

氟钽酸钾钠还原搅拌釜中的自由液面搅拌流场数值模拟研究

陈学清^{1*} 牛彦兵¹ 程越伟¹ 王浩亮²

1 宁夏东方钽业股份有限公司

2 中国科学院绿色过程与工程重点实验室

DOI:10.32629/etd.v6i7.18237

[摘要] 本文采用VOF多相流模型、标准k- ϵ 湍流模型,并分别使用滑移网格法和多重参考系法研究了氟钽酸钾钠还原搅拌釜中搅拌流场及熔盐自由液面情况,采用多重参考系法研究了不同转速、搅拌高度对熔盐液面形状的影响。结果表明:(1)滑移网格法和多重参考系法模拟搅拌釜中搅拌流场及自由液面的计算结果相近。(2)搅拌桨位于0.5倍液面高度位置时,对于平直叶桨建议选用 ≤ 100 r/min的搅拌桨转速。(3)在搅拌桨设置高度为0.5倍液面高度内,搅拌桨设置高度不影响自由液面的形状以及其凹陷幅度。

[关键词] 氟钽酸钾钠还原; 搅拌釜; 自由表面; VOF

中图分类号: TQ630.5+4 **文献标识码:** A

Numerical simulation of free surface stirring flow field in the stirred tank for potassium fluotantalate sodium reduction

Xueqing Chen^{1*} Yanbing Niu¹ Yuewei Cheng¹ Haoliang Wang²

1 Ningxia Oriental Tantalum Industry Co., Ltd.

2 CAS Key Laboratory of Green Process and Engineering, Institute of Process Engineering, Chinese Academy of Sciences

[Abstract] VOF multiphase flow model and standard k- ϵ turbulent flow model are used to study the stirring flow field and the free liquid surface of molten salt in stirred tank for potassium fluotantalate sodium reduction, through using the sliding grid method and the multiple reference frame method respectively. The effect of different rotational speeds on the shape of molten salt liquid surface was studied by the multiple reference frame method. The results show that:(1) The calculation results of sliding mesh method and multiple reference frame method for simulating the stirring flow field and free liquid surface in stirred tank are similar.(2) When the impeller is located at 0.5 times the page height, it is recommended to choose a stirring impeller speed of ≤ 100 r/min for flat blades. (3) When the impeller stinging height is 0.5 times the liquid, the height of the impeller setting does not affect the shape of the free liquid surface and its depression amplitude.

[Key words] Potassium fluotantalate sodium reduction; Stirred tank; Free surface; VOF

液-液搅拌钠还原是制备钽粉普遍采用的工业化方法之一^[1]。该工艺主要设备为搅拌反应釜,内部为无挡板结构,搅拌使液面会形成“宏观不稳定涡”^[2],影响流场的状态。在工艺、设备设计^[3]时需要考虑液面下凹深度及隆起高度,避免液面下陷导致桨叶露出熔盐与气相接触,致使搅拌桨腐蚀及搅拌不稳定等一系列问题。在前期^[4]仿真研究中使用FLUENT模拟搅拌反应釜,将液面设置为对称边界(symmetry),忽略了搅拌液面变形的情况,未能得到不同转速对液面形状及凹陷深度等对实际工艺参数选定有参考意义的数据。

目前已有研究者开展了搅拌槽自由液面的仿真工作,如吴昊等人^[5]采用多相流敞口自由液面气液两相流模型分析搅拌槽

内流场,以气液两相流耦合固体颗粒干涉沉降运动分析的方法代替三相流模型进行数值计算,提升了杂质搅拌槽搅拌均匀性,避免杂质颗粒的沉积。杨锋苓等人^[6]基于VOF多相流模型,以偏心和无挡板中心搅拌槽为例,使用分离涡模型研究偏心平底搅拌槽和中心碟形底搅拌槽内流体的时均速度分布,模拟结果与实验值误差小,很好地模拟了搅拌槽内流体的自由液面流动特性。童长仁等人^[7]采用滑动网格和VOF多相流模型研究了不同转速和挡板宽度对流场及液面形状的影响,该模型对于液面形状变化的强环流搅拌过程以及液面近似为水平搅拌过程均适用,对于强环流搅拌该模型的流场仿真结果可行性更高。雷鸣等人^[8]使用VOF多相流模型对熔融还原炉单底吹、复吹进行了模拟,

