

ТЕПЛОЭНЕРГЕТИКА

УДК 621.314.211

Полуэмпирическая математическая модель физико-химических процессов в проточных плазмохимических реакторах газового разряда

В.К. Семенов
ФГБОУВО «Ивановский государственный энергетический университет имени В.И. Ленина»,
г. Иваново, Российская Федерация
E-mail: semenov_vk@mail.ru

Авторское резюме

Состояние вопроса: В настоящее время теория плазмохимических реакторов ограничена исследованием реакторов идеального смешения и идеального вытеснения в изотермических условиях в отсутствие связи между плазмохимическими, гидродинамическими и теплофизическими процессами. Необходима разработка соответствующих математических моделей, учитывающих различные режимы работы реакторов с неизотермическими потоками с учетом взаимосвязанности указанных процессов.

Материалы и методы: Использована теория плазмохимических реакций, адаптированная к неизотермическим потокам, теория конвекции в приближении Буссинеска, принцип подчинения синергетики и методы математической физики.

Результаты: Предложена математическая модель и методика расчета физико-химических процессов в проточных газоразрядных реакторах, отличающаяся от известных учетом взаимной связи между физико-химическими, гидродинамическими и теплофизическими процессами и позволяющая теоретически определить геометрические размеры активной зоны и режимы работы реактора, обеспечивающие его наибольшую эффективность.

Выводы: Методика апробирована при моделировании плазмохимических процессов в реакторах-озонаторах фронтальных волн ионизации, емкостного и барьерного разрядов. Она может быть использована как при проектировании газоразрядных плазмохимических реакторов, так и в их эксплуатации при оптимизации режимов работы.

Ключевые слова: плазмохимический реактор, взаимосвязанные физико-химические процессы, подгоночные коэффициенты кинетического уравнения, принцип подчинения, смешанная конвекция.

Semiempirical mathematical model of physico-chemical processes in flow-type plasma-chemical gas discharge reactors

V.K. Semenov
Ivanovo State Power Engineering University, Ivanovo, Russian Federation
E-mail: semenov_vk@mail.ru

Abstract

Background: The present theory of plasma-chemical reactors is limited to the study of ideal-mixing and ideal displacement reactors under isothermal conditions in cases when there is no connection between plasma-chemical, hydrodynamic and thermophysical processes. It is necessary to develop appropriate mathematical models that take into account different operating modes of non-isothermal flow reactors, which correspond to these processes, and their interconnection.

Materials and methods: The study employed the theory of plasma-chemical reactions adapted to nonisothermal flows and the theory of convection in Boussinesq approximation, the principle of subordination of synergetics and methods of mathematical physics.

Results: A mathematical model and a methodology for calculating physico-chemical processes in flow-type gas-discharge reactors are proposed. The feature distinguishing them from the known ones consists in taking into account the interconnection between physicochemical, hydrodynamic and thermophysical processes, which makes it possible to theoretically determine the geometric dimensions of the active zone and the operating modes of the reactor, ensuring its greatest efficiency.

Conclusions: The technique has been tested in modeling plasma-chemical processes in ozonizer reactors of frontal ionization waves, capacitive and barrier discharges. It can be used both in the design of gas-discharge plasma-chemical reactors and in their operation for optimizing the operation modes.

Key words: plasma-chemical reactor, interrelated physicochemical processes, fitting coefficients of kinetic equation, principle of subordination, mixed convection.

DOI: 10.17588/2072-2672.2018.4.005-012

Состояние вопроса. Различные крупнотоннажные химические процессы обычно осуществляют в потоках жидкости или газа, проходящих через реактор с постоянной температурой. При этом реактор может быть либо пустым, либо заполненным слоем катализатора. Примерами таких процессов в химической технологии являются синтез аммиака, производство серной кислоты, крекинг нефти и пр. В энергетике подобные процессы осуществляются в системах водоподготовки на ТЭС и АЭС. Аппаратурное оформление в названных производствах базируется на теории реакторов двух типов – идеального смешения и идеального вытеснения. В реакторах первого типа исследуются химические реакции при условии, что время протока реагентов через реактор мало по сравнению с временем их пребывания в нем при их непрерывном перемешивании, т.е. среда считается однородной, изотермической и непроточной. Теория реакторов другого типа касается исследования кинетики химических реакций в потоках, когда течение реагентов через реактор носит ламинарный характер, а расход газа и его температура являются постоянными. В этом случае уравнения химической кинетики не связаны с уравнениями гидродинамики и теплопереноса. Вышеназванные процессы характеризуются, как правило, небольшим количеством реакций, и основной задачей теории является определение времени пребывания исходных компонентов в реакторе.

