通用的轴对称形式为

$$\frac{\partial}{\partial x}(\rho u \phi) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r}(r \rho v \phi) = \frac{\partial}{\partial x} \left(\Gamma_{\phi} \frac{\partial \phi}{\partial x} \right) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \Gamma_{\phi} \frac{\partial \phi}{\partial r} \right) + S_{\phi} \quad (2.1)$$

对于气体的连续方程,轴向动量方程,径向动量方程和能量方程, ϕ 分别为1, u , v , h ; Γ_{ϕ} 分别为0, μ_0 , μ_0 , μ_0/σ_h ; S_{ϕ} 分别为0,

$$-\frac{\partial p}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial x} \left(\mu_0 \frac{\partial u}{\partial x} \right) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \mu_0 \frac{\partial v}{\partial x} \right)$$

$$-\frac{\partial p}{\partial r} + \frac{\partial}{\partial x} \left(\mu_0 \frac{\partial u}{\partial r} \right) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \mu_0 \frac{\partial v}{\partial r} \right) - 2\mu_0 \frac{v}{r^2}$$

S_{ϕ} (除在近壁处计算壁面与流体的热传导外,其余处为零)。

式中, u, v : 气体在 x 和 r 方向的速度, μ_0 : 气体的有效粘性系数, σ_h : Prandtl 数, 对于氮气 $\sigma_h = 0.894$, h : 气体比焓, p : 气体压力, S_{ϕ} : 源项。

湍流模型

$$\mu_0 = \mu_l + \mu_t \quad (2.2)$$

式中, μ_l : 气体层流粘性系数; μ_t : 气体湍流粘性系数。

湍流模型采用SGS模型,即对大涡显式计算,而对小涡进行模化。在此模型中湍流应力正比于应变张量,即

$$\tau'_{ij} = 2\mu_t S_{ij} = \mu_t \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) \quad (2.3)$$

按Smagorinsky^[6]建议 $\mu_t = (c\Delta)^2 (S_{ij} S_{ij})^{1/2}$, 其中 c 和 Δ 分别为模型参数和过滤长度尺寸。

本文 $c = 0.1$, Δ 取当地网格的最大尺寸。在轴对称柱坐标下

$$\mu_t = \frac{1}{\sqrt{2}} \rho c^2 \Delta^2 (D_{11}^2 + D_{22}^2 + D_{33}^2 + 2D_{12}^2)^{1/2} \quad (2.4)$$

式中, $D_{11} = 2 \frac{\partial u}{\partial x}$, $D_{22} = 2 \frac{\partial v}{\partial r}$, $D_{33} = \frac{2}{r} v$, $D_{12} = \frac{\partial u}{\partial r} + \frac{\partial v}{\partial x}$

又, 比焓 $h = c_p T + (u^2 + v^2)/2 \quad (2.5)$

c_p : 定压比热。

再补充一个状态方程

$$p = \rho RT \quad (2.6)$$

R : 气体常数。

边界条件

1. 入口处 ($x=0$, $0 \leq r \leq R_{01}$)

$$u = u_{\max} (1 - r/R_{01})^{1/2}, v = 0$$

2. 对称轴 ($r=0$)

$$v = 0, \partial \phi / \partial r = 0 \quad (\phi \text{ 的含意如式(2.1)所解释})$$

3. 出口处 ($x=L$)

