

**В. В. МОРГУНОВ**, с. н. с. УИПА, Харьков

**ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССОВ  
ЭЛЕКТРОННО-ЛУЧЕВОЙ ОЧИСТКИ ДЫМОВЫХ ГАЗОВ.  
СИСТЕМА  $N_2-O_2-NO-SO_2-NH_3-H_2O-CO_2$**

В статье рассматриваются результаты численного моделирования радиационно-химических процессов, которые происходят при электронно-лучевом очищении (ЭЛО) дымовых газов для системы  $N_2-O_2-NO-SO_2-NH_3-H_2O-CO_2$  с использованием метода Гира в представлении Нордсика для решения жестких систем обычных дифференциальных уравнений (ОДУ). Полученные вносы радиационно-химических и химических реакций в образование и удаление основных химических веществ, которые принимают участие в моделировании. Продемонстрирована возможность проведения численного эксперимента с целью изучения радиационно-химических процессов с точки зрения повышения эффективности очищения.

**Ключевые слова:** электронно-лучевая очистка, численное моделирование

**Введение.** Проблему очистки дымовых газов от оксидов азота и серы позволяет решить технология электронно-лучевой очистки (ЭЛО) дымовых газов. Преимущества технологии ЭЛО перед химическими очистками заключается в следующем: одновременная очистка дымовых газов от  $NO_x$ ,  $SO_2$ , полиароматических углеводородов, летучих органических соединений; компактность; высокая степень очистки; в результате очистки дымовых газов получают сельскохозяйственные удобрения. Суть технологии ЭЛО [1, 2] заключается в следующем: дымовые газы облучаются ускоренными электронами (с энергиями до 1 МэВ), перед облучением в газы подаются пары аммиака; в результате радиационно-химических и химических реакций вредные вещества, в частности,  $NO_x$ ,  $SO_2$  переводятся в сульфаты-нитраты аммония, которые можно использовать в качестве сельскохозяйственных удобрений. Технология ЭЛО разрабатывается на протяжении последних 30-ти лет. Построены промышленные и опытно-промышленные установки в Китае, Польше, Болгарии. Но, несмотря на сравнительно длительное изучение этой технологии, полного понимания механизма кинетики удаления  $NO_x$ ,  $SO_2$  и других загрязняющих веществ из дымовых газов пока еще нет. Для этой цели автором была разработана математическая модель и

© В.В. Моргунов. 2013

программный комплекс «ELO» [3–5], собрана база данных радиационно-химических и химических реакций (более чем 2000 реакций) для более чем 500 химических реакций. Программный комплекс «ELO» обладает следующими возможностями: на основе начального состава дымовых газов составлять механизм химических реакций; составлять и решать жесткую систему обычных дифференциальных уравнений методом Гира в представлении Нордсика, описывающую процессы ЭЛО дымовых газов; рассчитывать вклад отдельных химических реакций в образование или удаление тех или иных химических веществ; строить графики концентраций химических веществ в зависимости от времени облучения.

Вопросу численного моделирования процессов ЭЛО посвящены работы [6–8]. В основном, в этих работах кроме перечня радиационно-химических и химических реакций, участвующих в моделировании приведены результаты по расчетам степени удаления в зависимости от поглощенной дозы.

Уменьшение энергозатрат для технологии ЭЛО является актуальной задачей на данный момент, и решение этого вопроса будет способствовать широкому распространению этой перспективной технологии в промышленности.

Для понимания путей повышения эффективности с точки зрения энергозатрат следует изучить механизм кинетики удаления и образования в процессе ЭЛО газообразных вредных веществ, загрязняющих дымовые газы, т.е. другими словами, понять, на что расходуется введенная в газы энергия электронного пучка. Одним из вариантов решения этой задачи является изучение вклада радиационно-химических и химических реакций в удаление и образование этих вредных веществ. Работ, посвященных этим вопросам практически нет. Следует выделить лишь работу [8], в которой даны результаты расчетов вкладов радиационно-химических реакций по образованию и стоку радикалов ОН, ответственных за удаление газообразных вредных веществ из газов.

Цель данной работы заключается в определении вклада химических и радиационно-химических реакций в образование в ходе ЭЛО и удаление газообразных веществ, содержащихся в дымовых газах

для системы  $N_2-O_2-NO-SO_2-NH_3-H_2O-CO_2$ , а также пути повышения эффективности технологии ЭЛО.