发现顶吹、侧吹、底吹对炉料流场液面都有影响。Glover等人^[9]采用VOF模型研究了自由液面速度对搅拌槽内固相颗粒浓度分布的严重影响。Torre等人^[10]采用VOF多相流和 $k-\epsilon$ 模型法仿真了不完全挡板搅拌槽内涡流形状,计算结果与实验吻合。王泽政等人^[11]采用VOF和DPM模型对搅拌作用下颗粒在熔体的流场分布及其空间分布过程进行数值模拟,分析了搅拌过程中流场速度和叶片浸入深度对SiC颗粒在铝熔体中分散的影响,从而为制备高性能增强铝基复合材料提供了理论参考。

通过以上研究可以发现VOF模型能较好地模拟出搅拌槽内自由液面变化对槽内流场特性及多相流混合特性的影响,部分模拟结果得到了实验数据的验证。本文在前期^[4]工作基础上,基于fluent软件,选用标准 $k-\epsilon$ 湍流模型,结合VOF多相流模型,对氟钽酸钾钠还原搅拌器中搅拌流场进行仿真计算,从而得到不同转速对流场以及液面形状的影响,以期优化工艺参数及设备提供可靠的理论参考。

1 物理模型

本文研究主体为宁夏东方钽业股份有限公司专利^[12,13]中涉及的还原反应容器,搅拌桨为单层平直叶桨,几何示意图如图1(a)所示。

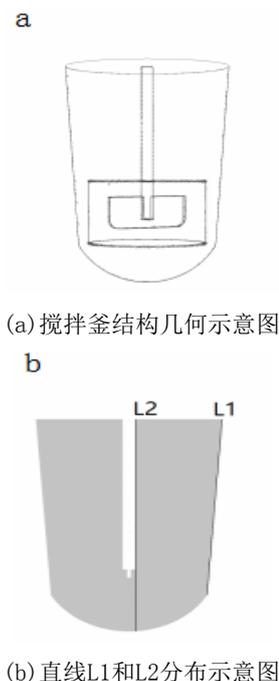


图1 几何示意图

我们模拟了 $K_2TaF_7:KCl$ (摩尔比为1: 7.31)混合熔盐在900℃下,搅拌桨在不同搅拌转速和不同安装高度下反应釜内流场及其液面情况,主要考察了:(1)搅拌桨高度位于0.5倍液面高度位置下,搅拌桨转速为60、80、100、120、140r/min时自由液面形状的变化;(2)搅拌桨转速为100r/min下,搅拌桨高度位于0.25倍液面高度、0.375液面高度、0.5倍液面高度位置时自由液面形状的变化。氩气作为基础相,熔盐为第二相。在上述温度下使用文献^[14-16]中提出的公式进行计算,得到混合熔盐的密度

为 $1.8598\text{g}/\text{cm}^3$,粘度为 $0.8255\text{mPa}\cdot\text{s}$ 。

1.1 网格划分及求解方案

本文使用Gambit软件进行几何建模,整个求解区域包括桨叶的转子区和定子区两个区域,转子、定子区域的分界面定义为interface交界面,采用非结构化网格进行网格划分,其中转子区域采用加密网格,网格数约169.7万,经过网格无关性验证,满足网格无关性要求。

采用Ansys Fluent进行计算,搅拌区域分别选用滑移网格法和多重参考系法来描述。使用标准 $k-\epsilon$ 湍流模型进行湍流流场模拟,近壁区域的计算采用标准壁面函数处理,模型常数采用默认设置数值。选用VOF多相流模型追踪气-液界面的变化。选用隐式的VOF模型,启用隐式体力格式,压力与速度耦合方程采用PISO算法,动量、湍动能、湍流耗散均采用二级迎风方程。其中滑移网格法计算时的时间步长 0.00334s ;由于只需考察达到稳定状态后流场及自由液面状态,选用多重参考系法计算时选用隐式Implicit计算。

