

Модели процессов и расчет температурного поля в печи сопротивления для производства карбида кремния

В.С. Кузеванов¹, С.С. Закожурников², Г.С. Закожурникова³, А.Б. Гаряев²

¹Филиал ФГБОУВО «Национальный исследовательский университет «МЭИ»», г. Волжский, Российская Федерация

²ФГБОУВО «Национальный исследовательский университет «МЭИ»», г. Москва, Российская Федерация

³ФГБОУВО «Волгоградский государственный технический университет», г. Волгоград, Российская Федерация

E-mail: galya.vlz@mail.ru

Авторское резюме

Состояние вопроса: Высокие температуры существенно затрудняют экспериментальное исследование тепломассопереноса в печах для производства карбида кремния. В связи с этим актуальным является расчетное исследование процессов образования карбида кремния. Анализ существующих подходов показал, что отсутствуют модели, включающие в себя процессы, сопровождающие процесс плавки SiC, в совокупности: тепломассопереноса в пористой среде с химическими реакциями при нагреве, сушки влажного материала и фильтрации. Создание модели с учетом всех перечисленных процессов и разработка программы численного расчета температурного поля в печи необходимы в качестве дополнения к дорогостоящим опытным плавкам. При этом целью численного анализа является повышение энергетической эффективности производства и увеличение выхода конечного продукта за счет реализации оптимального режима плавки для заданного состава шихты.

Материалы и методы: При создании математической модели процессов тепломассопереноса в печи сопротивления использован феноменологический подход, опирающийся на основные постулаты термодинамики и тепломассообмена.

Результаты: Продемонстрировано математическое описание процесса, представляющее собой систему из дифференциальных уравнений переноса субстанции, включая уравнение теплопроводности для пористого тела с внутренними источниками тепла и химически реагирующими компонентами и уравнения переноса тепла в процессе фильтрации газа через взаимосвязанные поры. Модель апробирована путем сравнения результатов расчетного анализа изменения температуры в объеме реакционной шихты с данными промышленных экспериментов.

Выводы: На основе полученной математической модели построен алгоритм численного расчета, позволяющий определять температурные поля в процессе образования карбида кремния в печи сопротивления. Соответствие экспериментальных и расчетных значений рабочих параметров печи показывает, что модель может использоваться для подбора вариантов загрузок печи и режимов плавки в целях увеличения выхода конечного продукта и экономии энергоресурсов.

Ключевые слова: печь сопротивления, осадка, пористый материал, производство карбида кремния, физическая модель, математическая модель, температурное поле, тепломассоперенос, объемное тепловыделение, влагоудаление.

Process models and calculation of temperature field in resistance furnaces of silicon carbide production

V.S. Kuzevanov¹, S.S. Zakozhurnikov², G.S. Zakozhurnikova³, A.B. Garyayev²

¹National Research University «MPEI», Volzhsky branch, Russian Federation

²National Research University «MPEI», Moscow, Russian Federation

³Volgograd State Technical University, Volgograd, Russian Federation

Abstract

Background: High temperatures make it very difficult to experimentally study heat and mass transfer in furnaces for silicon carbide production, which makes it important to conduct a calculation study of silicon carbide formation. The analysis of the existing approaches shows that there are no models taking into account all the processes accompanying SiC melting: heat and mass transfer in porous media with chemical reactions under heating, wet material drying and filtration. It is necessary to develop a model that would account for all of these processes and a program of numerical calculation of the furnace temperature field as a supplement to costly experimental melts. The purpose of this numerical analysis is to improve the energy efficiency and to increase the production output by choosing the optimal melting conditions for the set charge blend.

Materials and methods: The mathematical model of heat and mass transfer processes in the resistance furnace was developed according to a phenomenological approach based on the basic postulates of thermodynamics and heat and mass transfer.

Results: We have demonstrated a mathematical description of the process, representing a system of differential equations of substance transfer, including the heat equation for a porous body with internal sources of heat and chemically reactive components and the equation of heat transfer in the process of gas filtering through interconnected pores. The

model was tested by comparing the results of the calculation analysis of temperature changes in the volume of the reaction charge with industrial experiment data.

Conclusions: The resulting mathematical model was used to develop a numerical calculation algorithm allowing us to determine temperature fields in the process of silicon carbide formation in a resistance furnace. The correspondence between the experimental and calculated values of the furnace operating parameters shows that the model can be used to select furnace charging options and melting modes in order to increase the yield of the final product and to save energy resources.

Key words: resistance furnace, sag, porous material, production of silicon carbide, physical model, mathematical model, temperature field, heat and mass transfer, volumetric heat generation, moisture removal.

DOI: 10.17588/2072-2672.2017.4.021-029

Введение. Процессы, происходящие в печах сопротивления в технологическом цикле производства карбида кремния (SiC) [1–5], представляют собой сложное сочетание теплообмена, массообмена и изменений структуры реакционной среды вследствие химических реакций. Моделирование этих процессов в лабораторных условиях представляется дорогостоящим экспериментом из-за высоких температурных уровней плавки. Кроме того, отсутствие критериев переноса экспериментальных данных с модели на промышленную установку приводит к обоснованным сомнениям в целесообразности таких экспериментов. В производственных условиях контроль ряда параметров может производиться в порядке промышленного эксперимента в целях определения уровня температур в разных точках реакционной области, давления смеси газов в порах шихты, состава уходящих в процессе плавки газов [6]. Такие промышленные эксперименты только констатируют фактические уровни измеряемых параметров, но не используются для прогноза выхода конечного продукта – карбида кремния. Более того, получаемые в эксперименте значения параметров не могут быть воспроизведены повторно даже для одной и той же печи сопротивления. Причиной этого являются неизбежные для каждой плавки отличия в составе шихты, ее пористости и влажности компонент, некоторые несоответствия в ее укладке, а также стохастический характер осадки шихты.

Вышесказанные обстоятельства подчеркивают важность создания модели и алгоритма расчета изменяющихся во времени параметров сложного процесса карбидообразования в плавильной печи сопротивления. Естественно при этом считать основной целью расчетный прогноз увеличения массы конечного продукта плавки.