Наряду с традиционными химическими технологиями в последние годы интенсивно развивается химия высоких энергий, в частности плазмохимия, различные приложения которой лежат в области нанотехнологий [1]. Процессы этого направления являются малотоннажными. Они осуществляются в проточных реакторах в плазме газового разряда с объемными источниками энергии как в ламинарных, так и в турбулентных неизотермических потоках в условиях как вынужденной, так и смешанной конвекции. Количество химических реакций, идущих с образованием как радикалов, так и электронно и колебательно возбужденных молекул и атомов, при этом исчисляется десятками сотен [2]. Другим кардинальным отличием плазмохимических реакторов является взаимосвязанность гидродинамических, теплофизических и физико-химических процессов, тогда как в реакторах крупнотоннажной химии при постоянстве температуры среды такая взаимосвязанность отсутствует

[3, 4]. По назначению плазмохимические реакторы делятся на реакторы по производству целевого продукта и конверсионные [5–7].

Поскольку скорости химических реакций в плазмохимических реакторах зависят от поступательной и колебательной температур, то знания времени пребывания компонентов в реакторе совершенно недостаточно для теории. Необходимо знать, как концентрации полученных продуктов изменяются вдоль активной зоны реактора. Дело в том, что при объемном энерговыделении растет температура газа вдоль потока, а, по закону Аррениуса, растут и константы скоростей гибели продуктов, и может получиться так, что при слишком протяженной активной зоне концентрация целевого продукта на выходе из реактора окажется нулевой [8]. Ничего подобного в изотермических потоках не происходит, поэтому в этих потоках вопрос теоретического определения оптимальной длины активной зоны реактора принципиально не может быть решен.

В течение всех лет развития плазмохимии теоретические разработки в ней интенсивно ведутся в области исследования плазмохимических реакций в изотермических условиях, что применительно лишь в узкой области – для реакторов идеального смешения и идеального вытеснения. Вопросы, связанные с исследованием взаимосвязанных физико-химических процессов в неизотермических потоках, по-прежнему находятся на втором плане, и определение оптимальной геометрии активной зоны реактора решается чисто эмпирически [4, 7, 8]. Для вывода теории плазмохимических реакторов на твердую научную основу нами разработана и апробирована на ряде задач математическая модель, которая позволяет достаточно корректно описать различные режимы работы реакторов с неизотермическими потоками, не ограничиваясь рассмотрением вышеназванных предельных случаев.

Материалы и методы исследования. В любом плазмохимическом реакторе зарождается целый каскад разнообразных плазмохимических превращений, в основе которых лежат, строго говоря, взаимосвязанные между собой электрофизические, физико-химические, газодинамические и теплофизические процессы. Целью исследования этих процессов является определение оптимальной геометрии активной зоны реактора и оптимальных режимов его работы. При этом уровень описания должен позволять по заданному составу газов на

входе в аппарат, энергокладу и теплоотводу от аппарата предсказать состав газов на выходе из него. Сложность выбора адекватной математической модели, в первую очередь, связана с механизмом подвода энергии, а также с многоканальностью и обилием плазмохимических реакций, количество которых исчисляется сотнями. Энергоклад в газ осуществляется во время отдельных импульсов тока, когда объем активной зоны заполняется большим количеством разветвленных стримеров. При этом их количество, степень заполнения разрядного промежутка, пространственная локализация, геометрия и переносимый заряд от импульса к импульсу меняются случайным образом. Во время распространения отдельного стримера на его фронте в области высокой напряженности поля за счет электронно-колебательного возбуждения молекул электронными ударами происходит рождение химически активных частиц и свободных радикалов, которые инициируют различные реакции. Причем плазмохимические реакции протекают как во время приложения импульса напряжения в активной фазе разряда, так и во время паузы в режиме послесвечения. Наличие указанных осложняющих обстоятельств приводит к тому, что размеры активной зоны реактора не прогнозируются теоретически, а определяются чисто эмпирически.

Нами предложена математическая модель взаимосвязанных физико-химических процессов, позволяющая теоретически определить оптимальный размер зоны и оптимальный энергоклад, определяющий режим работы реактора. Она основана на следующей системе дифференциальных уравнений [9, 10]:

$$\frac{\partial n_i}{\partial t} + \text{div}(n_i \vec{v} - D_i \nabla n_i) = \sum_l k_{R}^{il}(T_v) n_l n_i - \sum_m k_s^{im}(T) n_i n_m; \quad (1)$$

$$\frac{\partial \vec{v}}{\partial t} + (\vec{v} \nabla) \vec{v} = -\frac{1}{\rho_0} \nabla p + \nu \Delta \vec{v} - \beta T \vec{g}; \quad (2)$$

$$\text{div} \vec{v} = 0; \quad (3)$$

$$\frac{\partial T}{\partial t} + (\vec{v} \nabla) T = a \Delta T + \frac{q}{c_p \rho_0}; \quad (4)$$

$$\frac{\partial T_v^i}{\partial t} + (\vec{v} \nabla) T_v^i = a_v^i \Delta T_v^i + \frac{q_v^i}{c_v^i \rho^i}. \quad (5)$$

Здесь первое уравнение описывает кинетику плазмохимических реакций в пространственно-неоднородной среде. В нем приняты следующие обозначения: n – концентрация частиц; v – скорость их движения в потоке; D – коэффициент диффузии. Следующие три уравнения являются уравнениями смешанной конвекции в приближении Буссинеска, пятое уравнение описывает перенос энергии колебательно-возбужденных молекул.

