

**МОСКОВСКИЙ ЭНЕРГЕТИЧЕСКИЙ ИНСТИТУТ
(ТЕХНИЧЕСКИЙ УНИВЕРСИТЕТ)**

На правах рукописи

001 0А

17.03.2000 2000

ЖУКОВ Сергей Васильевич

**РАЗРАБОТКА МЕТОДИКИ РАСЧЕТА ПРОЦЕССА ОЧИСТКИ
ТОПОЧНЫХ ГАЗОВ В НАНОСЕКУНДНОЙ
ИМПУЛЬСНОЙ КОРОНЕ**

Специальность 05.09.13 "Техника сильных электрических и магнитных
полей"

АВТОРЕФЕРАТ

диссертация на соискание ученой степени
кандидата технических наук



МОСКВА 2000

Работа выполнена на кафедре Техники и электрофизики высоких напряжений Московского энергетического института (ТУ).

Научный руководитель: - кандидат технических наук,
ст.н.с. М.В.Соколова

Официальные оппоненты: - доктор технических наук,
профессор Семенов В.К.

кандидат технических наук,
Будович В.Л.

Ведущая организация: Институт биохимической физики
РАН

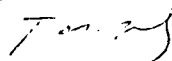
Защита диссертации состоится " 16 " мая 2000 года в аудитории Д-5 в "14-00" на заседании диссертационного совета К. 053.16.07 Московского энергетического института (ТУ) по адресу: 111250, г. Москва, Красноказарменная ул., д.14.

Отзывы на автореферат в двух экземплярах, заверенные печатью, просим присылать по адресу: 111250, г. Москва, Красноказарменная ул., д.14, Ученый совет МЭИ (ТУ).

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке МЭИ.

Автореферат разослан " ^{12 апреля} " 2000 г.

Ученый секретарь диссертационного
совета К. 053.16.07, к.т.н., ст.н.с



Т.Н. Тарасова

840.2 - 526,0

ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

Актуальность проблемы: В связи с интенсификацией применения высоковольтных технологий для очистки газовых выбросов промышленных предприятий и недостаточной информативностью результатов натуральных экспериментов для анализа режимов работы очистного оборудования, возникла необходимость дальнейшего развития и углубления методики исследования процессов очистки топочных газов от вредных примесей в наносекундной импульсной стримерной короне, используемой в высоковольтных технологиях.

Невозможность исследования экспериментальными методами таких величин, как распределение электрического поля вдоль стримера, распределение концентрации компонентов стримерной плазмы и динамика ее изменения в различных точках разрядного промежутка, невозможность анализа влияния внешних факторов на плазмохимические реакции, приводящие к эффекту очистки от вредных примесей, делают математическое моделирование процесса очистки основным методом исследования.

Представленные в литературе модели процессов генерации и взаимодействия химически активных частиц с вредными примесями топочных газов не обладают комплексностью подхода к рассмотрению всех этапов технологической цепочки очистки - начиная от генерации активных частиц во время разряда и заканчивая их взаимодействием с молекулами примесей в межразрядную паузу.

Учитывая важность задач, связанных с необходимостью не только совершенствовать технологию очистки, повышать ее эффективность, но и оптимизировать сам процесс для снижения энергозатрат, а также сложность и малую информативность экспериментальных исследований, создание методики всестороннего математического описания плазмохимических процессов очистки топочных газов от оксидов азота и серы в наносекундной импульсной короне является актуальным и перспективным направлением исследований в данной области.

Целью данной работы является разработка комплексной инженерной методики математического моделирования плазмохимических процессов очистки топочных газов от оксидов азота и серы в наносекундной импульсной стримерной короне, объединяющей конверсию газов под действием импульсов напряжения на стадии распространения стримеров и плазмохимические превращения в паузу между импульсами воздействующего напряжения.

Для достижения указанной цели в работе необходимо решить следующие задачи:

- разработать математическую модель развития стримера, включающую кинетические процессы наработки химически активных частиц и процессы взаимодействия их с молекулами вредных примесей в топочном газе;
- выполнить анализ влияния внешних условий на характер развития разряда и динамику генерации активных частиц;
- провести анализ плазмохимических реакций, приводящих к эффекту очистки в межразрядную паузу;
- определить направления оптимизации режимов установок очистки топочных газов на базе результатов, полученных с помощью разработанной модели.

Методы исследования: Для решения поставленных задач использовались аналитические методы, положения теории развития газового разряда, положения теории плазмохимических процессов, математическое моделирование на цифровых ЭВМ.

Научная новизна работы состоит в следующем:

1. Разработана комплексная инженерная методика описания плазмохимических процессов очистки топочных газов от оксидов азота и серы в наносекундной импульсной короне, включающая конверсию газов под действием импульсов напряжения на стадии распространения стримеров и плазмохимические реакции в паузах между импульсами напряжения. Методика реализована в виде программного комплекса для ЭВМ, позволяющего провести численное моделирование процесса очистки топочных газов и определить наиболее благоприятные условия его реализации.

1.1. Как часть общей методики, разработан алгоритм отбора реакций взаимодействия частиц плазмы коронного разряда для включения в модель расчета, что позволяет минимизировать число реакций при сохранении достоверности описания кинетических процессов. Основным критерием отбора является степень влияния отбираемых реакций на концентрацию частиц в канале и в головке стримера, участвующих в образовании химически активных компонентов плазмы, как в условиях приложенного напряжения, так и в межразрядную паузу.

