

УДК 519.688

Сергей Петрович Бобков

ФГБОУ ВО «Ивановский Государственный химико-технологический университет», доктор технических наук, профессор кафедры информационных технологий и цифровой экономики, Россия, Иваново, e-mail: bsp@isuct.ru

Ирина Александровна Астраханцева

ФГБОУ ВО «Ивановский Государственный химико-технологический университет», доктор экономических наук, профессор кафедры информационных технологий и цифровой экономики, Россия, Иваново, e-mail: i.astrakhantseva@mail.ru

Владимир Павлович Жуков

ФГБОУ ВО «Ивановский государственный энергетический университет имени В.И. Ленина», доктор технических наук, профессор кафедры прикладной математики, Россия, Иваново, e-mail: zhukov-home@yandex.ru

Елена Сергеевна Бобкова

Российский государственный университет нефти и газа (НИУ) имени И.М. Губкина, доктор химических наук, доцент кафедры физической химии, Россия, Москва, e-mail: lenabobkova777@gmail.com

Имитационное моделирование генератора озона

Авторское резюме

Состояние вопроса. Промышленное сжигание топлива приводит к загрязнению окружающей среды дымовыми газами, содержащими оксиды серы, углерода, азота, которые относятся к классу токсичных веществ. Одним из методов обезвреживания отходящих газов является их химическая очистка с применением озона, который позволяет ускорять реакции окисления оксидов до легко утилизируемых соединений. Одним из промышленных способов получения озона является его генерация (синтез) из кислородсодержащих смесей в установках, в которых реализуются высоковольтные электрические разряды. В связи с этим совершенствование методов расчета и конструктивного оформления генераторов озона является актуальной задачей.

Материалы и методы. В исследовании использованы имитационные модели, построенные на основе метода Монте-Карло, позволяющего описывать случайные процессы, используя как детерминированные, так и вероятностные правила.

Результаты. Разработана имитационная модель генератора озона в барьерном электрическом разряде. Предложена общая методология разработки имитационной модели генератора озона. Разработан алгоритм моделирования. Рассмотрено описание отдельных стадий процесса. Показана адекватность описания имитационной моделью данных физического эксперимента.

Выводы. Полученные данные о неоднородном распределении активных частиц в рабочей зоне аппарата дают возможность для усовершенствования конструкций генератора озона. Использование дискретного стохастического подхода является перспективным направлением исследований, что обусловлено его возможной расчетной реализацией на современной компьютерной технике в рамках технологии параллельных вычислений.

Ключевые слова: имитационное моделирование, дискретные модели, случайные процессы, электро-синтез озона

Sergei Petrovich Bobkov

Ivanovo State University of Chemistry and Technology, Doctor of Engineering Sciences (Post-doctoral degree), Professor of Information Technology and Digital Economy Department, Russia, Ivanovo, e-mail: bsp@isuct.ru

Irina Aleksandrovna Astrakhantseva

Ivanovo State University of Chemistry and Technology, Doctor of Economics (Post-doctoral degree), Professor of Information Technology and Digital Economy Department, Russia, Ivanovo, e-mail: i.astrakhantseva@mail.ru

Vladimir Pavlovich Zhukov

Ivanovo State Power Engineering University, Doctor of Engineering Sciences (Post-doctoral degree), Professor of Applied Mathematics Department, Russia, Ivanovo, e-mail: zhukov-home@yandex.ru

Elena Sergeevna Bobkova

Russian State University of Oil and Gas named after I.M. Gubkin, Doctor of Chemistry, (Post-doctoral degree), Associate Professor of Physical Chemistry Department, Russia, Moscow, e-mail: lenabobkova777@gmail.com

Simulation modeling of ozone generator

Abstract

Background. Industrial combustion of fuel leads to pollution of the environment with flue gases containing oxides of sulfur, carbon, and nitrogen, which belong to toxic substances. One of the methods of neutralizing exhaust gases is their chemical purification using ozone, which allows accelerating the oxidation reactions of oxides to easily recyclable compounds. One of the industrial methods to obtain ozone is its generation (synthesis) from oxygen-containing mixtures in installations in which high-voltage electrical discharges are used. In this regard, improving the methods of calculation and design of ozone generators is an urgent task.

Materials and methods. The authors have used simulation models based on the Monte Carlo method, which allows random processes to be described using both deterministic and probabilistic rules.

Results. A simulation model of an ozone generator in a barrier electric discharge has been developed. A general methodology to develop a simulation model of an ozone generator has been proposed. A modeling algorithm has been developed and a description of individual stages of the process has been considered. The adequacy of the simulation model description of physical experiment data has been demonstrated.

Conclusions. The obtained data on the non-uniform distribution of active particles in the working zone of the device provides an opportunity to improve the ozone generator designs. The application of a discrete stochastic approach is a promising direction of research, due to its possible computational implementation using modern computer technology within the framework of parallel computing technology.

Key words: simulation modeling, discrete models, random processes, ozone electrosynthesis

DOI: 10.17588/2072-2672.2024.6.081-090

Введение. Многие промышленные технологические процессы приводят к образованию загрязняющих атмосферу газообразных соединений. Прежде всего, это относится к сжиганию топлива в стационарных установках и на транспорте. В промышленных выбросах обычно преобладают оксиды углерода, серы, азота и пр. [1, 2]. Одним из путей снижения выбросов токсичных веществ в окружающую среду является совершенствование используемых технологий. В частности, при сжигании топлива применяется его предварительная очистка, ступенчатое сжигание, использование специальных горелок и др. Однако такие мероприятия далеко не всегда позволяют достичь допустимых концентраций вредных веществ в выбросах, и часто появляется необходимость в дополнительной специальной очистке отходящих газов [3].

