

УДК 697.1

Качан Ю.Г., Баташова Н.А.

ОПТИМИЗАЦИЯ ПАРАМЕТРОВ КОМБИНИРОВАННОЙ СИСТЕМЫ ОТОПЛЕНИЯ ПО ЭКОНОМИЧЕСКОМУ КРИТЕРИЮ

Тепловая нагрузка здания зависит от его параметров, энергонасыщенности и количества находящихся в нем людей. Но затраты на отопительный сезон при использовании комбинированной системы отопления определяются не только тепловой нагрузкой, а и долевым соотношением тепловой энергии, получаемой в ней за счет источников, работающих на разных энергоносителях. При существующих ценах на оборудование, изоляционные материалы, стеклопакеты, а также тарифах на энергоносители можно выбрать параметры системы таким образом, чтобы минимизировать затраты всего отопительного сезона.

Основными параметрами, подлежащими оптимизации, являются толщины изоляций ограждающих конструкций (стен, чердачного и подвального перекрытий), коэффициент теплопередачи окон, а также состав и мощности энергетического оборудования для комбинированной системы отопления. В случае первоначального проектирования здания можно, в дополнение к вышеуказанным параметрам, оптимизировать площадь остекления (в пределах возможного ее варьирования), толщины всех слоев наружных ограждений. Задачу оптимизации рассмотрим на примере комбинированной системы отопления, основными составляющими которой являются мини-котел(лы), тэн(ы) и электрический теплоаккумулирующий преобразователь(ли) (ЭТАП) [1].

Основой оптимизационной задачи является динамический расчет посуточных затрат [2], а интересующей величиной – минимальное значение суммарных затрат всего отопительного сезона. Данные о наружной температуре предлагается получать путем использования соответствующей модели – генератора температур, для чего необходимы статистические данные температуры по рассматриваемой местности. Последние же имеются в архивах гидрометцентров любого региона Украины.

Ограничениями для решения рассматриваемой задачи являются:

1. Суммарная мощность тэнов и электрического теплоаккумулирующего преобразователя (ЭТАПа) не должна превышать допустимую мощность, определяемую из условий используемой электрической сети:

$$P_{от.с}^{ЭТАП} + P_{от.с}^{тэн} \leq P_{дон}, \quad (1)$$

где $P_{дон}$; $P_{от.с}^{тэн}$; $P_{от.с}^{ЭТАП}$ – допустимая мощность, мощность тэнов и ЭТАПа, Вт. Это ограничение обусловлено тем, что работа тэнов и накопление энергии ЭТАПом осуществляется одновременно во внепиковый период времени. Если суммарная мощность электрического оборудования, выбранная исходя из минимального значения затрат всего отопительного сезона, превышает допустимую необходимо произвести перерасчет мощностей оборудования комбинированной системы отопления.

2. Сумма долей тепловой нагрузки, обеспечиваемых котлом (a), тэном (b), и ЭТАПом (c) в любой момент времени должна равняться единице:

$$a + b + c = 1, \quad (2)$$

При этом, учитывая что во время действия внепикового тарифа ЭТАП лишь накапливает энергию (в это время более выгодно нагревать теплоноситель напрямую тэнами), следовательно, ночная составляющая $c_n = 0$, а ограничение на время действия внепикового тарифа примет вид:

$$a_n + b_n = 1, \quad (3)$$

3. Если не известна стоимость единицы преобразователя необходимой мощности, то ее можно рассчитать исходя из стоимости электродов, материала бака и наполнителя. При этом, следует учитывать то, что температура нагрева наполнителя ЭТАПа не должна вызывать его структурных изменений, т.е:

$$t_{наг} < t_{н.н} - \Delta t_3 \text{ и } t_{наг} < t_{н.э} - \Delta t_3, \quad (4)$$

где $t_{н.н}$, $t_{н.э}$ – температура возникновения необратимых фазовых переходов в веществе и в конструктивных элементах преобразователя, К; Δt_3 – температурный интервал, гарантирующий надежность работы накопителя, К.

В случае недоиспользования накопленной ЭТАПом энергии время работы преобразователя в режиме накопления в следующие сутки уменьшается. Его продолжительность определяется из выражения:

$$T_{\text{э}} = \tau_{\text{вн}} - \frac{q_{\text{сум.ост}}^{\text{ЭТАП}}}{P_{\text{от.с}}^{\text{ЭТАП}} \eta_{\text{ЭТАП}}} / 3600, \quad (5)$$

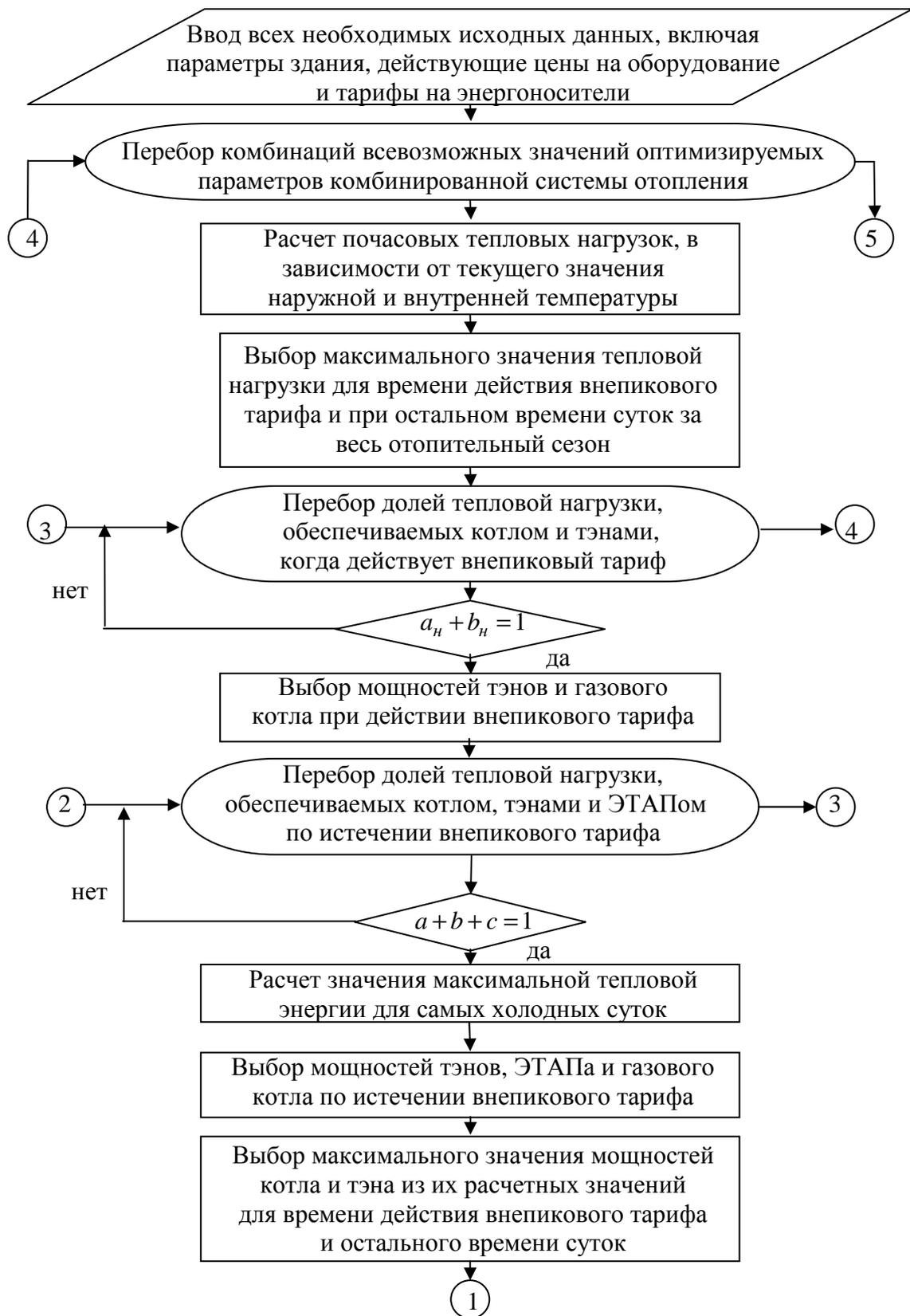
где $\tau_{\text{вн}}$ – продолжительность действия внепикового тарифа, ч; $q_{\text{сум.ост}}^{\text{ЭТАП}}$ – количество энергии, оставшееся в преобразователе, Дж; $P_{\text{от.с}}^{\text{ЭТАП}}$ – мощность ЭТАПа в режиме накопления, Вт; $\eta_{\text{ЭТАП}}$ – его КПД.

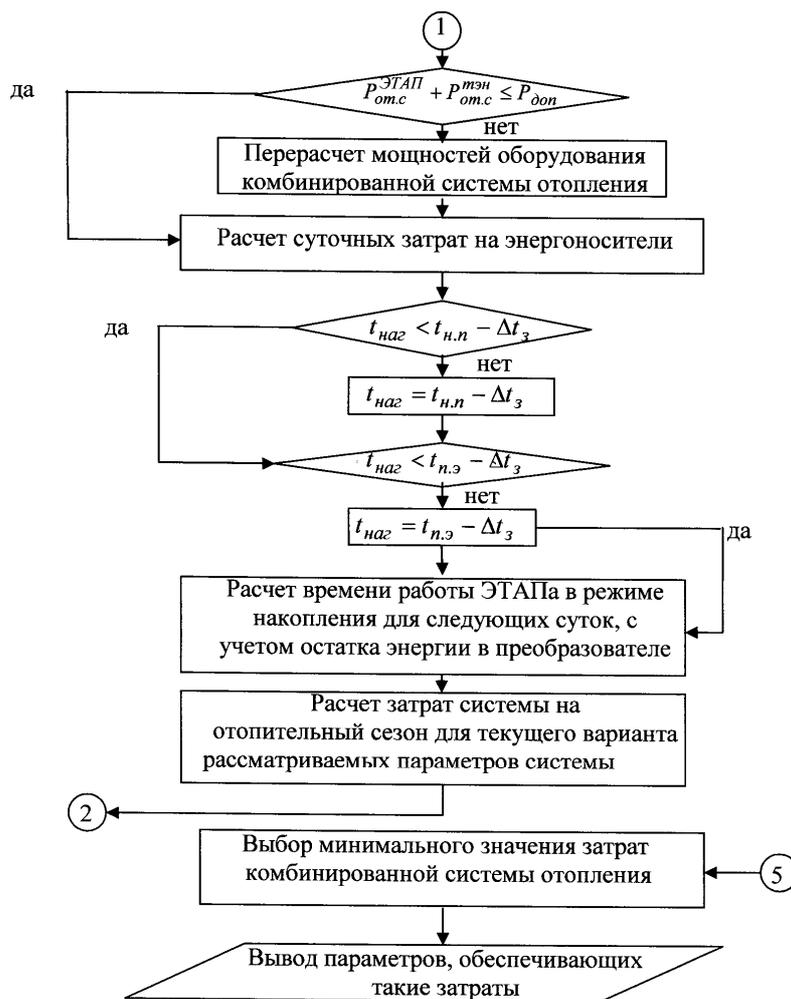
Данное условие является посуточным, возникающим из-за колебаний наружной температуры.

