

УДК 621.43.658

Ведь В.Е., Остапчук В.Н., Хань Вей, Бородин В.И., Ровенский А.И.

ИНТЕГРАЦИЯ КИНЕТИЧЕСКИХ, ТЕПЛОВЫХ И ГАЗОДИНАМИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ ПРИ ПРОЕКТИРОВАНИИ КАТАЛИТИЧЕСКИХ ПРЕОБРАЗОВАТЕЛЕЙ ВРЕДНЫХ ГАЗОВЫХ ВЫБРОСОВ

Промышленные предприятия Украины потребляют около 45-50 % энергоресурсов страны и являются основными источниками вредных твердых и газообразных выбросов, в том числе токсичных и вызывающих парниковый эффект [1]. Особенно критическая ситуация сложилась в крупнейших промышленных регионах страны, являющихся основными потребителями природных видов топлива и сырья. Дополнительно она усугубляется концентрацией внутри регионов транспортных средств и жилищно-коммунальных хозяйств, также вносящих определенный негативный вклад в общую экологическую ситуацию. В этой связи возникает необходимость локализации искусственных источников негативного влияния на окружающую среду и разработки эффективных методов нейтрализации или значительного уменьшения содержания вредных твердых и газовых выбросов в сфере жизнедеятельности человека. Решение таких проблем базируется на создании современных интегрированных технологий каталитических преобразователей.

Аппараты для проведения процессов очистки выпускных газов от вредных веществ, находящихся в газообразном состоянии, представляют собой реакторы проточного типа с неподвижным слоем носителей, поверхностно и объемно содержащими каталитические преобразователи [2].

Рабочие органы металлических нейтрализаторов отходящих газов представляют собой совокупность периодического чередования элементов заданных геометрических форм и размеров [3]. Так называемый „зернистый” слой носителей катализаторов, выполненный из материалов оксидной природы, характеризуется неориентированной и беспорядочной укладкой единичных элементов носителей различного размера, между которыми через случайно образованные каналы протекает газ [4,5].

В качестве „зернистых” слоев носителей каталитических преобразователей отходящих газов на неметаллической основе используют гранулы, шары, цилиндры, кольца рашига и другие геометрические тела разнообразной формы и размеров [6]. Форма и размер носителей определяют газодинамическое сопротивление каталитических преобразователей как реакторов в целом и, следовательно, энергетические затраты на транспорт газа. Случайное образование каналов, происходящее при использовании таких тел, приводит к неравномерной конфигурации каналов в объеме нейтрализаторов – или слишком свободных, или с большим сопротивлением движению потока газа. Поэтому потоки газов будут преимущественно протекать через относительно свободные системы каналов, не обеспечивающих расчетную степень превращения ввиду малой контактной поверхности газа с каталитически активными центрами. Кроме того, типы промышленно сжигаемых отходов и качество отходящих газов транспортных средств предопределяют наличие значительного количества пылевидных частиц, поступающих в аппараты очистки. По химическому составу такие частицы представляют собой смесь оксидов и твердых остатков продуктов неполного сгорания топлива, которые, проходя через нейтрализаторы, будут отлагаться на стенках каналов, образованных носителями. Это приведет к деградации активной поверхности последних и уменьшению степеней конверсий вредных газов.

Наиболее эффективные из известных каталитических нейтрализаторов выпускных газов нашли промышленное использование в трактах легковых и грузовых автомобилей. Однако и они имеют ряд существенных недостатков, основной из которых не-

высокая механическая прочность монолитного керамического носителя, каталитически активная поверхность которого легко поддается отравлению примесями и науглероживанию при эксплуатации на топливе невысокого качества. Конструктивные особенности таких нейтрализаторов не позволяют осуществлять процесс их регенерации, а экономические факторы определяют нецелесообразность их использования для очистки промышленных выбросов большого объема.

Теоретическая база, позволяющая провести расчет оптимальной геометрии каналов, образованных регулярным расположением носителей, геометрические параметры которых дают возможность осуществлять с достаточной полнотой процесс протекания заданных каталитических превращений и параллельный процесс самоочищения поверхности носителей при известных параметрах движения газового потока, является практически неразвитой. Также отсутствуют теоретические обоснования, определяющие возможность организации направленного воздействия на изменение формы каналов для движения газов в нейтрализаторах при создании в них газодинамической обстановки, позволяющей проводить каталитические процессы в режимах, близких к оптимальным даже при изменении входящих параметров газового потока.