1.2. Для расчета степени очистки разработана программа расчета изменения концентраций компонентов плазмы в следе стримера в послеразрядную паузу. Начальными условиями расчета являются распределения концентраций всех компонентов плазмы, получаемые не на

базе G-факторного метода, а расчетом по 1.5-мерной модели развития стримера.

2. Выявлены наиболее значимые факторы, влияющие на эффективность образования активных частиц в процессе развития стримера, а именно: средняя напряженность поля в разрядном промежутке, при увеличении которой в 2 раза (с 4.8 до 11.6 кВ/см), число генерируемых химически активных частиц возрастает более чем в 3 раза, и длительность фронта импульса напряжения, уменьшение которой до 1-2 нс в 2-3 раза повышает концентрацию нарабатываемых активных частиц.

3. Расчетным путем показано и объяснено, что с ростом начальной концентрации NO эффективность удаления этой примеси снижается за счет обратных реакций, что согласуется с известными экспериментальными данными.

4. Расчетным путем впервые выявлены временные интервалы и зоны стримера, в которых максимальна активность частиц, участвующих в удалении вредных примесей.

5. В результате исследований впервые установлено, что эффективность образования активных частиц и их средние концентрации определяются не только процессами на головках стримеров в области сильного поля, но и процессами в канале стримера при относительно слабой напряженности поля.

Практическая значимость: Разработанная комплексная модель процессов очистки топочных газов от вредных выбросов импульсным разрядом наносекундной длительности позволяет проводить подробный анализ всех этапов процесса очистки, выявлять факторы, влияющие на энергозатраты получения химически активных частиц, определять степень влияния состава топочных газов на эффективность его очистки. Разработанная модель и связанные с ней программы могут быть использованы как для теоретических исследований химической кинетики коронного разряда в топочных газах, так и для поисков направлений оптимизации технологических режимов промышленных электрофильтров.

На защиту выносятся:

1. Усовершенствованная комплексная методика анализа процесса очистки топочных газов с помощью стримерного разряда.

2. Методика отбора реакций и констант кинетических процессов в различных газах для включения их в модель стримера.

3. Математическая модель разрядной и межразрядной стадии очистки.

4. Новые результаты численных экспериментов, описывающих процесс очистки топочных газов от вредных выбросов, полученные с помощью ЭВМ.

Апробация работы: Основные положения работы докладывались и обсуждались: на 9-ой Всероссийской конференции "Физика газового разряда", (Рязань, 1998); на Международном симпозиуме по технике высоких напряжений ISH-99 (Лондон, 1999); на 14-ом Международном симпозиуме по химии плазмы ISPC-14 (Прага, 1999), на научных семинарах Института общей физики Академии наук России и кафедры Техники и электрофизики высоких напряжений МЭИ (ТУ).

Публикации: По основному содержанию и результатам работы опубликовано три печатных работы.

Структура и объем диссертации: Диссертация состоит из введения, четырех глав, заключения, списка литературы и приложения. Общий объем работы 217 страниц. Основная часть работы состоит из 186 страниц, из которых 151 страниц машинописного текста, 8 таблиц и 63 рисунка. Список литературы включает 95 наименования.

СОДЕРЖАНИЕ РАБОТЫ

Во введении показана актуальность работы и обосновывается выбор математического моделирования в качестве наиболее информативного способа анализа процессов очистки топочных газов от вредных примесей в технологиях с использованием стримерной короны. Сформулированы цель и задачи работы.

В первой главе проведен обзор работ по моделированию кинетики плазмохимических процессов, имеющих место в разных видах разряда и в межразрядную паузу. Анализ литературных данных показал, что существуют два способа учета кинетических процессов: включение их в модель разряда, когда учитываются процессы, протекающие при наличии внешнего поля, и в моделях плазмохимических процессов, происходящих в межразрядную паузу, когда внешнее поле отсутствует.

Первый подход характеризуется высокой детальностью моделирования самого разряда, при этом подробный учет плазмохимических процессов, приводящих к эффекту очистки во время разряда, и анализ процессов, происходящих в межразрядную паузу, не проводится. Степень детализации описания кинетических процессов на стадии разряда в сильной степени определяет информативность данной модели и её возможности в определении начальных условий межразрядной паузы.

Второй подход характеризуется упрощенностью описания процесса разряда и отсутствием анализа условий образования активных частиц, участвующих в удалении вредных компонентов топочных газов, при этом процесс очистки в межразрядную паузу моделируется достаточно подробно.

До настоящего момента не было единой комплексной модели, объединяющей оба способа учета плазмохимических процессов в единую методику учета и анализа процесса очистки топочных газов. Таким образом, актуальной задачей моделирования процесса очистки топочных газов в наносекундной импульсной короне является создание комплексной инженерной методики расчета, которая должна включать в себя модель разрядной стадии очистки с максимально допустимой детальностью описания кинетики плазмохимических реакций образования активных частиц и описание процессов взаимодействия активных частиц с вредными примесями, приводящих к очистке в межразрядную паузу.

Во второй главе представлены основные положения разработанной комплексной методики анализа процессов очистки топочных газов от вредных примесей.

Для создания модели, адекватно отражающей реальные условия развития стримера, по результатам обзора литературы были установлены основные параметры, характеризующие режим работы действующих технологических установок по очистке газовых выбросов. В конструкциях электрофильтров, использующих импульсный коронный разряд, применяются реакционные камеры с конфигурацией электродов провод-плоскость и коаксиальные системы с центральным электродом - проводом в качестве высоковольтного. Характерные параметры для электродных систем провод-плоскость: диаметр провода порядка 1-3 мм, расстояние до плоскости 100-200 мм; для коаксиальных систем - диаметр провода 0.2-10 мм, диаметр внешнего цилиндра 25-400 мм.