При наличии соответствующей автоматики для системы отопления исходные данные о температуре внутри здания необходимо брать с учетом дня недели и времени суток. Это дает возможность не отапливать пустые общественные здания в ночное время и по выходным дням и исключить, таким образом, нерациональное использование энергоресурсов.

Выбор параметров системы отопления производится исходя из наименьших суммарных затрат всего отопительного сезона. С учетом всего выше изложенного блок-схема алгоритма оптимизации параметров комбинированной системы отопления принимает вид:

Таким образом предложены методика и алгоритм, позволяющие выбрать параметры здания, мощности энергетического оборудования системы отопления, обеспечивающие минимальные затраты всего отопительного сезона.





Литература

1. Качан Ю.Г., Левченко С.А., Кононенко Н.А. (Баташова Н.А.). Применение электрического теплоаккумулирующего преобразователя для повышения эффективности системы горячего водоснабжения/ Сборник научных трудов международной научно-технической конференции «Энергоэффективность 2005», приложение к журналу «Холодильная техника и технология». – Одесса: Рефпринтинфо, 2005. – с. 90–94.

2. Качан Ю.Г., Баташова Н.А. Об оценке экономической эффективности комбинированной системы отопления / Энергетика: экономика, технологии, экология. – Київ: НТУУ «КПІ», 3’2007. – с. 56–60.

Bibliography (transliterated)

1. Kachan Yu.G., Levchenko S.A., Kononenko N.A. (Batashova N.A.). Primenenie elektricheskogo teploakkumuliruyushego preobrazovatelya dlya povyisheniya effektivno-sti sistemy goryachego vodosnabzheniya/ Sbornik nauchnykh trudov mezhdunarodnoy nauchno-tehnicheskoy konferentsii «Energoeffektivnost 2005», prilozhenie k zhurnalу «Holodilnaya tehnika i tehnologiya». – Odessa: Refprintinfo, 2005. – p. 90–94.

2. Качан Yu.G., Batashova N.A. Ob otsenke ekonomicheskoy effektivnosti kombinirovannoy sistemyi otopleniya Energetika: ekonomika, tehnologiyi, ekologiya. – Kiyiv: NTUU “KPI”, 3’2007. – p. 56–60.

УДК 697.1

Качан Ю.Г., Баташова Н.А.

**ОПТИМІЗАЦІЯ ПАРАМЕТРІВ КОМБІНОВАНОЇ СИСТЕМИ ОПАЛЕННЯ
ЗА ЕКОНОМІЧНИМ КРИТЕРІЄМ**

У роботі сформульовані обмеження для вирішення задачі оптимізації параметрів комбінованої системи опалення. Також запропоновані методика та алгоритм вибору параметрів будівлі та потужностей енергетичного устаткування які забезпечують мінімальні витрати всього опалювального сезону.

УДК 621.7.044

Третьяк В.В., Гранин В.Ю., Серикова Е.И.

ОСОБЕННОСТИ ОБЪЕКТНОГО ПОДХОДА К ПРОЕКТИРОВАНИЮ РЕСУРСΟΣБЕРЕГАЮЩИХ ИМПУЛЬСНЫХ ТЕХНОЛОГИЙ

Применение новых подходов к проектированию технологических процессов диктует использование оригинальных ресурсосберегающих технологий, которые обеспечивают решение технических задач ТПП в сжатые сроки при минимальных затратах на проектирование и подготовку производства.

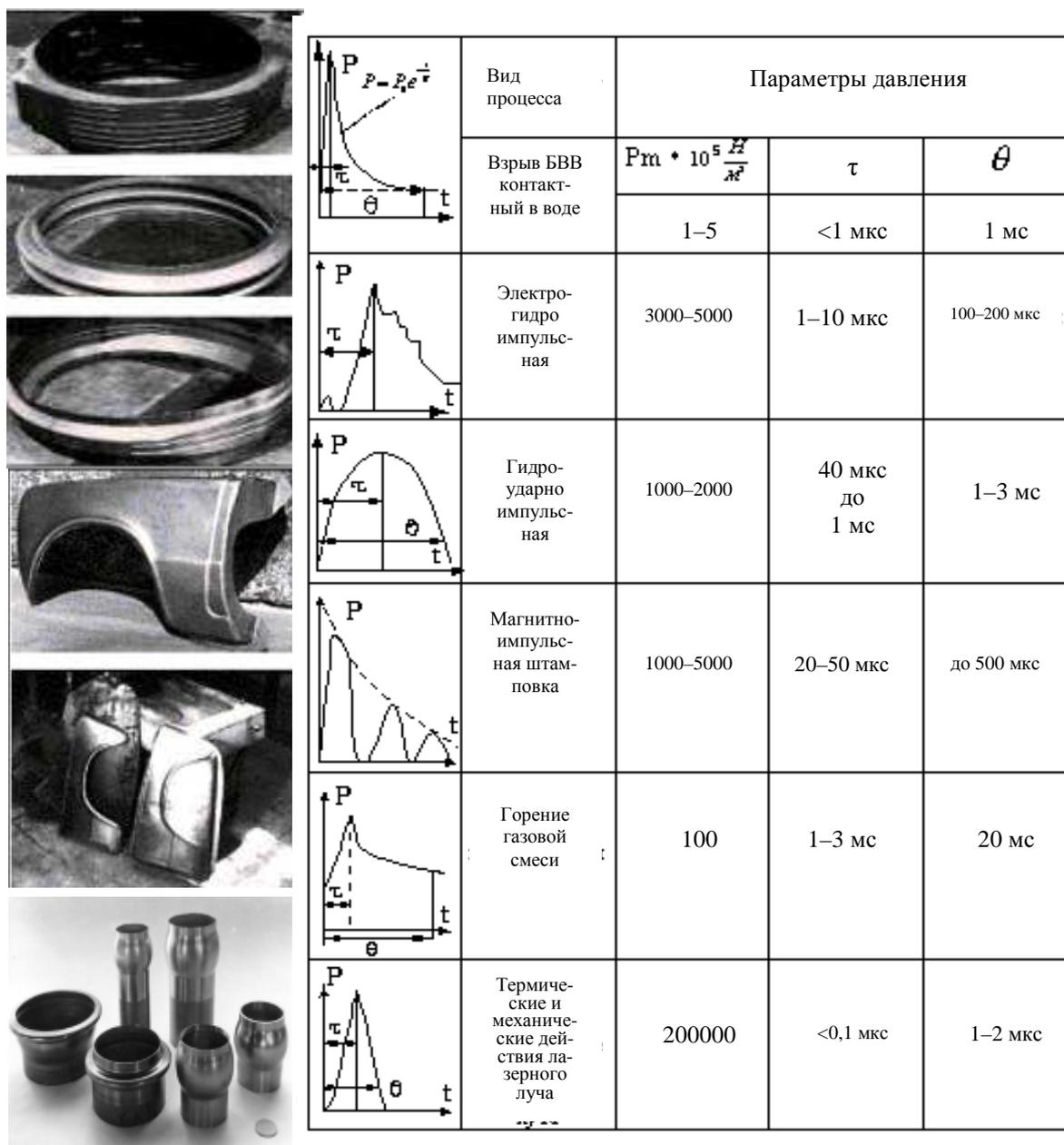


Рисунок 1 – Детали, изготовленные импульсными источниками энергии и характеристика импульсной нагрузки

Использование современных технологий импульсной штамповки, на базе комплексного подхода к знаниям, накопленным наукой и производством за счет использования новейших математических методов и компьютерных технологий, позволяет значительно снизить сроки изготовления деталей, свести к минимуму материальные и временные затраты на подготовку производства и само производство.

Детали, изготовленные импульсными способами, как правило, имеют сложную форму, изготовлены из высокопрочных материалов, обладают повышенной точностью. Для изготовления импульсными методами обычно предлагаются такие детали, которые без технологического членения или изменения конструктивных элементов традиционными методами изготовить невозможно [1].

Поэтому на этапах конструирования новых изделий, как правило, отсутствовали конструктивно-технологические решения, благодаря использованию которых проектировщики закладывали бы решения, учитывающие возможности импульсных методов.

Для изготовления таких деталей директивно предусматривалась прогрессивная технология, обеспечивающая решение поставленных задач. Однако такое решение не всегда являлось оптимальным и лишь решало конкретно поставленную задачу.

Сегодня необходимы методы проектирования, в которых отражены логические связи для назначения принципиальных схем обработки (вид заготовки, схема ее нагружения, фиксация базирования и т.д.), маршрут (количество и последовательность штамповочных операций, термообработок и специальных операций по интенсификации пластического течения в локальных зонах заготовки).

В теоретических работах решалась задача определения нагрузки на заготовку за счет импульсного источника энергии и по энергетическому балансу определялась потребная энергия. Применительно к реальным процессам характерные зависимости изменения давления от времени, полученные экспериментально показаны на рис. 1. Здесь же приведены пределы изменения основных показателей, определяющих вид рассматриваемых зависимостей.

К ним можно отнести максимальное давление P_m , время достижения максимального давления τ_m , время понижения максимального давления в e раз – θ . В расчетах энергосиловых параметров для конкретных технологических процессов можно использовать аналитические зависимости изменения давления во времени, полученные путем аппроксимации результатов многократных измерений или расчетным путем.

Для отработанных методов обработки, где накоплен большой опыт проектирования технологических процессов и имеется достаточная база структурированной информации, в том числе руководящие технические материалы (РТМ) используют при разработке ТП два основных направления в проектировании: метод синтеза и аналога.

Для описания технологических знаний в современных САПР системах используются принципы объектного представления знаний [2]. При этом математическая модель детали описывается в понятиях конструкторско-технологических элементов, которые обладают иерархической структурой, состоящей из нескольких уровней декомпозиции.