**Математическая модель, описывающая процессы ЭЛО и ее программная реализация.** Математическая модель процессов ЭЛО, подробно описана в [3] и приведена в табл. 1, где  $\dot{D}$  – мощность дозы облучения, Гр/с;  $D$  – доза облучения, Гр;  $\tau$  – общее время облучения, с;  $\sigma$  – параметр, влияющий на ширину кривой Гауссиана мощности дозы, с;  $n_i$  – концентрация  $i$ -ой компоненты, моль/м<sup>3</sup>;  $G_{n_i}$  – радиационно-химический выход  $i$ -ой компоненты газа, моль/Дж;  $x_i$  – мольная доля  $i$ -ой компоненты газа;  $\rho$  – средняя плотность газа, кг/м<sup>3</sup>;  $k_{ik}^{(n)}$  – константа скорости  $n$ -го порядка химической реакции между  $i$ -ой компонентой и  $k$ -ыми компонентами газа, м<sup>3</sup>/(моль·с);  $n_k$  – концентрация  $k$ -го компонента, моль/м<sup>3</sup>,  $n_{i0}$  – начальная концентрация  $i$ -го компонента;  $dD(t)$  – поглощенная доза, Гр;  $c$  – удельная теплоемкость газовой среды, Дж/(кг·К).

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

№ пп	Процесс	Основные характеристики и образующиеся продукты	Математическое описание процесса
1.	Прохождение первоначально нерасходящегося пучка ускоренных электронов через газ	Распределение мощности дозы от времени	$\dot{D} = \frac{D_0}{\sigma\sqrt{2\pi}} e^{\left[-0.5\left(\frac{t-\tau/2}{\sigma}\right)^2\right]}$
2.	Физические и физико-химические процессы при прохождении через дымовые газы	Возбужденные молекулы, ионы, радикалы	$\frac{dn_i}{dt} = G_{n_i} \dot{D} x_i \rho$
3.	Химические реакции промежуточных и конечных продуктов	Стабильные химические соединения	$\frac{dn_i}{dt} = n_i \sum_n k_{ik}^{(n)} \prod_{k=1}^n n_k$ При заданных начальных концентрациях: $n_i(0) = n_{i0}$
4.	Рост температуры газов вследствие поглощения энергии ускоренных электронов	Рост температуры газа со временем	$dT(t) = \frac{dD(t)}{c}$

Для расчета вклада отдельных химических реакций в удаление и образование тех или иных химических веществ в процессе ЭЛО применяется следующий подход. Скорость элементарной химической

реакции или же скорость образования (удаления) химического вещества описывается следующим выражением (для случая бимолекулярной реакции):

$$V_n = k_n[A][B],$$

где  $V_n$  – скорость  $n$ -ой элементарной химической реакции или скорость образования (удаления) химического вещества, моль/(с·м<sup>3</sup>);

$k_n$  – константа скорости химической реакции м<sup>3</sup>/(моль·с);

[A] и [B] – концентрации реагентов элементарной химической реакции, моль/м<sup>3</sup>.

Определение вклада в образование или удаление заданного химического вещества происходит по следующему алгоритму:

- $V_n$  суммируется по всему времени облучения для каждой реакции, участвующей в образовании или удалении заданного химического вещества;
- Рассчитывается относительный вклад каждой реакции в образование или удаление заданного химического вещества;
- Результаты вычислений программно записываются в электронную таблицу MS Excel, для последующей обработки данных;
- Определяются реакции, вносящие существенный вклад в образование или удаление химического вещества.

Как уже упоминалось, для моделирования процессов, происходящих при ЭЛО дымовых газов была собрана и проверена база данных, содержащая более 500 химических веществ и данные для более 2000 радиационно-химических и химических реакций. Для решения жесткой систем ОДУ, описывающей процессы ЭЛО дымовых газов, был выбран метод Гира в представлении Нордсика и создана компьютерная программа «ELO».

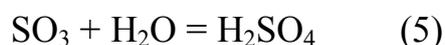
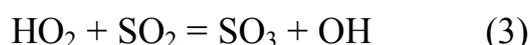
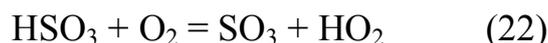
Оценка точности реализации выбранного метода решения проводилась при помощи тестовых задач [9]. Результаты тестирования совпадают с результатами тестовых задач.

**Результаты численных экспериментов процессов ЭЛО.** Расчеты проводились для следующих типичных параметров ЭЛО дымовых газов: доза облучения – 10 кГр, температура дымовых газов -120 °С, начальная концентрация O<sub>2</sub> – 10%, H<sub>2</sub>O – 8%, CO<sub>2</sub> – 10% NO – 250 ppm, SO<sub>2</sub> – 0,5

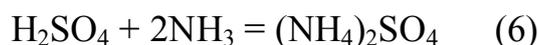
г/Нм<sup>3</sup>, N<sub>2</sub> – баланс, концентрация NH<sub>3</sub> соответствует стехиометрическому отношению  $[\text{NH}_3] = [\text{NO}] + 2[\text{SO}_2]$ .

**Удаление SO<sub>2</sub>.** Удаление SO<sub>2</sub> во время ЭЛО дымовых газов может проходить одновременно по двум каналам: по так называемому, «термическому» [11] и радиационно-окислительному.

