

УДК 532.517.2

DOI: 10.17223/00213411/64/2-2/40

С.А. КАРПОВ¹, В.Г. БУТОВ², В.А. СОЛОНЕНКО², В.Н. БРЕНДАКОВ¹

ЧИСЛЕННОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ТУРБУЛЕНТНОГО ТЕЧЕНИЯ В ПЛАЗМЕННОМ РЕАКТОРЕ С УЧЕТОМ ХИМИЧЕСКИХ РЕАКЦИЙ

Выполнено численное моделирование течения потока газа в рабочей зоне плазменного реактора. В созданной модели учитывается влияние химических реакций, протекающих в аппарате, на поля скорости и температуры, формируемых в верхней части реактора. Показано, что в исследуемой зоне аппарата располагаются интенсивные циркуляционные зоны, которые могут оказывать существенное влияние на плазмохимические процессы, реализуемые в аппарате. Достоверность полученных результатов обеспечивается выбором проверенных численных методов и использованием при математическом моделировании известных математических пакетов программ, выполнением тестовых расчетов и сравнением с известными решениями.

Ключевые слова: плазменный реактор, турбулентность, массовая скорость, численный метод.

Введение

Плазменный реактор является сложным техническим решением. Это аппарат, который применяется на пересечении двух фундаментальных наук – химии и физики. В нем используется низкотемпературная плазма для осуществления необходимых плазмохимических и металлургических процессов.

Главная задача, стоящая перед плазмохимическим реактором, – это выполнение процесса смешения выбранных реагентов и получение при этом на выходе из аппарата нового продукта. При работе оборудования происходит минимальное количество потери тепла, одновременно с этим между реагентами выполняется интенсивный обмен теплом и массой исходного вещества.

В настоящей работе проводится математическое моделирование процесса турбулентного течения в рабочей зоне плазменного реактора. При постановке задачи сделана попытка учесть влияние химических реакций, протекающих в рассматриваемом объеме, на гидродинамическую обстановку, складывающуюся в плазменном реакторе.

Математическая модель

На рис. 1 представлена цилиндрическая часть реактора с верхней крышкой. Здесь же обозначены условия ввода исходных реагентов.

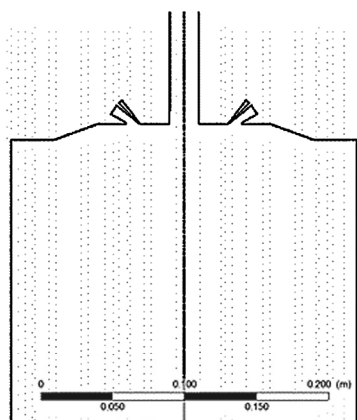


Рис. 1. Схема верхней части реактора

Для моделирования процессов и выполнения расчетов в активной зоне реактора использовался программный комплекс ANSYS CFX, в рамках которого была построена конечно-объемная модель, воспроизводящая геометрию реактора и позволяющая проводить комплексные расчеты многокомпонентной газовой смеси и полидисперсных конденсированных частиц с учетом пространственного турбулентного характера течения.

Запишем уравнения математической модели течения в рабочей зоне реактора, реализованные в комплексе ANSYS CFX, обоснование которых излагается в работах [1–4]. Модель процесса выполнена на основе законов сохранения, используемых в газовой динамике и уравнений химической кинетики. Для этого к элементарному объему реагирующей смеси применяются законы сохранения массы, импульса, энергии и закон сохранения числа атомов.

Используем в уравнениях эйлеровы переменные x_i , $i = 1, 2, 3$, вектор скорости U с компонентами u_i ($i = 1, 2, 3$). Течение также характеризуется термодинамическими параметрами: давлением p , плотностью газовой смеси ρ , температурой T , концентрацией компонент c_i .

