# 氯化法钛白高频等离子体发生器内流场数值模拟

### 张 森 许厚文

( 中国科学院化工冶金研究所 )

### 范致鹏

(中国科学院力学研究所)

### 摘 要

本计算中,将数值模拟应用于高频等离子发生器内流场预示.采用ω--φ方法.另外计算区域被分成几部分,以克服计算区域不规则的困难。对第三维速度进行了计算,得到一个独特的流动模型。此模型与实验数据基本上是吻合的。

关键词:数学模拟 钛白 等离子 流场 氯化

### 一、前 言

钛白(TiO<sub>2</sub>)是重要的化工原料之一。氯化法钛白生产过程是四氯化钛(TiCl<sub>4</sub>)同氧 气(O<sub>2</sub>)在高温下进行反应而生成钛白。其中氧气利用等离子体加热,图1示高频等离子发

生器示意图。为了深入了解氧化炉的入口边界条件,我们对 等离子发生器内的流场进行了数值模拟,得到一些重要结 果。已编制计算机程序,可应用于高频等离子体发生器的放 大设计。

目前,国内外对高频等离子发生器的数值计算都只限于 氩气,氢气等。对大流量,旋转进气的高频纯氧等离子体发 生器的数值计算还未见报导。本计算就是针对这种特殊工况 进行模拟和探讨的。

本计算是在轴对称二维平面上进行的,采用 ω-φ 方法 求解。利用分划子区域的方法克服计算区域不规则的困难。 同时考虑到第三维旋转速度分量 V<sub>8</sub> 对发生器内流动的重大 影响,增加了对V<sub>8</sub> 分布的计算,得出了由于V<sub>8</sub> 存在所产生 的独特的湍流流场的分布状况。由电磁场方程的处理采取同

本文于1987年10月21日收到,1987年11月24日收到修改稿。

2



**文献**[3]相似的方法,即将电磁力当做彻体力,电磁热认为是一个热源,被加到能量 方 程的 欧姆加热项中。

# 二、基本方程

简化后的高频等离子体发生器计算区域如图 2 所示,划分为两个直壁段子区域,均采用 柱坐标系进行计算。计算中,我们只考虑定常的湍流流场分布,所有的物理量均为时均值, 由连续方程、运动方程和能量方程耦合一维麦克斯韦电磁场方程组求出。

基本方程表示为一个统一形式:  $a\left[\frac{\partial}{\partial z}\left(\Phi\frac{\partial \varphi}{\partial r}-\right)\frac{\partial}{\partial r}\left(\Phi\frac{\partial \varphi}{\partial z}\right)\right]-\frac{\partial}{\partial z}\left[rb\frac{\partial(c\Phi)}{\partial z}\right]$ 0,028m 0.075m Ĩ  $-\frac{\partial}{\partial r}\left[ rb\frac{\partial(c\Phi)}{\partial r} \right] + rS\Phi = 0$ 0\_03m 对应于不同变量Φ,系数a、b、c及源项So列于表 I ₩ι 0.31m ሐ ε rзVз Π 0 1/ρr<sup>2</sup> 1 I I Γh.eff Γk,eff μeff 1 r <sup>2</sup> 1 Ь Γe. eff sφ -(P-Q<sub>r</sub>)  $G_k$ -C<sub>0</sub>ρε ε/k(C<sub>1</sub>G<sub>k</sub>-C<sub>2</sub>ρε)  $\partial \rho/\partial \theta$ 上表中:  $S_{w} = -r \left\{ \frac{\partial}{\partial z} \left( \frac{\rho V_{3}^{2}}{r} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left( \frac{V_{1}^{2} + V_{2}^{2}}{2} \right) \frac{\partial \rho}{\partial r} \right\}$ 图 2 计算域  $-\frac{\partial}{\partial r} \left( \frac{V_1^2 + V_2^2}{2} \right) \frac{\partial \rho}{\partial z} + \frac{\partial F_r}{\partial z} \right\}$  $G_{k} = 2\mu_{t} \left\{ \left[ \frac{\partial V_{1}}{\partial z} \right]^{2} + \left[ \frac{\partial V_{2}}{\partial r} \right]^{2} + \left[ V_{2}/r \right]^{2} \right\}$  $+ \mu_{t} \left\{ \left[ \frac{\partial V_{2}}{\partial r} + \frac{\partial V_{1}}{\partial r} \right]^{2} + \left[ r \frac{\partial (V_{3}/r)}{\partial r} \right]^{2} + \left[ r \frac{\partial (V_{3}/r)}{\partial r} \right]^{2} \right\}$ 