Радиационно-окислительный механизм удаления SO<sub>2</sub> состоит из следующих реакций [12]:



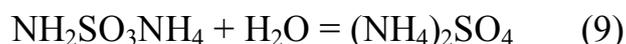
И в присутствии аммиака серная кислота взаимодействует с NH<sub>3</sub> с образованием сульфата аммония:



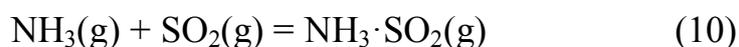
В нескольких работах [11, 13] сообщалось, что SO<sub>3</sub> напрямую реагирует с NH<sub>3</sub>:



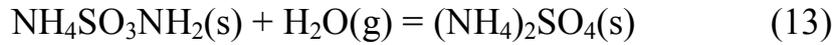
NH<sub>3</sub>SO<sub>3</sub> реагирует с NH<sub>3</sub> и H<sub>2</sub>O с образованием (NH<sub>4</sub>)<sub>2</sub>SO<sub>4</sub>:



Одновременно с радиационно-окислительным механизмом удаления SO<sub>2</sub>, происходит «термическое» удаление диоксида серы. Кинетический механизм этого процесса изучен недостаточно хорошо. В работе [11] была предложена следующая кинетическая схема с участием гетерогенных реакций:



Дальнейшее взаимодействие с парами воды и кислородом приводит к образованию сульфата аммония:



Результаты экспериментальных исследований по термическому взаимодействию диоксида серы и аммиака без облучения дымовых газов ускоренными электронами представлены на рис. 1 [15].

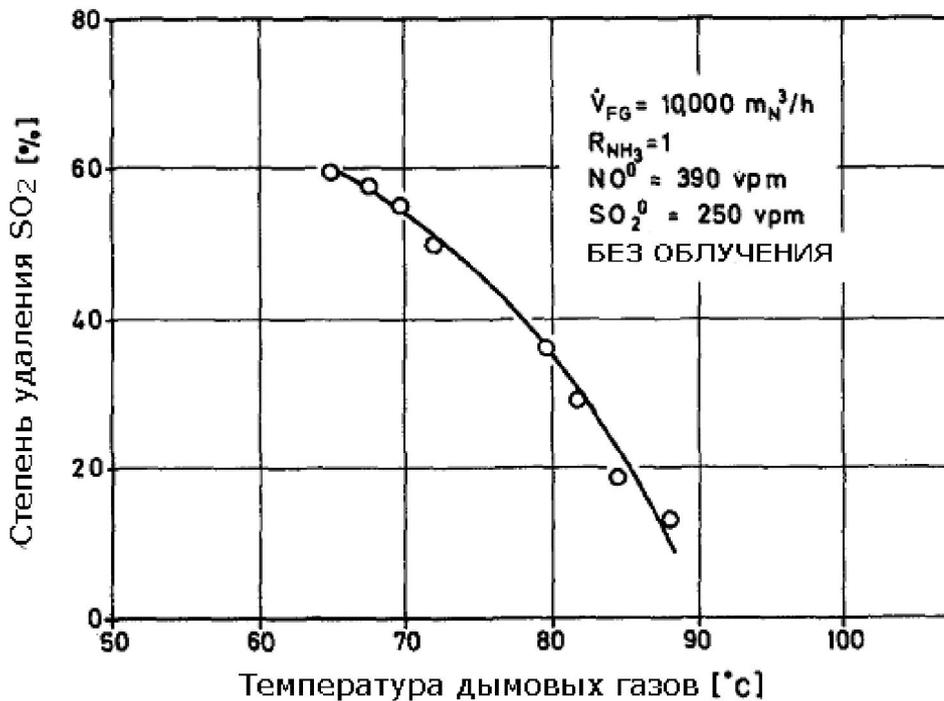


Рис. 1 – Термическое удаление SO<sub>2</sub> (без облучения) в зависимости от температуры [15]

На основе данных, представленных на рис. 1 зависимость константы скорости химической реакции SO<sub>2</sub> + NH<sub>3</sub> от температуры может быть определена эмпирически. Экспериментальные точки хорошо описываются при помощи следующей константы скорости химической реакции для «термического» удаления SO<sub>2</sub> [15]:

$$k = 4,55 \times 10^{-29} \exp(9000/T) \text{ см}^3 \text{ с}^{-1}.$$

На рис. 2 показана рассчитанная зависимость степени удаления  $\text{SO}_2$  от температуры при поглощенной дозе, равной 10 кГр. Из рис. 2 очевидно, что степень очистки  $\text{SO}_2$  за счет радиационных эффектов составляет порядка 10%. Такая же степень очистки получается без включения в моделирование реакции  $\text{NH}_3(\text{g}) + \text{SO}_2(\text{g})$ .