Полидисперсный ансамбль твердых частиц характеризуется скоростями V_i с компонентами v_{ij} , $j = 1, 2, 3$, температурой частиц i -й фракции T_i , распределенной плотностью $\rho_{si} = n_{si}(x, t) m_i$, где m_i – масса частицы, n_{si} – концентрация частиц.

Уравнение неразрывности для осредненных по времени величин газовой фазы имеет вид

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_k} (\rho \cdot u_k) = J. \quad (1)$$

Здесь J – массовая скорость химической реакции. В этой формуле и далее предполагается, что по повторяющимся индексам проводится суммирование.

Уравнение сохранения импульса записывается следующим образом:

$$\frac{\partial (\rho \cdot u_i)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_k} (\rho \cdot u_k u_i) = -\frac{\partial p}{\partial x_i} + g_i + \sum_{j=1}^N C_{Rj} \rho_{sj} (v_{ij} - u_i) + \frac{\partial \tau_{ik}}{\partial x_k}, \quad (2)$$

где g_i – массовая сила в i -м направлении, в случае расчета в реакторе $g_1 = g_2 = 0$, $g_3 = \rho g$ (g – ускорение силы тяжести); C_{Rj} – коэффициент силового взаимодействия между газовой фазой и частицами.

Тензор вязких напряжений выбран в следующем виде:

$$\tau_{ij} = \mu \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) - \frac{2}{3} \mu \delta_{ij} \frac{\partial u_k}{\partial x_k}. \quad (3)$$

Здесь $\mu = \mu(T, c_i)$ – коэффициент вязкости; $\delta_{ij} = 1$ для $i = j$ и $\delta_{ij} = 0$ при $i \neq j$.

Уравнение сохранения энергии имеет вид

$$\frac{\partial (\rho h_0 - p)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_k} (\rho u_k h_0) = \frac{\partial}{\partial x_k} (u_i \tau_{ik}) + \frac{\partial}{\partial x_k} \left(\lambda \frac{\partial T}{\partial x_k} \right) + \sum_{i=1}^N C_{Li} \rho_i (T_i - T), \quad (4)$$

где $h_0 = h + V^2/2$, h – полная энтальпия и энтальпия смеси, V – модуль вектора скорости газа; C_{Li} – коэффициент теплового взаимодействия между газовой фазой и конденсированными частицами.

Уравнение энергии для частиц i -й фракции записывается вдоль траектории частиц:

$$m_i c_s \frac{dT_i}{dt} = C_{Li} (T_i - T) + l_m \frac{dm_i}{dt}. \quad (5)$$

Здесь m_i , c_s , l_m – масса, теплоемкость и удельная теплота частиц.

Энтальпия h смеси выражается через удельные энтальпии компонентов h_i :

$$h = \sum_{i=1}^N Y_i h_i(T), \quad (6)$$

где

$$h_i(T) = h_i^0 + \int_0^T c_{pi}(T) dT, \quad (7)$$

Y_i , c_{pi} , h_i^0 – массовая доля, удельная теплоемкость и стандартная теплота образования i -го компонента смеси.

Уравнение состояния смеси идеальных газов с молярной массой смеси

$$p = \rho R T \sum_{i=1}^N \frac{Y_i}{M_i}, \quad (8)$$

где M_i – молярная масса i -й компоненты смеси; R – универсальная газовая постоянная.

Для описания турбулентного течения использована модель Д.К. Уилкокса [1], называемая k - ω -моделью, определяемой следующими двумя уравнениями.

Уравнение для кинетической энергии турбулентных пульсаций:

$$\frac{\partial(\rho k)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i}(\rho u_i k) = \frac{\partial}{\partial x_j}(u_i \tau_{ij}) - \beta^* \rho \omega k + \frac{\partial}{\partial x_i} \left((\mu + \sigma^* \mu_T) \frac{\partial k}{\partial x_i} \right). \quad (9)$$

Уравнение для удельной скорости диссипации этой энергии:

$$\frac{\partial(\rho \omega)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i}(\rho u_i \omega) = \gamma (u_i \tau_{ij}) - \beta \rho \omega^2 + \frac{\partial}{\partial x_i} \left((\mu + \sigma^* \mu_T) \frac{\partial \omega}{\partial x_i} \right). \quad (10)$$

Здесь k – кинетическая энергия турбулентных пульсаций; ω – удельная скорость диссипации этой энергии.