初始化时使用Patch指令,定义第二相熔盐的区域,初始化后 $Z=0\text{m}$ 纵截面的熔盐分布图如图2所示。

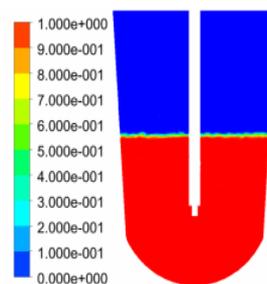


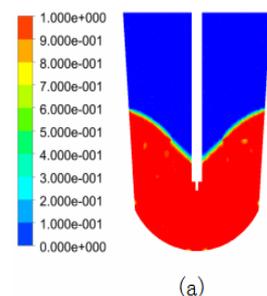
图2 初始混合熔盐分布图

2 计算结果与讨论

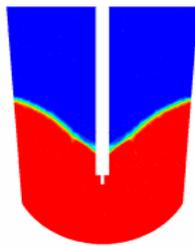
2.1 稳态及瞬态计算对比

选取中间转速100r/min时滑移网格法(SG)和多重参考系法(MRF)模拟结果进行对比分析。

通过纵截面($Z=0\text{m}$)第二相熔盐体积分数云图可以看出液面形状,具体如图3所示。从图中可以看出两种方法计算得液面形状几乎吻合,在截面上取沿容器壁面直线L1及搅拌轴边沿直线L2(直线分布示意图如图1b所示),作液相体积分数沿直线L1和L2的分布曲线如图4所示。



(a) 多重参考系法计算结果

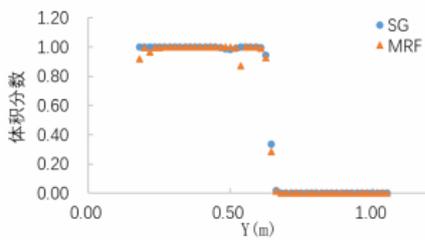


(b)

(b) 滑移网格法计算结果

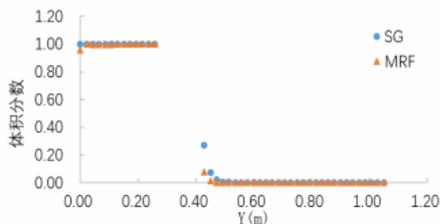
图3 液面形状截图

从图4中可知, 两种方法计算的液面隆起高度以及下陷深度基本相同。结合图3可以发现, 两种方法模拟结果显示的自由液面形状及液面凹陷程度均几乎相同, 即滑移网格法和多重参考系法结合VOF模型都能较好地计算出在一定搅拌速度下熔盐液面的形状及其与搅拌桨叶的位置关系, 这为工艺参数设置提供了一定的数据参考。



(a)

(a) 液相体积分数沿直线L1的分布曲线

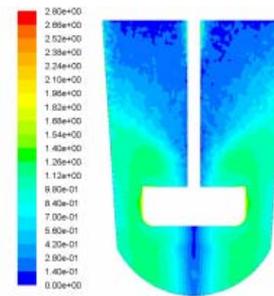


(b)

(b) 液相体积分数沿直线L2的分布曲线

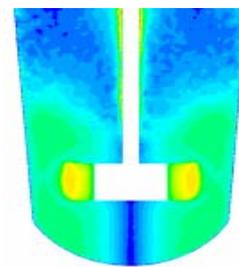
图4 液相体积分数沿直线L1和L2的分布曲线

因VOF模型气相-液相共用一套动量方程, 故模拟结果仅存在混合流场的速度场, 在分析速度场时应结合体积分数云图。取纵截面 ($Z=0m$) 速度云图如图5(a)、(b)所示, 并与前期[4]使用MRF结合欧拉模型模拟结果得到相同截面速度云图(图5c)进行对比。结合熔盐体积分数云图(图3)对比可知, 除了自由液面外反应釜内熔盐流场相似, 图5(b)、(c)均使用SG法处理搅拌区域, 采用瞬态计算, 两者模拟结果几乎相同。