电磁场方程由一维麦克斯韦方程组导出:

 $\begin{cases} \frac{dE_{\tau}}{dr} + \frac{E_{\tau}}{r} = -\xi w H_z S inx \\ \frac{dH_z}{dr} = -\sigma E_{\tau} cosx \\ \frac{dx}{dr} = \sigma \frac{E_{\tau}}{H_z} sinx - \xi w \frac{H_z}{E_{\tau}} cosx \end{cases}$ 

其中:  $x = \varphi_H - \varphi_E$ 

电磁力F,和能量方程源项P,Q由下式求得:

$$F_r = -\xi \sigma E_r H_z \cos x$$

 $P = \sigma E_y$ 

体积辐射损失Q,利用下列经验公式算出:

当T≥9500°K时

 $Q_r = 5.6 \times 10^{-3} (T - 9500) + 0.181 \times 10^{-3} (T - 9500)^2$ 

## 三、边界条件的确定

计算区域划分为二个子区域,相邻子区域在交界处互相覆盖,这种人为边界条件由内插 法得到。自然边界条件按常规方法确定,现分述如下:

3.1 氧气入口边界条件

等离子发生器的两股氧气是在常温下分别沿石英管外壁切向送入。旋转吹进的气体均匀 向下推进,轴向速度取平均值,径向速度为零。第三维旋转速度 V<sub>8</sub> 采取内壁到中心轴的 线 性分布,内壁处速度最大。

#### 3.2 **固壁边界条件**

在固璧上各方向速度为零。流函数甲为一常数,由进口处值确定。涡量ω由下式计算[1]:

$$\frac{\omega}{r}\Big|_{B} = \frac{2(\varphi_{NB} - \varphi_{B})}{r_{B}^{2}\rho(r_{NB} - r_{B})^{2}}$$

其中: 脚标B,NB代表壁面节点及其相邻内点。

对于固壁热焓 h 的边界条件,区别于用水冷却的装置,发生器是在大气中自然冷却,外 壁温度与大气温度相差很大。计算中考虑了外壁对空气的散热,由下式解出内外壁温度;

$$\alpha_1(T_{\not P_1} - T_1) = \frac{K}{\bigtriangleup r}(T_1 - T_2) = \alpha_2(T_2 - T_0)$$

其中:  $\alpha_1\alpha_2$ 给热系数, K传热系数, T<sub>0</sub> = 298°K

3.3 中心轴边界条件

(1)速度:  $V_1 = \frac{1}{r\rho} \frac{\partial \varphi}{\partial r}$ ,  $V_2 = V_3 = 0$ 

(2)温度:  $\frac{\partial T}{\partial r} = 0$ 

(3)涡量和流函数: φ=0

$$\frac{\omega}{r} = -\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left( \frac{1}{r\rho} \frac{\partial \varphi}{\partial r} \right)$$

#### 3.4 电磁场的边界条件

电磁场方程的边界条件是在灯具中心线处建立的。本计算只对第二区计算,忽略电磁场 对第一区的影响。 在r=0:

 $\begin{cases} E_{\tau} = 0, & \frac{dE_{\tau}}{dr} = \frac{1}{2} \xi \omega H_{z} \\ H_{z} = H_{c}, & \frac{dH_{z}}{dr} = 0 \\ x = -\frac{\pi}{2}, & \frac{dx}{dr} = 0 \end{cases}$ 

中心线磁场强度 H。由下式得到:

$$H_{c} = \frac{H_{\infty}}{2} \left[ \cos \beta_{2} - \cos \beta_{1} \right]$$

其中: β2β1分别是中心线点到线圈两端所张的角度。H∞是无限长螺线管中磁场强度。

# 四、氧气电导率o和定压比热Cp数值的确定

根据文献〔2〕分别提供的氧气的电导率σ和定压比热 C<sub>p</sub>在不同温度下的实验数据,提出 下列经验公式:

电导率
$$\sigma = \begin{cases} 4.6252 \times 10^{6} \times \exp(-6.3665 \times 10^{4}/T) & T \leq 7000 \\ 4.05 \times 10^{6} \times \exp(-2.7108 \times 10^{4}/T) & T > 7000 \end{cases}$$
  
定压比热  $C_{p} = \begin{cases} 0.23809 + 1.7931 \times 10^{-5}T & T \leq 8000 \\ -3.0269 + 4.08429 \times 10^{-4}T & T > 8000 \end{cases}$ 

