

**ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ,  
ПРОИСХОДЯЩИХ ПРИ ЭЛЕКТРОННО-ЛУЧЕВОЙ ОЧИСТКЕ ДЫМОВЫХ ГАЗОВ**

**Часть 1. Описание компьютерной программы**

**1. Введение**

Электронно-лучевая очистка (ЭЛО) дымовых газов находит в последнее время широкое применение в промышленности и, в первую очередь, в теплоэнергетике. ЭЛО характеризуется высокой степенью одно-временной очистки от SO<sub>2</sub>, NO<sub>x</sub>, (полиароматических углеводородов) ПАУ, летучих органических соединений (ЛОС); компактностью и экономичностью по сравнению с традиционными химическими методами очистки; продуктом ЭЛО является сульфаты-нитраты аммония, которые могут использоваться в качестве сельскохозяйственных удобрений [1]. Суть технологии ЭЛО дымовых газов заключается в следующем: дымовые газы облучаются ускоренными электронами, перед облучением в газы вводится аммиак, либо в виде капель водного раствора, либо в виде пара. В процессе воздействия ускоренных электронов на газовую среду образуются возбужденные молекулы и атомы, ионы, свободные радикалы и др., которые, взаимодействуя с оксидами серы и азота и введенным аммиаком, формируются соли сульфат-нитрат аммония, которые могут использоваться в сельском хозяйстве в качестве удобрений. Процессы, происходящие при ЭЛО дымовых газов имеют сложный физико-химический характер и зависят от многих параметров, таких как доза облучения, температура дымовых газов, начальная концентрация загрязняющих веществ, влажность дымовых газов и др. Оптимизация данной технологии с целью понижения энергозатрат может быть проведена либо экспериментально [2], либо численным моделированием (численный эксперимент). В данной работе описаны основные этапы разработки программного комплекса, численно моделирующего радиационно-химические процессы, имеющие место при ЭЛО дымовых газов процессы для дальнейшей оптимизации технологии ЭЛО.

**2. РАЗРАБОТКА КОМПЬЮТЕРНОЙ ПРОГРАММЫ**

**2.1. Математическая модель процессов ЭЛО**

Разработка математической модели радиационно-химических процессов, происходящих при ЭЛО дымовых газов описана в [3] и приведена в табл. 1.

Таблица 1 – Математическая модель процессов, происходящих во время ЭЛО газов

№ пп	Процесс	Основные характеристики и образующиеся продукты	Математическое описание процесса
1	Прохождение первоначально нерасходящегося пучка ускоренных электронов через газ	Распределение мощности дозы от времени	$\dot{D} = \frac{D_0}{\sigma \sqrt{2\pi}} e^{\left[-0.5 \left(\frac{t-T/2}{\sigma}\right)^2\right]} \quad (1)$
2	Физические и физико-химические процессы при прохождении через дымовые газы	Возбужденные молекулы, ионы, радикалы	$\frac{dn_i}{dt} = G_{n_i} \dot{D} x_i \rho \quad (2)$
3	Химические реакции промежуточных и конечных продуктов	Стабильные химические соединения	$\frac{dn_i}{dt} = n_i \sum_n k_i^{(n)} \prod_{k=1}^n n_k \quad (3)$
4	Рост температуры газов вследствие поглощения энергии ускоренных электронов	Рост температуры газа со временем	$dT(t) = \frac{dD(t)}{c} \quad (4)$

**2.2. Описание компьютерной программы, моделирующей процессы ЭЛО**

На первом этапе были собраны константы скоростей химических реакций и значения радиационно-химического выхода из [4, 5] и помещены в таблицу «Reactions» базы данных (БД). Также, были собраны

наименования химических компонент (веществ) (возбужденные молекулы, ионы, свободные радикалы и др.) и были записаны в таблицу «Components» БД. Всего было собрано констант скоростей и значения радиационно-химического выхода для более чем 2000 химических и радиационно-химических реакций и более, чем 500 наименований химических компонент. В таблице «Components» также указывается начальные концентрации компонент маточного газа, которые могут меняться для моделирования разных по содержанию и составу дымовых газов.

Выбор реакций и химических компонент участвующих в моделировании осуществляется по следующему обобщенному алгоритму:

1. Выбирается вещество с ненулевой начальной концентрацией из таблицы «Components».
2. Затем выбирается следующее вещество с ненулевой начальной концентрацией из таблицы «Components», если между ними есть реакция, то соответствующая реакция из таблицы «Reactions», если она не была отмечена как участвующая, отмечается как участвующая в моделировании процесса и продукты этой реакции отмечаются как участвующие в реакции (если данное вещество не было помечено как участвующее в моделировании). Также, на этом этапе добавляются реакции радиолитического разложения маточного газа (формула (2) (см. Табл. 1)).
3. Шаги 1-2 повторяются до тех пор, пока число добавленных реакций не станет равным нулю.

После выбора радиационно-химических и химических реакций, участвующих в процессе моделирования составляется система обыкновенных дифференциальных уравнений (ОДУ) в соответствии с формулой (3) из табл. 1 и записывается в файл вместе с начальными значениями концентраций веществ, участвующими в процессе моделирования. Так, например, в моделировании ЭЛО процессов дымовых газов, содержащих изначально 8 компонент, участвуют 100 промежуточных веществ и 800 радиационно-химических и химических реакций. Данная система ОДУ является жесткой и решается методом Гира в представлении Нордсика [6, 7]. Также, в компьютерной программе моделирования процессов ЭЛО дымовых газов, задаются следующие параметры процесса: начальная температура газов; доза облучения газов; время облучения газов, т.е. время, которое находится газ в реакционной камере; состав газа и начальная концентрация компонент дымовых газов.