Так как интенсивность рождения химически активных частиц определяется энергией, запасенной на колебательных степенях свободы, уравнение переноса энергии записано в двухтемпературном приближении, при котором уравнение переноса колебательной энергии отделено от соответствующего уравнения переноса поступательно-вращательной энергии. Это можно сделать, поскольку уравнение переноса полной энергии является линейным. При этом предполагается, что между поступательным и вращательным движениями имеется термодинамическое равновесие, характеризуемое температурой T , тогда как в колебательном движении имеется равновесие только «в себе» и оно характеризуется температурой T_v .

Уравнения рождения и гибели химически активных частиц, различающиеся лишь разной температурной зависимостью коэффициентов скоростей реакций (одни зависят от T_v , а другие – от T), по структуре одинаковы, поэтому в обобщенном виде они представлены уравнениями одного типа. В уравнении (2) сила тяжести представлена в виде $\rho \vec{g} = \rho_0 \vec{g} - \rho_0 \beta T \vec{g}$, где ρ_0 – плотность газа при температуре T_0 на входе в реактор; β – коэффициент объемного расширения газа. Поскольку $\text{rot}(\nabla p + \rho_0 \vec{g}) = 0$, то под p понимается избыточное (над гидростатическим) давление, т.е. $\nabla p + \rho_0 \vec{g} \equiv \nabla p$. В уравнениях приняты следующие обозначения:

$$k_R(T_v) = A(T_v) \exp\left(-\frac{E_{av}}{RT_v}\right) - \text{коэффициент скорости химической реакции, обусловленной колебательным возбуждением молекул;}$$

$k_s(T) = k_{s0} \exp\left(-\frac{E_a}{RT}\right) - \text{коэффициент скорости химической реакции гибели молекул-продуктов прямой реакции; } E_a - \text{энергия активации процесса; } R - \text{универсальная газовая постоянная;}$

$a = \frac{\lambda}{c_p \rho_0}$, $a_v^i = \frac{\lambda_v^i}{c_v^i \rho^i}$ – коэффициенты теплопроводности, определяемые поступательным и колебательным движением газа соответственно; λ , λ_v – коэффициенты теплопроводности; c_p , c_v – удельные теплоемкости газа; n_i , n_l – концентрации молекул конвертируемых газов. Связь между уравнениями (4) и (5) осуществляется через объемные источники и стоки тепла q , q_v , которые, в свою очередь, должны находиться из решения электрофизической части задачи, определяющей параметры и характер распределения стримеров в активной зоне реактора. Обобщенно их можно представить в следующем виде:

$$q(\vec{r}, t) = f \cdot \vec{j} \vec{E} + \sum_i P_{vT}^i + \sum_i \alpha^i P_R^i; \quad (6)$$

$$q_v^i(\vec{r}, t) = P_{ev}^i - P_{vT}^i - P_R^i, \quad (7)$$

где $f \cdot \vec{jE}$ – энергия поступательного движения, переданная в единицу времени в единице объема электронами, определяемая плотностью тока j и напряженностью поля E ; P_{ev}^i – энергия колебательного движения молекул i -го сорта; P_{VT}^i – энергия, обусловленная VT -релаксацией с нижних энергетических уровней; P_R^i – энергия, идущая на химические реакции и сопутствующие процессы; $\alpha^i P_R^i$ – энергия, выделенная в химических реакциях и преобразованная в тепловую. Заметим, что упомянутые выше модели чистого смешения и чистого вытеснения являются частными предельными случаями данной модели.

Приведенные уравнения должны быть дополнены соответствующими граничными условиями: на входе в плазмохимический реактор должны быть заданы профили скорости и температуры, расход газа, концентрации веществ, вступающих в химические реакции, температура стенок реактора, теплоотвод через стенки реактора и объемные источники тепла. Таким образом, исходная система уравнений (1)–(5), дополненная электрофизическими уравнениями и соответствующими краевыми условиями, представляет собой единую математическую модель взаимосвязанных физико-химических процессов. Заметим, что в случае турбулентного движения газа указанная система уравнений стандартным методом преобразуется в уравнения для осредненных по турбулентным пульсациям величин с соответствующими для турбулентного движения коэффициентами переноса.