Амплитуда прикладываемого напряжения лежит в диапазоне от 20 до 150 кВ, при этом средние напряженности в промежутке составляют порядка 15-21 кВ/см. Частота приложения импульсов варьируется от 100 до 1000 Гц. Фронты импульсов прикладываемого напряжения составляют от 20 до 200 нс, при длине импульса от 50 до 1500 нс. Температура очищаемого газа лежит в диапазоне от 80 до 160⁰С. Основной состав рассматриваемого топочного газа: 72% N₂, 6% O₂, 10% H₂O, 12% CO₂, 40 ppm CO, 700 ppm SO₂, 600 ppm NO (O₂ варьировалось от 1 до 6%, NO от 150 до 1500 ppm).

Принимая во внимание технические возможности вычислительной техники и математических методов моделирования сложных конфигураций электродов, в качестве базисной системы электродов разрядного промежутка для разработки модели был выбран промежуток "сфера-плоскость". Поскольку стримерный разряд в реальной конструкции фильтров в системе электродов провод-цилиндр представляет из себя параллельные слабоветвящиеся каналы, то в качестве 1-го шага моделирования возможно проведение анализа на модели одиночного неветвящегося стримера.

Существенным моментом разработанной методики является этап сбора, анализа и отбора основных химических реакций, происходящих на стадии разряда и после него, и определяющих процесс очистки, и обоснованный выбор констант этих реакций для заданных условий очистки. Центральным моментом методики является максимально подробная, с точки зрения кинетики плазмохимических реакций, модель разрядной стадии очистки.

При выборе модели образования и развития стримера за основу была взята 1.5-мерная модель, разработанная Белогловским для воздуха, в которой коронирующий электрод представляет собой уединенную сферу $R_{сф} = 0.2-0.3$ см. В момент времени t_0 , сфере сообщается положительный потенциал $U = 20-30$ кВ. Фоновые концентрации положительных ионов и электронов принимаются равными 10^3 см⁻³, радиус стримера считается неизменным и равным 300 мкм.

В основной модели учитываются процессы ударной ионизации, прилипания, ион-ионная и электрон-ионная рекомбинации, развал отрицательных ионов и фотоионизация. Электрическое поле на оси стримера рассчитывается методом суперпозиции полей от зарядов электрода и избыточного заряда стримера. Система уравнений, описывающих развитие стримера, включает уравнение неразрывности для электронов, положительных и отрицательных ионов и уравнение Пуассона. Правые части уравнений неразрывности определяются на основании обобщенных коэффициентов, учитываемых элементарных процессов и концентраций соответствующих частиц. Базисная модель была доработана для топочных газов.

На рис.1 представлен алгоритм расчета по базисной и усовершенствованной моделям. Непрерывные линии на рис.1 обозначают последовательность расчета по исходной модели, пунктиром выделены расчетные блоки, измененные или внесенные в исходную модель в

соответствии с разработанной в работе методикой учета плазмохимических процессов.

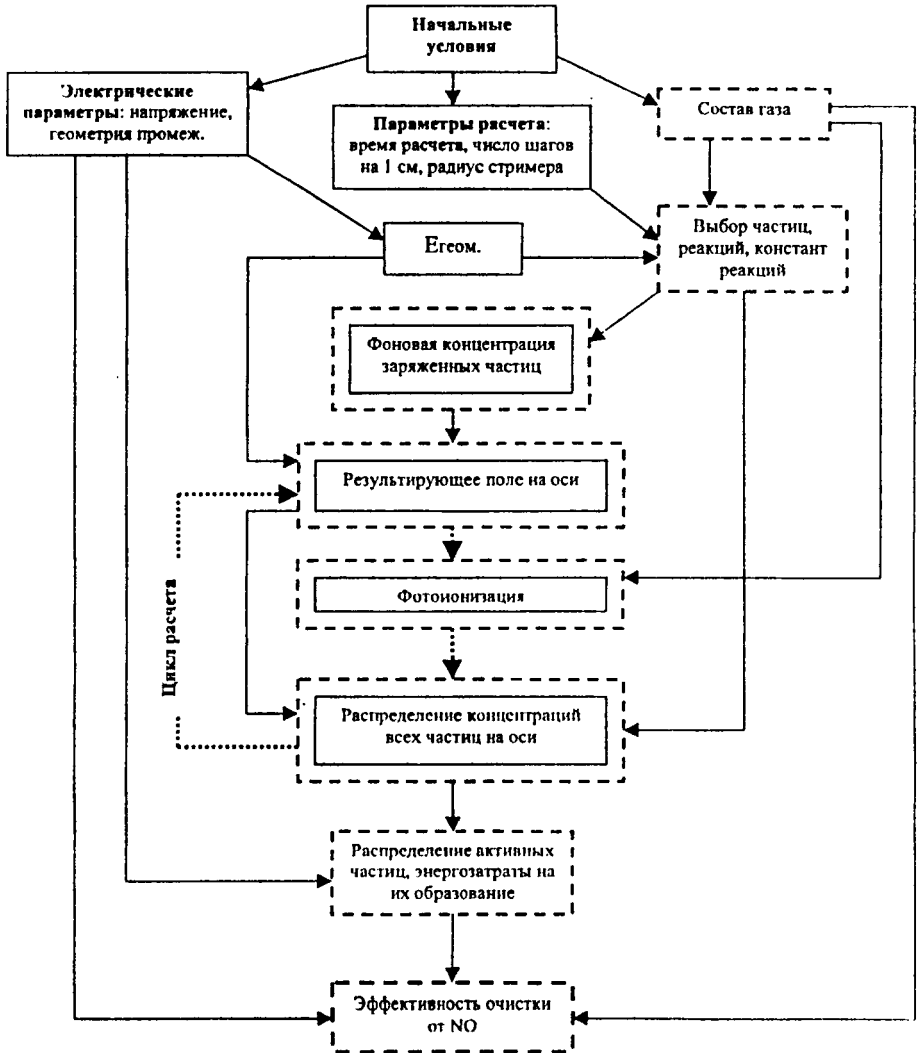


Рис.1. Схема алгоритма расчета эффективности очистки топочных газов от вредных примесей в коронном разряде.