К основным методам обезвреживания газовых выбросов относят сорбционные, термические, каталитические, мембранные, биохимические и химические методы очистки. Химические методы основаны на преобразовании токсичных соединений в менее токсичные, а также на активации химических реакций [4]. В последнем случае в очищаемые газы целесообразно вводить озон.

В частности, озонирование применяют для обезвреживания дымовых газов от оксидов серы и азота, что позволяет ускорять реакции их окисления до легко утилизируемых соединений. Помимо промышленной энергетики, озон, обладающий сильными окисляющими и дезинфицирующими свойствами, широко используется в таких отраслях, как электроника, нефтехимическая и пищевая промышленности, медицина, коммунальное и сельское хозяйство.

Массовое применение озона в современных технологиях связано с его производством в достаточном количестве. Экономически наиболее выгодным способом его получения считается синтез озона из кислорода или кислородсодержащих смесей газов в установках, реализующих высоковольтный электрический разряд [5, 6]. Поскольку электросинтез озона достаточно энергоемкий процесс, важной задачей становится совершенствование технологии и конструктивного оформления генераторов озона.

Описание предметной области. В промышленных генераторах озона, как правило, реализуется диэлектрический барьерный разряд. Барьерная форма разряда возникает между электродами, которые разделены диэлектрическим барьером и

разрядным промежутком, где, собственно, и протекает процесс синтеза озона [7, 8]. При этом молекулы кислорода (O_2) трансформируются, образуя озон (O_3). Одновременно с синтезом озона протекают обратные реакции, в результате которых озон разлагается [9]. Существует несколько вариантов конструктивного оформления аппаратов барьерного разряда. На практике большое распространение получили цилиндрические конструкции [10]. Повышенное внимание к использованию барьерного разряда вызвано, прежде всего, экономическими соображениями. Кроме того, эта форма электрического разряда удобна тем, что он осуществим в потоке газа при нормальном давлении. Такая конструкция генератора озона позволяет проводить процесс в режиме непрерывной подачи исходной газовой смеси на вход и удаления продуктов на выходе.

Для исследования работы коаксиального генератора озона целесообразно использовать модели аппаратов трубчатого типа. Для описания процессов в таких реакторах за основу обычно берут модель движения сплошной фазы в режиме идеального вытеснения [11]. При ее выводе приняты следующие допущения: перемешивание вещества в осевом направлении полностью отсутствует, при этом имеет место полное перемешивание в радиальном направлении. То есть предполагается, что материал перемещается через аппарат как твердый поршень и время пребывания всех частиц потока в аппарате одинаково. Это дает возможность представить модель движения в виде дифференциального уравнения в частных производных первого порядка. В нем искомой величиной выступает концентрация вещества, которая является функцией времени и длины аппарата:

$$\frac{\partial C_i}{\partial t} = -u \frac{\partial C_i}{\partial l} + W_i, \quad (1)$$

где C_i – концентрация i -го вещества; u – линейная скорость потока в аппарате; W_i – скорость образования i -го компонента в ходе реакции; t – время; l – координата, ось которой направлена вдоль аппарата.

При анализе уравнения (1) можно отметить ряд его существенных недостатков, заключающихся в том, что в реальных условиях невозможно добиться идеального вытеснения. Это связано с обязательным существованием осевого перемешивания

потока. Такая ситуация привела к созданию моделей, в которые введены корректирующие поправки [14]. К ним следует отнести две модификации так называемых диффузионных моделей, в уравнения которых входят слагаемые, учитывающие процессы либо продольного перемешивания потока, либо его перемешивания в двух направлениях:

$$\frac{\partial C_i}{\partial t} = -u \frac{\partial C_i}{\partial l} + D_l \frac{\partial^2 C_i}{\partial l^2} + W_i, \quad (2)$$

где D_l – коэффициент турбулентной диффузии в осевом направлении;

$$\frac{\partial C_i}{\partial t} = -u \frac{\partial C_i}{\partial l} + D_l \frac{\partial^2 C_i}{\partial l^2} + \frac{D_r}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial C_i}{\partial r} \right) + W_i, \quad (3)$$

где D_r – коэффициент диффузии в радиальном направлении; r – текущий радиус.

Модели (2)–(3) представляются дифференциальными уравнениями второго порядка в частных производных, а в выражение (3) дополнительно введена радиальная координата.

Опыт использования моделей с диффузионными членами показал, что повышение адекватности описания процесса обеспечивается существенным усложнением вычислительных процедур. Кроме того, остается неустранимым еще один крупный недостаток базовой модели (1), которая предполагает плоскопараллельное течение сплошной среды в осевом направлении с постоянной скоростью u . Но, согласно общепризнанным положениям гидродинамики, при течении сплошной среды около неподвижных стенок формируется пограничный слой, который характеризуется нулевой скоростью на стенке. В результате времена пребывания частиц потока в аппарате не корректно считать одинаковыми. Этот момент в моделях (1)–(3) игнорируется. Кроме того, в уравнениях типа (1) не рассматриваются стохастические факторы, всегда присутствующие в реальных условиях [13].

