I. Физические оценки и выбор модели Вопросам динамики взаимодействия плазмы атмосферного давления с минеральными порошками посвящены сотни как экспериментальных, так и теоретических работ. Современное состояние вопроса приведено в [1]. В большинстве реализованных к настоящему моменту технологий плазменная обработка минеральных порошков проводится в высокочастотных индукционных (ВЧИ) плазмотронах. В качестве входного сырья используются частицы размером от 50 до 300 мкм. На выходе получаются сфероидизированные оплавленные частицы, используемые для нанесения покрытий и как наполнитель. В последнее время ВЧИ плазмотроны стали использовать для получения путем сублимации и последующей кристаллизации минеральных нанопорошков, в частности диоксида кремния [2],[3]. В этом случае частицы исходного сырья имеет средний размер 10 мкм, и динамика теплообмена отдельной частицы с плазмой становится другой, а именно: частица сублимируется, не проходя стадию расплава. Предложенные в [1] математические модели градиентного нагрева частицы в плазме подлежат коррекции по следующим причинам: 1. Так как вся поступающая на поверхность частицы энергия плазмы идет на сублимацию, то температура внутри частицы не меняется, и уравнения, описывающие теплообмен между частицей и плазмой достаточно решать только в области, заполненной плазмой с учетом подвижности границы этой области (за счет уменьшения размера частицы при испарении). 2. В предложенных в [1] моделях предполагается, что плазма является термостатом, т.е. заполняет бесконечную по сравнению с радиусом частицы область с постоянной температурой и, следовательно, с бесконечной тепловой энергией. Такое приближение допустимо, когда порошка в плазме «мало». Практический же интерес представляет работа плазмотрона в режиме максимальной загрузки. В этом случае тепловой ресурс плазмы становится ограниченным и, соответственно, меняются граничные условия для уравнений теплообмена. В данной работе предлагается математическая модель сублимации в условиях предельной загрузки, которая позволяет, в частности, оценивать время сублимации. Время сублимации является одним из ключевых параметров для определения предельной загрузки и, как следствие, предельной производительности. Рассматривается ВЧИ плазмотрон с вертикальной цилиндрической рабочей камерой, в которой сверху вниз движется аргоновая плазма с температурой 8 - 10 кК. В поток через боковой или центральный питатель вводится порошок диоксида кремния дисперсностью около 10 мкм. Частицы порошка при движении по потоку сублимируются, получившийся пар на выходе из камеры конденсируется в нанометрические кристаллические частицы. Математическая модель эволюции частицы в общем случае распадается на четыре модели. 1. Модель электромагнитного поля и сопутствующего поля температур плазмы.. 2. Модель поля скоростей потока и траектории одиночной частицы в нем. 3. Модель тепло и массоообмена одиночной частицы с плазмой при движении по траектории.. 4. Стохастическая модель эволюции диспергированной фазы в целом. Необходимость стохастического моделирования кинетики одиночных частиц диктуется наличием таких случайных факторов как размер частицы и неустойчивость ее траектории. Ключом к математическому описанию всего процесса является решение задачи о сублимации отдельной частицы (п.3), чему посвящается данная работа. Предварительно сделаем некоторые оценки, соответствующие условиям процесса сублимации частиц диоксида кремния, описанного в [2], [3]. Для этих оценок принимаются типичные по порядку значения теплофизических и гидродинамических параметров минеральных порошков и гидродинамических параметров плазменного течения. 1. При скорости плазмы м/с; температуре T = 10 кК, и диаметре частицы 10 мкм число Рейнольдса при обтекании частицы равно Re = 0,02 1. Следовательно, справедлив закон Стокса, и предельная скорость частицы относительно потока равна: м/с (1) Можно считать, что в данных условиях частица увлекается потоком. Это, в свою очередь означает, что входящее в коэффициент конвективного теплообмена число Нуссельта равно Nu = 2. Здесь - плотности частицы и плазмы, - динамическая вязкость плазмы, r - радиус частицы. 2. Введем понятие «сферы влияния» для данной частицы. Это сфера из плазмы в которой содержится достаточно тепла для сублимации данной частицы. Радиус такой сферы из энергетических соображений и кинетической теории может быть определен по формуле: где - теплота испарения частицы, - концентрация атомов аргона в плазме, - радиус частицы. При значениях мкм, радиус сферы влияния равен мм. (2) Для режима предельной загрузки плазмотрона будем рассматривать область плазмы заполненной сферами плотной упаковки. Известно, что эти сферы заполняют 74% от всего объема пространства. Отсюда следует, что концентрация частиц порошка равна м-3. Оценим по этой концентрации среднюю длину свободного пробега частицы порошка по формуле кинетической теории: м (3) Поэтому при реальных размерах рабочей камеры 0.08 - 0,2 м взвесь частиц можно считать бесстолкновительной. Предельная производительность плазмотрона без учета тепловых потерь и времени, уходящего на сублимацию может быть оценена так: , где P - объемный расход плазмы. При реальном расходе 7 м3/час сублимируется около 100 г порошка. При расчетах межфазного теплообмена в двух фазных аэрозолях, газовзвесях, эмульсиях, суспензиях применяются две основных модели. Первая широко распространенная модель взаимопроникающих континуумов (Эйлерово преставление) (continious mixture model) подробно описана в [4]. В ней несущая и диспергированная фазы