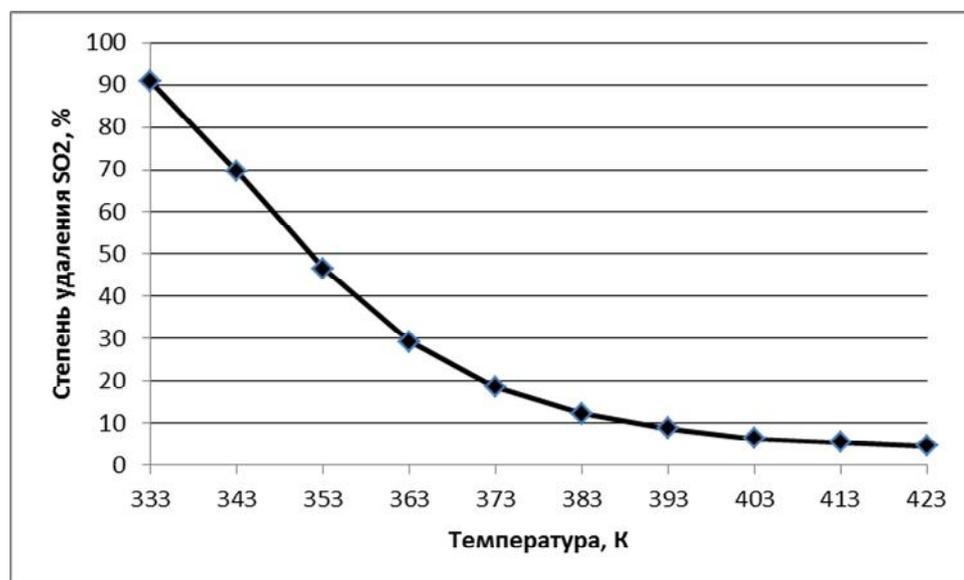
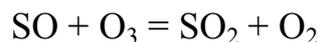
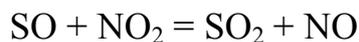
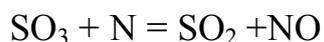
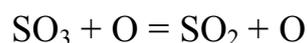


Рис. 2 – Зависимость степени удаления  $\text{SO}_2$  от температуры: поглощенная доза – 10 кГр

**Образование  $\text{SO}_2$ .**  $\text{SO}_2$  во время электронно-лучевой очистки образуется в малом количестве. Основные реакции, приводящие к образованию  $\text{SO}_2$ , являются следующие реакции:



**Удаление  $\text{NO}$ .** Вклады химических реакций в удаление  $\text{NO}$  приведены в таблице 2. Наибольший вклад (около 15% каждая) в удаление  $\text{NO}$  вносят реакции взаимодействия  $\text{NO}$  с  $\text{O}$ ,  $\text{OH}$  и  $\text{NO}_3$ .

Порядка 10% от общего удаления NO вносят реакции взаимодействия NO с  $N(^4S)$ ,  $HO_2$  и  $O_2^-(H_2O)$ .

Таким образом, в ходе электронно-лучевой очистки дымовых газов около 52% от общего количества NO превращается в  $NO_2$ , около 16% - в  $HNO_2$ , около 13% - в  $N_2$ , около 10% - в  $NO_3^-$ , и около 6% – в  $N_2O$ .

Таблица 2 – Результаты расчетов по вкладу реакций в удаление NO

№ пп	Реакция	Вклад в удаление, %
1.	$NO + O = NO_2$	16,47%
2.	$NO + OH = HNO_2$	15,81%
3.	$NO + NO_3^- = NO_2 + NO_2^-$	14,11%
4.	$NO + N(^4S) = N_2 + O$	10,67%
5.	$NO + HO_2 = NO_2 + OH$	10,49%
6.	$NO + O_2^-(H_2O) = NO_3^- + H_2O$	9,55%
7.	$NO + NO_3 = 2NO_2$	8,72%
8.	$NO + NH = H + N_2O$	5,83%
9.	$NO + O_3 = NO_2 + O_2$	3,29%
10.	$NO + NH_2 = N_2 + H_2O$	2,26%

Общая схема удаления NO представлена на рис. 3.

**Образование NO.** Реакции, приводящие к образованию NO уменьшают эффективность очистки дымовых газов и являются нежелательным. Исходя из результатов расчетов, NO образуется на уровне около 10% от удаленного NO. Перечень реакций, вносящих основной вклад в образование NO, приведены в табл. 3. Наибольшее количество NO (более 30% от всего образовавшегося вновь NO) получается в реакции  $N(^4P) + O_2 = NO$ , около 18% образуется в реакции  $NO_2 + O = NO + O_2$  и около 15% NO является результатом реакции  $O_2 + NH$ . Во всех реакциях, приведенных в табл. 3. участвуют вещества, являющиеся продуктами радиолиза газа. Это свидетельствует о том, что энергия электронного пучка, поглощенная дымовым газом, расходуется не только на очистку дымовых газов от вредных веществ, но и также на их образование.