Таким образом, исследования, посвященные проблеме каталитической очистки газовых выбросов, традиционно ограничивались только решением частных задач: совершенствованием конструкций контактных аппаратов, разработкой новых форм и материалов носителей, разработкой новых катализаторов, изучением их свойств и практически не определяют решение проблемы в едином целом.

В связи с этим, в настоящее время определилась очевидная необходимость создания наиболее общего, расчетно-практического, интегрального подхода, объединяющего комплекс расчетных, экспериментальных, материаловедческих и проектных задач, к реализации проблемы создания нейтрализаторов газовых выбросов промышленных предприятий и транспортных средств с максимально высокими характеристиками по заданным эксплуатационным и экономическим показателям.

Предлагаемый подход базируется на совокупности следующих теоретических разработок.

Открыт новый класс керамики безобжигового формирования, обладающей вязкопластичностью при высоких температурах [7,8]. Высокотемпературная вязкопластичность – это способность материалов релаксировать термические и механические напряжения, прикладываемые к ним внешними воздействиями в процессе эксплуатации. Этот показатель определяет аномально высокую термостойкость изделий из керамики нового класса и позволяет получать высокотемпературные материалы любых конфигураций. Кроме того, керамические изделия на основе таких материалов могут быть сформированными с любой заданной направленной пористостью и необходимым комплексом эксплуатационных параметров (табл. 1).

В структуру керамических материалов безобжигового формирования могут быть искусственно введены оксиды, их соединения и тугоплавкие металлы, проявляющие достаточные каталитически активные свойства по отношению к соответствующим конвертируемым примесям, находящимся в газовой фазе.

На основе керамики, обладающей вязкопластичностью при высоких температурах, созданы керамические нагреватели нового типа [9], функционирующие при различных сетевых напряжениях. Это позволяет предположить возможность создания металллокерамических дожигателей твердых частиц органической природы, как на стационарных установках, так и передвижных на основе двигателей внутреннего сгорания (ДВС). Параметры свойств разработанной керамики, приведенные в табл.1, свидетельствуют о возможности применения изделий, проектируемых на ее основе, в значительно более напряженных условиях – в авиационных газотурбинных установках, что свидетельствует и о возможности их применения в ДВС. Конструктивное совмещение в

одном аппарате дожигателя и нейтрализатора позволит реализовать комплексное решение актуальных проблем – очистки отходящих газов от вредных газовых и углеродных примесей.

Таблица 1 – Основные эксплуатационные показатели керамических материалов

Свойства	Показатели
Температура применения, °С	-140 ÷ +1750
Коэффициент теплопроводности при 700°С, Вт/м·К	0,05÷22
Открытая пористость, %	3÷70
Энергия разрушения при температуре 900°С, Дж	<3
Удельная энергия отрыва, Дж/м ²	<2
Удельное объемное электросопротивление при 1000°С, Ом·м	10 ² ÷10 ⁴
ТКЛР, 10 ⁻⁶ град ⁻¹	3÷16
Предел прочности при изгибе, МПа	<8
Предел прочности при сжатии, МПа	<200
Термостойкость (способность выдерживать разрушающие перепады температур), °С	>1600
Модуль упругости при изгибе, ГПа	2÷20
Пластическая прочность структуры при 700°С, кПа·м	<95
Виброперенапряжение, ед.нагр.	8 ÷ 10
Виброскорость при 300 Гц, мм/с	40 ÷ 45
Циклы вибронагружения, 10 ⁶ ед.	<5,4

Для носителей каталитических преобразователей, изготавливаемых из металлов, отработана и освоена технология формирования оксидных покрытий непосредственным окислением поверхности металлов и сплавов вентильной группы (Ti, Mg, Zr, Nb, Ta и др.) методом микродугового окисления (МДО). Метод МДО позволяет превратить поверхности металлов в их высокотемпературные кристаллические оксиды. Выращивание кристаллов новообразований этим методом протекает без формирования переходных зон на границе металл – оксид, как при любых других известных методах нанесения покрытий. Этим обеспечивается высокая адгезия покрытий с металлами. МДО позволяет образовывать бездефектные высокотемпературные оксидные покрытия с уникальными свойствами: высокими показателями прочности при ударе, изгибе и сдвиге, термо- и коррозионной стойкостью и др. Например, по твердости, абразивной стойкости покрытия из корунда, полученные МДО поверхности алюминия, уступают только алмазу.