Турбулентная вязкость определяется при помощи соотношения:

$$\mu_T = \gamma^* \frac{\rho k}{\omega}. \quad (11)$$

В этих уравнениях имеется ряд коэффициентов. Д.К. Уилкоксом показано, что значения этих констант следующие:

$$\beta = 3/40, \beta^* = 9/100, \gamma = 5/9, \gamma^* = 1, \sigma = 0.5, \sigma^* = 0.5. \quad (12)$$

Уравнение сохранения массы компонентов Y_k имеет вид

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho Y_k) + \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\rho u_i Y_k - \rho D \frac{\partial Y_k}{\partial x_i} \right) = J_k, \quad k = 1, 2, \dots, N. \quad (13)$$

Здесь D – коэффициент молекулярной диффузии; J_k – массовая скорость образования (расходования) в ходе химической реакции k -й компоненты газовой смеси.

Плотность молекулярного потока компонента смеси описывается законом Фика. Считая, что коэффициент диффузии D одинаков для всех компонентов смеси, закон Фика имеет вид

$$\rho_k \eta_{ki} = -\rho D \frac{\partial Y_k}{\partial x_i}, \quad (14)$$

где η_{ki} – скорость диффузии k -го компонента смеси в направлении оси координат i .

Произвольная химическая реакция с обозначением символов реагирующих веществ A_j и стехиометрических коэффициентов ν_j и ν_j' записывается так:

$$\sum_{j=1}^N \nu_j A_j \rightarrow \sum_{j=1}^N \nu_j' A_j. \quad (15)$$

Массовая скорость J_k определяется уравнением:

$$J_k = M_k (\nu_j' - \nu_j) \left(A T^\beta e^{-\frac{E_A}{RT}} \right) \prod_{i=1}^N c_i^{\nu_i^*}. \quad (16)$$

Здесь E_A – энергия активации; A – предэкспоненциальный множитель; M_k – молярная масса; $c_k = \rho Y_k / M_k$; β – показатель температуры; ν_k^* – порядок реакции по k -му исходному реагенту.

Для определения общего характера движения частиц можно воспользоваться следующими соотношениями из работы [5]:

$$m \frac{\partial u}{\partial t} = -mg + \frac{1}{2} \lambda F \rho_0 (u - w)^2, \quad (17)$$

где m , ρ_0 – масса и плотность частицы; λ , F – коэффициент сопротивления и площадь поперечного сечения; u , w – скорости частицы и газа соответственно.

Из этого соотношения можно определить скорость витания частицы как

$$u_b = \sqrt{\frac{4gd(\rho - \rho_0)}{3\lambda\rho_0}}. \quad (18)$$

В свою очередь, коэффициент сопротивления λ можно представить как зависимость от локального числа Re_0 вида

$$\lambda = \begin{cases} \frac{24}{Re_0}, & Re_0 \ll 1, \\ \frac{24}{Re_0} (1 + 0.15Re_0^{0.687}), & Re_0 < 1000, \\ 0.44, & Re_0 > 1000. \end{cases} \quad (19)$$

Таким образом, решая нелинейное уравнение, можно определить скорость витания для частицы заданной плотности и диаметра d .

Анализ полученных результатов

Для примера визуализации выполненных расчетов на рис. 2 и 3 представлены распределения линий тока и вектора скорости газа в верхней части реакционной зоны плазменного реактора.