五、计算过程及一些专门化处理

(1) 计算耗散于灯具的总功率 $P_1$ 时,如果 $P_1$ 在与输入总功率 $P_1$ 。(16KW) 相差1%,则利用下式估算 $H_{\infty}$ 的新值:

$$[H_{\infty}]_{\text{NEW}} = [H_{\infty}]_{\text{OLD}} \sqrt{\frac{P_{t_0}}{P_t}}$$

然后通过新的边界条件求解电磁场方程组,并重新求得Pt。

(2) 解得局部耗散功率和彻体力,就可以解出流动方程和能量方程。我们是采用交替方 向逐行迭代法求解流场。

(3) 收敛判据为:

$$\frac{\frac{\max x}{i j} \left| \phi_{n ew} - \phi_{o l d} \right|}{\frac{\max x}{i j} \left| \phi_{n ew} \right|} < \varepsilon_{\phi}$$

ε<sub>b</sub>为事先给定的收敛精度(=0.01)

(4) 松驰方法为亚松驰:

$$\phi_{n \circ w} = \phi_{OLD} + \alpha_{\phi}(\phi^* - \phi_{OLD})$$

 $0 < \alpha_{\varphi} < 1$  为松驰因子,  $\phi^*$ 是每次求解差分方程的计算值。

# 六、结果与讨论

图 3 是发生器内流线圈。在感应线圈前部及后部分别有两个迴流区。第一个迴流区发生 于等离子体发生器边氧入口处附近的中心区。氧气采用旋转进气,气流中心产生一个低压区, 形成迴流。第二个迴流区发生于感应线圈附近的中心区,这是由磁泵效应引起的。文献〔3〕 中M.I.Boulos 计算氩气等离子体两维流动的数学模型时,发现在感应线圈的两端分别产生 一个迴流。当气流量很大时,下游的迴流消失。本计算证实了这一点。



图 4 是发生器温度 <sup>T</sup> 的分布。由于电磁场的影响,线圈周围的温度上升至 8000°K~ 9000°K,这与力学所的实验数据基本吻合。而且高温区的特殊形状也与文献〔3〕的计算基本 一致。

图 5 是气流旋转速度分量<sup>∨</sup><sup>3</sup>的分布情况。可以看出电磁场对<sup>∨</sup><sup>3</sup>有影响,使进入氧化炉 的气流也是旋转的,当氧化炉数值模拟时计算<sup>∨</sup><sup>3</sup>就是必不可少的了。

通过以上的几个重要物理量的分析。本计算所假定的模型是可行的,对实际工况的模拟 也是可信的。此项工作对今后更大规模生产试验装置工况的模拟是有很大意义的。

#### 参考文献

- [1] Gosman, A.D., Pun, W.M., Runchal, A.K. and Spalding, D.B., Heat and mass Transfer in Recirculating flnws, Academic press (1969).
- [2] Yos, J.M., Transport Proporties of Nitrogen, Hydrogen, Oxygen and air to 30000 "K. AVCO.RAD-TM-83-7 (1963), PB. 165058.
- [3] Boulos, M.I. IEEE transaction on plasma Science, Vol. PS-4, No.1, March 1976
- 〔4〕王应时,力学学报,1980.1.
- [5] 高丽君、吴文东、王应时,工程热物理学报,第三卷,第二期,1982.8.
- 〔6〕秦朝斌、王应时、张森、许厚文,工程热物理学报,第八卷,第二期,1987.5.
- 〔7〕王应时等,燃烧过程数值计算,科学出版社(1986)

# NUMERICAL SIMULATION OF FLOW FIELD IN A RADIO-FREQUENCY INDUCTION PLASMA GENERATOR POR PRODUCING TIO<sub>2</sub> BY CHLORIDE PROCESS

### Zhang Sen Xu Houwen

(Institute of Chemical Metallurgy ACADEMIA SINICA)

### Fan Zhipeng

(Institute of Mechanics ACADEMIA SINICA)

#### ABSTRACT

This paper describes the numerical simulation of flow field in a radio frequency induction plasma generator. The  $\omega-\varphi$  method is used and the computational flow field is divided into several sub-regions in order to overcome the difficulty of irregular boundary.

Based on the consideration of swirl velocity  $V_3$ , an unusual circulating flow field model has been developed. The numerical calculation has been verified by the experimental results.

Keywords: Numerical simulation, Flow field, Plasma,

Titanium dioxide, Chloride process

6