После того, как в отдельный файл записана жесткая система ОДУ совместно с начальными условиями и технологическими параметрами процесса ЭЛО дымовых газов, программа считывает и решает их, используя метод Гира. Также, на каждом шаге вычислений по формулам (1) и (4) (см. Табл. 1) рассчитывается соответственно текущая мощность дозы облучения и текущая температура газа, которая меняется вследствие поглощения энергии пучка ускоренных электронов.

После решения системы жестких ОДУ в компьютерной программе можно визуализировать графики зависимости концентрации всех компонент газа от времени облучения; вывести на экран и в файл степень очистки дымовых газов от загрязнителей (SO<sub>2</sub>, NO<sub>x</sub>, ПАУ, ЛОС). Блок-схема компьютерной программы представлена на рис. 1.

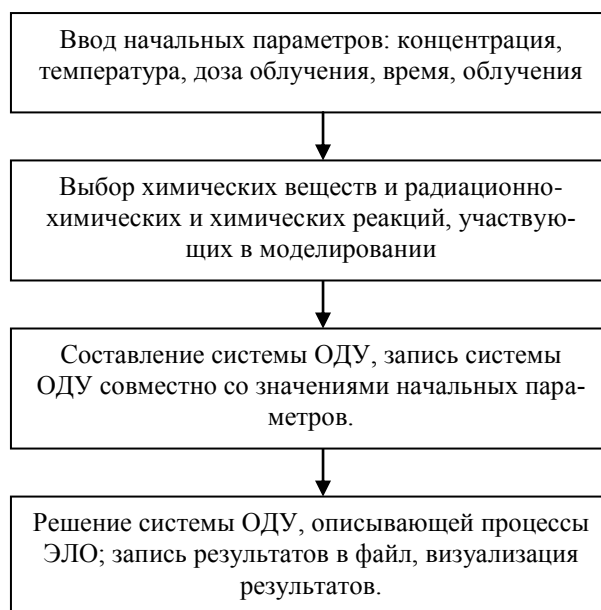


Рисунок 1 – Блок-схема компьютерной программы, моделирующей процессы ЭЛО

### 3. Выводы.

В статье описана компьютерная программа, моделирующая процессы одновременной электронно-лучевой очистки дымовых газов от  $\text{SO}_2$ ,  $\text{NO}_x$ . Создана программа, решающая жесткую систему ОДУ методом Гира. Описаны основные блоки программы.

#### Литература

1. Fainchtein, O.L. Developing wet variants of electron-beam removal of  $\text{NO}_x$ ,  $\text{SO}_2$  and particulate from flue gas [Текст] / O. L. Fainchtein, V. V. Piotrovskiy, M. V. Sagaidak et al. // In: Cooper W.J., Curry R.D., O'Shea K.E. (Eds.) Environmental Application of Ionizing Radiation. New York : Wiley, 1998.– С. 123–138.– ISBN 0-471-17086-0.
2. Fainchtein, O.L. On problems of reducing energy consumption for irradiation of flue gas in the electron beam gas treatment technology [Текст] / O.L. Fainchtein, M.V. Sagaidak, V.V. Morgunov // Radiation Physics and Chemistry.– 2002.– №65.– С. 405–414.
3. Моргунов, В.В. Математическая модель процессов электронно-лучевой очистки дымовых газов от  $\text{SO}_2$ ,  $\text{NO}_x$ , ПАУ, ЛОС [Текст] / В.В. Моргунов, А.Л. Файнштейн, А.М. Шкілько // Восточно-европейский журнал передовых технологий– 2011– №3/11.
4. Mätzing, H. Chemical kinetics of flue gas cleaning by irradiation with electron [Текст] / H. Mätzing // Advances in Chemical Physics.– 1991.– Т. LXXX.– С. 315–402.
5. NIST Chemical Kinetics Database [Электронный ресурс] / National Institute of Standards and Technology, Gaithersburg, Maryland– Режим доступа : \www/ URL : <http://kinetics.nist.gov/>– 25.05.2011– Загл. с экрана.
6. Gear, C.W. The automatic integration of ordinary differential equations [Текст] / C.W. Gear // Communications of the ACM.– 1971. Т. 14, № 3.– С. 176–179.
7. Gear, C.W. DIFSUB for solution of ordinary differential equations [Текст] / C.W. Gear // Communications of the ACM.– 1971. Т. 14, № 3.– С. 185–190.

УДК 519.6

Моргунов В.В., Шкілько А.М.

### ЧИСЕЛЬНЕ МОДЕЛЮВАННЯ ФІЗИКО-ХІМІЧНИХ ПРОЦЕСІВ, ЩО ВІДБУВАЮТЬСЯ ПРИБЕЛЕКТРОННО-ПРОМЕНЕВОМУ ОЧИЩЕННІ ДИМОВИХ ГАЗІВ

Описані основні блоки комп'ютерної програми, що моделює процеси електронно-променевого очищення димових газів. Наведено математичну модель процесів. Наданий алгоритм вибору хімічних реакцій і хімічних компонентів, що беруть участь у моделюванні, а також блок-схема програми.

Morgunov V.V., Shil'ko A.M.

### NUMERICAL SIMULATION OF PHYSICAL AND CHEMICAL PROCESSES UNDER ELECTRON-BEAM FLUE GAS CLEANING

This article describes the basic building blocks of a computer program that simulates the processes of electron-beam flue gas treatment. A mathematical model of the processes is given. The algorithm of the selection of chemical reactions and chemical components involved in modeling, as well as a block diagram of the program are given.