Анализ существующих подходов [7, 8] показал, что отсутствуют модели, включающие в себя процессы, учитывающие теплоперенос в пористой среде с химическими реакциями при нагреве, фильтрацию и влагоудаление, сопровождающие процесс плавки SiC в совокупности.

Количество получаемого карбида кремния при одинаковом составе шихты и порис-

тости напрямую зависит от следующих параметров:

- уровня температуры в реакционной зоне, которая должна быть не менее температуры начала реакции с образованием SiC и не более температуры распада SiC. Оценочные значения этих температур – 1400–1500 °C и 2100–2200 °C соответственно;

- размера области с необходимым уровнем температуры. Объем этой зоны заметно меньше объема реакционной зоны;

- времени выдержки фиксированного объема реакционной зоны в эффективном диапазоне температур.

Именно поэтому определяющим фактором в оценке выхода конечного продукта является информация о температурном поле в печи сопротивления в течение всего процесса плавки и влиянии на это поле состава шихты и режима электрической нагрузки.

Ниже демонстрируется построение физической модели процесса теплообмена в пористой среде при наличии химических реакций на примере плавильной печи сопротивления для производства карбида кремния, а также алгоритм расчета температурного поля в среде с изменяющимися теплофизическими параметрами на том же примере печи с центральным обогревом.

Методы исследования. Поставленная задача потребовала формулировки физических моделей отдельных взаимосвязанных процессов, сопровождающих производство карбида кремния. Использован феноменологический подход к описанию физических процессов со следующими базовыми особенностями и допущениями.

Рассматриваемая среда – пористая: твердая составляющая (индекс «1») пронизана системой конечно-размерных связанных между собой пор. В порах находится изменяющаяся по составу газовая составляющая (индекс «2»). Твердая составляющая также изменяется вследствие химических реакций, в которые вступают ее компоненты.

Считаем, что:

- общее для твердой и газовой составляющих уравнение энергии может быть представлено в виде уравнения теплопроводности для эквивалентной сплошной среды с пере-

менными теплофизическими параметрами и внутренними источниками (стоками) тепла;

– параметры газовой составляющей могут быть описаны уравнениями равновесной термодинамики для смеси идеальных газов;

– поры представляют собой локальные объемы малых, но конечных размеров, связанные между собой условными каналами;

– процесс фильтрации есть процесс перетока газовой составляющей из одного локального объема в другой, подчиняющийся закономерностям, описанным моделью Дарси;

– влажность твердой составляющей определяет количество воды, находящееся во внутренних не связанных между собой микропорах;

– удаление влаги (сушка) твердой составляющей и удаление летучих составляющих химических реакций происходит через границу «твердая составляющая (массив) – газовая составляющая (пора)»;

– массоперенос в твердой составляющей есть результат баро-, термо- и концентрационной диффузии, а в газовой составляющей – результат перемещения конечных масс потоками фильтрации;

– температура летучих продуктов химических реакций и водяных паров равна температуре твердой составляющей на границе массив–пора, через которую летучие компоненты и водяные пары переходят в газовую составляющую;

– общий процесс тепломассопереноса можно представить как суперпозицию двух процессов: теплопроводности в отсутствие массопереноса и переноса энергии вследствие фильтрации (рис. 1 а, б, в). Суперпозиция процесса без массообмена с другими ячейками (б) и процесса массообмена в ячейке и между ячейками (в) должна соответствовать реальному процессу (а), в частности суммарный перенос массы и тепла в модельных процессах должен быть равен переносу массы и тепла в реальном технологическом цикле.

Последующая математическая формализация процессов переноса опирается на основные постулаты термодинамики и тепломассопереноса.

Результаты исследования. Результатом исследования явились общая модель теплопроводности для рассматриваемой специфической задачи, а также модели фильтрации, сушки, генерации газообразных продуктов химических реакций, эффективной теплопроводности и изменения пористости среды.

Математическая модель теплопроводности для сплошной среды с переменными теплофизическими параметрами. Запишем уравнение теплопроводности [9] для эквивалентной среды с переменными теплофизическими параметрами и в отсутствии массопереноса:

$$\frac{\partial}{\partial \tau} \rho h = -\operatorname{div} q + q_v, \quad (1)$$

где ρ – плотность; h – энтальпия; q_v – мощность внутренних источников тепла.