В последние годы в связи с возросшими возможностями технических и программных средств компьютерной техники стали активно использоваться методы имитационного моделирования. Такой подход предполагает создание и исследование моделирующего алгоритма, который имитирует поведение реального объекта – прототипа. При этом остаются неизменными логическая структура и поведенческие свойства объекта, последовательность во времени проис-

ходящих в нем событий, динамика взаимодействий элементов. Алгоритмическая имитационная модель может использоваться для проведения численных экспериментов и позволяет получать информацию о функционировании объекта с учетом случайных входных воздействий [14]. Все указанное делает имитационный подход удобным для выполнения компьютерных экспериментов в целях проектирования, анализа и оценки функционирования объектов и систем.

Методика создания модели генератора озона. Непрерывные детерминированные модели типа (1)–(3) базируются на понятии бесконечно малых величин. Бесконечно малые, являясь фундаментом классического математического анализа, по своей сути есть математическая абстракция. При моделировании реальной действительности существуют хотя и малые, но конечные физические величины, которые являются дискретными. Естественно предположить, что в научных исследованиях рассмотрение объектов с дискретных позиций будет приемлемым.

В этой связи в качестве методологической основы предлагаемой модели был принят дискретный стохастический подход. Он предполагает рассмотрение эволюции системы конечных элементов пространства по шагам дискретного времени. Кроме того, как следует из названия, подход учитывает существенное влияние случайных факторов на динамику исследуемого процесса. Последнее обстоятельство позволяет использовать при моделировании приемы, характерные для методов Монте-Карло [11].

Правомерность макроскопического дискретного представления о природе веществ была высказана профессором В.П. Майковым около 30 лет назад [12]. Предложенная им концепция применима к объектам, где неделимыми ячейками являются совокупности частиц в количестве не менее 10^{10} штук. При этом как бы устанавливается граница между микромиром, где действуют законы квантовой механики, и обычным миром, в котором имеют смысл макроскопические характеристики вещества (давление, температура, вязкость и пр.).

Дискретный стохастический подход объединяет методы моделирования, основанные на следующей базовой концепции. Принимается, что функционирование системы полностью определяется поведением элементов, из которых она состоит.

Отдельные элементы системы взаимодействуют между собой и с окружающей средой, подчиняясь одинаковым детерминированным или вероятностным правилам. Дискретные подходы к моделированию, такие как модели решеточных газов, системы клеточных автоматов, агентные модели и другие, эффективно используются в самых различных областях исследований [15, 16]. В настоящем исследовании нами использовалась модификация агентного метода имитационного моделирования. В качестве агентов рассматривались дискретные элементы сплошной среды, состояние и локализация которых подчиняются установленным правилам и алгоритмически закодированы в компьютерной программе.

Для получения дискретной модели генератора озона принимаются следующие гипотезы.

Во-первых, поток сплошной среды в аппарате рассматривается как совокупность множества отдельных элементов (ячеек), размер которых позволяет реализоваться термодинамическим параметрам движущегося вещества (плотность, вязкость и т.п.). При этом указанные элементы (макроячейки) могут перемещаться строго между узлами воображаемой пространственной решетки [17]. Ограничимся рассмотрением двумерной модели с регулярной ортогональной решеткой (рис. 1). Таким образом может быть осуществлен переход от привычных физических размеров аппарата к дискретным, когда каждый узел решетки имеет свои уникальные координаты x_1 и x_2 .

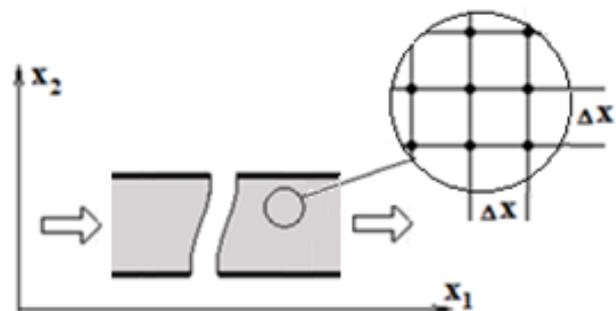


Рис. 1. Схема дискретной модели аппарата

Во-вторых, считается, что макроячейки рассматриваемой системы могут находиться в одном из двух состояний – активном или неактивном. Первое означает, что ячейка содержит макроскопически достаточное количество озона, чего нет в неактивной ячейке.

Как было указано выше, при работе генератора исходная газовая смесь поступает в реакционную зону, обрабатывается там плазмой барьерного разряда, насыщается озоном и покидает аппарат. Следовательно, модель должна позволять имитировать три основных процесса, непрерывно и одновременно протекающих в рабочей зоне:

- 1) перемещение газа внутри рабочей зоны;
- 2) образование озона под действием электрического разряда;
- 3) частичное разложение образовавшегося озона.

Имитация исследуемого процесса развития системы заключается в том, что на каждом шаге по времени синхронно происходит обновление положения макроэлемента на решетке и изменение ее состояния. Данные процессы определяются правилами, описанными ниже.

Моделирование движения макроэлемента. Разработанная модель предполагает, что в движении макроэлемента через рабочую зону генератора реактора задействованы два механизма – детерминированный и вероятностный.

Первый из них – плоскопараллельное перемещение в направлении оси течения, которое определяется давлением газа на входе в аппарат. Величина модуля скорости в осевом направлении зависит от расстояния от элемента до оси аппарата и уменьшается по мере приближения к его стенке. Для расчета данной составляющей скорости используется выражение, вытекающее из закона Пуазейля:

$$v = \frac{\Delta P (R^2 - r^2)}{4\mu L}, \quad (4)$$

где v – скорость как функция расстояния от элемента до оси аппарата; ΔP – перепад давления; R – радиус аппарата; r – расстояние от элемента до оси аппарата; μ – вязкость среды; L – длина аппарата.