представляются как сплошные среды, заполняющие одну и ту же область пространства. Функции, описывающие макроскопические характеристики обеих сред непрерывны и имеют оду и ту же область определения. Уравнения кинетики и взаимодействия фаз выбираются в классическом виде. В работе [6] при моделировании диффузии в плазме использовалось Эйлерово представление. Вторая - модель “блуждающих фаз” описана, например, в [5]. В ней несущая и диспергированная фазы не предполагаются сплошными (Эйлерово =Лаганжево или Лагранжево-Лагранжево представление). При Эйлерово-Лагранжевом подходе диспергированная фаза моделируется почастично в соответствии с движением несущей фазы (Лагранжево моделироание на макроуровне), Взаимодействие отдельной частицы с несущей фазой выбирается в классическом виде (Эйлеров подход на микроуровне). Отметим, что в [1] без указания на то фактически применен Эйлерово-Лагранжев подход. В нашей ситуации в силу оценок (2) и (3) среднее расстояние между частицами порошка, а также длина свободного пробега на порядки выше размеров частиц, и диспергированная фаза не удовлетворяет приближению сплошной среды. Поэтому мы выбираем Эйлерово-Лагранжев подход. В силу оценки (1) будем считать, что частица “носит с собой” свою сферу влияния. Так как сферы влияния плотно упакованы, то частица потребляет тепло только из своей сферы влияния, внешняя поверхность сферы влияния теплоизолирована. Наконец, в некотором приближении, будем считать, что частица имеет сферическую форму (такое приближение принято в большинстве работ, см [1]). Теплообмен между плазмой и частицей внутри сферы влияния описывается смешанной краевой задачей для уравнения теплопроводности в шаровом слое плазмы, внутри которого находится твердая частица (в декартовых координатах):): , (4) , (5) , (6) Здесь - температура, теплопроводность, удельная теплоемкость и плотность. Индекс p относится к плазме, индекс s - к частице, - коэффициент конвективного теплообмена на границе частицы, - удельная теплота испарения материала частицы. - радиус сферы влияния, - переменный радиус частицы, - начальное распределение температуры по радиусу. Второе из уравнений (6) описывает изменение размера частицы в процессе сублимации, краевая задача (4) - (6) является задачей с подвижной границей, при этом радиус границы. Сам зависит от решения (4)-(5). Задача (4)-(5) может быть решена методом Фурье. II. Решение системы уравнений теплопроводности (4)-(6) Рассмотрим характерные масштабы температуры, времени и длины и введем безразмерные переменные. Все безразмерные переменные обозначены штрихом. , , , , , , , , , , . В безразмерных переменных задача (4)-(6) имеет вид: , , (7) , , (8) ; . (9) Уравнения (7)-(9) содержит безразмерные критерии: - число Фурье, - число Нуссельта (Био), - число Br (термин условен). Из соображений физической симметрии будем искать сферически симметричные решения (7)-(9), зависящие только от r и t: . Введем новую функцию: . В полярных координатах задача (7)-(9) после серии тождественных преобразований приобретает вид: , , (10) , (11) (11′) (12) Рассмотрим сначала задачу (10)-(11’) и соответствующие задачи (7)-(9) и (4)-(6) без условия подвижности границы. Они могут быть решены методом Фурье. Переведем (10)-(11′) задачу на отрезок по переменной ; , ; ; ; . (13) Введем функцию . (14) Замена (13)-(14) переводит задачу (10)-(11′) в такую: (15) = , (16) , (16′) (17) Переобозначим: ( ), , (), , () Проведем замену, приводящую задачу (15)-(17) к неоднородной задаче с однородными граничными условиями Положим , Тогда удовлетворяет уравнению (18) с начальными и краевыми условиями = (19) , (20) = (21) Выберем в виде и такую, чтобы условия (20), (21) стали однородными Тогда Решение этой системы: , На функцию получается простая краевая задача: (22) (23) ; (24) (25) Разделяем переменные: (26) (27) , (28) (29) Собственные функции задачи Штурма-Лиувилля (27) - (28): , (30) где − положительные корни уравнения , а числа равны: . Квадрат нормы собственной функции . Решения уравнения (29) при найденных имеют вид (31) Решение уравнения (22) ищется в виде: (32) при выполнении начальных условий (23): (33) Отсюда В итоге: = ; (34) (35) (36) Функция (34) дает “точное” решение задачи (10)-(11′), а функции (35) и (36) − “точные” решения задач (7)-(9) и (4)-(6) при условии неподвижности границы. Алгоритм расчета времени сублимации частицы, т.е. численного решения полной задачи (4)-(6) состоит в следующем. Задача (4)-(5) решается на заранее выбранном малом шаге по времени, после чего пересчитывается радиус частицы по дискретизированному условию (6): Полученный на первом шаге по времени температурный профиль линейно экстраполируется до нового радиуса и служит начальным условием для решения (4) - (5) на следующем шаге по времени и последующем пересчете радиуса частицы. Вычисления заканчиваются либо когда частица полностью сублимируется, либо когда температура плазмы на поверхности частицы упадет ниже температуры кипения, либо когда частица выходит из плазмонда.. Момент окончания вычислений фиксируется как время сублимации (это одна итерация). Далее вычисления повторяются заново, но с половинным шагом по времени. Результат расчета считается удовлетворительным, если полученные на соседних итерациях времена сублимации отличаются на величину, много меньшую, чем они сами. Возможна также проверка по энергетическому балансу. Результаты конкретных расчетов при различных комбинациях параметров плазмы и порошка, а также процедура статистического усреднения по ансамблю частиц составляет содержание части 2 данной работы.