Практическая реализация модели и результаты. Практическая реализация предлагаемой модели во всем ее объеме невозможна из-за целого ряда трудностей принципиального характера. Так, при турбулентном движении одним из слабых мест теории являются всякого рода предположения о турбулентных коэффициентах переноса. Обычно исходят из гипотезы Рейнольдса о равенстве турбулентных коэффициентов вязкости, диффузии и температуропроводности. Сама по себе эта гипотеза не вполне правомерна (хотя, конечно, и не лишена оснований). Она, безусловно, оправдана в качественном смысле, но в количественном отношении названные коэффициенты могут отличаться друг от друга на 50 % и более. Кроме того, для решения указанных выше уравнений нужно задать определенные зависимости коэффициента турбулентной вязкости от координат и усредненной скорости потока газа. Как известно, эти зависимости зиждутся на различного рода моделях и гипотезах, справедливость которых или вообще сомнительна, или может иметь место в довольно узких пределах (даже в этом случае она должна быть подтверждена эмпирически). Другая принципиальная труд-

ность связана с невозможностью детального определения параметров стримеров, их количества и закона распределения в пространстве и во времени. Третья трудность связана с корректным определением коэффициентов скоростей реакций рождения и гибели химически активных частиц, протекающих через колебательное возбуждение основных и электронно-возбужденных состояний. Уже только эти обстоятельства говорят о том, что вся теория физико-химических процессов в реакторе может претендовать в лучшем случае на полуколичественный характер. Тем не менее прагматика предлагаемой математической модели очевидна: она позволяет правильно объяснить и рассчитать зависимость концентрации продукта химических реакций от длины активной зоны реактора. Как явствует из модели, эта связь обусловлена зависимостью константы скорости гибели продукта от температуры потока, растущей вдоль продольного размера зоны и определяемой удельным энерговыделением и эффективностью системы охлаждения.

Предложенная модель допускает дальнейшее упрощение. Поскольку стримеры имеют хаотические параметры, а время их жизни и время паузы между их поколениями мало по сравнению со временем пребывания газа в реакторе, то с учетом турбулентных пульсаций можно ввести предположение о равномерном заполнении стримерами разрядного промежутка. Следовательно, распределение химических активных частиц, находящихся в стримерных следах, следует тоже считать равномерным. Следующее допущение касается коэффициентов скоростей реакций рождения химически активных частиц и радикалов. Согласно уравнению (5), при нормальном режиме реактора, когда процесса VT -релаксации не происходит и вся закаченная в колебательное движение энергия идет на проведение химических реакций, колебательная температура во времени остается величиной постоянной, изменяясь только вдоль активной зоны. Следовательно, постоянными будут и соответствующие ей коэффициенты скорости реакции. Здесь можно пойти дальше, если предположить, что время жизни возбужденных уровней мало по сравнению со временем распространения стримеров, а время гибели активных частиц, напротив, велико по сравнению с ними. В таких условиях из уравнений (5) вытекает, что концентрация активных частиц определяется подведенной энергией, т.е. можно вообще отказаться от рассмотрения кинетики рождения активных частиц и считать скорость их рождения пропорциональной удельному энерговыделению. В рамках такого подхода можно достаточно корректно исследовать различные каналы рождения и гибели частиц в газовом потоке.

Наконец, для определения длины активной зоны реактора можно пойти по пути даль-

нейшего упрощения модели, позволяющего значительно сократить количество рассматриваемых химических реакций. Теоретической базой такого упрощения является основной принцип синергетики – принцип подчинения [11]. Согласно этому принципу, долгоживущие моды (компоненты) подчиняют себе короткоживущих. Благодаря этому задача со многими степенями свободы приводится к задаче с одной или в общем случае с несколькими степенями свободы. Применительно к рассматриваемой ситуации это означает, что всегда можно выделить основные долгоживущие компоненты, для рождения и гибели которых можно записать аппроксимирующие реальный процесс уравнения. Причем эти уравнения, количество которых, как правило, невелико (1–10), могут быть получены как на основе детального анализа различных каналов плазмохимических реакций, так и на основании опытных данных, т.е. эмпирически. Второй путь, разумеется, является более надежным и предпочтительным.

В рамках такого подхода нами предложено следующее модельное полуэмпирическое уравнение, нашедшее применение в практике наших расчетов плазмохимических реакторов различного назначения [9, 12–15]:

$$\frac{\partial n}{\partial t} + \text{div}(\vec{v}n - D\nabla n) = R_0(1 + rx) - n^m k_0 \exp\left(-\frac{E_A}{RT}\right), \quad (8)$$

где m – порядок химической реакции; R_0 – скорость рождения продукта в начале активной зоны при $x = 0$; множитель $(1 + rx)$ учитывает неоднородность скорости рождения продукта от длины активной зоны реактора, обусловленной накоплением колебательно-возбужденных молекул вдоль длины активной зоны, что позволяет косвенно учесть их влияние на скорость рождения продукта, исключив тем самым уравнение (5).

Как показывает анализ уравнения (5), при постоянной удельной мощности среднемассовая колебательная температура линейно растет вдоль активной зоны, что и отражено в уравнении (8). Анализ кинетики химических превращений показывает, что скорость рождения продуктов R_0 и константа скорости гибели k_0 в кинетическом уравнении должны быть пропорциональны удельной мощности разряда w :

$$R_0 = \gamma w, \quad k_0 = \delta + \varepsilon w. \quad (9)$$

Коэффициенты γ , δ , ε , r , m и E_A подлежат экспериментальному определению.