В качестве второго механизма движения газовой среды рассматривается стохастический процесс перемешивания частиц потока, который обусловлен флуктуациями скорости. При этом принимается, что макроэlement может совершить случайное перемещение в один из соседних узлов. В настоящем исследовании рассматривается выбор одного из четырех ближайших узлов решетки. Для такого выбора можно применить

следующий оператор, использующий метод «выбора по жребии»:

$$\begin{cases} m(x_1, x_2) \rightarrow m(x_1, x_2 + 1), & \text{если } 0 < \xi \leq d_1, \\ m(x_1, x_2) \rightarrow m(x_1 + 1, x_2), & \text{если } d_1 < \xi \leq d_1 + d_2, \\ m(x_1, x_2) \rightarrow m(x_1, x_2 - 1), & \text{если } d_1 + d_2 < \xi \leq d_1 + d_2 + d_3, \\ m(x_1, x_2) \rightarrow m(x_1 - 1, x_2), & \text{если } d_1 + d_2 + d_3 < \xi \leq 1, \end{cases} \quad (5)$$

где (x_1, x_2) – координаты узла; ξ – случайное число, равномерно распределенное в диапазоне $[0-1]$; d_i – вероятности движения в соответствующем направлении.

Алгоритм моделирования движения макроэлемента включает на каждом шаге по времени следующие действия.

1. Выбирается очередная активная макроэlementка и по уравнению (4) для нее вычисляется модуль осевой скорости. Полученная величина квантуется с учетом шага решетки, что позволяет определить предварительные координаты нового положения ячейки.

2. Окончательные координаты определяются с учетом влияния случайных факторов. Генерируется случайное число ξ , проверяются условия (5), и положение макроэлемента корректируется. Три вероятности направления случайного перемещения принимались одинаковыми: $d_1 = d_2 = d_3 = 0,25$.

Моделирование процесса образования озона. Не вдаваясь в подробности химического характера, примем, что образование озона в генераторе происходит по следующему механизму.

Неактивная макроэlementка, движущаяся внутри аппарата, на каждом шаге по времени под действием электрического разряда может перейти в активное состояние с вероятностью P_1 . Эту вероятность можно интерпретировать как отношение количества появившихся на данном временном отрезке активных макроэлементов к общему количеству макроэлементов. Указанная вероятность зависит от параметров разряда, состава сплошной среды и конструктивных особенностей реактора. В то же время P_1 не зависит от времени пребывания газа в рабочей зоне генератора, т.е. от расхода газа через него.

Была проведена предварительная оценка данного показателя исходя из скоростей химических реакций образования озона и шага дискретизации пространства в модели (размеров макроэlementки). При этом использовались кинетические параметры реакций образования и разрушения

озона, приведенные в [18]. Затем вычисленные значения уточнялись на основе экспериментальных данных. Поскольку в численных экспериментах с предлагаемой моделью шаг дискретизации пространства варьировался в пределах 1,0–0,25 мм, искомая вероятность P_1 лежала в диапазоне $0,8 \cdot 10^{-3}$ – $0,2 \cdot 10^{-3}$. Далее эта величина на основе опытных данных была скорректирована до значений $2 \cdot 10^{-3}$ – $0,5 \cdot 10^{-3}$.

Алгоритм моделирования образования активных макроячеек на каждом шаге по времени включает следующие этапы.

1. Исходя из заданного значения вероятности возникновения активного элемента и размеров решетки, вычисляется среднее количество активных макроячеек, появляющихся на каждом шаге по времени $n_{\text{ср}}$:

$$n_{\text{ср}} = P_1 N M, \quad (6)$$

где N и M – количество узлов решетки в направлении соответствующих осей.

2. Затем определяется конкретное количество появившихся на данном шаге активных макроячеек n_k . Оно генерируется как целая случайная величина, равномерно распределенная от 1 до $2n_{\text{ср}}$.

3. Далее координаты (положение на решетке) каждого нового активного элемента конкретизируются путем случайного выбора свободного узла решетки.

Моделирование процесса разложения озона. При создании модели было принято, что любая активная макроячейка на каждом шаге по времени может вернуться в пассивное состояние с вероятностью P_2 . Данная вероятность зависит от состава среды и конструкции реактора. Кроме того, вероятность дезактивации P_2 увеличивается с ростом продолжительности «жизни» активной ячейки.

Величина P_2 рассматривалась нами как непрерывная случайная экспоненциально распределенная величина:

$$P_2(\tau) = 1 - e^{-\lambda\tau}, \quad (7)$$

где τ – продолжительность существования активной ячейки; λ – параметр, связанный с количеством событий дезактивации ячеек в единицу времени.

Если обозначить среднее число активных макроячеек, переходящих в исходное состояние на каждом шаге по времени, как $m_{\text{ср}}$, то можно записать

$$\lambda = 1/m_{\text{ср}}. \quad (8)$$

Величина $m_{\text{ср}}$ должна коррелировать с показателем скорости появления активных ячеек $n_{\text{ср}}$. С учетом сравнения кинетических параметров реакций образования и разрушения озона [18] значение $m_{\text{ср}}$ определялось как непрерывная случайная величина, равномерно распределенная от 1 до $n_{\text{ср}}$. В проведенных имитационных экспериментах вероятность P_2 составляла 0,02–0,65, в зависимости от продолжительности активного состояния макроячейки.