Каждый элемент, также как и деталь представляют собой объект со своим набором свойств. Используются возможности наследования свойств от старшего объекта к младшему.

Математическая модель проектирования импульсных технологических процессов также представляется в виде объекта с иерархической структурной классификацией: метод обработки, этап обработки, операция, переход. Метод

обработки складывается из этапов (рис. 2), этапы – из операций, операции – из переходов.

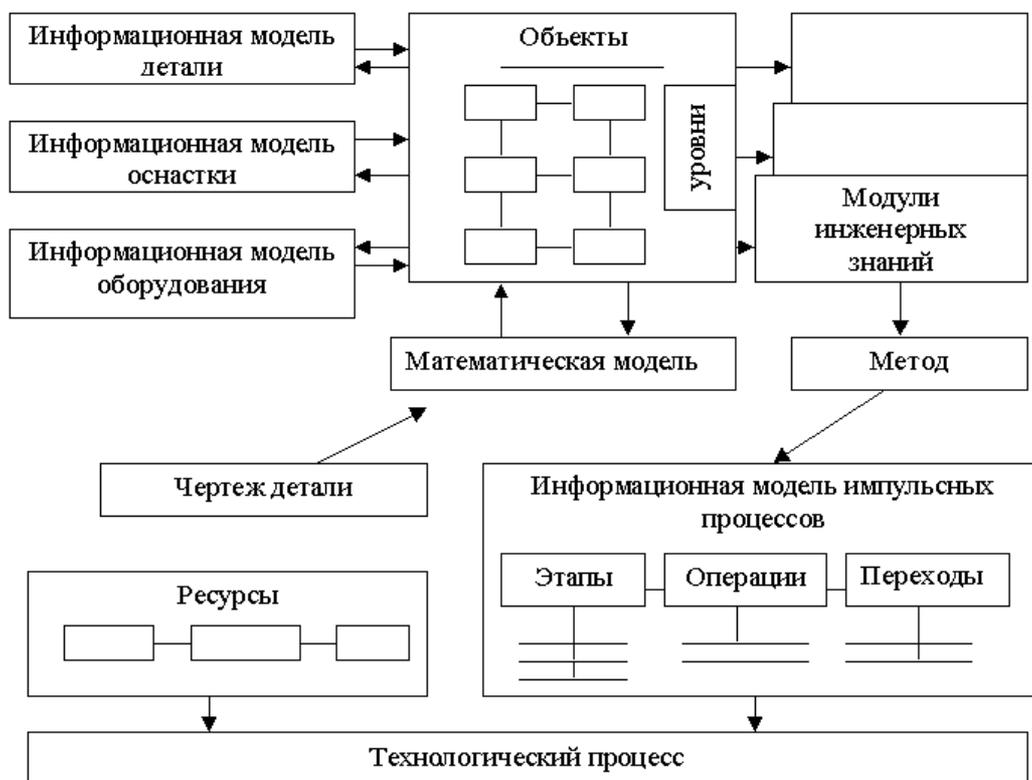


Рисунок 2 – Объекты технологического проектирования импульсной обработки

Проектирование ТП (рис. 3) состоит из блоков анализа, синтеза и оптимизации.

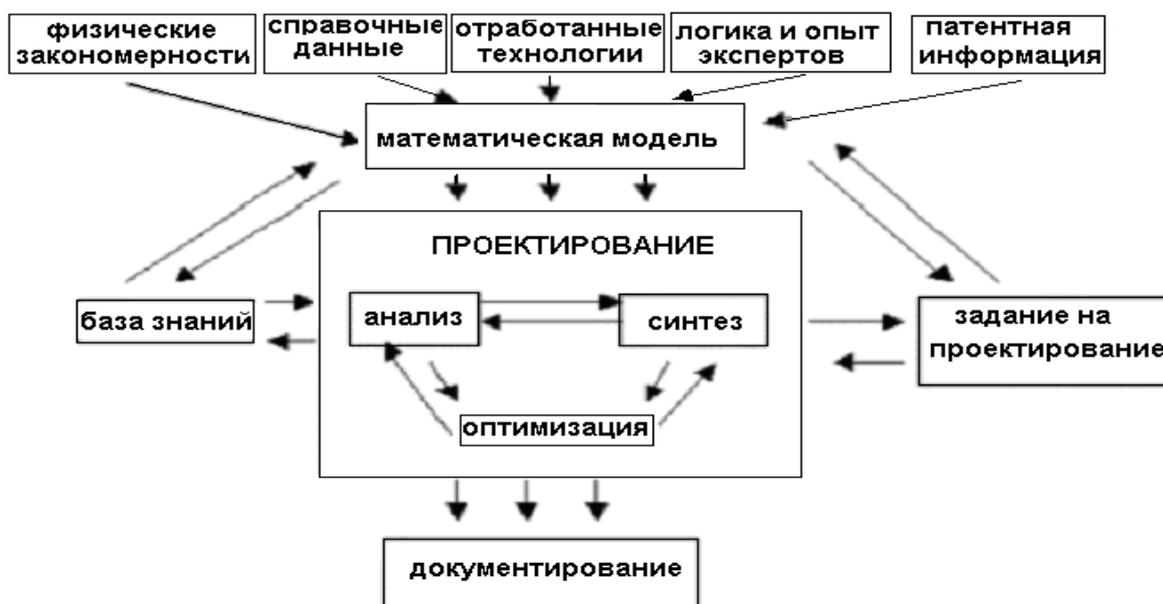


Рисунок 3 – Схема синтеза импульсного технологического процесса

На уровнях формирования последовательности этапов, операций и переходов ТП складывается из фаз структурного и параметрического синтеза.

Структурный синтез устанавливает последовательность элементов и этапов на соответствующем уровне [3]. На уровне структурного синтеза используются структурно-аналитические (С-А) алгоритмы распознавания образов [4]. С помощью СА алгоритмов реализуется классификационная обработка данных (рис. 4).

При параметрическом синтезе формируются свойства элементов, уже включенные в технологический процесс.



Рисунок 4 – Схема последовательности классификационной обработки данных при помощи СА моделей

Исходной информацией для классификации является таблица эмпирических данных (ТЭД) в форме матрицы «объекты – признаки», которые составляют реализации с наименованиями классов.

Выходную информацию составляют сведения о структурной полноте признаков ТЭД, их разделяющей способности и информативности, о возможности безошибочной классификации до построения грамматического ПК, а также само С-А правило классификации в виде самоанализирующейся древовидной решающей структуры. Внутренние вершины решающего дерева отвечают терминальным бинарным (свойством-предикатом) С-П, описывающим локальные закономерности структурного образа в исследуемой предметной области, а внешние вершины (листья) соответствуют заданным категориям (классам) принимаемых решений (рис. 5).

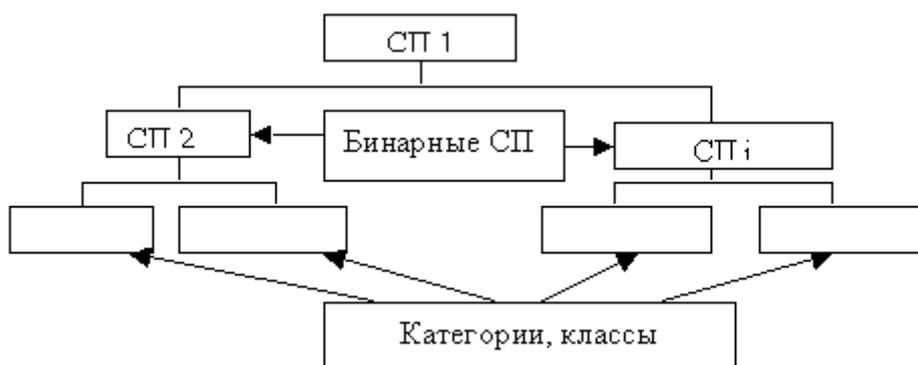


Рисунок 5 – Структурная модель классификационного графа

Для формирования технологического процесса создается объектная модель детали (рис. 6, а), затем в объектах описываются ее характерные поверхности (рис. 6, б), создается модель заготовки (рис. 6, в), а затем создается модель оснастки и установки (рис. 6, г).

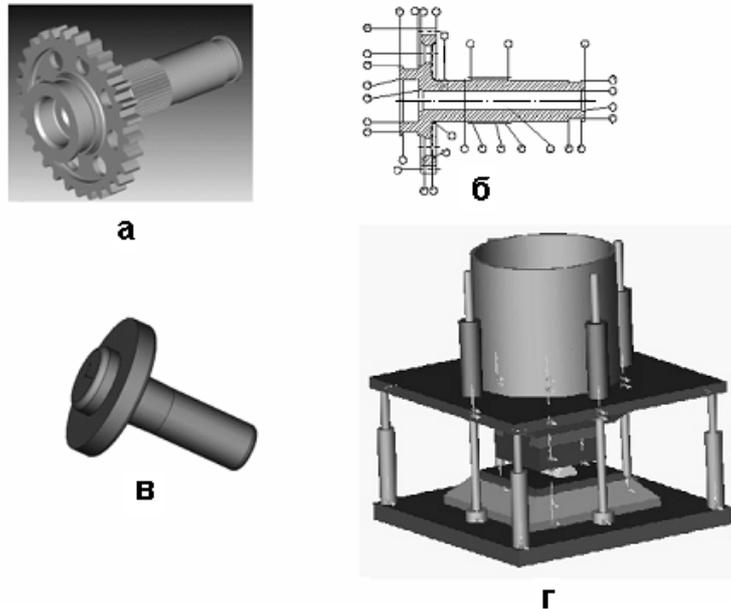


Рисунок 6 – Этапы объектного представления элементов проектирования технологии импульсной обработки для детали типа – вал

На начальных этапах определяют принципиальную схему и назначают маршрут (количество и последовательность операций и специальных операций технологических приемов для интенсификации пластического течения в локальных зонах заготовки).