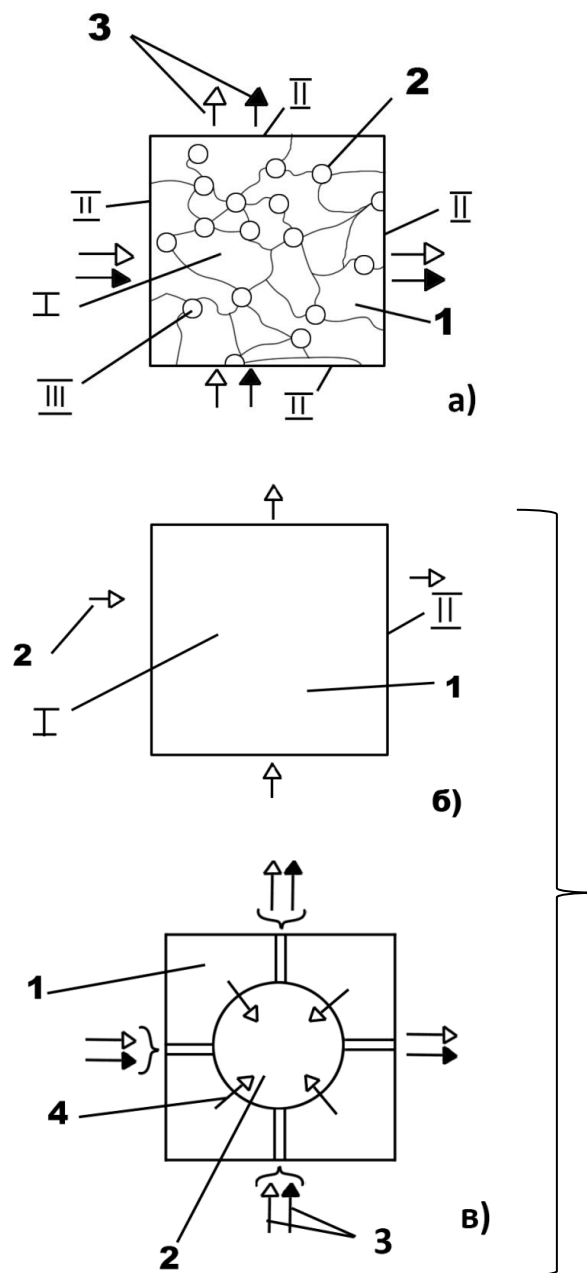


Рис. 1. Элементарная ячейка и схема процессов тепло-массообмена: а – реальный процесс: 1 – твердая составляющая; 2 – газообразная составляющая; 3 – тепломассоперенос; I – область сушки и химических реакций с образованием диффундирующих летучих продуктов; II – поверхность с ненулевыми потоками тепла и массы; III – область стока летучих продуктов, диффундирующих через поверхность раздела 1–2; б – процесс без массообмена с другими ячейками: 1 – эквивалентная среда; 2 – теплоперенос; I – область сушки и химических реакций с образованием локализованных летучих продуктов; II – поверхность с ненулевыми потоками тепла и нулевым потоком массы; в – процессы массообмена в ячейке и между ячейками: 1 – твердая составляющая; 2 – эквивалентная пора с газообразной составляющей, являющейся областью стока летучих продуктов; 3 – тепломассоперенос с газовой составляющей; 4 – массоперенос летучих продуктов химических реакций и водяного пара

Заметим, что под эквивалентной средой мы понимаем объект, к которому применима модель сплошной среды.

Поскольку ρh имеет смысл энергии на единицу объема, для системы с произвольным объемом V и пористостью $\varepsilon = \frac{V_2}{V}$ можно

записать

$$\rho h = \rho_1(1-\varepsilon)h_1 + \rho_2\varepsilon h_2. \quad (2)$$

Определим парциальную плотность (верхний индекс «~»):

$$\tilde{\rho}_i = \lim_{V \rightarrow 0} \frac{m_i}{V}, \quad (3)$$

где m_i – масса компонента « i » в элементарной ячейке.

При использовании парциальных плотностей для всех возможных компонентов выражение (2) для ρh имеет эквивалентную запись:

$$\rho h = \tilde{\rho}_1^c h_1^c + \tilde{\rho}_{\text{газ}} h_{\text{газ}} + \tilde{\rho}_в h_в + \tilde{\rho}_{\text{пар}} h_{\text{пар}} + \tilde{\rho}_2 h_2, \quad (4)$$

где $\tilde{\rho}_1^c, h_1^c$ – парциальная плотность и энтальпия твердого сухого компонента; $\tilde{\rho}_{\text{газ}}, h_{\text{газ}}$ – парциальная плотность и энтальпия газа, появляющегося в результате химических реакций в твердом сухом компоненте; $h_в, \tilde{\rho}_в$ – энтальпия водяной фазы и парциальная плотность, определяющая влажность твердого компонента; $\tilde{\rho}_{\text{пар}}, h_{\text{пар}}$ – парциальная плотность и энтальпия пара, появляющегося из воды в результате фазового перехода при сушке твердого компонента; $\tilde{\rho}_2, h_2$ – парциальная плотность и энтальпия газовой составляющей.

Учтем, что в отсутствие массопереноса имеем:

$$\left. \begin{aligned} \tilde{\rho}_1^c + \tilde{\rho}_{\text{газ}} &= \tilde{\rho}_{1,0}^c = \text{const}, \\ \tilde{\rho}_в + \tilde{\rho}_{\text{пар}} &= \tilde{\rho}_{в,0} = \text{const}, \\ \tilde{\rho}_2 &= \tilde{\rho}_{2,0} = \text{const}, \end{aligned} \right\} \quad (5)$$

где нижний индекс «0» соответствует начальным условиям.

Обозначим интенсивность объемной генерации газа в химических реакциях как $\tilde{g}_{\text{хим}}$ и пара в процессе сушки как $\tilde{g}_{\text{суш}}$. Очевидно, что

$$\tilde{g}_{\text{хим}} = -\frac{\partial \tilde{\rho}_1^c}{\partial \tau}, \quad \text{а} \quad \tilde{g}_{\text{суш}} = -\frac{\partial \tilde{\rho}_в}{\partial \tau}. \quad (6)$$

Продифференцируем выражение (4) по времени, приняв изобарное приближение

$$\frac{\partial h_i}{\partial \tau} = C_i \frac{\partial T}{\partial \tau},$$

где C_i – теплоемкость компонента « i ».

С учетом обозначений (6) получим:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial \tau} \rho h &= \left\{ \tilde{\rho}_1^c C_1^c + (\tilde{\rho}_{1,0}^c - \tilde{\rho}_1^c) C_{\text{р,газ}} + \tilde{\rho}_в C_в + \right. \\ &\left. + (\tilde{\rho}_{в,0} - \tilde{\rho}_в) C_{\text{р,пар}} + \tilde{\rho}_2 C_{\text{р,2}} \right\}; \end{aligned} \quad (7)$$

$$\frac{\partial T}{\partial \tau} + (h_{\text{газ}} - h_1^c) \tilde{g}_{\text{хим}} + (h_{\text{пар}} - h_в) \tilde{g}_{\text{суш}}.$$

Две последние составляющие правой части соотношения (7) можно определить как внутренние источники (стоки) тепла: $q_{\text{в,хим}}$ и $q_{\text{в,суш}}$. Действительно, объемное энерговыделение $q_{\text{в},j}$ вследствие процесса химического превращения твердого компонента с образованием газообразного (летучего) продукта реакции составляет

$$q_{\text{в},j} = (h_1^c - h_{\text{газ},j}) \tilde{g}_{\text{хим},j}, \quad 1 \leq j \leq m,$$

где j – индекс химической реакции; m – количество учитываемых реакций.