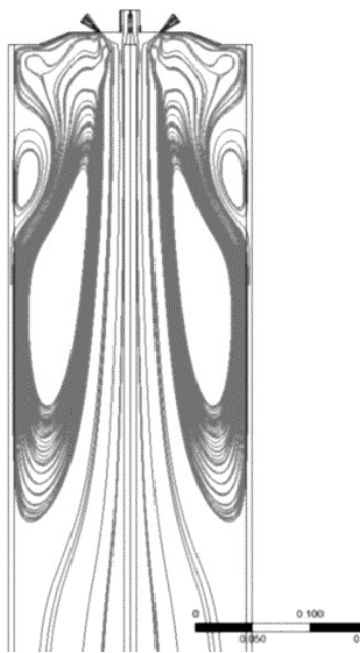


Рис. 2. Распределение изолиний функции тока газа в верхней части реакционной зоны (проекция в вертикальной плоскости симметрии)

Из рис. 2 видно, что в аппарате организуются вихревые структуры большой протяженности. В верхней части рассмотренной геометрии наблюдаются небольшие рециркуляционные области с вращением против часовой стрелки. Такие структуры могут оказывать негативное влияние на устойчивость формирования центрального ядра потока газа, в котором происходят плазмохимические процессы.

Для более удобного представления пространственной структуры течения рабочая зона реактора была разбита перпендикулярными друг к другу меридиональными плоскостями, а визуализация поля векторов скорости газа проводилась в плоскостях поперечных сечений в клиновидных окрестностях.

Результаты численного моделирования для различных вариантов режимов течения показывают, что в верхней части реактора образование вихревых структур неизбежно при любом способе подачи исходных реагентов.

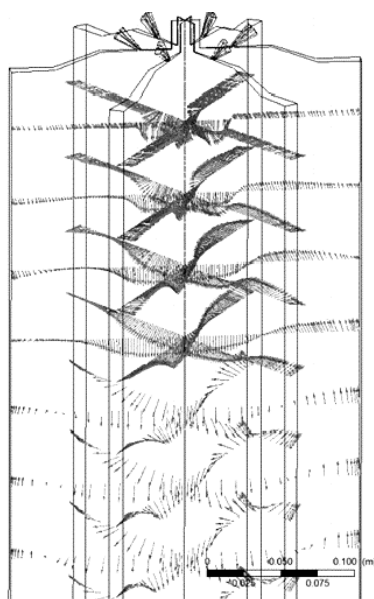


Рис. 3. Вектор скорости газа в верхней части реакционной зоны

На рис. 4 представлено характерное распределение поля температуры газа в верхней части рассматриваемой области аппарата. Как видно из рисунка, в результате устойчивых крупных вихревых структур происходит существенный нагрев в области боковых стенок плазменного реактора. Постоянное охлаждение верхней крышки реактора, предусмотренное конструктивными особенностями аппарата, связано с тем, что в этой области создается на входе поток плазмы. Интенсивный перенос тепла к боковой стенке реактора может стать причиной нарушения герметичности всего реактора в целом. Полученные результаты должны быть тщательно проанализированы и при необходимости выработаны защитные меры, позволяющие обеспечить безопасный режим работы плазменного реактора.

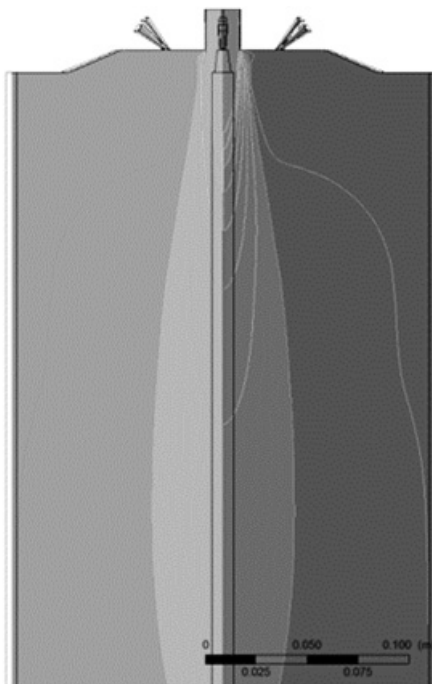


Рис. 4. Распределение поля температуры газа в под-областях верхней части реакционной зоны