Алгоритм моделирования перехода активных элементов в исходное состояние на каждом шаге по времени следующий.

1. Выбор очередной активной макроячейки и расчет вероятности ее дезактивации P_2 по выражениям (7) и (8).

2. Имитация события. При этом генерируется случайное число ξ , равномерно распределенное в диапазоне [0–1]. Если выполняется условие $\xi < P_2$, то событие произошло.

Алгоритм моделирования работы генератора. Укрупненная блок-схема алгоритма имитационного моделирования представлена на рис. 2.

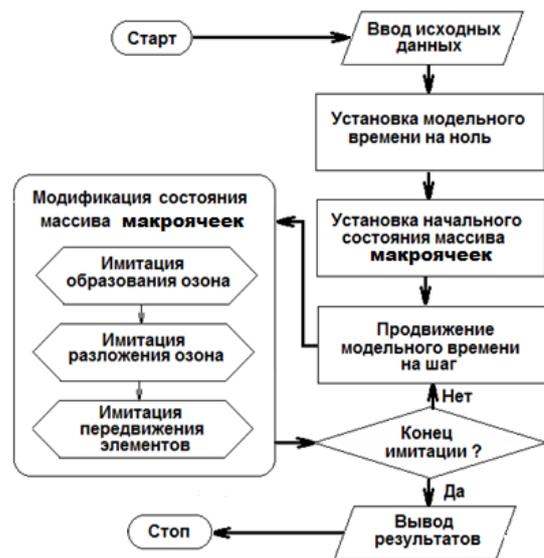


Рис. 2. Блок-схема алгоритма имитационного моделирования

Компьютерная имитация работы генератора озона состоит из следующих действий.

1. Ввод исходных данных: длина L и радиус рабочей зоны реактора R ; шаг дискретизации пространства Δx ; давление газовой смеси на входе в реактор ΔP ; вязкость среды μ ; вектор вероятностей случайного

перемещения элементов d_i ; вероятность возникновения активного элемента P_i ; шаг дискретизации времени $\Delta\tau$; общее число шагов моделирования T .

2. Установка начального значения времени и начального состояния массива макроячеек (их исходное размещение).

3. Продвижение имитационного времени на один шаг.

4. Имитация процессов в рабочей зоне аппарата согласно методикам, описанным выше: перемещение активных макроячеек в узел с новыми координатами; образование новых активных макроячеек; «гибель» активных макроячеек. К концу данного этапа формируется массив состояния макроячеек на данном шаге по времени.

5. Если модельное время не исчерпано, то происходит возврат к этапу 3.

6. Вывод и визуализация результатов.

Описанный алгоритм был реализован в программной среде MatLab.

Результаты имитационного моделирования. В качестве физического прототипа при имитационном моделировании рассматривался реактор диэлектрического барьерного разряда, описанный в [19]. Цилиндрический реактор с внутренним диаметром 15 мм имел активную зону длиной 120 мм. Для генерации озона создавался барьерный разряд током промышленной частоты и напряжением до 20 кВ. В реактор подавалась газовая смесь, содержащая технический кислород. При физических экспериментах давление на входе регулировалось, что позволяло менять среднюю скорость газовой среды в пределах 0,01–0,04 м/с и, соответственно, продолжительность контакта газа с зоной разряда.

Предварительно были проверены значения критерия Рейнольдса. Расчет показал, что в указанном диапазоне изменения скоростей потока его величина составляла 10–41. Полученные значения указывают на ламинарный режим течения среды, что позволяет считать правомерным использование в расчетах уравнения (4). В дискретной модели пространство квантовалось с шагом $\Delta x = 0,5\text{--}0,05$ мм, время – с шагом $\tau = 0,1\text{--}0,01$ с. В процессе имитационного моделирования определялись несколько реализаций изучаемого случайного процесса, далее полученные данные подвергались статистической обработке.

Ниже представлены некоторые результаты компьютерной имитации генерации озона при следующих конкретных

значениях шагов дискретизации: по пространству $\Delta x = 0,1$ мм; по времени $\tau = 0,02$ с.

Прежде всего, следует отметить, что предлагаемый подход позволяет в каждом имитационном эксперименте получить последовательность массивов состояний макроячеек, т.е. наблюдать динамику процесса в активной зоне генератора озона. На рис. 3 представлена визуализация одного из массивов, соответствующих установившемуся режиму, при скорости газовой смеси 0,018 м/с. Размеры активной зоны реактора переведены из дискретных в привычные величины и даны в миллиметрах. Направление потока – слева направо.

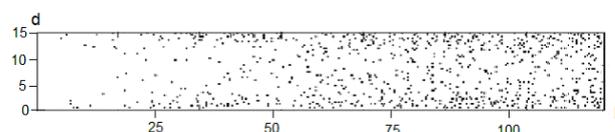


Рис. 3. Визуализация состояния генератора (активные макроячейки отмечены черным цветом)

Изображение на рис. 3 иллюстрирует значительную неравномерность распределения активных макроячеек в рабочей зоне генератора. Причиной этого являются как специфика гидродинамики потока, так и протекание реакций образования и разложения озона. В этой связи целесообразно рассмотреть особенности распределения активных макроячеек подробнее.