Очевидно, что

$$q_{\text{в,хим}} = \sum_{j=1}^m q_{\text{в},j} = (h_1^c - h_{\text{газ}}) \tilde{g}_{\text{хим}}$$

или

$$q_{\text{в,хим}} = \tilde{g}_{\text{хим}} \sum_{j=1}^m e_j \beta_j, \quad (8)$$

где $\beta_j = \tilde{g}_{\text{хим},j} / \tilde{g}_{\text{хим}}$ – доля летучих продуктов реакции « j » в общем количестве образующихся газообразных продуктов; e_j – теплота химической реакции « j » $e_j \geq 0$.

Аналогично, объемный сток тепла в процессе фазового перехода при сушке твердой составляющей равен

$$q_{\text{в,суш}} = (h_{\text{пар}} - h_в) \tilde{g}_{\text{суш}}$$

или

$$q_{\text{в,суш}} = r \tilde{g}_{\text{суш}}, \quad (9)$$

где r – скрытая теплота парообразования.

Уравнение теплопроводности (1) с учетом введения $q_{\text{в,хим}}$ и $q_{\text{в,суш}}$ как параметров общего процесса теплообмена, а также с учетом выражения (7) для электрообогреваемой пористой среды с влажными химически регулирующими компонентами в условиях отсутствия массопереноса будет выглядеть следующим образом:

$$\Phi \frac{\partial T}{\partial \tau} = -\text{div} \mathbf{q} + q_{\text{в,эл}} + q_{\text{в,хим}} - q_{\text{в,суш}}, \quad (10)$$

где индекс «эл» относится к электрической нагрузке; Φ – функция, соответствующая выражению в фигурных скобках (7), переписанному с использованием плотностей компонентов ρ_i и объемных долей каждого компонента системы «твердая составляющая – газовая составляющая»:

$$\begin{aligned} \Phi &= \rho_1^c (1-\varepsilon)(1+\nu)^{-1} C_1^c + (1+\nu)^{-1} \times \\ &\times \left[\rho_{1,0}^c (1-\varepsilon_0) - \rho_1^c (1-\varepsilon) \right] C_{\text{р,газ}} + \rho_в \frac{(1-\varepsilon)}{1+\nu} \nu C_в + \\ &+ \frac{\nu}{1+\nu} \left[\rho_{в,0} (1-\varepsilon_0) - \rho_в (1-\varepsilon) \right] C_{\text{р,пар}} + \rho_2 \varepsilon C_{\text{р,2}}. \end{aligned} \quad (11)$$

Причем $\nu = \frac{V_в}{V_1^c}$ – доля несвязанных между собой микропор ($\nu = \text{const}$).

Представим поведение системы, если «включился» механизм массопереноса. Газо-

образные продукты химических реакций и молекулы воды в твердой составляющей устремляются к границе конечноразмерных пор. Причиной этого переноса массы будет являться сложный процесс баро-, термо- и концентрационной диффузии. Перенос энергии в этом процессе обусловит энергетическую подпитку газовой составляющей газообразной смесью летучих продуктов химических реакций и водяного пара с температурой твердой составляющей. Обновляемая газовая составляющая переносится к другим порам. Причиной этого переноса массы будет являться перепад давлений между конечноразмерными газовыми полостями (порами), а процесс переноса можно представить как фильтрационный, описываемый моделью Дарси.

Учтем, по аналогии с теплом химических реакций и сушки, перетоки тепла, связанные с перетоками массы, как объемные источники (стоки) $q_{v,\phi}$.

Тогда из (10) имеем

$$\Phi \frac{\partial T}{\partial \tau} = -div q + q_{v,эл} + q_{v,хим} - q_{v,суш} + q_{v,\phi}. \quad (12)$$

Математическая модель фильтрации. Сформулируем математическую модель фильтрации и определим $q_{v,\phi}$ с учетом общей модели процесса.

Рассмотрим эквивалентную пору « i » как произвольный объем $V_{2,i}$ заполненный смесью газов.

Под эквивалентной порой будем понимать единичную пору совокупным объемом $V_{2,i} = \varepsilon_i V_{расч,i}$ где $V_{расч,i}$ – объем расчетной ячейки при численном решении уравнения (12). Считаем важным подчеркнуть, что выполнение условия $V_{расч,i} \geq \bar{V}_n / \varepsilon_i$, где \bar{V}_n – средний объем единичной поры, при численном расчете с использованием предлагаемой модели является обязательным.

Через поверхность поры из твердой составляющей в объем поступают летучие продукты химических реакций $g_{хим,i}$ и водяной пар $g_{суш,i}$. Кроме этого происходят перетоки смеси газов во всех взаимосвязанных порах по условным каналам вследствие перепадов давления.

Принимая газовую составляющую как смесь идеальных газов и опуская индекс « i », запишем уравнение состояния среды в произвольной эквивалентной поре в следующем виде:

$$PV_2 = M_2 RT, \quad (13)$$

где P – давление смеси газов в поре; T – их температура; $R = \frac{R_{унив}}{\tilde{\mu}_2}$, $R_{унив}$ – универсальная газовая постоянная; M_2 и $\tilde{\mu}_2$ – масса и молекулярная масса смеси газов соответственно.

Предположим, что нам известна функция $\frac{\partial T}{\partial \tau}$ для рассматриваемой поры:

$$\frac{\partial T}{\partial \tau} = \varphi_T(\tau). \quad (14)$$

Это предположение мы основываем на возможности расчета изменения температуры в любой точке эквивалентной среды по уравнению (12).

Продифференцируем уравнение (13) по времени.

В квазистационарном приближении получим

$$\frac{1}{P} \frac{dP}{d\tau} = \frac{1}{M_2} \frac{dM_2}{d\tau} + \frac{1}{T} \frac{dT}{d\tau} - \varphi_g(\tau), \quad (15)$$

где $\varphi_g(\tau) = \frac{1}{\varepsilon} \frac{d\varepsilon}{d\tau} + \frac{1}{\tilde{\mu}_2} \frac{d\tilde{\mu}_2}{d\tau}$ – функция, учитывающая изменение пористости системы, вида и доли компонент газовой составляющей.