Основным моментом полученной модели является запись уравнений неразрывности для каждой из частиц, участвующих в плазмохимических

реакциях, происходящих при развитии стримера.

$$\frac{\partial n_e}{\partial t} - \frac{\partial(n_e u_e)}{\partial x} = S_{ph} + \sum R_p - \sum R_d, \quad (1)$$

$$\frac{\partial n_{pi}}{\partial t} = S_{ph} + \sum R_p - \sum R_d, \quad (2)$$

$$\frac{\partial n_{nk}}{\partial t} = \sum R_p - \sum R_d, \quad (3)$$

$$\frac{\partial n_{0j}}{\partial t} = \sum R_p - \sum R_d, \quad (4)$$

где n_e , n_{pi} , n_{nk} , n_{0j} - концентрации электронов, положительных ионов i -типа, отрицательных ионов k -типа и нейтральных частиц j -типа, включая возбужденные молекулы и атомы; R_p - константа образования частиц; R_d - константа удаления частиц; S_{ph} - источник фотоэлектронов. Уравнение Пуассона:

$$\text{div}E = \frac{e(\sum n_p - \sum n_e - \sum n_n)}{\epsilon_0}, \quad (5)$$

где n_p , n_n суммы концентраций ионных компонентов смеси соответствующего знака; n_e - концентрация электронов.

Особое внимание в методике расчета уделяется выбору реагирующих частиц и реакций между ними. На основании литературных данных составляется перечень всех возможных частиц, возникающих в газе в процессе развития стримера, записываются все реакции между ними и константы этих реакций.

Для демонстрации применения методики в главе 2 приведено подробное изложение всех этапов расчета для наиболее простого случая - развития стримера в кислороде - вплоть до процессов наработки химически активных частиц, которыми в кислороде являются атомы O и молекулы озона O₃. Подробно приведены результаты ранжирующих расчетов для реакций с участием атомов O: из 26 реакций образования атома O было отобрано 9, из 8 реакций ухода - 5.

Для проведения расчетов по модели стримера необходимо выбрать расчетную сетку шагов по времени и по продольной оси развития стримера. В работе показана методика выбора таких шагов, число которых зависит от используемого напряжения. Для O₂ количество шагов по оси x составляет от 3000 шагов на 1 см для 14-20 кВ, 4000 шагов для 25 кВ и 5000-10000 шагов для напряжений 30 кВ и выше.

Расчет по предложенной методике позволил получить распределение концентрации всех отобранных частиц вдоль оси стримера в O_2 к моменту 10 нс, а также их зависимость от времени на расстоянии 2.5 мм от анода. Оценено влияние на результаты расчета размеров разрядного промежутка и показано, что начиная с длин промежутков 3-4 см, можно проводить расчет характеристик стримера по модели для уединенного электрода. Показано влияние условий параллельного развития стримеров на результаты расчета концентраций нарабатываемых активных частиц на примере развития стримера в кислороде. Подтвержден известный из публикаций факт снижения интенсивности развития каждого индивидуального стримера при их параллельном развитии в воздухе так же и для случая кислорода. При этом установлено, что происходит заметное (в 3.5-4 раза) снижение интенсивности образования активных частиц при учете параллельно развивающихся стримеров.

В третьей главе описаны особенности использования разработанной математической модели и программы для расчета процессов очистки топочных газов от NO. Система уравнений неразрывности, описывающая баланс частиц в модели развития стримера, аналогична системе, использованной для кислорода. Правая часть данной системы включает набор констант образования и ухода частиц. Отбор констант проводился по методике выбора значимых реакций, описываемой в главе 2.

Отбор частиц проводился в 3 этапа. Первоначально были собраны все частицы, упоминавшиеся в исходной литературе для топочных газов (34 частицы): e, $N_2(A)$, $N_2(B)$, $N_2(^1a)$, N_2^+ , N_4^+ , NO^+ , N_3^+ , O_2^- , O^- , O^+ , O_2^+ , O_4^+ , NO , N_2O^- , N_2O^+ , $O(^2P)$, $O_2(b)$, $O_2(a)$, O_3 , N , N_2 , O_2 , H_2O , CO , CO_2 , O , HO_2 , H , $O_2(a)$, $O(^1D)$, $O(^1S)$, SO_2 , NO_2 . Далее, были рассмотрены реакции удаления и наработки NO и SO_2 . В результате было добавлено еще 5 частиц: $N(^2P)$, NO_3^- , N_2O_5 , SO , NO_3 . На третьем этапе, были добавлены "вторичные частицы", в результате реакций с которыми образовывались частицы, отобранные на первых этапах (9 частиц): H^- , OH , OH^+ , H_2O^+ , NO_2^- , NO_2^+ , NO^- , H_3O^+ , N^+ . В конечном итоге было отобрано для расчетов стримера 48 частиц.