Таблица 3 – Результаты расчетов по вкладу реакций в образование NO

№ пп	Реакция	Вклад в образование, %
1.	$N(^4P) + O_2 = NO$	32,76
2.	$NO_2 + O = NO + O_2$	17,93
3.	$O_2 + NH = NO + OH$	14,81
4.	$N(^4S) + NO_2 = 2NO$	10,77
5.	$NO_2 + H = NO + OH$	6,43
6.	$NO_2 + NO_2^- = NO + NO_3^-$	4,70
7.	$CO_2 + N = NO + CO$	2,88

**Образование NO<sub>2</sub>.** Перечень реакций, вносящих основной вклад в образование NO<sub>2</sub>, приведен в табл. 4.

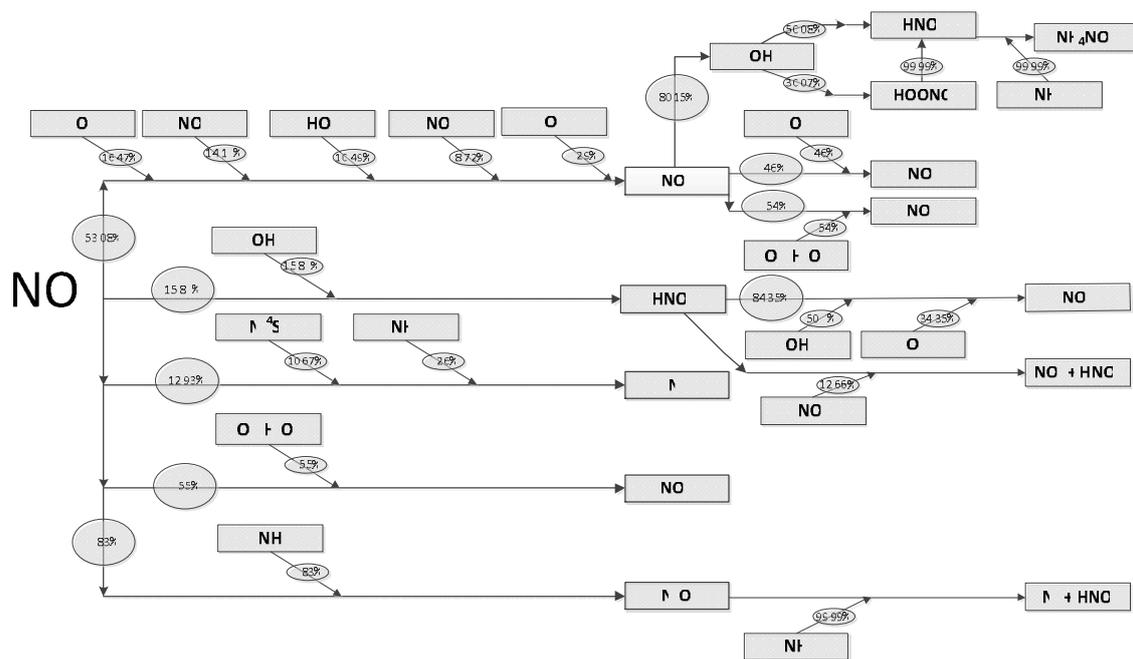


Рис. 3 – Схема удаления NO, NO<sub>2</sub>, HNO<sub>2</sub>, N<sub>2</sub>O: в овалах приведены данные (%) по степени вклада химических реакций в удаление соответствующих химических веществ

Таблица 4 – Результаты расчетов по вкладу реакций в образование  $\text{NO}_2$

№ пп	Реакция	Вклад в образование, %
1.	$\text{NO} + \text{O} = \text{NO}_2$	20,51
2.	$\text{HOONO} = \text{NO}_2 + \text{OH}$	19,22
3.	$\text{NO}_3^- + \text{NO} = \text{NO}_2 + \text{NO}_2^-$	17,60
4.	$\text{NO} + \text{HO}_2 = \text{NO}_2 + \text{OH}$	13,05
5.	$\text{NO} + \text{NO}_3 = 2\text{NO}_2$	10,84
6.	$\text{NO} + \text{O}_3 = \text{NO}_2 + \text{O}_2$	4,10
7.	$(\text{H}_3\text{O})^+ \cdot (\text{H}_2\text{O})_6 + \text{NO}_3^- = 7\text{H}_2\text{O} + \text{NO}_2 + \text{OH}$	3,33

Из табл. 4 видно, что основными реакциями-источниками  $\text{NO}_2$  (более 50% всего  $\text{NO}_2$ ) являются реакции  $\text{NO} + \text{O} = \text{NO}_2$ ,  $\text{HOONO} = \text{NO}_2 + \text{OH}$ ,  $\text{NO}_3^- + \text{NO} = \text{NO}_2 + \text{NO}_2^-$ . Причем, реакция  $\text{HOONO} = \text{NO}_2 + \text{OH}$  является нежелательной, т.к. уменьшает степень эффективности удаления  $\text{NO}_x$ , т.к.  $\text{HOONO}$  является продуктом окисления  $\text{NO}$  и  $\text{NO}_2$ .