Производная $\frac{dM_2}{d\tau}$ в правой части

уравнения (15) может быть представлена элементарным соотношением, отражающим закон сохранения массы и условие неразрывности:

$$\frac{dM_2}{d\tau} = g_\phi + g_{хим} + g_{суш}, \quad (16)$$

где g_ϕ – фильтрационная составляющая массообмена.

Определим массовый расход g_ϕ в квазистационарном приближении по Дарси:

$$g_\phi = \sum_r \left(\frac{\rho_2}{\mu_2 l^2} k \right)_\sigma V_2 (P_r - P), \quad (17)$$

где μ – коэффициент динамической вязкости; k – коэффициент проницаемости; l – средняя длина условного канала как связующего элемента системы пор; индекс « n » относится к порам, непосредственно примыкающим к рассматриваемому объему V_2 ; индекс « σ » указывает на соответствие параметров в круглых скобках источнику потока массы: если $P_r > P$, то « σ » принимает значения « n », в противном случае параметры в круглых скобках соответствуют параметрам газовой смеси в объеме V_2 .

Из уравнений (15)–(17) после несложных преобразований получаем

$$\frac{dP}{d\tau} + f_1(\tau)P = f_2(\tau), \quad (18)$$

где $f_1(\tau) = TL(\tau) + \varphi_g(\tau) - \frac{1}{T} \varphi_T(\tau)$;

$$f_2(\tau) = \tilde{T}L(\tau) + \frac{RT}{\varepsilon} \varphi_{x,c}(\tau); \quad L(\tau) = \sum_r \left(\frac{Pk}{T\mu_2 l^2} \right)_\sigma;$$

$$\tilde{L}(\tau) = \sum_r \left(\frac{Pk}{T\mu_2 l^2} \right)_\sigma P_r; \quad \varphi_{x,c}(\tau) = \tilde{g}_{хим} + \tilde{g}_{суш}.$$

Решение уравнения (18) относительно искомого давления в расчетном объеме V_2 (эк-

вивалентной поре) в малом временном интервале будет выглядеть следующим образом:

$$P(\tau) = P(\tau_0) + \left[\frac{f_2(\tau_0)}{f_1(\tau_0)} - P(\tau_0) \right] \left(1 - e^{-f_1(\tau_0)\delta\tau} \right), \quad (19)$$

где $\tau = \tau_0 + \delta\tau$, а $\delta\tau$ – промежуток времени, в котором значения функций $f_1(\tau)$ и $f_2(\tau)$ можно считать постоянными и равными $f_1(\tau_0)$ и $f_2(\tau_0)$.

Уравнение (19) может служить основой для расчета поля давления в газовой составляющей, при условии, что известны функции $\tilde{g}_{хим}(\tau)$ и $\tilde{g}_{суш}(\tau)$, $T(\tau)$, $\varphi_T(\tau)$, $\varphi_G(\tau)$, а также пористость ε системы, компонентный состав газовой составляющей и их изменения для любого фиксированного объема $V_{расч}$. Действительно, записывая уравнение (19) для каждой эквивалентной поры, т. е. для каждого расчетного объема (ячейки) численной схемы расчета, добавляя граничные условия на поверхности всей расчетной зоны, имеем при известных f_1 и f_2 замкнутую систему уравнений для определения давления в каждом выделенном объеме в следующий расчетный момент времени по известному текущему давлению. Таким образом, можем найти поле давления в любой момент времени.

При известном поле давления и с учетом уравнения для массового расхода (17) легко определяем $q_{v,\phi}$ для любого фиксированного объема $V_{расч}$:

$$q_{v,\phi} = \varepsilon \sum_r \left(\frac{PkC_p}{\mu_2 l^2 R} \right) (P_r - P). \quad (20)$$

Заметим, что в расчете поля давления и $q_{v,\phi}$ необходимо учитывать характерную длину l как расстояние между геометрическим центром расчетной ячейки и центром соседней ячейки. Очевидно, что $1 \leq r \leq N$, где $N = 2; 4; 6$ для одномерной, плоской и пространственной задачи соответственно.

Математическая модель сушки. В модели не рассматривается фазовое состояние воды в твердой составляющей, поскольку существенным является лишь то, что переход воды из твердой составляющей системы в поры (с газообразной составляющей) может осуществляться только в паровой фазе, т. е. при обязательном фазовом переходе.

В [10] получено соотношение для изменения массового расхода удаляемой при сушке влаги:

$$g_{суш} = M_{в,о} S_0 e^{-S_0 \tau}, \quad (21)$$

где все параметры относятся к рассматриваемой элементарной ячейке.

Из (21) следует

$$\tilde{g}_{суш} = \tilde{p}_{в,о} S_0 e^{S_0 \tau}. \quad (22)$$

Здесь, согласно модели [10],

$$S_0 = S_{00} + S_{01}^* \frac{\partial T}{\partial \tau}, \quad (23)$$

где S_{00} и S_{01}^* – константы. Эти константы определяют в лабораторном эксперименте с сухой реальной элементом шихты. Возможна обоснованная оценка значений этих коэффициентов по результатам анализа выхода водорода и кислорода из печи для получения карбида кремния в процессе плавки.

Полуэмпирическая модель образования газообразных продуктов химических реакций. В модели не рассматривается детальный расчет выхода летучих продуктов реакции. Дело в том, что такой расчет невозможен. Действительно, если кинетику выхода продукта реакции описывать с использованием соотношения Аррениуса, то кроме константы скорости химической реакции необходимо знать:

- площадь контакта реагирующих компонент;
- концентрацию составляющих химической реакции, например концентрацию SiO_2 в газообразном состоянии на поверхности угля или нефтяного кокса.

Естественно, ни то, ни другое в настоящее время оценить не представляется возможным, разве только порядок величин. Именно поэтому делаем упор на использование экспериментальных данных по определению выхода летучих продуктов химических реакций. При этом тот факт, что экспериментальные данные получены на печах конкретной конфигурации и с конкретным составом шихты, не меняет предпочтения использовать эти опытные данные для расчета процессов в других печах аналогичного типа вместо расчета по некой математической модели, где некоторые параметры могут на порядок отличаться от реальных.