В заключение, к уже отобранным частицам были добавлены атом $N(^2D)$, который является источником молекул NO в реакции окисления с кислородом, и ион O_3^- , который является одним из важных источников электронов в области слабых полей канала стримера для топочных газов рассмотренных составов. Комплексные ионы $O_2^+(H_2O)$ и $NO^+(H_2O)$ были добавлены к ионам $H^+(H_2O)$ и O_4^+ для корректного учета ухода электронов в канале стримера в области низких полей в реакциях электрон-ионной

рекомбинации.

Отбор реакций проводился в несколько этапов. На первом этапе для заданных параметров среды $T_{\text{газа}} = 350\text{K}$ и нормального атмосферного давления, заданных временных диапазонов разрядных процессов 5-50 нс и межразрядной паузы от 0.1 до 1 мс, напряженностей электрического поля до 300 кВ/см - определялись по литературным данным все реакции с отобранными частицами. Отбор констант этих реакций осуществляется по методике, изложенной во второй главе.

В частности, при отборе констант реакций предпочтение отдавалось реакциям, константы которых соответствовали диапазону температур 300-400 К, а также аппроксимация которых задавалась в виде функции.

Далее, для выбранного набора реакций и отобранных констант проводились оценочные расчеты для времен развития стримера до 5 нс, целью которых было определение значимости реакций в процессе образования той или иной частицы. Контрольные точки, в которых определялось изменение концентрации частиц (основной критерий влияния той или иной реакции) брались как на головке стримера, где напряженность поля максимальна, так и в его канале, где величина поля была минимальной. На основе оценочных расчетов были отбракованы реакции, суммарное влияние которых на концентрацию основных частиц не превышает 1%.

С учетом оставленных реакций для определения чувствительности полученных результатов расчета к значению констант оставленных реакций проводились предварительные расчеты изменения концентрации активных частиц при изменении этих констант. Самыми чувствительными к значениям констант оказались реакции с участием возбужденных частиц, реакции с которыми в конечном итоге приводили к образованию активных частиц O и N, что, в свою очередь, сказывалось на интенсивности удаления NO в разрядной стадии очистки.

На последнем этапе выявлялась чувствительность результатов расчета к исходному составу реагирующих частиц. Отслеживались компоненты плазмы, концентрации которых после прохождения реакций оказывались на 7-8 порядков меньше остальных продуктов. Эти компоненты плазмы из расчетной схемы удалялись. Далее проводился повторный расчет с целью определения изменений, полученных при неучете этих частиц. В результате подобных предрасчетов, были удалены из кинетической схемы ионы N_2O^+ , N_2O^+ , N_3^+ , NO_3^- и возбужденные частицы $N(^2P)$, $O(^1P)$, $O_2(b)$.

Модель кинетических процессов для топочных газов должна учитывать большое количество плазмохимических реакций. Это

накладывает специальные требования при расчетах на выбор шага по времени, поскольку скорость реакций в данных процессах лимитирует его максимальное значение. В модели максимальный шаг по времени рассчитывался как функция максимальной напряженности. Далее шаг уменьшался, что приводило к более частому пересчету значения напряженности поля, на интервале одного и того же шага по оси развития стримера. Более частый пересчет значения поля повышал точность его расчета и позволял избегать скачков его значения при переходе на следующий шаг по оси движения стримера, что делало расчет более устойчивым. Так, уменьшение исходного временного шага, используемого при расчете разряда в воздухе, в расчетах для топочных газов в 5.5 раз позволило увеличить шаг по оси x в 2.5 раза без потери точности и устойчивости расчета. В целом взаимная компенсация в сторону увеличения шага по оси x и уменьшения шага по времени позволила сохранить времена расчетов компьютерной программы в разумных пределах.

Другой особенностью расчетов по предложенной методике для топочных газов является введение новых значений коэффициентов фотоионизации. Добавление молекул H_2O и CO_2 в топочном газе приводит к сужению диапазона энергий фотонов, поглощаемых кислородом с его последующей ионизацией, так как при энергиях выше 12.53 эВ начинается интенсивное поглощение фотонов молекулами воды и двуокиси углерода. В итоге вместо диапазона энергий фотоионизации, характерного для воздуха (12.5-12.66 эВ), в топочном газе необходимо брать диапазон энергий фотонов от 12.5 эВ до 12.53 эВ. Фотоионизация молекул воды ($W_i=12.6$ эВ) вносит при этом незначительный вклад в общий процесс. Таким образом, в уравнение для определения коэффициента фотоионизации в топочных газах должны войти коэффициенты поглощения фотонов молекулами кислорода, соответствующие новому диапазону энергий: $k_{n1}(W_i=12.5 \text{ эВ}) = 5.85 \text{ см}^{-1}$, $k_{n2}(W_i=12.53 \text{ эВ}) = 150.3 \text{ см}^{-1}$. В итоге интенсивность фотоионизации в топочном газе ниже, чем в воздухе.

Представлена методика моделирования процессов очистки в межразрядную паузу. На первом этапе методики оценивается влияние остаточного объемного заряда на кинетику плазмохимических процессов в следе стримера. Расчетом показано, что роль остаточного объемного заряда незначительна, и для упрощения расчета его можно пренебречь.

Система уравнений кинетики плазмохимических превращений в межразрядную паузу имела следующий вид:

$$\frac{dn_i}{dt} = F_i + D \cdot \frac{\partial}{\partial r} \left(\frac{dn_i}{\partial r} \right), \quad (6)$$

где n_i - концентрация i -го компонента; F_i - изменение концентрации i -го компонента за счет реакций с другими частицами; D - коэффициент диффузии; r - радиальная составляющая. Расчет коэффициента диффузии проводится, исходя из состава газа, основными компонентами которого являются N_2 , O_2 , H_2O , CO_2 , на основании закона Бланка для расчета коэффициента диффузии в многокомпонентной смеси. С учетом постоянства температуры в разрядном промежутке, суммарный коэффициент диффузии был принят $0.229 \text{ см}^2/\text{с}$.