**Удаление  $\text{NO}_2$ .** Процентные вклады химических реакций в удаление  $\text{NO}_2$  представлены в табл. 5 и на рис. 3.

Таблица 5 – Результаты расчетов по вкладу реакций в удаление  $\text{NO}_2$

№ пп	Реакция	Вклад в удаление, %
1.	$\text{NO}_2 + \text{OH} = \text{HNO}_3$	50,08
2.	$\text{NO}_2 + \text{OH} = \text{HOONO}$	30,07
3.	$\text{NO}_2 + \text{O} = \text{NO}_3$	5,46
4.	$\text{NO}_2 + \text{O}_2^-(\text{H}_2\text{O}) = \text{NO}_2^- + \text{O}_2$	3,54
5.	$\text{NO}_2 + \text{O} = \text{NO} + \text{O}_2$	2,15

Основным продуктом удаления  $\text{NO}_2$  является азотная кислота  $\text{HNO}_3$  и ее изомер  $\text{HOONO}$ , который, практически, полностью преобразуется в  $\text{HNO}_3$ . При взаимодействии азотной кислоты с аммиаком  $\text{NH}_3$  образуется нитрат аммония  $\text{NH}_4\text{NO}_3$  в мелкодисперсном виде и который является сельскохозяйственным удобрением и может быть уловлен электростатическим или мокрыми фильтрами. И таким образом, повышается экономическая эффективность ЭЛО-процесса.

**Образование  $\text{OH}$ .** Гидроксил-радикал  $\text{OH}$  является одним из мощных окислителей (табл. 6). Современные окислительные технологии очистки жидких и газообразных сред используют для разложения

органических и неорганических загрязнителей, главным образом, гидроксил радикалы OH [10].

Таблица 6 – Окислительные потенциалы наиболее сильных окислителей [10]

№ пп	Окислитель	Окислительный потенциал, эВ
1.	F	3,6
2.	ОН	2,7
3.	Cl	2,2
4.	O <sub>3</sub>	2,1
5.	H <sub>2</sub> O <sub>2</sub>	1,8
6.	ClO <sub>2</sub>	1,2

Наибольшее количество (около 18%) гидроксил-радикалов (табл. 7) получается из реакции  $(H_3O)^+ \cdot (H_2O)_6 + NO_3^- = 7H_2O + NO_2 + OH$ . Протонированный кластер воды  $(H_3O)^+ \cdot (H_2O)_6$  образуется в результате реакций.

Таблица 7 – Результаты расчетов по вкладу реакций в образование OH

№ пп	Реакция	Вклад в удаление, %
1.	$(H_3O)^+ \cdot (H_2O)_6 + NO_3^- = 7H_2O + NO_2 + OH$	17,62%
2.	$N(^2D) + H_2O = OH + NH$	14,85%
3.	$NO + HO_2 = NO_2 + OH$	14,52%
4.	$H_2O^+ + H_2O = H_3O^+ + OH$	12,48%
5.	$(H_3O)^+ \cdot (OH) + H_2O = (H_3O)^+ \cdot (H_2O) + OH$	8,74%
6.	$(H_3O)^+ \cdot (H_2O)_5 + NO_3^- = 6H_2O + NO_2 + OH$	4,93%

$(H_3O)^+ \cdot (H_2O)_n + H_2O = (H_3O)^+ \cdot (H_2O)_{n+1}$ , где  $n = 0 \dots 5$ . В свою очередь кластер  $H_3O^+ \cdot H_2O$  является результатом реакций  $H_3O^+ + H_2O = (H_3O)^+ \cdot H_2O$  (эта реакция является источником около 95%  $H_3O^+ \cdot H_2O$ ) и  $H_3O^+ \cdot OH + H_2O = H_3O^+ \cdot H_2O + OH$ . Источником аниона  $NO_3^-$  являются

следующие реакции:  $O_2^- \cdot H_2O + NO = NO_3^- + H_2O$  (около 50% в образовании  $NO_3^-$ ),  $NO_2^- + HNO_3 = NO_3^- + HNO_2$  (около 38% в образовании  $NO_3^-$ ) и  $NO_2^- + NO_2 = NO_3^- + NO$  (около 12% в образовании  $NO_3^-$ ). Около 15%  $OH$  образуется в реакции  $N(^2D) + H_2O = OH + NH$ . Возбужденная молекула азота  $N(^2D)$  образуется в результате радиолиза дымовых газов.

Также около 15%  $OH$  образуется в реакции  $NO + HO_2 = NO_2 + OH$ . Источником 95% молекул  $HO_2$  является реакция  $O_2 + H = HO_2$ .