Представим подход, основанный на использовании опытных данных.

Удельное тепло всех « n » принятых во внимание химических реакций составляет

$$q_{v,хим} = \sum_{j=1}^n q_{v,j} \sum_{j=1}^n e_j \tilde{g}_{хим,j}, \quad (24)$$

где e_j – тепло химической реакции « j ».

Общее удельное выделение летучих продуктов реакции « j » за время τ рассчитывается как

$$G_{хим,j} = \int_0^{\tau} \tilde{g}_{хим,j} \delta_{i,j} d\tau,$$

где

$$\delta_{i,j} = \begin{cases} 1, & \text{если } \tau_{1,j} < \tau < \tau_{2,j}, \\ 0, & \text{если } \tau \leq \tau_{1,j} \text{ или } \tau \geq \tau_{2,j}. \end{cases} \quad (25)$$

В условиях (25) по определению функции $\delta_{i,j}$ через $\tau_{1,j}$ и $\tau_{2,j}$ обозначены время начала и завершения химической реакции типа « j » соответственно.

Считаем, что $\tilde{g}_{хим,j}$ есть функция, определяемая только видом химической реакции.

Полагаем также, что сама реакция протекает при достижении температуры реагирующих компонентов значения $T_{н,р,j}$ – температуры начала химической реакции типа «j», а значение $\tilde{g}_{хим,j}$ при наличии всех компонентов реакции и условия $T(x,y,z) > T_{н,р,j}$ не зависит от координат (x,y,z) и времени.

Тогда

$$G_{хим,j} = \tilde{g}_{хим,j} \int_0^\tau \delta_{i,j} d\tau$$

и в целом по расчетной зоне $V_{р,j}$, где сосредоточены соответствующие виду химической реакции компоненты:

$$\tilde{G}_{хим,j} = \tilde{g}_{хим,j} \int_{V_{р,j}} \int_0^\tau \delta_{i,j} d\tau dV$$

или

$$\tilde{G}_{хим,j} = \tilde{g}_{хим,j} \int_{V_{р,j}} (\tau_{2,j} - \tau_{1,j}) dV, \quad (26)$$

где $\tau_{1,j}$ – время достижения температуры начала химической реакции типа «j» ($T_{н,р,j}$) при разогреве плавильной печи; $\tau_{2,j}$ – время достижения температуры $T_{н,р,j}$ при охлаждении разогретой реакционной среды. Очевидно, что $\tau_{1,j}$ и $\tau_{2,j}$ есть функции координат.

Данные по выходу газообразных продуктов при производстве карбида кремния для разных составов шихты известны. Эти данные получают при проведении соответствующих замеров на практике для контроля исполнения экологических требований по выбросам побочных продуктов производства в окружающую среду. Обычно эти данные представлены как выход газообразного продукта реакции «j» на единицу массы ($M_{загр}$) загружаемой шихты, $G_{хим,j}^3$.

Тогда в рамках принятой модели

$$\tilde{G}_{хим,j} = \frac{G_{хим,j}^3 M_{загр}}{\int_{V_{р,j}} (\tau_{2,j} - \tau_{1,j}) dV}, \quad (27)$$

где подынтегральные функции $\tau_{1,j}$ и $\tau_{2,j}$ определяются с использованием экспериментальных данных по температурным полям по производству карбида кремния для печи с известными $M_{загр}$ и $V_{р,j}$.

Модель эффективной теплопроводности. Представим первое слагаемое уравнения теплопроводности (12) в виде

$$-div q = div(\lambda_{эф} grad T), \quad (28)$$

где $\lambda_{эф}$ – эффективный коэффициент теплопроводности, учитывающий многокомпонентность среды и перенос тепла излучением (индекс «изл»):

$$\lambda_{эф} = \lambda_{эф}^T + \lambda_{изл}, \quad (29)$$

где $\lambda_{эф}^T$ – коэффициент теплопроводности пористой среды с твердой и газообразной составляющими, содержащими внутренние ком-

поненты; $\lambda_{изл}$ – коэффициент, учитывающий перенос тепла излучением.

Обозначим как $q_{изл}$ составляющую теплового потока, связанную с излучением. Представим проекцию $q_{изл}$ на произвольное направление ξ как

$$q_{изл,\xi} = -\lambda_{изл,\xi} \frac{\partial T}{\partial \xi}, \quad (30)$$

где $\lambda_{изл,\xi}$ – условный коэффициент теплопроводности излучения.

Поскольку должно выполняться условие $q_{изл} \rightarrow 0$, если $\varepsilon \rightarrow 0$ и если $\varepsilon \rightarrow 1$, то

$$\lambda_{изл,\xi} = \varepsilon(1-\varepsilon)\lambda_{изл,\xi}^0. \quad (31)$$

Примем для $q_{изл}^0$ модель Стефана–Больцмана:

$$q_{изл,\xi}^0 = \sigma_0 \varepsilon_r (T_{яч,1}^4 - T_{яч,2}^4) = -\lambda_{изл,\xi}^0 \frac{\partial T}{\partial \xi},$$

где $T_{яч,1} = T$ – температура поверхности пор со стороны ячейки «1»; $T_{яч,2}$ – температура поверхности тех же пор со стороны ячейки «2», граничащей с ячейкой «1» по направлению ξ ; ε_r – степень черноты поверхности пор; σ_0 – постоянная Стефана–Больцмана.

Вследствие малости пор имеем

$$T_{яч,2} = T_{яч,1} + \frac{\partial T}{\partial \xi} d\xi.$$

Тогда

$$T_{яч,1}^4 - T_{яч,2}^4 = -4T^3 \frac{\partial T}{\partial \xi} d\xi, \quad (32)$$

$$q_{изл,\xi}^0 = -4T^3 \sigma_0 \varepsilon_r \frac{\partial T}{\partial \xi} d\xi.$$

Из этого следует

$$\lambda_{изл,\xi}^0 = 4T^3 \sigma_0 \varepsilon_r d\xi \text{ и } \lambda_{изл,\xi} = k_\xi \varepsilon (1-\varepsilon) T^3, \quad (33)$$

где k_ξ – параметр, зависящий от шага расчетной сетки l_ξ по направлению ξ :

$$k_\xi = 4\sigma_0 \varepsilon_r l_\xi.$$

Коэффициент теплопроводности пористой среды $\lambda_{эф}^T$ определим следующим образом.