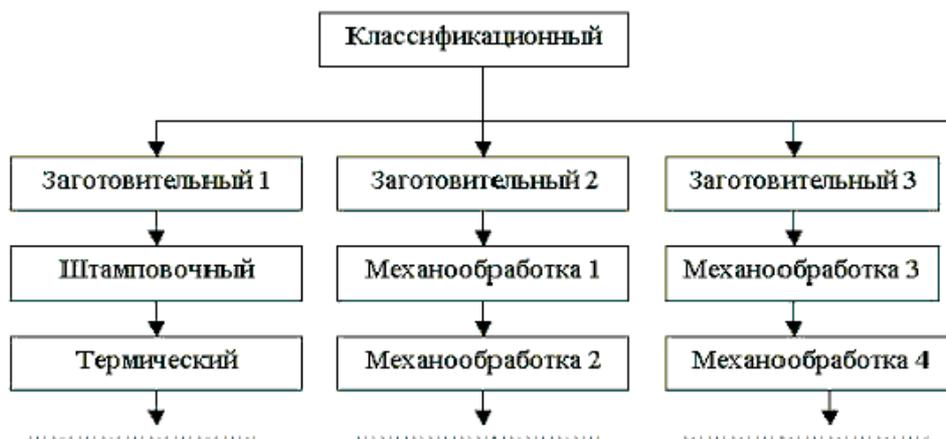


Рисунок 7 – Последовательность назначения этапов обработки при синтезе элементов маршрута

Для решения этих задач используется классификационный этап (рис. 7). На последующем уровне – операционном описании ТП назначают режимы обработки и определяют технико-экономические показатели техпроцесса [5].

В рамках постановки задачи оптимизации структурно-аналитических моделей алгоритмы анализа разнотипных данных и синтеза правил классификации разделены на семь этапов.

Этап 1. Предобработка исходных данных.

Этап 2. Автоматическая генерация терминальных свойств-предикатов С-П непосредственно по ТЭД.

Этап 3. Формирование синтаксического образца и оценка его структурной полноты с допустимой ошибкой.

Этап 4. Определение критериальных оценок признаков ТЭД.

Этап 5. Определение базового набора признаков ТЭД.

Этап 6. Формирование информативной системы признаков ТЭД.

Этап 7. Построение СА правила классификации.

Для определения параметров операционной технологии вначале определяется ближайший аналог. По аналогу определяются параметры и режимы установки зарядов, а также КПД процесса.

Массу заряда для деформирования объемной заготовки можно рассчитать по формуле:

$$m = \frac{G_{\text{пад}} \cdot V^2}{2 \cdot Q \cdot \eta} \cdot k,$$

где V – скорость, м/с; $G_{\text{пад}}$ – вес падающих частей оборудования для штамповки, кг; k соответствует количеству ударов (в закрытом штампе, $k = 3$); Q – теплотворная способность БВВ, Дж/кг; η – КПД процесса.

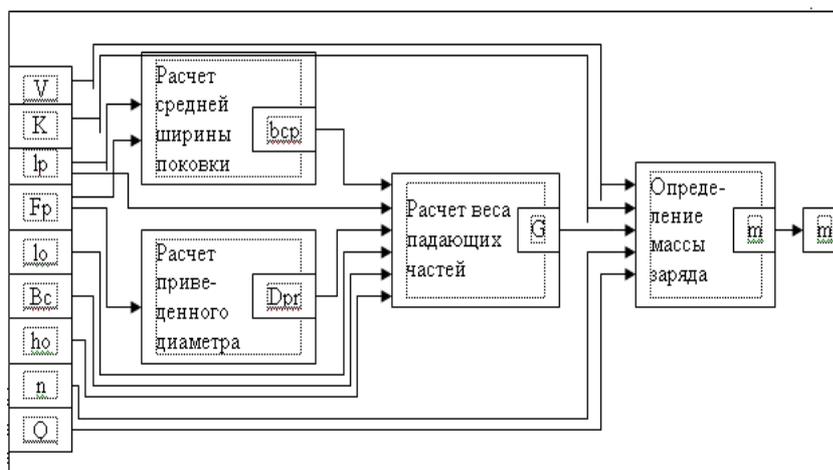


Рисунок 8 – Блок-схема расчета импульсного нагружения для расчета технологических параметров изготовления объемной заготовки

База знаний имеет словарь, записанный на естественном, понятном технологу языке. Последовательность выполнения модулей инженерных знаний определяются разработанным методом (рис. 8).

Данная концепция проектирования может быть легко реализована в среде СПРУТ.

Элементом знаний в системе является модуль инженерных знаний (МИЗ), представляющий собой продукционное правило. МИЗ характеризуется входными и выход-

ными свойствами, ограничениями на значения входных свойств и механизмом преобразования входных свойств в выходные.

Модули инженерных знаний реализуют следующие функции:

- присваивания значений выходным свойствам;
- определения значений по таблицам;
- определения значений выбором из базы данных;
- вычисление значений по формулам;
- вычисление значений с помощью программных модулей;
- построение геометрических образов.

Модули инженерных знаний (МИЗ) объединяются в функциональные библиотеки. База знаний имеет общий словарь (список свойств), из которого выбираются входные и выходные свойства МИЗ.

Связанные между собой по входу и выходу модули инженерных знаний образуют методы. Метод может присоединяться к объекту, описанному в редакторе информационных моделей.

Для каждого модуля инженерных знаний и для каждого метода в системе автоматически генерируется PRT-модуль, который может быть использован в прикладных системах.

Литература

1. Орешников А.И., Вагин В.А., Мамутов В.С. Высокоскоростные методы листовой штамповки: Уч. Пособие.-Л.:ЛПИ.1984. – 80 с.
2. Евгеньев Г.Б. Систематология инженерных знаний: Уч. пособие для вузов. – М: Изд-во МГТУ им. Н.Э. Баумана, 2001. – 346 с.
3. Борисевич В.К., Третьяк В.В., Клыгина И.В. Математическое моделирование ресурсосберегающих технологий //Впровадження нових інформаційних технологій навчання:Науково-метод. конф.– Харьков: "ХАИ", 2004.– С. 227–232.
4. Зорик В.Я., Филипковская Л.А., Третьяк В.В. Информационная технология классификационной обработки данных в проектировании техпроцессов листовой штамповки взрывом //Удосконалення процесів та обладнання обробки тиском в машинобудуванні і металургії: Темат.зб. наук. праць.-Краматорськ:Донбаська державна машинобудівна академія, 2001.– С. 286–289.
5. Третьяк В.В. Объектный подход к проектированию импульсных технологий. //Авиационно-космическая техника и технология. Науч.техн.журнал.– 2006.–№3(29).– С. 26–30.

Bibliography (transliterated)

1. Oreshnikov A.I., Vagin V.A., Mamutov V.S. Vyisokoskorostnyie metody listovoy shtampovki:Uch. Posobie.-L.:LPI.1984. – 80 p.
2. Evgenev G.B. Sistematologiya inzhenernyih znaniy: Uch. posobie dlya vuzov. – M: Izd-vo MGTU im. N.E. Bauman, 2001. – 346 p.
3. Borisevich V.K., Tretyak V.V., Klygina I.V. Matematicheskoe modelirovanie resursosberegayuschih tehnologiy Vprovadzhennya novih Informatsiynih tehnologiy navchannya: Naukovo-metod. konf.– Harkov: "HAI", 2004.– p. 227–232.
4. Zorik V.Ya., Filipkovskaya L.A., Tretyak V.V. Informatsionnaya tehnologiya klassifikatsionnoy obrabotki dannyih v proektirovanii tehprotsessov listovoy shtampovki vzryvom Udoskonalennya protsesiv ta obladnannya obrobki tiskom v mashinobuduvanni i

metaluriyi: Temat.zb. nauk. prats.-Kramatorsk:Donbaska derzhavna mashinobudivna akademiya, 2001.– p. 286–289.

5. Tretyak V.V. Ob'ektnyy podhod k proektirovaniyu impulsnyih tehnologiy. Aviatsionno-kosmicheskaya tehnika i tehnologiya. Nauch.tehn.zhurnal.– 2006.–#3(29).– p. 26–30.

УДК 621.7.044

Третьяк В.В., Гранін В.Ю., Серікова Є.І.

**ОСОБЛИВОСТИ ОБ'ЄКТНОГО ПІДХОДУ ДО ПРОЕКТУВАННЯ
РЕСУРСОЗБЕРІГАЮЧИХ ІМПУЛЬСНИХ ТЕХНОЛОГІЙ**

Описано особливості об'єктного представлення знань при формуванні технологічного процесу імпульсної обробки листових і об'ємних деталей.

Запропонована модель адаптації методу синтезу в базах знань з використанням алгоритмів розпізнавання подоби для розрахунку етапів обробки і параметрів навантаження заготовки.

УДК 621.577

Харлампида Д.Х.

**ПРИМЕНЕНИЕ СИСТЕМНОГО ПОДХОДА
ПРИ ВЫБОРЕ ТЕХНОЛОГИЧЕСКОЙ СХЕМЫ
ТЕПЛОНАСОСНОЙ УСТАНОВКИ**

ИПМаш НАН Украины

Теплонасосная установка (ТНУ) представляет собой единый комплекс разнообразных элементов оборудования со структурой технологической схемы различной степени сложности.

Под структурой технологической схемы подразумевается множество возможных вариантов реализации термодинамического цикла, отдельные компоненты которого отличаются наличием или отсутствием вспомогательного оборудования, особенностями последовательности включения теплообменных аппаратов по тепло- и хладоносителю и т.д. [1].

Учитывая все многообразие оборудования ТНУ, а также большое число возможных структурных соединений элементов в технологическую схему, возникает задача поиска рациональной структуры технологической схемы ТНУ, конфигурации ее термодинамического цикла и хладагента, обеспечивающих при заданных условиях высокую энергетическую эффективность.

Решение такой задачи связано с анализом и оценкой множества вариантов схемных решений ТНУ как известных, так и новых, синтезируемых на их основе. Для этого необходим единый критерий оценки схемы и оборудования, свободный от влияния субъективных факторов. Таковым является критерий сложности [2].

Критерий сложности представляет собой качественную характеристику, для которой в настоящее время фактически нет однозначных методов оценки. В основе оценки критерия сложности любой технической системы лежит, в первую очередь, характеристика сложности структуры схемы, сложность ее создания, функционирования и т.д. Известны подходы, в которых сложность определяется количеством элементов и связей системы [3], а также числом системных уровней [4]. Эти подходы хорошо себя зарекомендовали в химической технологии и других областях техники, но они не позволяют в полной мере оценить сложность системы, в основе работы которой лежит термодинамический цикл.

Применительно к схемным решениям холодильных машин (ХМ), которые во многом схожи с ТНУ, Е.И. Таубманом в работе [5] предложен критерий сложности $S_{сх}$, учитывающий суммарное число взаимодействий системы с окружающей средой, суммарное число технологических связей и сложность всех элементов. Учет последнего фактора вызывает наибольшие затруднения при анализе схем ТНУ. Поэтому оценка сложности элементов ТНУ на основе упрощенного подхода, предложенного ранее в работе [6], представляется более целесообразной.