Непосредственно на границе с металлом методом МДО создаются плотные оксидные покрытия, переходящие, по мере удаления от нее, в высокопористую развитую структуру, способствующую наиболее полному протеканию гетерофазных каталитических процессов, так как удельная поверхность металла после обработки ее МДО увеличивается больше чем в 10 000 раз, но и этот показатель можно существенным образом увеличить.

МДО металлов позволяет в процессе формирования оксидных покрытий варьировать в широких пределах фазовый состав продуктов новообразований и получать соединения с заданной каталитической активностью по отношению к соответствующим вредным химическим выбросам.

Отработана технология нанесения каталитически активных элементов оксидной и металлической природы в развитый объем носителей катализаторов, формируемых как на металлической оксидированной, так и на керамической основе. Эффективность каталитических преобразователей для очистки разных газов существенным образом повышается при насыщении их активного объема металлами группы платины. В этой связи разработан и реализован практически новый механохимический метод закрепле-

ния мономолекулярных слоев драгметаллов на носители, позволяющий на порядок уменьшить расход металлов группы платины.

Детальное исследование газодинамического процесса теплообмена, происходящего в каталитическом нейтрализаторе, определяет необходимость разработки математической модели процесса и алгоритма численного решения поставленной задачи. Разработка физической и математической моделей процесса теплообмена должна осуществляться с учетом термодинамических свойств очищаемых газов, наличия и интенсивности источников тепловыделения, вызванного экзотермическим процессом конверсии, что должно быть отражено в алгоритме численного моделирования. В случае, когда структурный анализ газодинамического процесса, происходящего в нейтрализаторе, произведенный декомпозицией его полной математической модели, выявил, что основное влияние на протекание исследуемого процесса оказывает интенсивность тепловыделения в результате сгорания углерода и угарного газа, содержащихся в смеси конвертируемых газов, то для описания процессов смешения достаточно использовать усеченные уравнения, полученные из уравнений Навье-Стокса, путем отбрасывания вязких и диффузных членов – приближение Эйлера с источниковыми членами.

В более общих случаях математическая модель невязкого газа должна быть представлена системой двумерных нестационарных уравнений Эйлера и соответствующих предельных условий. Тогда систему уравнений необходимо численно интегрировать с помощью модификационной схемы Годунова повышением порядка точности, которая касается схем TVD-типа. Схема использует регулярные расчетные сетки. Повышение порядка аппроксимации по объему достигается путем использования линейного закона распределения параметров в расчетных ячейках. Аппроксимация по времени осуществляется по методам Родинона, Лакса-Вендрова или Рунге-Куты второго или третьего порядка точности [10-13].

Для решения кинетических уравнений, которые описывают межфазный обмен массой, импульсом или энергией, необходимо создание методики, основанной на распределении задачи расчета двухфазного течения на несколько независимых подзадач, в каждой из которых рассчитываются параметры фаз. Учет взаимного влияния подзадач проводится на каждой итерации, а расчет в каждой точке разностной сетки производится до достижения сходимости по параметрам, которыми характеризуются все рассматриваемые в них физические процессы.

Общая поверхность гетерофазного взаимодействия, определяющая основные конструкционные и геометрические параметры носителей и геометрию каналов, рассчитывается посредством созданной компьютерной интерактивной системы гидродинамического анализа процессов многократного соударения элементов газового потока с пористой поверхностью носителей [14].

Создан исследовательский стенд, позволяющий определять газодинамические и кинетические параметры процессов каталитической конверсии вредных газовых примесей на носителях любой геометрии [15]. Лабораторный стенд может быть трансформирован и для проведения исследований в промышленных условиях.

Решение поставленной проблемы очистки отходящих газов опирается на значительный накопленный теоретический и практический материал по использованию соответствующих каталитически активных соединений, позволяющий создавать комплексные катализаторы для эффективной очистки различных газов от вредных примесей.