Пусть в частном варианте «а» двухкомпонентная система имеет вид чередующихся слоев однородных компонентов, когда можно считать, что тепловой поток направлен вдоль слоев. Пусть, как принято ранее, ε – объемная доля компонента «2».

Тогда в рамках модели сплошной среды

$$\lambda_{эф,a}^T = \lambda_1(1-\varepsilon) + \lambda_2\varepsilon, \quad (34)$$

где а – индекс варианта.

Пусть в ином частном варианте «б» двухкомпонентная система имеет вид чередующихся слоев однородных компонентов, когда можно считать, что тепловой поток направлен поперек слоев по нормали к ним. Тогда

$$\lambda_{эф,b}^T = \left(\frac{1-\varepsilon}{\lambda_1} + \frac{\varepsilon}{\lambda_2} \right)^{-1}, \quad (35)$$

где б – индекс варианта.

Полагая, что в пористой системе многообразная форма пор и их случайное расположение определяют равную вероятность любого угла φ ($0 < \varphi < 90^\circ$) между нормалью к поверхности раздела «твердая составляющая – газовая составляющая» и вектором плотности теплового потока, из (34) и (35) имеем

$$\lambda_{\text{эф}}^T = \frac{2\lambda_1\lambda_2 + \varepsilon(1-\varepsilon)(\lambda_1 - \lambda_2)^2}{2[\lambda_2(1-\varepsilon) + \lambda_1\varepsilon]} \quad (36)$$

Модель изменения пористости среды. По определению,

$$\tilde{g}_{\text{хим}} = -\frac{\partial \tilde{\rho}_1^c}{\partial \tau} = -\frac{1}{1+\nu} \left\{ (1-\varepsilon) \frac{\partial \rho_1^c}{\partial \tau} - \rho_1^c \frac{\partial \varepsilon}{\partial \tau} \right\}.$$

Из этого следует

$$\frac{\partial \varepsilon}{\partial \tau} = \frac{1}{\rho_1^c} \left\{ (1+\nu) \tilde{g}_{\text{хим}} + (1-\varepsilon) \frac{\partial \rho_1^c}{\partial \tau} \right\}. \quad (37)$$

Изменяющаяся во времени пористость системы будет определена как

$$\varepsilon = \varepsilon_0 + \int_{\tau} \frac{\partial \varepsilon}{\partial \tau} d\tau.$$

Производная $\frac{\partial \rho_1^c}{\partial \tau}$ в соотношении (37)

может быть представлена как $\frac{\partial \rho_1^c}{\partial T} \frac{\partial T}{\partial \tau}$ с опре-

делением $\frac{\partial \rho_1^c}{\partial T}$ по справочным данным для материалов шихты.

Проверка адекватности общей модели. В результате проведенных численных экспериментов получены нестационарные поля температур в печи сопротивления с учетом всех основных процессов, сопровождающих производство карбида кремния.

На рис. 2 приводится изменение температуры в точках по поперечному сечению печи, наблюдаемое в промышленном эксперименте, а также результаты численного расчета температур. Расчетные температурные кривые представлены с учетом математического моделирования всех описанных выше физических процессов, сопровождающих производство карбида кремния. Сравнение результатов численных экспериментов и промышленных испытаний по данным Полубеловой [6] для зеленого карбида кремния показывает хорошее соответствие результатов расчета и экспериментальных данных.

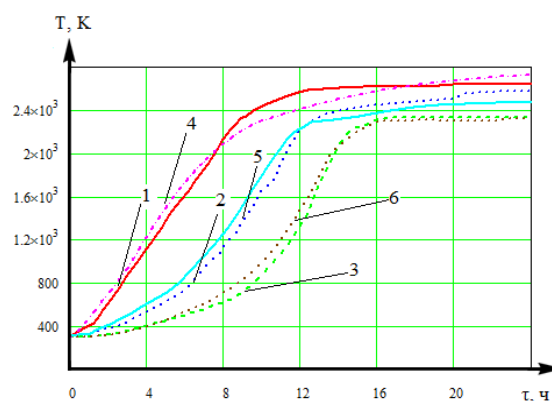


Рис. 2. Температура T зон печи для карбида кремния зеленого: 1, 2, 3 – кривые, построенные по данным [6]; 4, 5, 6 – кривые, соответствующие кривым 1, 2, 3, построенные по результатам численных экспериментов: 1 – ядро; 2 – на расстоянии 150 мм от ядра; 3 – на расстоянии 250 мм от ядра; 4 – на расстоянии 400 мм от ядра

Выводы. В рассмотренной модели учтены различные факторы, влияющие на процессы теплообмена в печах сопротивления, такие как теплота химических реакций, образование дополнительной газовой составляющей, процесс влагуудаления, перенос тепла фильтрационным потоком газа, радиационная составляющая эффективного коэффициента теплопроводности.

Учет основных явлений и механизмов в физических представлениях позволяет говорить о физической достоверности и полноте рассмотрения, хотя и приводит к некоторой громоздкости совокупной математической модели.

На основании полученной математической модели появляется возможность определить температурные поля в процессе образования карбида кремния и подобрать режимы плавки и варианты загрузки печей сопротивления в целях повышения энергетической эффективности процесса производства и увеличения выхода конечного продукта.