Принимая во внимание вышесказанное, можно сформулировать следующие рекомендации относительно оценки уровня сложности технологической схемы ТНУ.

Сложность структуры технологической схемы ТНУ определяется числом и разнотипностью элементов основного и вспомогательного оборудования, непосредственно влияющего на термодинамическую эффективность цикла и изменяющего его конфигурацию, количеством вспомогательного оборудования, влияющего на термодинамическую эффективность, но при этом не изменяющего конфигурацию цикла, числом существующих и потенциальных связей между элементами, а также уровнем сложности самих элементов.

Таким образом, критерий сложности ТНУ или ХМ можно записать в следующем виде:

$$S_{cx} = \sum_{i=1}^n D_i n_i m_i + j + g + p, \quad (1)$$

где n – число основных и вспомогательных элементов, непосредственно влияющих на термодинамический цикл и определяющих его конфигурацию; D_i – сложность элементов [6]; m – число технологических связей между элементами; j – число вспомогательных элементов, влияющих на эффективность цикла, но не изменяющих его конфигурацию; g – количество разнотипных элементов одинакового технологического назначения; p – число потенциальных связей между элементами.

Рассмотрим подробно все величины, входящие в формулу (1).

К числу основных элементов схемы ТНУ отнесем оборудование, непосредственно реализующее процесс трансформации теплоты, т.е. компрессор, конденсатор, испаритель, дроссельный вентиль (или детандер).

Появление в схеме ТНУ вспомогательных элементов связано с обеспечением надежности и эффективности работы основного оборудования. Среди вспомогательных элементов, влияющих на эффективность цикла и определяющих его конфигурацию, выделим переохладитель, регенеративный теплообменник, экономайзер, промежуточный сосуд, охладитель перегретого пара, отделитель жидкости. Здесь следует отметить [7], что в классическом варианте отделитель жидкости не оказывает прямого влияния на цикл. Только в насосно-циркуляционных схемах, имеющих большую протяженность жидкостного и всасывающего трубопроводов, его установка, за счет увеличения кратности циркуляции хладагента, способствует уменьшению потерь, связанных с дросселированием.

Вспомогательными элементами, которые оказывают влияние на эффективность цикла, но при этом не изменяют его конфигурацию, являются разного рода вентили (заправочные, соленоидные), фильтры, линейный ресивер, маслоотделитель.

Количественная оценка разнотипности оборудования предусматривает выделение из числа основного и вспомогательного оборудования различных по принципу действия элементов одинакового технологического назначения. Например, наличие в схеме одновременно винтового и поршневого компрессора или же компрессора с дозарядкой.

При определении числа потенциальных связей между элементами необходимо выделить возможные варианты включения основных и вспомогательных элементов. Например, в схеме возможны два варианта охлаждения компрессора: парами рабочего вещества после испарителя или парами рабочего вещества после промежуточного со-

суда. Или же другой пример [7], когда в схеме предусмотрено включение промежуточного охладителя после компрессора высокой ступени или использование охлаждаемого маслоохладителя.

Известно [8], что более сложные технологические схемы применяются с целью сокращения внутренних необратимостей цикла, связанных с дросселированием и нагревом пара выше температуры конденсации. Для оценки эффективности внесенных в цикл усложнений используется коэффициент обратимости ψ

$$\psi = \frac{\mu_d}{\mu_0}, \quad (2)$$

где μ_d – действительный коэффициент преобразования цикла ТНУ; $\mu_0 = T_k / (T_k - T_n)$ – коэффициент преобразования идеального цикла Карно, осуществляемого в диапазоне температур кипения T_n и конденсации T_k хладагента.

Зависимость коэффициента ψ от термодинамических свойств рабочего вещества может быть представлена уравнением [9]

$$\psi = \frac{Kl - 1 + MЛ}{Kl - \frac{M}{2} + MЛ}, \quad (3)$$

где $Kl = \frac{r_k}{c'_p (T_k - T_n)}$ – критерий Клаузиуса; $Л = \frac{c''_p}{c'_p}$ – отношение теплоемкостей на-

сыщенного пара c''_p и жидкости c'_p ; $M = \frac{T_k}{T_m}$ – отношение T_k к средней температуре в цикле T_m , равной $0,5(T_k + T_n)$; r_k – удельная теплота парообразования при T_k .

Анализ выражения (3) показал, что в рамках заданных температурных границ термодинамического цикла коэффициент ψ фактически является только функцией критерия Клаузиуса Kl_k для конденсатора. С увеличением Kl_k величина ψ растет. Тем не менее, на величину ψ также влияет и критерий $Л$, характеризующий относительный наклон пограничных кривых. Его значение намного меньше, чем значение Kl_k . Так, для R134a при $Kl_k = 1,72$ критерий $Л = 0,812$. Чем выше $Л$, тем меньше потери при дросселировании и соответственно выше ψ [9].

Поскольку оба эти критерия являются зависимыми от c'_p и оценить степень влияния каждого в отдельности на ψ невозможно, далее в качестве основного критерия, характеризующего термодинамические свойства рабочего вещества, будет использован критерий Клаузиуса.

Определим степень влияния структурных факторов на термодинамическое совершенство ТНУ, построив зависимости ψ от критерия Kl_k для схем разного уровня сложности (рис. 1). Исходные данные представлены в таблице 1.

Для расчета термодинамических свойств хладагентов используется база данных [10]. Расчет режимных параметров ТНУ выполнен по методикам [11, 12]. Влиянием величин D_i, j, g и p , входящих в формулу (1), при анализе принципиальных схем можно пренебречь.

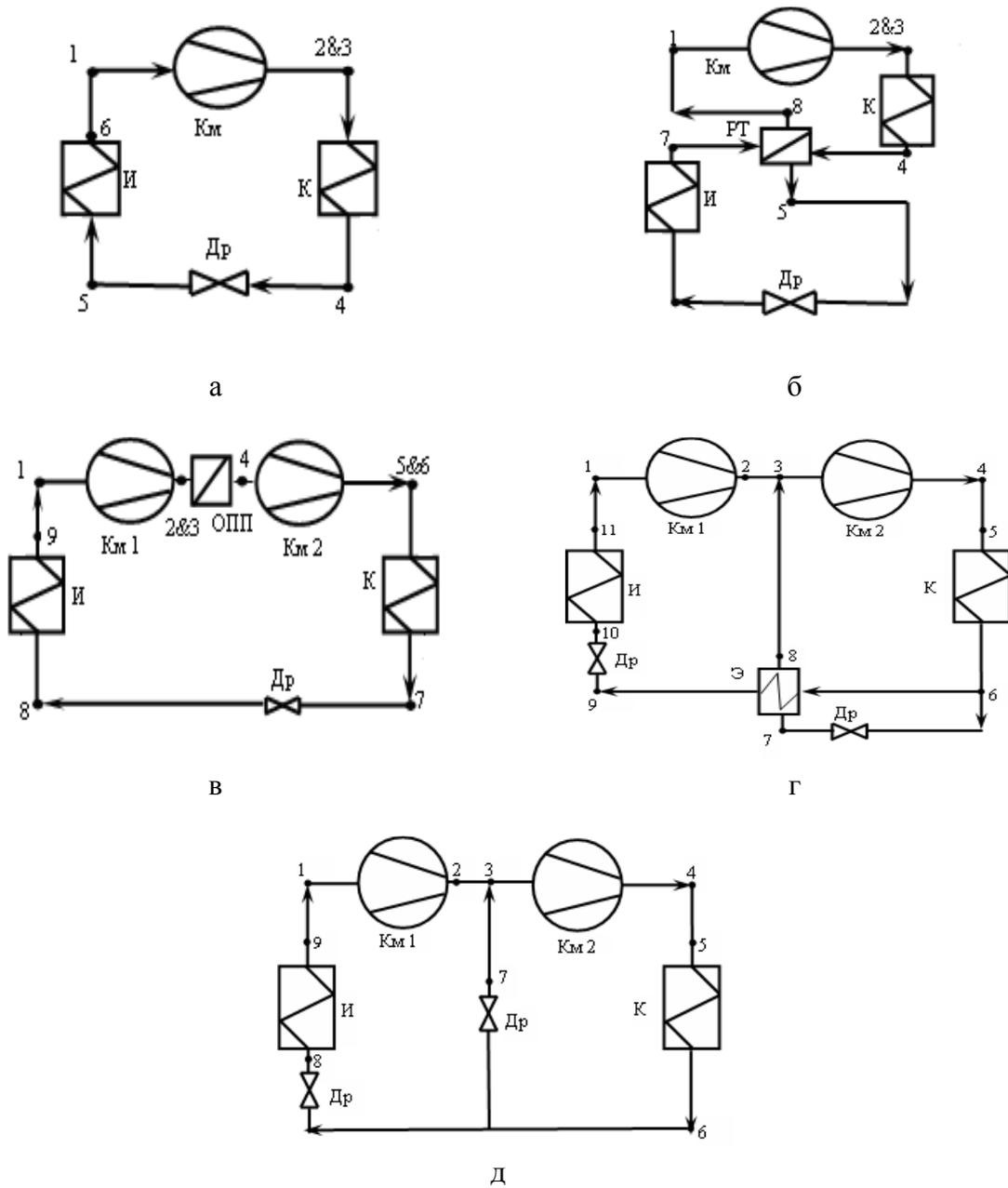


Рисунок 1 – Принципиальные технологические схемы ТНУ:
 а – простая одноступенчатая; б – регенеративная;
 в – двухступенчатая с неполным промежуточным охлаждением;
 г – двухступенчатая с экономайзером;
 д – двухступенчатая с промежуточным впрыском
 И – испаритель; К – конденсатор; Км – компрессор; Др – дроссель;
 ОПП – охладитель перегретого пара; Э – экономайзер

Таблица 1 – Исходные данные для анализа технологических схем ТНУ

п/п	Название схемы	$S_{сх}$	Дополнительно задаваемая величина
а	Простая одноступенчатая	20	Перегрев $\Delta T_{пер} = 7 \text{ }^\circ\text{C}$
б	Одноступенчатая с регенерацией	35	Разность температур в теплообменнике $\Delta T_{рт} = 20 \text{ }^\circ\text{C}$
в	Двухступенчатая с неполным промежуточным охлаждением	41	Температура всасывания во вторую ступень $T_{вс} = 30 \text{ }^\circ\text{C}$
г	Двухступенчатая с экономайзером	68	Разность температур в экономайзере $\Delta T_3 = 5 \text{ }^\circ\text{C}$
д	Двухступенчатая с промежуточным впрыском	46	Перегрев при впрыскивании $\Delta T_{пер}^в = 10 \text{ }^\circ\text{C}$

Взаимное влияние сложности структуры принципиальной технологической схемы ТНУ и термодинамических свойств рабочего вещества на коэффициент ψ представлено на рис. 2. Зависимости получены при температуре конденсации $T_k = 55 \text{ }^\circ\text{C}$, температура испарения T_n варьировалась от -10 до $0 \text{ }^\circ\text{C}$.