Методика определения подгоночных коэффициентов кинетического уравнения. Указанные коэффициенты находят на основании серии экспериментов. Сначала рассмотрим решение уравнения (8) при неподвижном газе в равновесном состоянии:

$$R_0 = k(T)n^m. \quad (10)$$

В первой серии опытов следует измерить концентрацию продукта в камере при

одинаковых энерговкладах, но различных температурах газа в области низких концентраций при выполнении неравенства $\delta \gg \varepsilon w$. Такой режим будет иметь место при различной интенсивности работы системы принудительного охлаждения. Из формул (9), (10) и из условия $w_1 = w_2$ получим

$$m \ln \left(\frac{n_1}{n_2} \right)_1 = \frac{E_A}{R} \left(\frac{1}{T_1} - \frac{1}{T_2} \right). \quad (11)$$

Во второй серии опытов следует измерить концентрацию продукта при различных подведенных мощностях, но одинаковых температурах газа. Опять-таки такой режим можно создать за счет разной интенсивности работы системы охлаждения. Из условия равенства температур $T_1 = T_2$ и формулы (10) определяем порядок химической реакции

$$m = \frac{\ln \frac{w_1}{w_2}}{\ln \left(\frac{n_1}{n_2} \right)_2}. \quad (12)$$

Подставив значение параметра m в формулу (11), находим выражение для энергии активации:

$$E_A = \frac{Rm \ln \left(\frac{n_1}{n_2} \right)_1}{\frac{1}{T_1} - \frac{1}{T_2}}. \quad (13)$$

Характер дальнейших решений зависит от численного значения порядка химической реакции m . Эксперименты показали, что для конверсионных реакторов и реакторов целевого продукта $m \sim 1$ [12]. Поэтому дальнейший анализ проведем для реакции первого порядка. Для определения k_0 и R_0 обратимся к равенству (10), представив его в виде

$$n = \frac{\frac{\gamma}{\delta} w}{\left(1 + \frac{\varepsilon}{\delta} w \right) \exp\left(-\frac{E_A}{RT}\right)}. \quad (14)$$

При низких удельных мощностях $\frac{\varepsilon}{\delta} w \ll 1$ концентрация продукта прямо пропорциональна удельной мощности разряда:

$$n_{\min} = \frac{\gamma w}{\delta} \exp\left(\frac{E_A}{RT}\right). \quad (15)$$

А при больших энерговкладах имеет место обратное соотношение $\frac{\varepsilon}{\delta} w \gg 1$ и, соответственно, решение (14) приобретает вид

$$n_{\max} = \frac{\frac{\gamma}{\delta} \exp\left(\frac{E_A}{RT}\right)}{\frac{\varepsilon}{\delta}}. \quad (16)$$

Таким образом, построив экспериментальную зависимость концентрации продукта

от удельной мощности разряда и выделив на ней линейный участок и плато, можно определить отношение параметров $\frac{\gamma}{\delta}$ и $\frac{\varepsilon}{\delta}$:

$$\frac{\gamma}{\delta} = \frac{n_{\min}}{w_{\min}} \exp\left(-\frac{E_A}{RT_{\min}}\right); \quad (17)$$

$$\frac{\varepsilon}{\delta} = \frac{n_{\min} \exp\left[-\frac{E_A}{R}\left(\frac{1}{T_{\min}} - \frac{1}{T_{\max}}\right)\right]}{w_{\min} n_{\max}}. \quad (18)$$

Подгоночный параметр δ , в принципе, можно определить на основании исследования решения кинетического уравнения для осредненной поперек сечения концентрации:

$$n(t) = \frac{\gamma w}{k_1(T)} [1 - \exp(-k_1(T)\delta t)], \quad (19)$$

$$\text{где } k_1(T) = \left(1 + \frac{\varepsilon}{\delta} w\right) \exp\left(-\frac{E_A}{RT}\right).$$

Если равновесное состояние устанавливается очень быстро, то получение экспериментальной зависимости $n(t)$ весьма затруднительно и следует рассмотреть иной способ определения вышеназванного параметра. Этот способ связан с измерением зависимости стационарной концентрации продукта от продольной координаты узкого канального реактора с известным расходом газа и распределением газовой температуры в реакторе. Для упрощения получаемого решения от температурной зависимости $T(x)$ следует избавиться, т.е. систему охлаждения реактора настроить так, чтобы она могла обеспечить отвод всего тепла, выделенного в активной зоне через боковые стенки реактора. В этом случае температура газа будет постоянна. Для канального реактора, сложив уравнение (3) с уравнением (8), для $\partial n / \partial t = 0$ имеем

$$\frac{\partial(nu)}{\partial x} + \frac{\partial(nv)}{\partial y} - D \frac{\partial^2 n}{\partial x^2} - D \frac{\partial^2 n}{\partial y^2} = \gamma \omega (1 + r_0 x^s) - \delta k_1 n. \quad (20)$$

Интегрируя это уравнение поперек активной зоны и пренебрегая продольной диффузией, с учетом граничных условий отсутствия диффузионного потока на стенках реактора получим следующее дифференциальное уравнение для концентрации, осредненной по ширине канала h :

$$\frac{dn}{dx} + \alpha n = \beta(1 + rx), \quad (21)$$

где $\alpha = \frac{\delta k_1 h}{G}$; $\beta = \frac{\delta h \gamma \omega}{G}$; $G = \int_0^h u dy$ – расход газа.