В результате предварительного тестирования подбирался оптимальный шаг по времени чтобы исключить скачки концентраций в ходе реакций в следе стримера. Длина шага была принята 10^{-10} с.

Для оценки достоверности расчетных результатов полученные данные были сравнены с результатами физических экспериментов. Анализ результатов сравнения показал, что расчетная динамика изменения скорости продвижения стримера и тока в его канале качественно совпадают с экспериментальными данными. Сравнение полученных данных с результатами расчетов, проведенных на двумерных моделях, как для воздуха, так и для топочных газов, показало, что распределение напряженности в разрядном промежутке и соотношение максимальных напряженностей для воздуха и топочных газов совпали полностью, так как были получены для аналогичных внешних условий.

Результаты расчетов по модели процессов в межразрядную паузу сравнивались с аналогичными расчетами, выполненными на базе G факторной модели, известными из литературы. Сравнение показало хорошее соответствие результатов расчета обеих моделей на качественном уровне, несмотря на более упрощенный состав исходных частиц, используемых в данной модели.

В четвертой главе приведены результаты расчетов, проведенных на основе численного моделирования процессов очистки топочных газов от вредных примесей по разработанной методике. При расчете в модель включены все реакции, отобранные по изложенной ранее методике. Расчеты позволили построить распределения концентраций всех основных активных частиц по каналу стримера на момент снятия напряжения (20 нс, на рис.2) и изменение концентраций частиц от времени в некотором заданном сечении канала (рис.3). Аналогичные кривые, построенные для разных взаимодействующих частиц, разных моментов времени и разных

длительностей воздействующего напряжения, позволили установить зональную структуру генерации активных частиц и рассчитать вклад разных участков канала стримера в их образование.

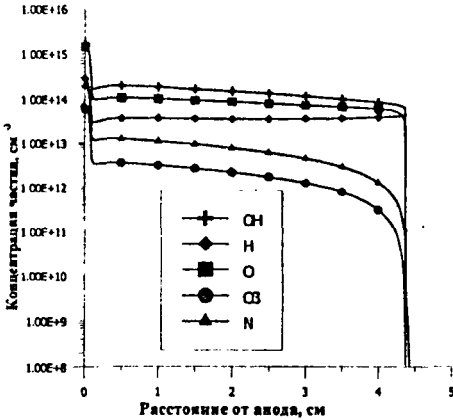


Рис. 2. Распределение концентрации активных частиц вдоль оси стримера (20 кВ, 20 нс).

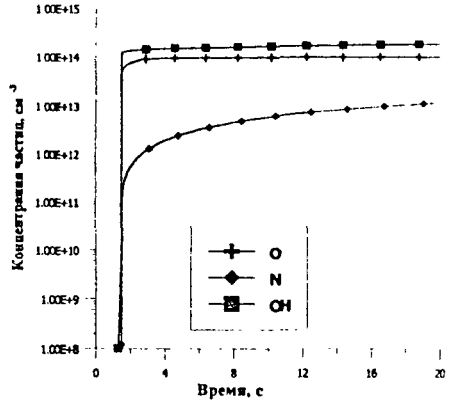


Рис. 3. Изменение концентрации активных частиц от времени в точке на расстоянии 2.5 мм от анода (20 кВ).

Например, вклад прианодной области, канала стримера и его головки в образование атома O в топочном газе составляет 20%, 20% и 60% для стримеров длиной более 2-3 см, и 5%, 10% и 85% для коротких стримеров (рис. 4).

Установлен перечень и степень активности основных химически активных частиц и реакций с ними, приводящих к очистке топочных газов от примеси NO, как на стадии развития стримера, так и в межразрядную паузу. Расчетом показано, что атомы O, N, OH наиболее активны в области канала, головки и в прианодной области стримера, а общее время их действия распространяется на весь цикл очистки (вплоть до времени приложения следующего импульса напряжения). Молекулы O_3 и HO_2 , накопив достаточную концентрацию ко времени снятия напряжения, наиболее активно проводят удаление вредных примесей в межразрядную стадию очистки (Рис. 5 и 6).

Проведен выбор внешних условий разряда, обеспечивающих наибольшую благоприятность условий очистки. Анализируется степень влияния таких внешних факторов, как полный состав топочного газа, амплитуда и фронт прикладываемого напряжения, геометрия электродной системы, начальные концентрации вредных примесей - на генерацию активных частиц. На примере атома O показано, что увеличение средней

напряженности поля в разрядном промежутке с 4.8 до 11 кВ/см приводит к увеличению концентрации О, нарабатываемой в стримере, в три и более раза (таб.1).

Таблица 1

Напряжение, кВ	Средняя напряженность поля, кВ/см	Рост средней концентрации / рост средней напряженности поля
20.0	4.76	
25.0	5.95	1.3/1.2
30.0	7.14	1.7/1.5
50.0	11.1	3.1/2.3

Принимая во внимание, что в реальных установках используются импульсы напряжения не прямоугольной форма, были проведены расчеты с целью оценки влияния крутизны фронта на генерацию активных частиц.