На рис. 4 приведен график распределения активных макроячеек по длине активной зоны в процентах от их общего количества. При этом активная зона была разбита на 10 участков, внутри которых данные усреднялись. Результаты получены в стационарном режиме при скорости газа 0,018 м/с.

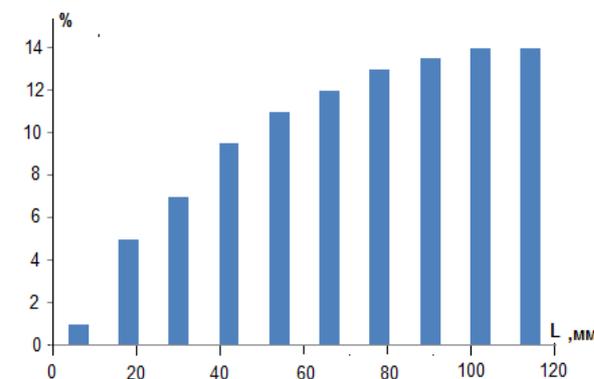


Рис. 4. Распределение активных макроячеек по длине активной зоны

Приведенные результаты показывают рост количества озона в направлении

выхода, что вполне ожидаемо и укладывается в рамки существующих взглядов на процесс. Понижение скорости роста ближе к концу активной зоны свидетельствует о выравнивании скоростей прямой и обратной реакций синтеза озона.

На рис. 5 приведено усредненное распределение активных макроячеек по диаметру рабочей зоны реактора, которая была разбита по сечению на 10 участков. Режим работы соответствует рассмотренному на рис. 4.

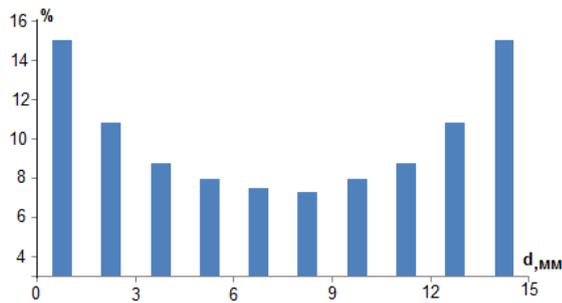


Рис. 5. Распределение активных макроячеек по диаметру сечения активной зоны

Результаты имитационного моделирования процесса наглядно показывают, что активные макроячейки в большей степени концентрируются вблизи стенок. Такие данные отличаются от результатов, которые можно получить при использовании существующих непрерывных моделей (1)–(3). В частности, указанные традиционные модели дают практически равномерное распределение частиц по диаметру потока. Но в реальных условиях равномерное распределение невозможно, прежде всего, из-за существования пограничного слоя [13].

Адекватность предлагаемого имитационного алгоритма была проверена путем сравнения результатов компьютерного моделирования с данными физического эксперимента, приведенными в [20]. На рис. 6 приводятся экспериментальные и модельные зависимости концентрации озона на выходе из аппарата от скорости движения газовой смеси. Данные компьютерной имитации процесса, аппроксимированные полиномом третьей степени, представлены сплошной кривой. Значения, полученные в ходе физического эксперимента, показаны в виде квадратных меток.

Анализ полученных результатов позволяет утверждать, что предлагаемый имитационный алгоритм вполне адекватно моделирует исследуемый объект. Кроме того,

расчеты показали, что относительная погрешность данных имитационного моделирования не превышает 15 %.

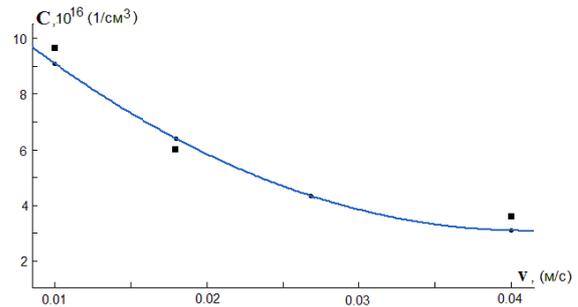


Рис. 6. Сравнение модельных и экспериментальных данных

Выводы. Результаты, полученные с использованием дискретного стохастического подхода, реализованного в имитационной модели, не противоречат существующим теоретическим взглядам на изучаемый процесс. Это касается как дискретного описания движения сплошной среды, так и использования вероятностных методов имитации химической реакции.

В пользу возможности использования методов Монте–Карло для моделирования химического взаимодействия можно указать, что вероятностные факторы широко используются химической кинетикой. В частности, уравнения для скоростей реакции выводятся из положений молекулярно-кинетической теории газов с использованием элементов статистики и теории вероятности [21]. В то же время в [21] используются обобщенные вероятности образования и разложения озона, что не идет вразрез со статистическими аспектами оценки скоростей химических реакций.

Достоинством предложенной модели является возможность анализировать поведение элементов газовой среды непосредственно в рабочей зоне аппарата (генератора), что невозможно при использовании классических моделей. Полученные результаты свидетельствуют о неравномерном распределении активных макроячеек по объему рабочей зоны генератора, т.е. о неоднородном поле концентрации озона. Эти факты могут быть учтены при разработке конструктивного оформления генераторов озона, что позволит повысить эффективность их работы.

Также необходимо подчеркнуть, что дискретные вероятностные модели по

своей идеологии и архитектуре идеально подходят для успешного использования современной компьютерной техники, особенно при использовании технологии параллельных вычислений.