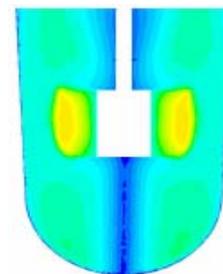
(a)

(a) MRF-VOF模型下纵向截面速度云图



(b)

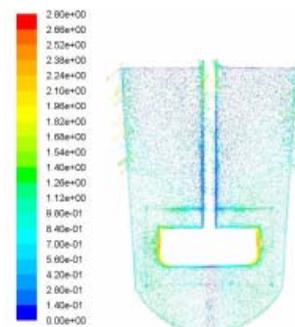
(b) SG-VOF模型下纵向截面速度云图



(c)

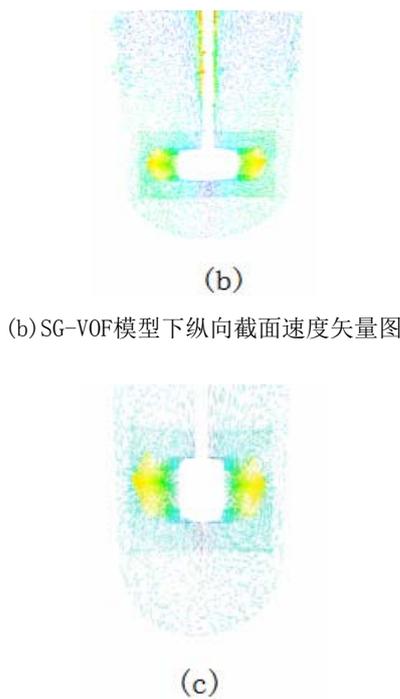
(c) SG-欧拉模型下纵向截面速度云图^[2]

图5 纵向截面速度云图 ($Z=0m$)



(a)

(a) MRF-VOF模型下纵向截面速度矢量图



(c)SG-欧拉模型下纵向截面速度矢量图^[2](图对齐)

图6 纵向截面速度矢量图:

取纵截面(Z=0m)速度矢量图(图6(a)、(b)),并与前期^[4]使用MRF结合欧拉模型模拟结果得到相同截面速度矢量图(图6c)可知,除了自由液面外反应釜内熔盐的流场相似,图6(b)、(c)两者模拟结果几乎相同。

综上所述,选用标准k-ε湍流模型、VOF多相流模型,结合滑移网格法和多重参考系法都能较好的模拟搅拌釜中搅拌流场及自由液面。

2.2自由液面分析

采用标准k-ε湍流模型、VOF多相流模型,结合滑移网格法模拟研究了:(1)在搅拌桨位于0.5倍液面高度位置时,搅拌桨转速分别为N=60r/min、80r/min、100r/min、120r/min、140r/min下的自由液面形状的变化情况,具体如图7所示;(2)搅拌桨转速为100r/min时,搅拌桨设置于0.25倍液面高度、0.375液面高度、0.5倍液面高度位置下自由液面形状的变化如下图8所示。

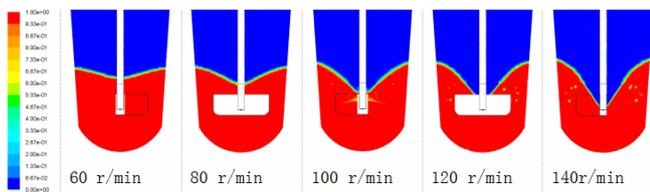


图7 不同转速下自由液面形状

从图7可以清晰地看出随着搅拌桨转速的增加,熔盐自由液面中央下陷深度及四周隆起高度均增加。从计算结果图中可知当转速大于等于120r/min时,下凹幅度过大,桨叶上边缘已与气