Около 12% радикалов  $OH$  дает реакция  $H_2O^+ + H_2O = H_3O^+ + OH$ . Катион  $H_2O^+$ , в основном, является продуктом реакций обмена положительного заряда, а также образуется в результате радиолиза паров воды, содержащихся в дымовом газе.

В реакции  $(H_3O)^+ \cdot (OH) + H_2O = (H_3O)^+ \cdot (H_2O) + OH$  образуется около 9% радикалов  $OH$ . Катион  $(H_3O)^+ \cdot (OH)$ , в основном, образуется в реакции  $O_2^+ \cdot H_2O + H_2O = (H_3O)^+ \cdot (OH) + O_2$ .

И менее 5% гидроксил-радикалов  $OH$  образуется в реакции  $(H_3O)^+ \cdot (H_2O)_5 + NO_3^- = 6H_2O + NO_2 + OH$ .

**Потребление  $OH$ .** Около 50% гидроксил-радикалов расходуется в реакции  $NO_2 + OH = HNO_3$ . 33% образовавшихся радикалов  $OH$  потребляются реакцией  $NO + OH = HNO_2$ . Около 8% радикалов  $OH$  потребляются реакцией  $HONO + OH = NO_2 + H_2O$  и около 4% -  $NO_2 + OH = HOONO$ . Очевидно, что реакция  $HONO + OH = NO_2 + H_2O$  является нежелательной, так как приводит к образованию вредных веществ, а именно диоксида азота  $NO_2$ , снижая, таким образом, эффективность электронно-лучевой очистки дымовых газов.

**Выводы и направления дальнейших исследований.** В результате численных экспериментов получены данные по нежелательным реакциям, которые уменьшают эффективность электронно-лучевой очистки. Также, из результатов моделирования следует, что энергия электронов, расходуется не только на очистку газов от газообразных вредных примесей дымовых газов, но и на образование новых вредных примесей (до 10% от типичного начального содержания  $NO$  в дымовых газах), что снижает эффективность очистки. Избежать образования новых оксидов азота во время ЭЛО не представляется возможным, т.к. поглощение энергии ускоренных электронов

осуществляется всеми компонентами газа. Повышение эффективности очистки дымовых газов можно достичь, при условии селективного поглощения энергии теми компонентами газа, которые приводят к образованию химических веществ (ОН, О и др.), способствующих удалению NO<sub>x</sub>, SO<sub>2</sub> и других газообразных загрязнителей. Такое селективное поглощение можно достичь, например, при использовании ультрафиолетового облучения дымовых газов с определенной длиной волны или фотокатализаторов (например, на основе TiO<sub>2</sub>). Причем, применение фотокатализаторов на основе TiO<sub>2</sub> возможно без источников ультрафиолетового излучения, т.к. энергия вторичных электронов выше энергии ультрафиолетового излучения, применяемого в фотокаталитических устройствах на основе TiO<sub>2</sub>.

**Список литературы:** 1. *Fainchtein O.L.* Developing wet variants of electron-beam removal of NO<sub>x</sub>, SO<sub>2</sub> and particulate from flue gas [Текст] / *O. L. Fainchtein, V. V. Piotrovskiy, M. V. Sagaidak et al.* // In: Cooper W.J., Curry R.D., O'Shea K.E. (Eds.) Environmental Application of Ionizing Radiation. New York : Wiley, 1998. – С. 123–138. 2. *Fainchtein O.L.* On problems of reducing energy consumption for irradiation of flue gas in the electron beam gas treatment technology [Текст] / *O.L. Fainchtein, M.V. Sagaidak, V.V. Morgunov* // Radiation Physics and Chemistry. 2002. – № 65. – С. 405–414. 3. *Моргунов В.В.* Математическая модель процессов электронно-лучевой очистки дымовых газов от SO<sub>2</sub>, NO<sub>x</sub>, ПАУ, ЛОС [Текст] / *В.В. Моргунов, А.Л. Файнштейн, А.М. Шкилько* // Восточно-европейский журнал передовых технологий 2011 – № 3/11. – С. 25–29. 4. *Моргунов В.В.* Численное моделирование физико-химических процессов, происходящих при электронно-лучевой очистке дымовых газов [Текст] / *В.В. Моргунов, А.М. Шкилько* // Интегровані технології та енергозбереження 2011. – № 3 – С. 48–51. 5. *Morgunov V.V.* Numerical simulation of flue gas purification from NOX, SO2 dy electron beam [Текст] / *V.V. Morgunov, O.L. Fainchtein, A.M. Shkilko* / тез. докл. 12-ой симпозиума по радиационной химии «Tihany» (27 августа – 1 сентября 2011 г., г. Залакарош, Венгрия). – С. 103. 6. *Mätzing H.* Chemical kinetics of flue gas cleaning by irradiation with electron [Текст] / *H. Mätzing* // Advances in Chemical Physics. 1991. – Т. LXXX. – С. 315–402. 7. *Nishimura K.* Radiation treatment of exhaust gases, xiv. analysis of no oxidation and decomposition in dry and moist NO-O<sub>2</sub>-N<sub>2</sub> mixtures by computer simulation [Текст] / *Nishimura K., Suzuki N.* // J. Nucl. Sci. Technol. 1981. – Т. 18. – С. 878–886. 8. *Schmitt, K.* Towards a consistent chemical kinetic model of electron beam irradiation of humid air [Текст] / *K. Schmitt, D. Murray, T. Dibble* // Plasma Chemistry and Plasma Processing. 2009. – Т. 29. – С. 347–362. 9. *Хайпер Э., Ваннер Г.* Решение обыкновенных дифференциальных уравнений. Жесткие и дифференциально-алгебраические задачи [Текст] / *Ваннер Г., Хайпер Э.* – Т.2. : М.: Мир, 1999. С. 685. 10. *Wardman P.* Reduction potentials of one-electron couples involving free radicals in aqueous solution [Текст] / *P. Wardman* // J. Phys. Chem. Ref. Data. 1989. – Т. 18. – С. 1637–1755. 11. *Hartley E. M.*, Sulfur Dioxide Reactions with Ammonia in Humid Air [Текст] / *Hartley Edwin M., Matteson Michael J.* // Industrial & Engineering Chemistry Fundamentals. 1975. Vol. 14, No. 1. P. 67–72. 12. *Kim T.O.*