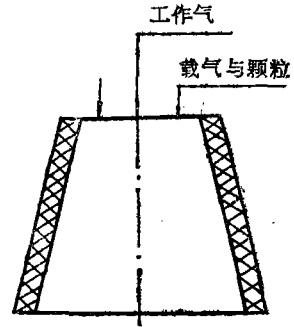


图 1

$$\partial\phi/\partial x=0$$

4. 等离子体反应器内壁

$$u=v=0, T \text{ 为测定温度.}$$

颗粒运动轨道

颗粒运动轨道在拉格朗日坐标系下进行考察。对于原料颗粒直径在几十微米以下，气流与颗粒相对速度较大的情况，阻力是影响颗粒运动的主要因素。当略去温度梯度的影响和重力项的影响，颗粒运动方程可写为

$$du_p/dt=(u-u_p)/\tau_{r,p} \tag{2.7}$$

$$dv_p/dt=(v-v_p)/\tau_{r,p} \tag{2.8}$$

式中， u_p, v_p : 颗粒轴向和径向速度。

$$\tau_{r,p} = \frac{\bar{\rho}_p d_p^2}{18\mu} \frac{c_{d,s}}{c_d} \tag{2.9}$$

式中， $\bar{\rho}_p$: 原料颗粒密度； d_p : 原料颗粒直径；

$$c_{d,s}=24/Re_p \text{ 为 Stokes 阻力系数；} \tag{2.10}$$

c_d 暂取无蒸发和燃烧时的阻力系数，按 Wallis-Kliachko 公式

$$c_d = \frac{24}{Re_p} \left(1 + \frac{1}{6} Re_p^{2/3} \right) \tag{2.11}$$

而 $Re_p = |v - v_p| d_p / \nu$ (2.12)

轨道计算用线性近似，如图 2 所示。

$$x_{p,e} = x_{p,i} + 0.5(u_{p,i} + u_{p,e})\Delta t \tag{2.13}$$

$$r_{p,e} = r_{p,i} + 0.5(v_{p,i} + v_{p,e})\Delta t \tag{2.14}$$

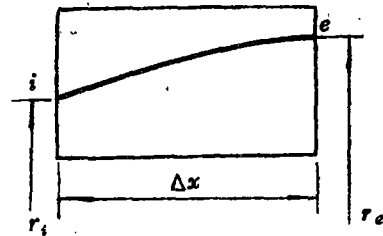


图 2

初始条件， $x=0, r=r_i$ 处

$$u_p = u_{p0}, v_p = v_{p0}$$

三、数值模拟方法

方程组(2.1) 由于具有强烈的非线性和耦合性，其计算采用迭代法是适宜的。本文采用 Patankar-Spalding 所发展的著名的 SIMPLER 算法。其特点是将各控制方程写成通用格式；引入压力校正常程，有可能把估计的初始值经过若干次迭代后，变成误差在控制范围的较准确的值。采用交错网格以避免出现物理上不真实的解。

本文所采取的计算流程是：

一 用 SIMPLER 法，经过若干次迭代(包括求解动量方程，压力方程，压力校正常程等) 解出 u, v, p 。

一 用湍流模型(2.4)解出 μ_i 及 $\mu_o = \mu_i + \mu_t$ 。

一 用求解出的 μ_o 返回到第一步，重新用 SIMPLER 法求解 u, v, p 。

一 根据能量方程及式(2.5)，(2.6)求解 h, T 。

一 在以上气相速度场和温度场的基础上解出颗粒轨道。

由于流道为圆锥，网格与固体壁面不平行，故用一系列矩形阶梯作为近似。固体壁外的粘性系数取为 10^{30} ，以保证壁面速度为零。

四、结果和讨论

流场数值模拟结果如图3所示,可以明显看到,由于锥角太大,在侧壁产生旋涡及逆流。当锥角减小之后,旋涡和逆流明显减少甚至不出现。在不同断面上速度分布轮廓如图4所示。

等温线如图5所示,显见,随轴向和径向距离增加,温度急剧下降。

颗粒运动轨道如图4所示。实线表示颗粒喷入速度倾斜向下(即 $v_{\theta 0}$ 为负值)的轨道,虚线表示颗粒喷入速度倾斜向上(即 $v_{\theta 0}$ 为正值)的轨道。很明显,这两条轨道差别不大,仅在入口处附近有明显不同。这是由于 $v_{\theta 0}$ 的数值相对而言很小,而气体速度 u 值很大,故 $v_{\theta 0}$ 不同所引起的差别很快趋于减小。