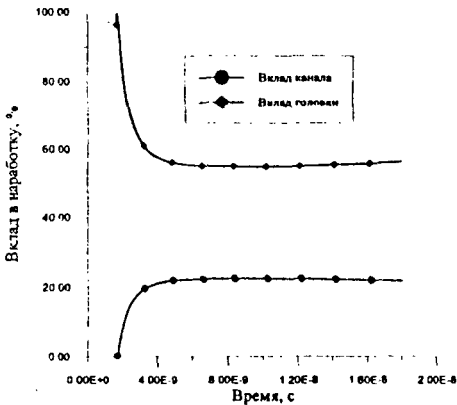


Рис.4. Вклад зон стримера в наработку атома О, 20 кВ, ТГ1.

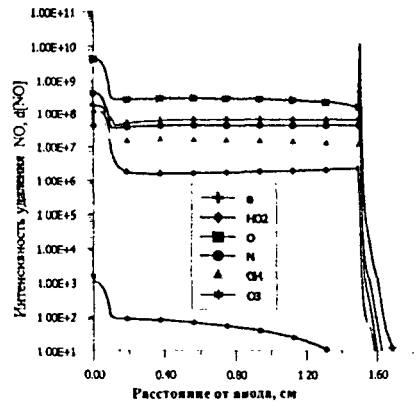


Рис. 5. Распределение интенсивности удаления молекул NO в реакциях с разными частицами по длине стримера (5 нс, 25 кВ), ТГ1, NO 600 ppm.

Расчеты показали, что увеличение длительности фронта τ_f импульса напряжения с 0 до 30 нс для стримеров одинаковой длины снижает число нарабатываемых активных частиц: N - в 3,5 раза, OH - более, чем в два раза, атомов O - более, чем в полтора раза (Рис. 7.).

Установлено, что подобный характер изменения наработки частиц с ростом τ_f связан с изменением времени формирования стримера и начальными напряженностями поля на головке стримера, определяющими энергию электронов которые дают начало цепочкам реакций, приводящим к образованию активных частиц.

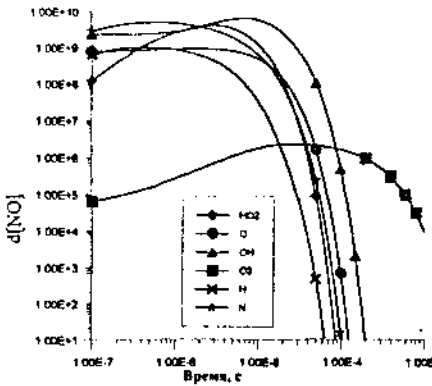


Рис. 6. Интенсивность удаления NO в межразрядную паузу. Нарботка активных частиц произведена импульсом напряжения 20 кВ, длит. 24 нс, 350 К, ТГ1.

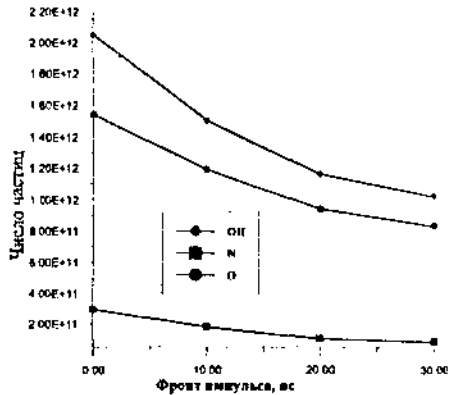


Рис. 7. Зависимость числа генерируемых активных частиц (при одинаковой длине стримера) от длины фронта импульса (25 кВ, ТГ1), в пространстве занятом стримером.

Впервые подтверждено и объяснено экспериментально установленное влияние начальной концентрации примеси NO на степень ее очистки; показано, что снижение эффективности очистки связано с усилением роли обратных реакций восстановления молекул примеси за счет роста концентрации молекул NO_2 .

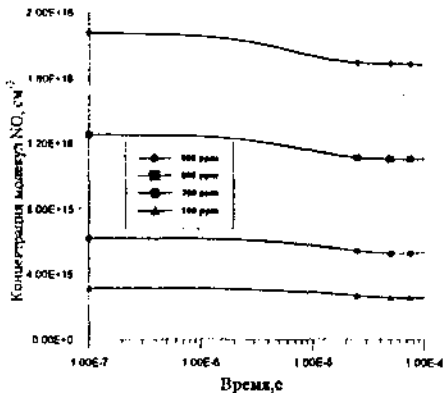


Рис. 8. Зависимость средней концентрации NO от времени для разных начальных значений NO, 20 кВ, ТГ1.

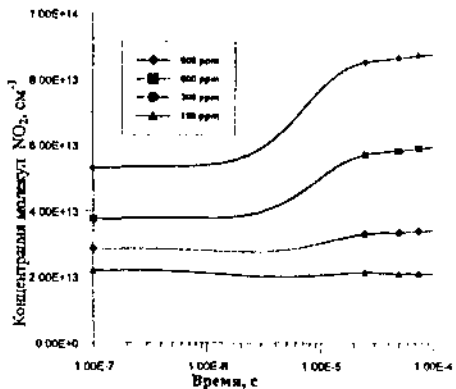


Рис. 9. Зависимость средней концентрации NO_2 от времени для различных начальных значений NO, 20 кВ, ТГ1.

В частности получено, что при росте начальной концентрации NO со 150 до 900 ppm, степень удаления молекул этой примеси в результате

прохождения одного стримера снижается с 18% до 10% (рис. 8). Рост концентрации NO_2 с увеличением начальной концентрации NO можно объяснить быстрым уходом частиц OH и H в реакциях вида $\text{NO} + (\text{OH}, \text{H}) \rightarrow (\text{HNO}_2, \text{HNO})$ (рис.9), что замедляет реакции уничтожения NO_2 , в которых основную роль играют частицы OH и H , выводящие NO_2 из циклических реакций вида $\text{NO}_2 \leftrightarrow \text{NO}$.