Заклучение

Созданная математическая модель работы плазменного реактора и численные расчеты, выполненные по этой модели, позволили получить новые данные по организации гидродинамической и тепловой обстановке в рабочей зоне аппарата. Полученная информация может быть использована при проектировании новых перспективных конструкций аппаратов такого типа. Эти данные можно учитывать при оценки стабильности и безопасности работы существующих конструкций плазменных реакторов.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Уилкоккс Д. К. // Аэрокосмическая техника. – 1989. – № 11. – С. 47–60.
2. Турбулентные течения реагирующих газов: пер. с англ. / под ред. П. Либби, Ф. Вильямса. – М.: Мир, 1983. – 328 с.
3. Канторович Б. В., Миткалинный В. И., Делягин Г. Н., Иванов В. М. Гидродинамика и теория горения потока топлива. – М.: Металлургия, 1971. – 488 с.
4. Сполдинг Д. Б. Горение и массообмен. – М.: Машиностроение, 1985. – 240 с.
5. Барский М. Д. Фракционирование порошков. – М.: Недра, 1980. – 327 с.

Поступила в редакцию 20.10.2020.

¹ Северский технологический институт Национального исследовательского ядерного университета «МИФИ», г. Северск, Россия

² Национальный исследовательский Томский государственный университет, г. Томск, Россия

Карпов Сергей Алексеевич, к.ф.-м.н., руководитель СТИ НИЯУ «МИФИ», e-mail: sakarpov@mephi.ru;

Бутов Владимир Григорьевич, д.ф.-м.н., профессор НИ ТГУ, e-mail: bvg@niipmm.tsu.ru;

Солоненко Виктор Александрович, к.ф.-м.н., доцент НИ ТГУ, e-mail: sva@niipmm.tsu.ru;

Брендаков Владимир Николаевич, д.ф.-м.н., доцент СТИ НИЯУ «МИФИ», e-mail: vnbrendakov@mephi.ru.

S.A. KARPOV¹, V.G. BUTOV², V.A. SOLONENKO², V.N. BRENDAKOV¹

NUMERICAL STUDY OF TURBULENT FLOW IN A PLASMA REACTOR TAKING INTO ACCOUNT CHEMICAL REACTIONS

In this work, a numerical simulation of the gas flow in the working zone of a plasma reactor is performed. The created model takes into account the influence of chemical reactions occurring in the apparatus on the field of velocity and temperature formed in the upper part of the reactor. It is shown that intense circulation zones are located in the investigated zone of the apparatus, which can have a significant effect on the plasma-chemical processes in the apparatus. The reliability of the results obtained is ensured by the choice of proven numerical methods and the use of known mathematical software packages in mathematical modeling, by performing test calculations and comparison with known solutions.

Keywords: *plasma reactor, turbulence, mass velocity, numerical method.*

¹ Seversk Technological Institute National Research Nuclear University «МЕРФИ», Seversk, Russia

² National Research Tomsk State University, Tomsk, Russia

Karpov Sergey Alekseevich, Ph.D., Head of STI NRNU «МЕРФИ», e-mail: sakarpov@mephi.ru;

Butov Vladimir Grigorievich, Doctor of Physical and Mathematical Sciences, Professor NR TSU, e-mail: bvg@niipmm.tsu.ru;

Solonenko Viktor Alexandrovich, Ph.D., Associate Professor NR TSU, e-mail: sva@niipmm.tsu.ru;

Brendakov Vladimir Nikolayevich, Doctor of Physical and Mathematical Sciences, Associate Professor of STI NRNU «МЕРФИ», e-mail: vnbrendakov@mephi.ru.