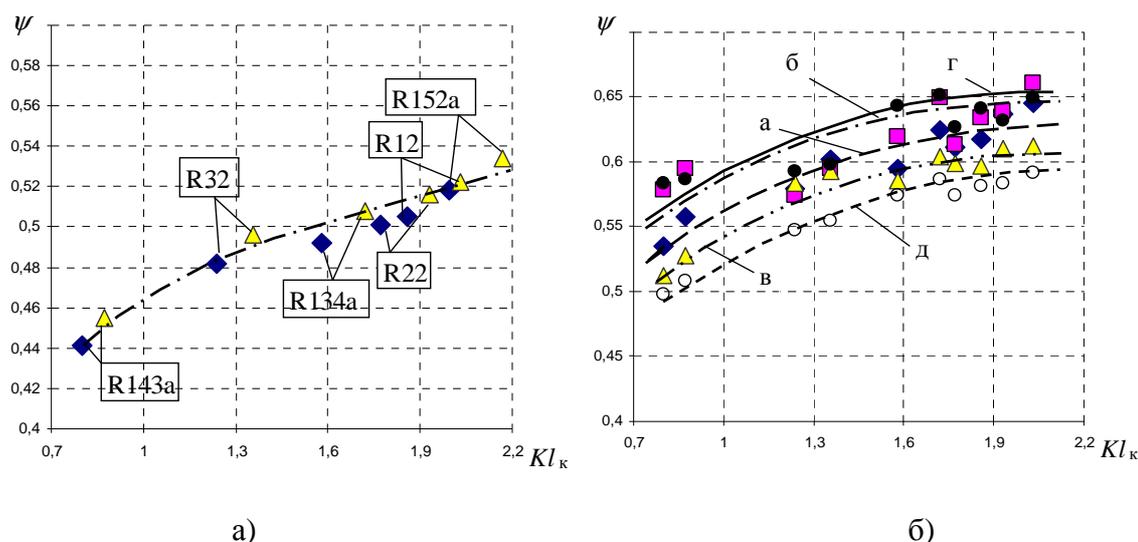


Рисунок 2 – Зависимость коэффициента ψ от критерия Клаузиуса Kl_k :
 а) без учета сложности схемы; б) с учетом сложности схемы

По результатам расчетов циклов установлено, что влияние Kl_k на ψ уменьшается с увеличением сложности схемы и для схем большой сложности величина ψ от термодинамических свойств фактически не зависит.

Далее оценим влияние сложности схемы на гидравлический режим работы ТНУ. Для этого введем показатель чувствительности μ'/μ [11], представляющий собой отношение коэффициента преобразования, вычисленного с учетом влияния гидравлических сопротивлений μ' , к значению μ без учета таковых, т.е. в эталонном цикле [7]. Очевидно, что чем больше отношение μ'/μ , тем менее существенное влияние оказывают гидравлические сопротивления на коэффициент преобразования ТНУ.

Рассмотрим два гидравлических контура циркуляции хладагента, имеющие различную сложность схемы: контур простой одноступенчатой ТНУ (рис. 3) и контур двухступенчатой ТНУ с промежуточным впрыском (рис. 4). Принимаем для обеих схем одинаковые температурные границы цикла ($T_k = 55\text{ }^\circ\text{C}$, $T_n = -10\text{ }^\circ\text{C}$), а также постоянную теплопроизводительность ТНУ $Q_T = 8,62\text{ кВт}$, выбираем хладагент R134a. Для учета влияния неизобарности процессов в цикле используем методику [11].

Анализ результатов расчета показал, что с усложнением схемы ТНУ влияние гидравлических сопротивлений на энергетическую эффективность снижается. Для двухступенчатой схемы отношение $\mu'/\mu = 0,898$, а для одноступенчатой $\mu'/\mu = 0,866$. С изменением температурных границ цикла и гидравлических сопротивлений соединительных трубопроводов характер зависимости μ'/μ от параметра сложности $S_{сх}$ остается тем же.

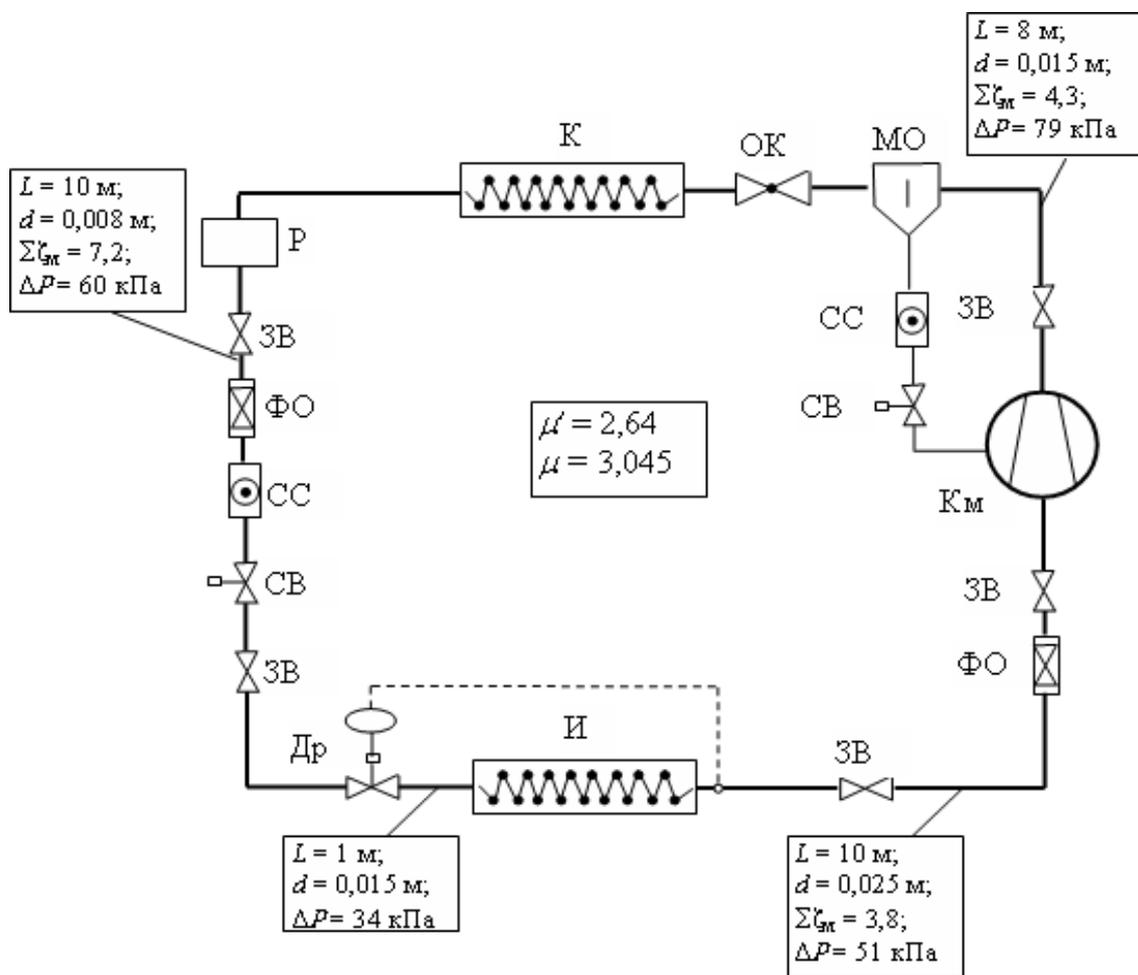


Рисунок 3 – Схема гидравлического контура циркуляции хладагента одноступенчатой ТНУ:
 И – испаритель; К – конденсатор; Км – компрессор; Др – дроссель; Р – ресивер;
 МО – маслоохладитель; ФО – фильтр осушитель; СВ – соленоидный вентиль;
 ЗВ – запорный вентиль; ОК – обратный клапан; СС – смотровое стекло; L – длина линии; d – диаметр; $\Sigma\zeta_m$ – сумма коэффициентов местных сопротивлений; ΔP – потери давления в линии

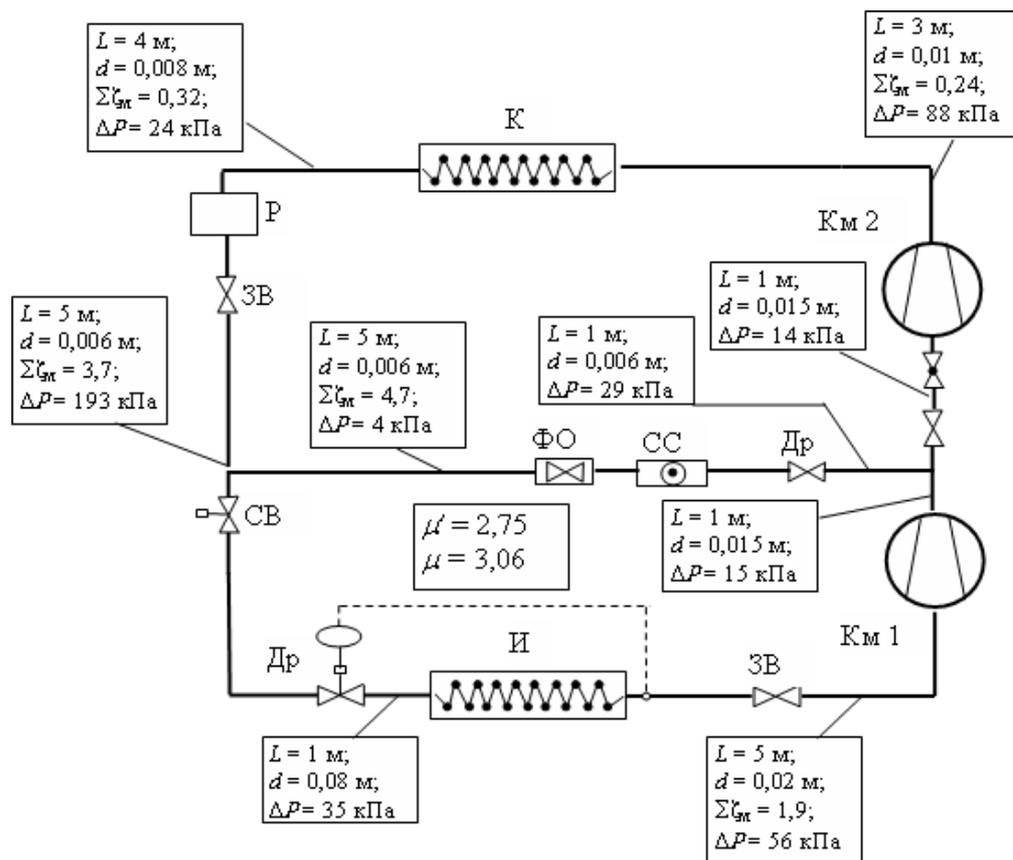


Рисунок 4 – Схема гидравлического контура циркуляции хладагента двухступенчатой ТНУ с промежуточным впрыском (обозначения см. рис. 3)