Специальным анализом установлено, что одним из способов упрощения расчетов для получения оценочных данных по наработке активных частиц в стримере в топочных газах может быть использование результатов расчета для воздуха при определении распределения напряженности поля стримера. Сравнение показало приемлемое совпадение распределение напряженности поля стримера в воздухе и в топочных газах, а также токовых характеристик разряда, при прочих равных условиях.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

1. На основании обзора и анализа литературы установлено, что экспериментальные исследования технологии очистки газовых выбросов ТЭС (топочных газов) в импульсной наносекундной короне не дают объяснения ряду важных для практики зависимостей эффективности очистки от таких существенных моментов, связанных с технологическим режимом очистки, как средняя напряженность электрического поля в разрядном промежутке $E_{\text{ср}}$, длительность фронта кривой воздействующего напряжения, начальная концентрация вредных примесей NO и SO_2 в очищаемом топочном газе. Эти объяснения могут быть получены только с помощью математического моделирования всех этапов процесса очистки, включая этап развития стримерного разряда.

2. Анализ литературных данных позволил сформулировать основную цель работы, заключающуюся в разработке комплексной инженерной методики анализа процессов и эффективности очистки топочных газов от вредных примесей оксидов азота и серы в наносекундной стримерной короне. Разработанная с этой целью методика включает анализ процессов взаимодействия продуктов разряда с молекулами очищаемого газа как на стадии развития стримерной короны, так и в паузу между импульсами воздействующего напряжения. Существенным моментом разработанной методики является этап сбора, анализа и отбора основных химических реакций, определяющих процесс очистки, и обоснованный выбор констант этих реакций. Центральным моментом методики является модель

возникновения и развития стримера, в которую введены характеристики всех основных плазмохимических реакций.

3. Блок методики, описывающий разрядную стадию процесса очистки, реализован программным комплексом, включающим 1,5-мерную модель одиночного стримера, методику расчета поля объемного заряда стримера с учетом конкретного состава газа и позволяющим оценить возможность перехода от расчетов одиночного стримера к расчетам в условиях стримерной зоны.

4. Основным моментом разработанной модели развития стримера является включение в систему уравнений, описывающих процессы в стримере, уравнений неразрывности для каждой частицы плазмы и газа, причем правые части этих уравнений содержат члены, определяющие все процессы появления и исчезновения данной частицы, что требует знания всех реакций с ее участием.

5. Для демонстрации применения методики расчета приведено подробное изложение всех этапов расчета для наиболее простого случая - развития стримера в кислороде - вплоть до процессов наработки химически активных частиц, которыми в кислороде являются атомы O и молекулы озона O₃.

6. Для осуществления расчетов плазмохимических процессов в топочных газах проведен отбор основных реакций и определен перечень основных активных частиц, принимающих участие в уничтожении примеси NO в топочном газе как на стадии развития стримера, так и в межразрядную паузу. Показаны особенности учета фотоионизации в модели развития стримера в топочном газе установлены основные требования в выбору шага расчета по времени для моделирования развития стримера.

7. На основании расчетов, проведенных по разработанной методике для топочных газов разных составов, впервые установлены области стримера, в которых активность частиц, участвующих в удалении примесей, максимальна, и определено, что эффективность образования активных частиц и их средние концентрации определяются не только процессами на головках стримеров в области сильного поля, но и процессами в канале стримера при относительно слабой напряженности поля.

8. Впервые подтверждено и объяснено экспериментально установленное влияние начальной концентрации примеси NO на эффективность ее очистки; показано, что снижение эффективности очистки связано с усилением роли обратных реакций восстановления молекул примеси за счет роста концентрации молекул NO₂; в частности

получено, что при росте начальной концентрации NO со 150 до 900 ppm степень очистки газа в результате прохождения одного стримера снижается с 18% до 10%.

9. В результате анализа внешних условий, определяющих технологию очистки топочных газов от вредных примесей, выявлены наиболее значимые факторы, влияющие на эффективность образования активных частиц в разряде, а именно: средняя напряженность электрического поля в разрядном промежутке, с ростом которой возрастает наработка активных частиц; длительность фронта импульса воздействующего напряжения, с увеличением которого уменьшается число нарабатываемых активных частиц.

10. Впервые дано объяснение влияния роста начальной концентрации NO, который при прочих равных условиях снижает эффективность удаления этой примеси за счет обратных реакций.

Основное содержание диссертации изложено в следующих работах:

1. Соколова М.В., Жуков С.В. Простой метод расчета коэффициента ионизации топочных газов// IX Всероссийская конференция по физике газового разряда: Тез. докл. - Рязань, 1998 – С.26-28 .

2. Жуков С.В., Соколова М.В., Белогловский А.А. Развитие положительного стримера в коротких промежутках в воздухе и кислороде// Международный симпозиум по технике высоких напряжений (ISH 99): Тр. симп. - Лондон, Великобритания, 1999, - С. 3.193.P3-3.196.P3.

3. Жуков С.В., Соколова М.В., Темников А.Г. Анализ образования активных частиц в стримере в топочных газах// 14-й Международный симпозиум по химии плазмы (ISPC-14): Тр. симп. - Прага, Чехия, 1999, -С. 1085-1090.

Печ. л. 125

Тираж 100

Заказ 140

Типография МЭИ, Красноказарменная, 13.