以上说明采用轴向喷入原料颗粒方式时,当喷入速度不太大时,其数值大小与方位对颗粒运动轨道影响并不大。这与径向喷入方式的

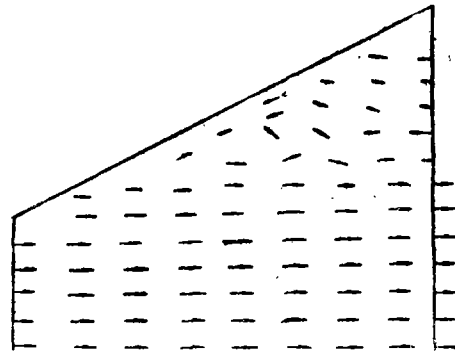


图 3

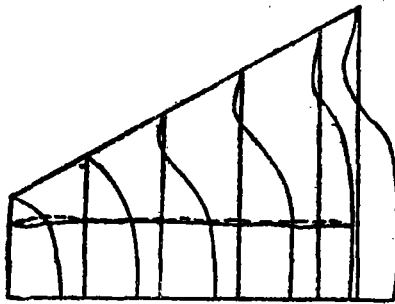


图 4

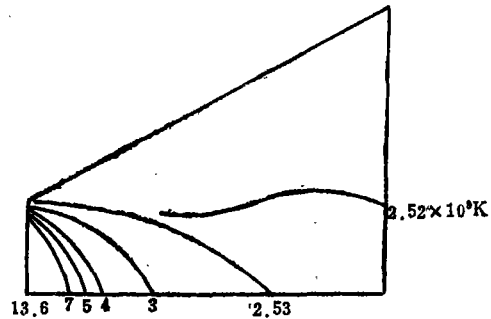


图 5

情况^[3]大不相同。考虑到不同喷入方式对有效加热的影响,应将温度场与颗粒运动轨道结合起来考察,以便寻求较佳的喷入方式与速度、方位。

本文计算结果在数量级和趋势上与[3,4,7]一致。当然由于所取计算域不同,颗粒喷入方式相异,考虑因素不一样,计算模型有区别,数值结果也有明显差异。

数值模拟仅是初步的,应进一步研究颗粒熔化、蒸发等情况以及化学变化等。同时亦可看出数值模拟对工程设计与工艺过程参数控制是有实际价值的。

参 考 文 献

- [1] 朱清文, 等离子体技术几个方面的研究进展, 力学进展, 16, 2 (1986), 281—291.
- [2] Boulos, M. L., Inductively coupled R. F. plasma, *Pure and Appl. Chem.*, 57, 9 (1985), 1321—1352.
- [3] 陈照, 等离子体反应器中颗粒加热与运动的数值模拟, 力学学报, 19, 1 (1987), 52—60.

- [4] 赵国英、朱清文, 等离子体氯化氧化法钛白反应器流场的数值模拟, *力学学报*, 19, 4 (1987), 342—351.
- [5] Patankar, S. V., *Numerical Heat Transfer and Fluid Flow*, Hemisphere Publishing Corporation (1980).
- [6] Fenziger, J. H., *AIAA J.*, 15, 9 (1977), 1261—1267.
- [7] KL-Kaddah, N., J. Mckelliget and J. Szekely, Heat transfer and fluid flow in plasma spraying, *Metallurgical Transactions*, 15B, 3 (1984), 59—70.

Numerical Simulation of the Flow Field in a Thermal Plasma Reactor

Li Guo-yan

(*Kunming Institute of Technology, Kunming*)

Abstract

A numerical simulation is presented for a thermal plasma reactor with particle-trajectory model in this paper. Turbulance is considered by using simple SGS model. The governing equations are solved by means of the algorithm of SIMPLER. The calculated results give the velocity and the temperature fields within plasma reactor, and the trajectories of the injected particles.

Key words plasma, flow field, numerical simulation, turbulence model