Следует отметить, что выбор той или иной схемы без учета экономических показателей не может быть окончательным, поскольку любое усложнение схемы ТНУ в итоге приводит к увеличению капитальных затрат. В связи с этим представилось целесообразным предложить обобщенный критерий оценки структуры технологической схемы ТНУ, комплексно учитывающий влияние термодинамических и технико-экономических показателей.

$$\Xi = \frac{\Psi}{Z}, \tag{4}$$

где Z – интегральный экономический критерий оценки энергетического оборудования; Ψ – коэффициент обратимости, определяемый по уравнению (3).

Используя рекомендации работы [13], критерий Z можно представить в следующем виде

$$Z = \frac{z_k + z_{ЭК}}{Q_1 \tau \vartheta}, \tag{5}$$

где z_k – капитальные затраты, \$; $z_{эк}$ – эксплуатационные затраты, \$; Q_T – теплопроизводительность ТНУ, $Q_T = 8,62$ кВт; τ – наработка установки до капремонта, $\tau = 7000$ ч; $\bar{\vartheta} = \frac{c_T}{c_{эл}}$ – весовой коэффициент; c_T – себестоимость производства тепловой энергии в ТНУ, \$/кВт ч; $c_{эл}$ – тариф на электрическую энергию, $c_{эл} = 0,035$ \$/кВт ч.

На рис. 5 представлены зависимости критерия Ξ от параметра сложности $S_{сх}$ для рассматриваемых схем и хладагентов.

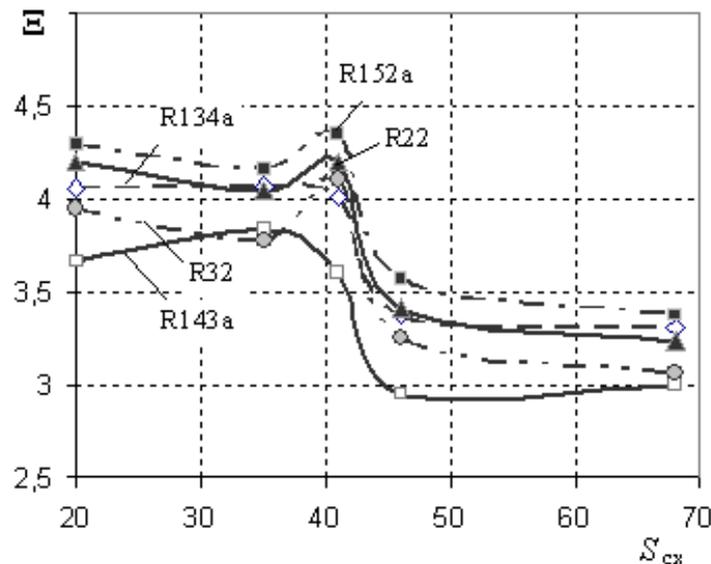


Рисунок 5 – Зависимость критерия Ξ от параметра сложности схемы $S_{сх}$

Как видно из рис. 5, для заданных условий ($T_k = 55$ °С; $T_{и} = -10$ С) наиболее рациональной для большинства хладагентов является двухступенчатая схема с неполным промежуточным охлаждением ($S_{сх} = 41$). Исключение составляют хладагенты R143a и R134a, для которых эффективной оказывается одноступенчатая регенеративная схема.

Таким образом, впервые предложена методика оценки эффективности схемных решений ТНУ, позволяющая на этапе предпроектных разработок производить комплексный анализ термодинамической и технико-экономической эффективности ТНУ, а также вести направленный поиск рабочих веществ с заданными термодинамическими свойствами для схем различной степени сложности.

Литература

1. Попырин Л.С. Математическое моделирование и оптимизация теплоэнергетических установок. – М.: Энергия, 1978. – 416 с.
2. Бусленко Н.П. Лекции по теории сложных систем/ Н.П. Бусленко, В.В. Калашников, И.Н. Коваленко. – М.: Советское радио. –1973. –439 с.
3. Половинкин А.И. Законы строения и развития техники. – Волгоград: ВолгПИ, 1985. – 280 с.

4. Синергетическая парадигма. Многообразие поисков и подходов. Сборник трудов / Под ред. В.И. Аршинова, В.Г. Буданова, В.Э. Войцеховича. – М.: Прогресс-Традиция. – 2000. – 320 с.
5. Таубман Е.И. Анализ и синтез теплотехнических систем. – М.: Энергоатомиздат, 1983. – 176 с.
6. Харлампида Д.Х. Выбор термодинамического цикла и технологической схемы теплонасосной установки на основе оценки критерия сложности // Интегровані технології та енергозбереження. – 2006. – №4. – С. 3–11.
7. Морозюк Т.В. Теория холодильных машин и тепловых насосов. – Одесса: Негициант, 2006. – 721 с.
8. Калнинь И.М. Оценка эффективности термодинамических циклов парокомпрессионных холодильных машин и тепловых насосов/ И. М. Калнинь, К. Н. Фадеков // Холодильная техника. – 2006. – №3. – С. 16–24.
9. Розенфельд Л.М. Холодильные машины и аппараты / Л.М. Розенфельд, А.Г. Ткачев. – М.: Госторгиздат, 1955. – 584 с.
10. Cool Pack – a collection of simulation tools for refrigeration. Tutorial version 1.46 / A. Jakobsen, B. Dindler Rasmussen, M. Skovrup, S. Andersen. – Department of Energy Engineering Technical University of Denmark, 2001. – 20 p.
11. Братута Э.Г. Влияние гидравлических сопротивлений на энергетическую эффективность цикла холодильной машины в зависимости от сложности ее технологической схемы / Э.Г. Братута, Д.Х. Харлампида, В.Г. Шерстюк // Труды Одесского политехнического университета. – 2007. – № 1(27). – С. 98–104.
12. Тепловые и конструктивные расчеты холодильных машин / Кошкин Н.Н., Стукаленко А.К. и др.; Под ред. Н.Н. Кошкина. – Л.: Машиностроение, 1976. – 463 с.
13. Лоза В.М. Критерий оценки эффективности энергетического оборудования// Турбины и дизели. – 2007. – №1. – С. 10–15.

Bibliography (transliterated)

1. Popyirin L.S. Matematicheskoe modelirovanie i optimizatsiya teploenergeticheskikh ustanovok. – М.: Energiya, 1978. - 416 p.
2. Buslenko N.P. Lektsii po teorii slozhnyih sistem N.P. Buslenko, V.V. Kalashnikov, I.N. Kovalenko. – М.: Sovetskoe radio. –1973. –439 p.
3. Polovinkin A.I. Zakonyi stroeniya i razvitiya tehnik. – Volgograd: VolgPI, 1985. – 280 p.
4. Sinergeticheskaya paradigma. Mnogoobrazie poiskov i podhodov. Sbornik trudov Pod red. V.I. Arshinova, V.G. Budanova, V.E. Voytsehovicha.- М.: Progress-Traditsiya. - 2000. - 320 p.
5. Taubman E.I. Analiz i sintez teplotekhnicheskikh sistem. – М.: Energoatomizdat, 1983. – 176 p.
6. Harlampidi D.H. Vyibor termodinamicheskogo tsikla i tehnologicheskoy shemyi teplonasosnoy ustanovki na osnove otsenki kriteriya slozhnosti Integrovani tehnologiyi ta energozberezhennya. - 2006. - #4. - p. 3-11.
7. Morozyuk T.V. Teoriya holodilnyih mashin i teplovyih nasosov. - Odessa: Negotsiant, 2006. - 721 p.

8. Kalnin I.M. Otsenka effektivnosti termodinamicheskikh tsiklov parokompressionnykh holodilnykh mashin i teplovykh nasosov I. M. Kalnin, K. N. Fadekov Holodilnaya tehnika. - 2006. - #3. - p. 16-24.
9. Rozenfeld L.M. Holodilnyie mashinyi i apparaty L.M. Rozenfeld, A.G. Tkachev. - M.: Gostorgizdat, 1955. - 584 p.
10. Cool Pack – a collection of simulation tools for refrigeration. Tutorial version 1.46 A. Jakobsen, B. Dindler Rasmussen, M. Skovrup, S. Andersen. - Department of Energy Engineering Technical University of Denmark, 2001. - 20 p.
11. Bratuta E.G. Vliyanie gidravlicheskih soprotivleniy na energeticheskuyu effektivnost tsikla holodilnoy mashinyi v zavisimosti ot slozhnosti ee tehnologicheskoy shemy E.G. Bratuta, D.H. Harlampidi, V.G. Sherstyuk Trudyi Odesskogo politehnicheskogo universiteta. - 2007. - # 1(27). - p. 98-104.
12. Teplovyie i konstruktivnyie raschetyi holodilnykh mashin Koshkin N.N., Stukalenko A.K. i dr.; Pod red. N.N. Koshkina. - L.: Mashinostroenie, 1976. - 463 p.
13. Loza V.M. Kriteriy otsenki effektivnosti energeticheskogo oborudovaniya Turbinyi i dizeli. - 2007. - #1. - p. 10-15.

УДК 621.577

Харлампіді Д.Х.