В качестве недостатка предложенного подхода можно считать трудности, возникающие при определении конкретных значений вероятностных показателей, что, впрочем, характерно для большинства вероятностных подходов [22]. Одним из путей решения этой проблемы, помимо использования опытных данных, можно считать применение положений статистической термодинамики.

Сказанное выше позволяет сделать выводы о перспективности использования дискретного стохастического подхода для моделирования различных видов технологического оборудования. Физическая простота исходных предпосылок и возможность наглядной визуализации результатов позволяют рекомендовать дискретные стохастические модели к использованию как в научных исследованиях, так и в педагогической практике.

Список литературы

1. **Луканин А.В.** Очистка газоздушных выбросов. – М.: Инфра-М, 2022. – 200 с.
2. **Вострикова М.А., Шкода В.В., Кашин Я.М.** Обзор методов очистки газовых выбросов энергетических установок от оксидов серы и азота // Инновационная наука. – 2015. – № 8. – С. 31–35.
3. **Очистка и дезодорация газоздушных выбросов / В.А. Пронин, В.О. Мамченко, О.В. Долговская, В.А. Цветков.** – СПб.: Университет ИТМО, 2022. – 155 с.
4. **Теория и практика получения и применения озона / В.В. Лунин, В.Г. Самойлович, С.Н. Ткаченко, И.С. Ткаченко.** – М.: Изд-во Моск. ун-та, 2016. – 416 с.
5. **Силкин Е.М.** Синтез озона в электрических разрядах и повышение его эффективности // Компоненты и технологии. – 2008. – № 6. – С. 136–143.
6. **Оценка эффективности работы плазмохимических очистных устройств методом биотестирования / А.А. Гушин, В.И. Гриневич, Т.В. Извекова, Н.А. Иванцова // Безопасность в техносфере.** – 2012. – Т. 37, № 4. – С. 47–54.
7. **Самойлович В.Г., Гибалов В.И., Козлов К.В.** Физическая химия барьерного разряда. – М.: Изд-во Моск. ун-та, 1989. – 176 с.
8. **Инженерная химия.** Химические реакторы / Ю.Н. Жилин, А.Н. Зарубина, Г.Л. Олиференко, А.Н. Иванкин. – М.: ФГБОУ ВО МГУЛ, 2016. – 140 с.

9. **Лунин В.В., Попович М.П., Ткаченко С.Н.** Физическая химия озона. – М.: ООО «МАКСПресс», 2019. – 540 с.

10. **Gibalov V.I., Tkachenko I.S., Lunin V.V.** Breakdowns and the formation of microdischarge channels in surface barrier discharges // Russian Journal of Physical Chemistry. – 2008. – No. 6. – P. 1020–1023.

11. **Гумеров А.М.** Математическое моделирование химико-технологических процессов. – СПб.: Лань, 2022. – 176 с.

12. **Майков В.П.** Расширенная версия классической термодинамики – физика дискретного пространства-времени. – М.: МГУИЭ, 1997. – 160 с.

13. **Заварухин С.Г.** Математическое моделирование химико-технологических процессов и аппаратов. – Новосибирск: Изд-во НГТУ, 2017. – 86 с.

14. **Звонарев С.В.** Основы математического моделирования. – Екатеринбург: Изд-во Урал. ун-та, 2019. – 112 с.

15. **Бобков С.П., Астраханцева И.А.** Использование вероятностных клеточных автоматов для моделирования течения жидкости // Современные наукоемкие технологии. Региональное приложение. – 2022. – № 2(70). – С. 47–54.

16. **Бобков С.П., Астраханцева И.А.** Применение агентного подхода для моделирования процессов теплопроводности // Вестник ИГЭУ. – 2022. – Вып. 2. – С. 58–66.

17. **Бобков С.П., Астраханцева И.А.** Дискретная стохастическая модель гидродинамики потока // Моделирование систем и процессов. – 2023. – № 2. – С. 7–14.

18. **Исследование физико-химических свойств импульсного разряда в смеси CO₂ – O₂ / L. Saidia, A. Belasri, S. Baadj, Z. Harrache // Физика плазмы.** – 2019. – Т. 45, № 5. – С. 465–480.

19. **Бобкова Е.С.** Разряд атмосферного давления как источник активных частиц для очистки воды от органических поллютантов // Известия вузов. Химия и химическая технология. – 2014. – Т. 57, № 10. – С. 89–91.

20. **Bobkova E.S., Rybkin V.V.** Peculiarities of Energy Efficiency Comparison of Plasma Chemical Reactors for Water Purification from Organic Substances // PlasmaChem. PlasmaProcessing. – 2015. – Vol. 35, No. 1. – P. 133–142.

21. **Буданов В.В., Лефедова О.В.** Химическая кинетика / Иван. гос. хим.-технол. ун-т. – Иваново, 2011. – 177 с.

22. **Ефремов Г.И.** Моделирование химико-технологических процессов. – М.: ИНФРА-М, 2021. – 260 с.

References

1. **Lukanin, A.V.** *Ochistka gazovozdushnykh vybrosov* [Cleaning of gas-air emissions]. Moscow: Infra-M, 2022. 200 p.
2. **Vostrikova, M.A., Shkoda, V.V., Kashin, Ya.M.** *Obzor metodov ochistki gazovykh vybrosov energeticheskikh ustanovok ot oksidov sery i azota* [Review of methods for cleaning gas emissions from power plants

from sulfur and nitrogen oxides]. *Innovatsionnaya nauka*, 2015, no. 8, pp. 31–35.