Nanometer-sized particle formation from  $\text{NH}_3/\text{SO}_2/\text{H}_2\text{O}/\text{air}$  mixtures by ionizing irradiation / *T.O. Kim, T. Ishida, M. Adachi et al.* // *Aerosol science and technology*. 1998. Vol. 29, no. 2. P. 111–125. **13.** *Lovejoy E.R.*, Kinetics and Products of the Reaction  $\text{SO}_3 + \text{NH}_3 + \text{N}_2$  [Текст] / *Lovejoy Edward R., Hanson David R.* // *The Journal of Physical Chemistry*. 1996. Vol. 100, no. 11. P. 4459–4465. **14.** *Oppenlander T.* Photochemical Purification of Water and Air: Advanced Oxidation Processes (AOPs): Principles, Reaction Mechanisms, Reactor Concepts [Текст] / *T. Oppenlander* // *Wiley-VCH Verlag GmbH & Co. KGaA*, 2007. – С. 368. **15.** *Gerasimov G.Y.* Homogeneous and heterogeneous radiation induced NO and  $\text{SO}_2$  removal from power plants flue gases-modeling study [Текст] / *G.Y. Gerasimov, T.S. Gerasimova, V.N. Makarov, S.A. Fadeev* / *Radiation Physics and Chemistry*. 1996. Vol. 48, no. 6. P. 763–769.

*Поступила в редколлегию 20.03.2013*

УДК 519.6 : 544.54 : 537.5

**Численное моделирование процессов электронно-лучевого очищения дымовых газов. Система  $\text{N}_2\text{-O}_2\text{-NO-SO}_2\text{-NH}_3\text{-H}_2\text{O-CO}_2$  / В.В. Моргунов** // *Вісник НТУ «ХПІ»*. Серія: Інноваційні дослідження у наукових роботах студентів. – X. : НТУ «ХПІ». – № 9 (983). – С. 33–46. – Бібліогр.: 15 назв.

У статті розглядається результати чисельного моделювання радіаційно-хімічних процесів, що відбуваються при електронно-променевому очищенні (ЕЛО) димових газів для системи  $\text{N}_2\text{-O}_2\text{-NO-SO}_2\text{-NH}_3\text{-H}_2\text{O-CO}_2$  з використанням методу Гіра в поданні Нордсіка для вирішення жорстких систем звичайних диференціальних рівнянь (ЗДР). Отримані внески радіаційно-хімічних і хімічних реакцій в утворення та видалення основних хімічних речовин, що беруть участь у моделюванні. Продемонстровано можливість проведення чисельного експерименту з метою вивчення радіаційно-хімічних процесів з точки зору підвищення ефективності очищення.

**Ключові слова:** електронно-випромінювальна очистка, чисельне моделювання.

In the article the results of numerical modeling of radiation-chemical processes in electron beam treatment (ELO) flue gas system  $\text{N}_2\text{-O}_2\text{-NO-SO}_2\text{-NH}_3\text{-H}_2\text{O-CO}_2$  using the Gear method in Nordsieck representation for solving stiff systems of ordinary differential equations (ODE) are given. Received contributions of radiation, and chemical reactions in the formation and removal of the main chemicals involved in the simulation. The possibility of numerical simulation to study the radiation-chemical processes in terms of improving the efficiency of treatment is demonstrated.

**Keywords:** electron-beam cleaning, numerical simulation