Литература

1. ТОВАЖНЯНСКИЙ Л.Л., КАПУСТЕНКО П.А., УЛЬЕВ Л.М. и др. Интеграция тепловых процессов для развития энергосберегающего потенциала промышленности // Интегровані технології та енергозбереження. – 2002. – №2. – С. 3-5.

2. Бесков В.С., Флокк В. Моделирование каталитических процессов в реакторах. – М.: Химия, 1991. – 256 с.
3. Денисов А.А., Макаренко В.А., Шамрай А.А. Керамические блочные носители и катализаторы сотовой структуры // Экотехнологии и ресурсосбережение. – 1997. – №1. – С. 24-31.
4. Бесков В.С. Катализаторы новых геометрических форм// Химическая промышленность. – 1990. – №7. – С. 29-32.
5. Скарченко В.К. Алюмосиликатные катализаторы. –К.: Изд-во АН УССР, 1963. – 120 с.
6. Аланова Т.Г. Очистка воздуха от органических соединений // Журн. ВХО им. Д.И. Менделеева. – 1969. – Т. XII. – Вып. 14. С. 381-388.
7. Ведь В.Е. Описание деформационных характеристик упруго-вязких покрытий // Вестник Харьковского политехнического института: Сб. научн. тр. – 1999. – Вып. 26.– Харьков: ХГПУ – С. 122-124.
8. Ведь В.Е. Аномальное разрушение безобжиговой керамики на основе оксида алюминия, содержащей стеклофазу, при повышенных температурах // Механіка та машинобудування.– 1997.– №1.– С. 26-33.
9. Ведь В.Е., Лещенко В.А., Гусева Н.И., Верба А.Г. Энергоэффективные нагревательные устройства на основе термостойкой керамики // Інтегровані технології та енергозбереження.– 2001.–№2.– С. 23-27.
10. Тимошенко В.А., Лиманский А.В. Технология решения на ЭВМ задач газовой динамики. – Киев: Наук. думка, 1981. –232 с.
11. Численное решение многомерных задач газовой динамики/С.К. Годунов, А.В. Забродин, М.Я. Иванов, А.Н. Крайко, Г.П. Прокопов. – М.: Наука, Гл. ред. физ.-мат. лит., 1976. – 400 с.
12. Лойцянский Л.Г. Механика жидкости и газа. – М.: Наука, Гл. ред. физ.-мат. лит., 1970. – 904 с.
13. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Теоретическая физика: Учебное пособие. В 10 т. – Т. 6. Гидродинамика. – М.: Наука, Гл. ред. физ.-мат. лит., 1986. –736 с.
14. Комп'ютерна інтерактивна система аеродинамічного аналізу і удосконалення вінців турбомашин «Експерт»: Свідцтво про державну реєстрацію виключної правомірності особи на твір ВП № 666, Національний аерокосмічний університет ім. Н.Е.Жуковського «Харківський авіаційний інститут» / М.Л. Угрюмов, Ю.К. Чернишов, Ю.А. Скоб, С.А. Прокоф'єв (Україна). – Дата реєстрації 27.10.2000; Дата видачі 27.11.2000.
15. Зубков Л.Ф., Ведь В.Е. Ровенский А.И., Соловей С.И. Стенд для изучения аэродинамических и кинетических процессов конверсии вредных примесей в выпускных газах // Інтегровані технології та енергозбереження.– 2003.–№2.– С. 122-126.

УДК 621.43.658

Ведь В.Є., Остапчук В.М., Хань Вей, Бородин В.І., Ровенський О.І.

ІНТЕГРАЦІЯ КІНЕТИЧНИХ, ТЕПЛОВИХ І АЕРОДИНАМІЧНИХ ПРОЦЕСІВ ПРІ ПРОЕКТУВАННІ КАТАЛІТИЧНИХ ПЕРЕТВОРЮВАЧІВ ШКІДЛИВИХ ГАЗОВИХ ВИКИДІВ

Пропонується інтегральний підхід до рішення проблеми проектування каталітичних перетворювачів шкідливих газових викидів промислових установок та транспортних засобів. Він поєднує сукупність розрахункових, експериментальних, матеріалознавських та проектних задач, які вирішуються для визначених умов очищення газів.