Список литературы

1. Гнесин Г.Г. Карбидокремниевые материалы. – М.: Металлургия, 1977. – 216 с.
2. Кац И.С. Образование карбида кремния в промышленной печи электросопротивления // Абразивы. – 1970. – № 3. – С. 8.
3. Van Veggel M. The Basic Angle Monitoring system: picometer stability with Silicon Carbide optics – Eindhoven: Universiteitsdrukkerij, Technische Universiteit Eindhoven, 2007. – 224 p.
4. Дигонский С.В. Газофазные процессы синтеза и спекания тугоплавких веществ. – М.: ГЕОС, 2013. – 462 с.
5. Синтез карбида кремния в электротермическом реакторе с кипящим слоем углеродных частиц / В.А. Бородуля, Л.М. Виноградов, А.Ж. Гребеньков, А.А. Михайлов // Горение и плазмохимия. – 2015. – Т. 13, № 2. – С. 92–102.
6. Производство абразивных материалов / А.С. Полубелова, В.Н. Крылов, В.В. Карлин, И.С. Ефимова. – СПб.: Машиностроение, 1968. – 180 с.
7. Heat-Transfer Model for the Acheson Process / G.S. Gupta, P. Vasanth Kumar, V.R. Rudolph, M. Gupta //

Zeitschriftenartikel aus Metallurgical and Materials Transactions A (2001-06). – P. 32.

8. Куций Д.В. Численное моделирование фильтрации биогаза и теплообмена в деформируемом теле полигона твердых бытовых отходов. Ч. I. Разработка модели // Теплоэнергетика. – 2015. – № 6. – С. 18–22.

9. Кузеванов В.С., Закожурникова Г.С., Закожурников С.С. Модель тепломассопереноса в печах при производстве карбида кремния // Альтернативная энергетика и экология. – 2015. – № 7. – С. 75–81.

10. Кузеванов В.С., Закожурникова Г.С. Модель сушки пористого проницаемого материала при внутреннем нагреве // Альтернативная энергетика и экология. – 2013. – № 14. – С. 19–23.

References

1. Gnesin, G.G. *Karbidokremnievye materialy* [Silicon carbide materials]. Moscow, Metallurgiya, 1977. 216 p.

2. Kats, I.S. *Obrazovanie karbida kremniya v promyshlennoy pechi elektrosoprotivleniya* [Formation of silicon carbide in industrial resistance furnaces]. *Abrazivy*, 1970, no. 3.

3. Van Veggel, M. The Basic Angle Monitoring System: Picometer Stability with Silicon Carbide Optics. Eindhoven: Universiteitsdrukkerij, Technische Universiteit Eindhoven, 2007. 224 p.

4. Digon'skiy, S.V. *Gazofaznye protsessy sinteza i spekanie tugoplavkikh veshchestv* [Gas phase processes of refractory material synthesis and caking]. Moscow, GEOS, 2013. 462 p.

5. Borodulya, V.A., Vinogradov, L.M., Greben'kov, A.Zh., Mikhaylov, A.A. *Sintez karbida kremniya v elektrotermicheskom reaktore s kipiyashchim sloem uglerodnykh chastits* [Silicon carbide synthesis in carbon fluidized bed reactors]. *Gorenje i plazmokhimiya*, 2015, vol. 13, no. 2, pp. 92–102.

6. Polubelova, A.S., Krylov, V.N., Karlin, V.V., Efimova, I.S. *Proizvodstvo abrazivnykh materialov* [Production of abrasive materials]. Saint-Petersburg, Mashinostroyeniye, 1968. 180 p.

7. Gupta, G.S., Vasanth Kumar, P., Rudolph, V.R., Gupta, M. Heat-Transfer Model for the Acheson Process. Zeitschriftenartikel aus Metallurgical and Materials Transactions A (2001-06). P. 32.

8. Kutsy, D.V. *Chislennoe modelirovanie fil'tratsii biogaza i teploobmena v deformiruемом теле poligona tverdykh bytovykh otkhodov. Ch. I. Razrabotka modeli* [Numerical modeling of biogas filtering and heat transfer in the deformable body of solid waste landfill]. *Teploenergetika*, 2015, no. 6, pp. 18–22.

9. Kuzevanov, V.S., Zakozhurnikova, G.S., Zakozhurnikov, S.S. *Model' tepломассоперенosa v pechakh pri proizvodstve karbida kremniya* [A model of heat and mass transfer in furnaces for silicon carbide production]. *Alternativnaya energetika i ekologiya*, 2015, no. 7, pp. 75–81.

10. Kuzevanov, V.S., Zakozhurnikova, G.S. *Model' sushki poristogo pronitsaemogo materiala pri vnutrennem nagreve* [A model of drying permeable materials under internal heating]. *Alternativnaya energetika i ekologiya*, 2013, no. 14, pp. 19–23.

Kuzevanov Vyacheslav Semenovich,

Филиал ФГБОУВО «Национальный исследовательский университет «МЭИ»» (г. Волжский),

доктор технических наук, профессор кафедры теплоэнергетики и теплотехники,

e-mail: kuzevanov@vfmei.ru

Kuzevanov Vyacheslav Semyonovich,

National Research University «MPEI», (Volzhsky),

Doctor of Engineering Sciences (Postdoctoral degree), Professor of the Department of Heat Power Engineering and Heat Engineering,

e-mail: kuzevanov@vfmei.ru

Zakozhurnikov Sergey Sergeevich,

ФГБОУВО «Национальный исследовательский университет «МЭИ»»,

кандидат технических наук,

e-mail: jester.vlz@mail.ru

Zakozhurnikov Sergei Sergeevich,

National Research University «MPEI»,

Candidate of Engineering Sciences (PhD),

e-mail: jester.vlz@mail.ru

Zakozhurnikova Galina Sergeevna,

ФГБОУВО «Волгоградский государственный технический университет»,

кандидат технических наук, старший преподаватель кафедры теплотехники и гидравлики,

e-mail: galya.vlz@mail.ru

Zakozhurnikova Galina Sergeevna,

Volgograd State Technical University,

Candidate of Engineering Sciences (PhD), Senior Lecturer of the Department of Heat Engineering and Hydraulics,

e-mail: galya.vlz@mail.ru

Gariyev Andrey Borisovich,

ФГБОУВО «Национальный исследовательский университет «МЭИ»»,

доктор технических наук, профессор кафедры тепломассообменных процессов и установок,

e-mail: GariyevAB@mpei.ru

Gariyev Andrey Borisovich,

National Research University «MPEI»,

Doctor of Engineering Sciences (Postdoctoral Degree), Professor of the Department of Heat and Mass Transfer Processes and Plants,

e-mail: GariyevAB@mpei.ru