Решение этого уравнения имеет следующий вид:

$$n(x) = \frac{\beta r}{\alpha} x + \frac{\beta}{\alpha} \left(1 - \frac{r}{\alpha}\right) [1 - \exp(-\alpha x)]. \quad (22)$$

Определив концентрацию продукта в двух сечениях активной зоны, получим два алгебраических уравнения для нахождения параметров α и δ .

Таким образом, изложенная выше методика позволяет на эксперименте определить все параметры идентификации модельного кинетического уравнения. Из решения системы уравнений (2)–(4) и (8) с соответствующими начальными и краевыми условиями находятся зависимости распределения основных компонентов плазмохимических реакций от геометрии реактора. По характеру полученных распределений определяются оптимальные размеры активной зоны реактора и оптимальный режим его работы (соотношение между удельным энергозатратом и эффективностью системы принудительного охлаждения). Для решения второй части задачи исходная система уравнений дополнялась уравнениями выноса теплоты системой принудительного охлаждения и решалась сопряженная задача по расчету температурного поля в реакторе и в системе охлаждения [10, 12–15]. Заметим, что расчет поля температуры в реакторе при граничных условиях второго рода по упрощенной методике на основе эквивалентного коэффициента теплопередачи в потоке с заданной скоростью газа, по сравнению с решением задачи Буссинеска, дает погрешность до 60 %. Поскольку константа скорости гибели продукта экспоненциально зависит от температуры, то упрощенной методикой расчета пользоваться не следует.

В заключение сформулируем требования к методу решения задачи. Определяющим при этом является тот факт, что в основу модели положен ряд предположений и гипотез: предположение о равномерном распределении стримеров и химически активных частиц по объему активной зоны; гипотеза Рейнольдса; гипотеза, касающаяся выполнения в данной конкретной ситуации принципа подчинения, и пр. Приведенные выше соображения показывают, что при формулировании задачи даже в установленных зависимостях неизбежно введение эмпирических подгоночных параметров, присутствие которых в значительной степени сужает применимость результатов, полученных на основе решения дифференциальных уравнений. Из этого следует, что решение поставленной краевой задачи целесообразно искать на основе метода интегральных соотношений, в котором влияние всякого рода гипотез и эмпирических зависимостей будет в сильной степени сглажено. Заметим, что подобные подходы и методы находят широкое применение в гидродинамике и теплофизике.

Выводы. Исходная математическая модель, дополненная уравнениями отвода теплоты системой принудительного охлажде-

ния, позволяет теоретически определить длину активной зоны реактора и выбрать оптимальный режим его работы. Изложенная методика апробирована в работах по расчету активных зон как конверсионных плазмохимических реакторов, так и реакторов целевого продукта [12–15] и может быть рекомендована для практического использования. Результаты расчетов с приемлемой точностью (погрешность составляла 3–5 %) согласуются с результатами экспериментов.

Список литературы

1. **Пушкарев А.И., Ремнев Г.Е.** Прикладная плазмохимия. – Томск: Изд-во Томск. политех. ун-та, 2011.
2. **Bruggeman P.J., Kushner M.J., Locke B.R.** Gardeniers4 and others // Plasma-liquid interactions: a review and roadmap. *Plasma Sources Science and Technology*. – 2016. – 25. – 053002. – 59 p.
3. **Мешалкин В.П., Панченко С.В., Панченко Д.С.** Анализ теплофизических процессов и режимов работы электротермического реактора с использованием компьютерной модели // Теоретические основы химической технологии. – 2018. – Т. 52, № 2. – С. 141–149.
4. **Михайлов Б.И.** Электродуговые плазмохимические реакторы раздельного, совмещенного и раздельно-совмещенного типов // Теплофизика и аэромеханика. – 2010. – Т. 17, № 3. – С. 425–439.
5. **Plasma-liquid interactions at atmospheric pressure for nanomaterials synthesis and surface engineering / D. Mariotti, J. Patel, V. Svrcek, P. Maguire // Plasma Proc. Polym.** – 2012. – С. 1074–1085.
6. **Плазмохимический реактор на основе импульсного дугового разряда низкого давления для синтеза нанопорошков / И.В. Карпов, А.В. Ушаков, А.А. Лепешев, Л.Ю. Федоров // Журнал технической физики.** – 2017. – Т. 87, вып. 1. – С. 140–145.
7. **Латышенко К.П., Горелик С.А.** Плазмохимический реактор по переработке полимерных отходов в водород и другую ликвидную продукцию // Изв. МГТУ МАМИ. – 2014. – Т. 3, № 1(19). – С. 11–17.
8. **Теория и практика получения и применения озона / В.В. Лунин, В.Г. Самойлович, С.Н. Ткаченко, И.С. Ткаченко.** – М.: Изд-во МГУ, 2016.
9. **Семенов В.К.** Влияние температурного режима барьерного озонатора на синтез озона // Высоковольтная техника и электротехнология: сб. Вып. 1. – 1997. – С. 107–110.
10. **Семенов В.К.** К вопросу теплообмена в вертикальных каналах газоразрядных аппаратов // ТВТ. – 1998. – Т. 36, № 3. – С. 503–507.
11. **Хакен Г.** Синергетика. – М.: Мир, 1980.
12. **Семенов В.К., Трошин С.Л., Мешалкин Д.В.** К вопросу оптимизации длины активной зоны плазмохимического реактора // Теоретические основы химической технологии. – 2003. – Т. 37, № 3. – С. 309–314.
13. **Семенов В.К., Трошин С.Л.** Прогнозирование длины активной зоны канальных плазмохимических реакторов емкостного разряда при синтезе озона // Химическая промышленность. – 2002. – № 9. – С. 34–37.