相接触,不但不利于液钠的分散及熔盐的混合,还能破坏搅拌体系的稳定运行。因此,对于平直叶桨建议选用搅拌桨转速≤100r/min。通过模拟计算可以初步判断熔盐液面高度、搅拌桨在熔盐液面的具体位置等在实验过程无法直接测量的数据,这为生产高质量钽粉选择合适的搅高、转速及熔盐量提供了一定的理论基础。



图8 不同液面高度下自由液面形状

从图8中可知,在搅拌桨设置高度为0.5倍液面高度内,搅拌桨设置高度不影响自由液面的形状以及其凹陷幅度。

3 结论

(1)基于VOF多相流模型和标准k-ε湍流模型,采用滑移网格法和多重参考系法模拟搅拌釜中搅拌流场及自由液面得到的计算结果相近;(2)在搅拌桨位于0.5倍液面高度位置时,对于平直叶桨建议选用≤100r/min的搅拌桨转速。(3)在搅拌桨设置高度为0.5倍液面高度内,搅拌桨设置高度不影响自由液面的形状以及其凹陷幅度。

【基金项目】

宁夏自然科学基金创新群体项目(2021AAC01002钠还原氟钽酸钾熔盐中金属钽成核生长机理的研究)。

【参考文献】

[1]郭青蔚,王肇信.现代钨钼冶金[M].北京:冶金工业出版社,2009:355.
 [2]Galletti C,Brunazzi E.On the main flow features and instabilities in an unbaffled vessel agitated with an eccentrically located impeller[J].Chemical Engineering Science,2008,63(18):4494-4505.
 [3]全国化工设备设计技术中心站搅拌工程技术委员会.搅拌设备[M].化学工业出版社,2019:24.14.
 [4]马海燕,王浩亮,程越伟,等.氟钽酸钾钠还原搅拌釜中的搅拌流场数值模拟[J].有色金属(冶炼部分),2022(12):92-100.
 [5]吴昊.自由液面固液搅拌流场数值模拟研究与应用[D].哈尔滨工业大学,2019.
 [6]杨锋苓,周慎杰,张翠勋.无挡板搅拌槽内的自由表面湍流流场研究[J].四川大学学报(工程科学版),2015(2):179-183.
 [7]童长仁,黄金堤,李俊标,等.基于Fluent的自由液面搅拌流场数值模拟[J].能源研究与管理,2010(4):33-43.
 [8]雷鸣,王周勇,张捷宇,等.多相流模型模拟熔融还原炉内流体流动[J].过程工程学报,2009,9(z1):420-425.

[9]G.M.Cartland Glover, J.J. Fitzpatrick. Modelling vortex formation in an unbaffled stirred tank reactors[J]. Chemical Engineering Journal,2007,127(1-3):11-22.

[10]Jean-Philippe Torr e,DF Fletcher,T Lasuye, et al. An experimental and computational study of the vortex shape in a partially baffled agitated vessel[J]. Chemical Engineering Science,2007,62(7):1915-1926.

[11]王泽政,常庆明,洪守坤,等.搅拌作用下铝熔体流场分布及SiC颗粒分散过程数值模拟[J].武汉科技大学学报(自然科学版),2022,45(1):30-36.

[12]潘伦桃,郑爱国,朱存喜.粉末的制造方法[P].CN1069564C. 2001.8.5.

[13]雒国清,董学成,王治道,等.金属钠还原氟钽酸钾生产钽粉的还原反应容器[P].CN204108313U.2015.01.21.

[14]许文江,潘伦桃,王向东,等.氟钽酸钾及其相关熔盐体系的密度[J].稀有金属,1999,23(5):349-352.

[15]赵庆国,冯建茹,吴玉庭,等.混合熔融盐低温共熔区的密度计算[J].化工学报,2019,70(z2):37-43.

[16]胡春旭.纯组分及混合熔融盐粘度的研究[D].北京工业大学,2018.

作者简介:

陈学清(1975--),男,汉族,宁夏石嘴山市人,硕士研究生,宁夏东方钽业股份有限公司,高级工程师,主要从事钽粉的生产与研究。