3. Pronin, V.A., Mamchenko, V.O., Dolgovskaya, O.V., Tsvetkov, V.A. *Ochistka i dezodoratsiya gazovozdushnykh vybrosov* [Cleaning and deodorization of gas-air emissions]. Saint-Petersburg: ITMO University, 2022. 155 p.

4. 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 using ozone]. Moscow: Izdatel'stvo Moskovskogo universiteta, 2016. 416 p.

5. Silkin, E.M. Sintez ozona v elektricheskikh razryadakh i povyshenie ego effektivnosti [Synthesis of ozone in electrical discharges and increasing its efficiency]. *Komponenty i tekhnologii*, 2008, no. 6, pp. 136–143.

6. Gushchin, A.A., Grinevich, V.I., Izvekova, T.V., Ivantsova, N.A. Otsenka effektivnosti raboty plazmokhimicheskikh ochistnykh ustroystv metodom biotestirovaniya [Assessing the efficiency of plasmachemical treatment devices using biotesting]. *Bezopasnost' v tekhnosfere*, 2012, vol. 37, no. 4, pp. 47–54.

7. Samoylovich, V.G., Gibalov, V.I., Kozlov, K.V. *Fizicheskaya khimiya bar'ernogo razryada* [Physical chemistry of barrier discharge]. Moscow: Izdatel'stvo Moskovskogo universiteta, 1989. 176 p.

8. Zhilin, Yu.N., Zarubina, A.N., Oliferenko, G.L., Ivankin, A.N. *Inzhenernaya khimiya. Khimicheskie reaktory* [Engineering chemistry. Chemical reactors]. Moscow: FGBOU VO MGUL, 2016. 140 p.

9. Lunin, V.V., Popovich, M.P., Tkachenko, S.N. *Fizicheskaya khimiya ozona* [Physical chemistry of ozone]. Moscow: MAKS Press LLC, 2019. 540 p.

10. Gibalov, V.I., Tkachenko, I.S., Lunin, V.V. Breakdowns and the formation of microdischarge channels in surface barrier discharges. *Russian Journal of Physical Chemistry*, 2008, no. 6, pp. 1020–1023.

11. Gumerov, A.M. *Matematicheskoe modelirovanie khimiko-tekhnologicheskikh protsessov* [Mathematical modeling of chemical-technological processes]. Saint-Petersburg: Lan', 2022. 176 p.

12. Maykov, V.P. *Rasshirennaya versiya klassicheskoy termodinamiki – fizika diskretnogo prostranstva-vremeni* [An extended version of classical thermodynamics – physics of discrete space-time]. Moscow: MGUIE, 1997. 160 p.

13. Zavarukhin, S.G. *Matematicheskoe modelirovanie khimiko-tekhnologicheskikh protsessov i*

apparatov [Mathematical modeling of chemical technological processes and apparatus]. Novosibirsk: Izdatel'stvo NGTU, 2017. 86 p.

14. Zvonarev, S.V. *Osnovy matematicheskogo modelirovaniya* [Basics of mathematical modeling]. Ekaterinburg: Izdatel'stvo Ural'skogo universiteta, 2019. 112 p.

15. Bobkov, S.P., Astrakhantseva, I.A. Ispol'zovanie veroyatnostnykh kletochnykh avtomatov dlya modelirovaniya techeniya zhidkosti [Using probabilistic cellular automata to simulate fluid flow]. *Sovremennye naukoemkie tekhnologii. Regional'noe prilozhenie*, 2022, no. 2(70), pp. 47–54.

16. Bobkov, S.P., Astrakhantseva, I.A. Prime-neniye agentnogo podkhoda dlya modelirovaniya protsessov teploprovodnosti [Application of an agent-based approach to modeling heat conduction processes]. *Vestnik IGEU*, 2022, issue 2, pp. 58–66.

17. Bobkov, S.P., Astrakhantseva, I.A. Diskretnaya stokhasticheskaya model' gidrodinamiki potoka [Discrete stochastic model of flow hydrodynamics]. *Modelirovanie sistem i protsessov*, 2023, no. 2, pp. 7–14.

18. Saidia, L., Belasri, A., Baadj, S., Harrache, Z. Issledovanie fiziko-khimicheskikh svoystv impul'snogo razryada v smesi CO₂ – O₂ [Study of the physical and chemical properties of pulse discharge in a CO₂ – O₂ mixture]. *Fizika plazmy*, 2019, vol. 45, no. 5, pp. 465–480.

19. Bobkova, E.S. Razryad atmosfernogo davleniya kak istochnik aktivnykh chastits dlya ochistki vody ot organicheskikh pollyutantov [Atmospheric pressure discharge as a source of active particles for purifying water from organic pollutants]. *Izvestiya vuzov. Khimiya i khimicheskaya tekhnologiya*, 2014, vol. 57, no. 10, pp. 89–91.

20. Bobkova, E.S., Rybkin, V.V. Peculiarities of Energy Efficiency Comparison of Plasma Chemical Reactors for Water Purification from Organic Substances. *Plasma Chem. Plasma Processing*, 2015, vol. 35, no. 1, pp. 133–142.

21. Budanov, V.V., Lefedova, O.V. *Khimicheskaya kinetika* [Chemical kinetics]. Ivanovo, 2011. 177 p.

22. Efremov, G.I. *Modelirovanie khimiko-tekhnologicheskikh protsessov* [Modeling of chemical and technological processes]. Moscow: INFRA-M, 2021. 260 p.