14. **Семенов В.К.** Прогнозирование длины активной зоны конверсионных плазмохимических реакторов // Вестник ИГЭУ. – 2007. – Вып. 4. – С. 39–41.

15. **Семенов В.К., Бабинова Л.Г.** Оценка эффективности системы охлаждения горизонтальных плазмохимических реакторов целевого продукта // Вестник ИГЭУ. – 2013. – Вып. 2. – С. 15–18.

References

1. Pushkarev, A.I., Remnev, G.E. *Prikladnaya plazmokhimiya* [Applied plasma chemistry]. Tomsk: Izdatel'stvo Tomskogo politekhnicheskogo universiteta, 2011.
2. Bruggeman, P.J., Kushner, M.J., Locke, B.R. Gardeniers4 and others. *Plasma-liquid interactions: a review and roadmap. Plasma Sources Science and Technology*, 2016, 25, 053002, 59 p.
3. Meshalkin, V.P., Panchenko, S.V., Panchenko, D.S. Analiz teplofizicheskikh protsessov i rezhimov raboty elektrottermicheskogo reaktora s ispol'zovaniem komp'yuternoy modeli [Analysis of thermophysical processes and operation modes of the electrothermal reactor using a computer model]. *Teoreticheskie osnovy khimicheskoy tekhnologii*, 2018, vol. 52, no. 2, pp. 141–149.
4. Mikhaylov, B.I. Elektrodugovye plazmokhimicheskie reaktory razdel'nogo, sovmeshchennogo i razdel'no-sovmeshchennogo tipov [Electric arc plasma-chemical reactors of separated, single-chamber and combined types]. *Teplofizika i aeromekhanika*, 2010, vol. 17, no. 3, pp. 425–439.
5. Mariotti, D., Patel, J., Svrcek, V., Maguire, P. Plasma-liquid interactions at atmospheric pressure for nanomaterials synthesis and surface engineering, *Plasma Proc. Polym.*, 2012, pp. 1074–1085.
6. Karpov, I.V., Ushakov, A.V., Lepeshev, A.A., Fedorov, L.Yu. Plazmokhimicheskii reaktor na osnove impul'snogo dugovogo razryada nizkogo davleniya dlya sinteza nanoporoshkov [Plasma-chemical reactor based on a pulsed low-pressure arc discharge for the synthesis of nanopowders]. *Zhurnal tekhnicheskoy fiziki*, 2017, vol. 87, no. 1, pp. 140–145.
7. Lатышенко, К.П., Горелик, С.А. Plazmokhimicheskii reaktor po pererabotke polimernykh otkhodov v vodorod i druguyu likvidnuyu produktsiyu [Plasma-chemical reactor for processing polymer waste into hydrogen and other liquified products]. *Izv. MGTU MAMI*, 2014, vol. 3, no. 1(19), pp. 11–17.
8. Lunin, V.V., Samoylovich, V.G., Tkachenko, S.N., Tkachenko, I.S. *Teoriya i praktika polucheniya i primeneniya ozona* [Theory and practice of obtaining and applying ozone]. Moscow: Izdatel'stvo MGU, 2016.
9. Semenov, V.K. Vliyaniye temperaturnogo rezhima bar'ernogo ozonatora na sintez ozona [Influence of the barrier ozonizer temperature regime on the synthesis of ozone]. *Sbornik: «Vysokovol'tnaya tekhnika i elektrotekhnologiya»*. Vyp. 1 [Collection «High-voltage equipment and electro-technology». Issue 1]. Ivanovo, 1997, pp. 107–110.
10. Semenov, V.K. K voprosu teploobmena v vertikal'nykh kanalakh gazorazryadnykh apparatov [On the problem of heat exchange in vertical channels of gas-discharge devices]. *TVT*, 1998, vol. 36, no. 3, pp. 503–507.
11. Khaken, G. *Sinergetika* [Synergetics]. Moscow: Mir, 1980.
12. Semenov, V.K., Troshin, S.L., Meshalkin, D.V. K voprosu optimizatsii dliny aktivnoy zony plazmokhimi-

cheskogo reaktora [On the problem of optimizing the length of the plasma-chemical reactor core]. *Teoreticheskie osnovy khimicheskoy tekhnologii*, 2003, vol. 37, no. 3, pp. 309–314.

13. Semenov, V.K., Troshin, S.L. Prognozirovaniye dliny aktivnoy zony kanal'nykh plazmokhimicheskikh reaktorov emkostnogo razryada pri sinteze ozona [On the problem of optimizing the length of the plasma-chemical reactor core]. *Khimicheskaya promyshlennost'*, 2002, no. 3, pp. 34–37.

14. Semenov, V.K. Prognozirovaniye dliny aktivnoy zony konversionnykh plazmokhimicheskikh reaktorov [Forecasting the length of the active zone of conversion plasma-chemical reactors]. *Vestnik IGEU*, 2007, issue 4, pp. 39–41.

15. Semenov, V.K., Babikova, L.G. Otsenka effektivnosti sistemy okhlazhdeniya gorizonta'lnykh plazmokhimicheskikh reaktorov tselevogo produkta [Evaluation of the efficiency of the cooling system of horizontal plasma-chemical reactors of the target product]. *Vestnik IGEU*, 2013, issue 2, pp. 15–18.

Семенов Владимир Константинович,

ФГБОУВО «Ивановский государственный энергетический университет имени В.И. Ленина»,
доктор технических наук, профессор кафедры атомных электрических станций,
телефон +7 (4932) 38-57-78,
e-mail: semenov_vk@mail.ru

Semenov Vladimir Konstantinovich,

Ivanovo State Power Engineering University, Doctor of Engineering Sciences (Post-doctoral Degree), Professor of the Nuclear Power Plants Department,
tel. +7 (4932) 38-57-78,
e-mail: semenov_vk@mail.ru

УДК 662.61

Оценка показателей энергогенерирующей станции с низкокипящим рабочим телом в условиях угольной шахты

А.Б. Бирюков, В.В. Варакута, П.А. Гнитиев, А.С. Приходько
ГОУВПО «Донецкий национальный технический университет», г. Донецк, Украина
E-mail: birukov.tff@gmail.com, varakutaviktor@ukr.net, gnitiev.pavel@gmail.com

Авторское резюме

Состояние вопроса: Известен ряд научно-технических решений по использованию вторичной и низкопотенциальной теплоты в различных областях хозяйственной деятельности. Одним из перспективных вариантов является использование паротурбинных установок на низкокипящих рабочих телах, которые, несмотря на низкий КПД, получают распространение. Вопросы использования вторичной и низкопотенциальной теплоты при помощи паротурбинных установок на низкокипящих рабочих телах в условиях угольных шахт не решены. В связи с этим актуальной является оценка реальных энергетических характеристик энергогенерирующей станции на низкокипящих рабочих телах в зависимости от изменения внешних факторов.

Материалы и методы: Расчетные оценки эффективности использования вторичной и низкопотенциальной теплоты шахты для электрогенерации при помощи паротурбинных установок на низкокипящих рабочих телах получены при помощи стандартных методов, используемых в технической термодинамике. Для решения поставленной задачи проанализированы и классифицированы по температурным уровням все доступные в условиях угольной шахты источники вторичной и низкопотенциальной теплоты; для определения теплового потока вторичной и низкопотенциальной теплоты каждого вида, утилизация которого возможна при помощи паротурбинных установок на R407c, использованы уравнения теплового баланса и учтен температурный потенциал каждого источника вторичной и низкопотенциальной теплоты; для определения характеристик турбины использована стандартная методика расчета, при этом входными данными являются расход паров низкокипящих рабочих тел, температуры нагревателя и холодильника.

Результаты: Впервые для условий угольной шахты установлены показатели эффективности энергогенерирующей станции на базе одновенцовой конденсационной турбины в зависимости от изменяющихся температур конденсации, определяемых температурой холодильника. Установлено, что в течение года наиболее длительным является промежуток использования станции с наибольшей температурой холодильника 12 °С, при этом тепловой поток вторичной и низкопотенциальной теплоты, который может быть использован в условиях рассмотренной шахты, составляет 80,6 МВт. Для этих наихудших условий КПД генерации составляет 4,7 %, а мощность электрического генератора – 3,79 МВт.

Выводы: Полученные результаты необходимы при проектировании оборудования для использования вторичной и низкопотенциальной теплоты в условиях угольных шахт.

Ключевые слова: вторичная и низкопотенциальная теплота, паротурбинная установка, низкокипящее рабочее тело, энергогенерирующая станция, угольная шахта.