ВИКОРИСТАННЯ СИСТЕМНОГО ПІДХОДУ ДЛЯ ВИБОРУ ТЕХНОЛОГІЧНОЇ СХЕМИ ТЕПЛОНАСОСНОЇ УСТАНОВКИ

На підставі методології системного аналізу розроблена методика комплексної оцінки технологічної схеми теплонасосної установки. Досліджено вплив складності структури технологічної схеми на термодинамічну ефективність циклу та гідравлічний режим роботи теплонасосної установки при використанні холодоагентів з різними теплофізичними властивостями.

Огурцов А.Н.

**РАДИАЦИОННЫЕ ТЕХНОЛОГИИ МОДИФИКАЦИИ
МОДЕЛЬНЫХ КРИСТАЛЛОВ ЭЛЕКТРОННЫМИ ВОЗБУЖДЕНИЯМИ:
4. ДЕСОРБЦИЯ АТОМАРНЫХ КРИОКРИСТАЛЛОВ**

Радиационные технологии, в которых энергия электронных возбуждений конвертируется в структурные нарушения кристаллической решетки, являются одновременно и одним из наиболее эффективных способов контролируемых изменений структуры атомарных криокисталлов [1–3], и комплексным аналитическим методом, позволяющим осуществлять в реальном времени мониторинг состояния облучаемого образца [4,5], что в совокупности позволяет наметить пути решения задачи управляемой модификации материалов электронными возбуждениями, моделируя промышленные процессы на кристаллических пленках инертных криокисталлов [6].

Возбуждение электронной подсистемы атомарных криокисталлов в области края фундаментального поглощения приводит к формированию широкого набора свободных и локализованных заряженных (электроны и дырки) и нейтральных (экситоны) электронных возбуждений [7]. В предыдущих статьях подробно обсуждались радиационно-индуцированные неупругие процессы, завершающиеся наномодификациями образца вследствие локализации экситонов и дырок [1–3]. Селективное возбуждение электронных состояний завершается их локализацией в объеме кристалла и формированием стабильных точечных дефектов по Френкелю. Настоящая работа посвящена обсуждению процессов локализации электронных возбуждений вблизи поверхности образца и каналированию энергии электронных возбуждений в различные виды десорбции.

Исследования десорбции атомов и молекул с поверхности твердых тел и элементарных механизмов, вызывающих разрыв конкретной атомной связи, в настоящее время проводятся во всех крупнейших научных центрах мира, вследствие постоянного спроса со стороны всех отраслей техники и микроэлектроники, связанных с использованием поверхностей и границ раздела между материалами [9–12]. Отдельным направлением в этой области исследований в физике поверхности является исследование десорбции, стимулированной электронными возбуждениями. Аббревиатура DIET (Desorption Induced by Electronic Transitions) является общепринятым названием метода исследования процессов взаимодействия электронной и атомной подсистем кристалла в приповерхностном слое образца. В методике DIET исключен отрыв атомов или молекул от поверхности кристалла за счет передачи кинетической энергии от налетающих частиц к атомам исследуемой поверхности.

За последние два десятилетия десорбция частиц электронными возбуждениями с поверхности металлов, полупроводников и диэлектриков исследована методом DIET в огромном количестве систем [13]. Изучение микроскопических механизмов десорбции вследствие разрыва ван-дер-ваальсовой кристаллической связи традиционно проводится на простейших ван-дер-ваальсовых кристаллах – криокисталлах инертных элементов [9]. Измерения выхода десорбции атомов при селективном фотовозбуждении показало, что генерация и локализация электронных возбуждений вблизи поверхности кристалла вызывает десорбцию [10].

На рис. 1(а) в модели конфигурационных координат показана схема формирования полос люминесценции в ходе релаксации экситонов нижней $\Gamma(3/2)$, $n = 1$ экс-

тонной зоны в процессах автолокализации в состояния квазиатомного (A-STE) и квазимолекулярного (M-STE) типа (STE обозначает автолокализованный (self-trapped) экситон) [7]. На рисунке 1(б) приведен в качестве примера спектр люминесценции твердого аргона при селективном возбуждении фотонами. Спектры Ne, Kr и Xe подробно обсуждены в [1].

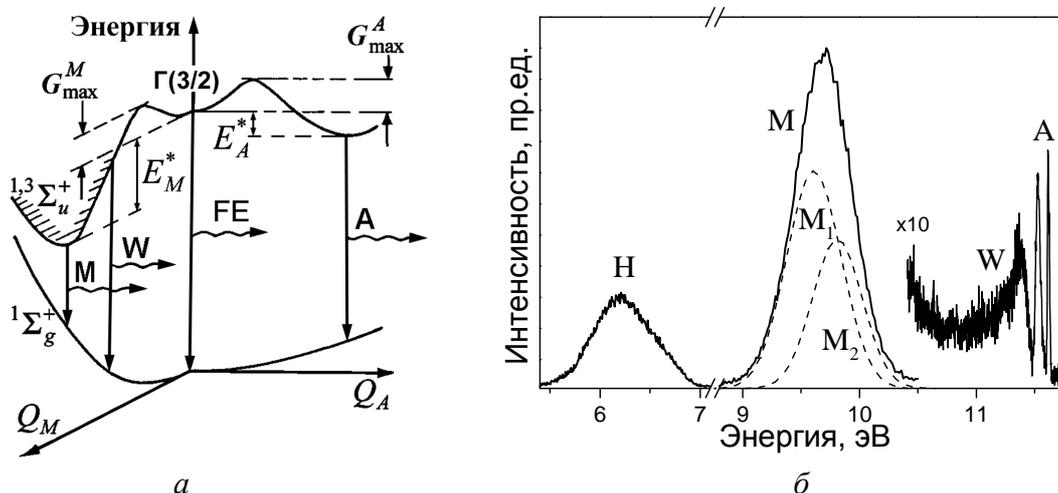


Рисунок 1 – Схема формирования спектра люминесценции твердого аргона:
 а – схема потенциальных кривых в модели конфигурационных координат,
 б – спектр люминесценции при $T=15\text{K}$

В случае M-STE конфигурационной координатой, Q_M , является межъядерное расстояние в квазимолекуле. В случае A-STE конфигурационной координатой, Q_A , является радиус микрополости (радиус первой конфигурационной сферы) [7]. В табл. 1 суммированы энергетические параметры потенциальных кривых атомарных кристаллов.

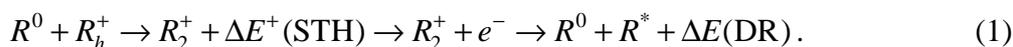
Таблица 1 – Некоторые параметры зонной структуры атомарных кристаллов

	Xe	Kr	Ar	Ne
Ширина запрещенной зоны в Γ -точке, E_g (эВ)	9,298	11,59	14,14	21,58
Положение дна экситонной зоны $\Gamma(3/2)$, FE (эВ)	8,37	10,14	12,06	17,36
Сродство к электрону, χ (эВ)	0,5	0,3	-0,4	-1,3
Высота барьера к M-STE образованию, G_{\max}^M (мэВ)	20	10	2	0,3
Высота барьера к A-STE образованию, G_{\max}^A (мэВ)		30	10	1
Выделение энергии при M-STE, E_M^* (эВ)	0,45	0,75	1,25	
Выделение энергии при A-STE, E_A^* (эВ)			0,2	0,58
Энергия связи атома, ε_b (эВ)	0,172	0,123	0,088	0,026

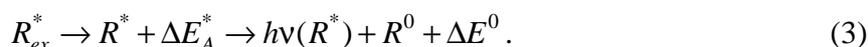
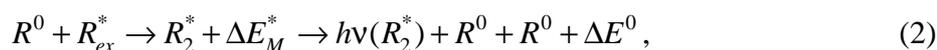
Наиболее интенсивной особенностью спектров люминесценции Ar, Kr, Xe является так называемая полоса M, формируемая $^{1,3}\Sigma_u^+ \rightarrow ^1\Sigma_g^+$ переходами в молекулярном автолокализованном экситоне [7]. Те же переходы $^{1,3}\Sigma_u^{+(v)} \rightarrow ^1\Sigma_g^+$ в излучательном рас-

паде эксимеров, колебательная релаксация которых не завершена, формируют полосу W . Излучательный распад квазиатомных автолокализованных экситонов формирует систему узких квазиатомных полос A в спектрах аргона и неона [7]. Полосы H , которые являются твердотельным аналогом "третьих" молекулярных континуумов, формируются переходами в квазимолекулярных ионах из состояний $(R_2^+)^*$ (асимптотически соответствующих основному состоянию иона R^+ и возбужденному состоянию атома $R^+(^3P_{1,2})$) в состояния R_2^+ (асимптотически соответствующие основным состояниям иона R^+ и атома R) [14]. Здесь и далее R – обозначает атом инертного элемента. В серии специальных экспериментов было однозначно установлено, что полоса A имеет компоненты, которые излучаются из газовой фазы – из "облака" десорбировавшихся атомов над поверхностью образца, а вся широкая полоса "горячей" люминесценции W излучается десорбировавшимися с поверхности эксимерами $(R_2)^*$ [9,10].

Сущность десорбции, стимулированной возбуждением электронной подсистемы, состоит в конверсии энергии электронного возбуждения в кинетическую энергию движения атомов. Необходимым условием такого преобразования является локализация возбуждения в наноразмерной приповерхностной области образца с выделением энергии, превышающей энергию связи ε_b . При энергии возбуждения, превышающей энергию запрещенной зоны E_g , в кристалле возникают зарядовые состояния – электроны (e^-) и дырки (R_h^+), которые могут автолокализоваться в регулярной решетке с выделением энергии $\Delta E^+(STH)$. Диссоциативная рекомбинация (DR) автолокализованных дырок (R_2^+) с электронами, сопровождающаяся выделением энергии $\Delta E(DR)$, может приводить к десорбции возбужденных атомов и атомов в основном состоянии



Здесь R^* – атом в возбужденном состоянии, R^0 – атом в основном состоянии, STH – обозначение автолокализованной дырки (self-trapped hole). Заселение экситонных (R_{ex}^*) состояний с последующей автолокализацией приводит к формированию состояний молекулярного (R_2^*) и атомарного (R^*) типов (соответственно, M-STE и A-STE). Автолокализация сопровождается выделением в решетку энергии ΔE_M^* при формировании квазиэксимерного центра и ΔE_A^* при формировании квазиатомного центра:



Здесь $h\nu(R_2^*)$ и $h\nu(R^*)$ – излучательные переходы квазиэксимерного и квазиатомного центров в основное состояние, ΔE^0 – выделение энергии в ходе энергетической релаксации электронной подсистемы после радиационного распада автолокализованного состояния. На заключительном этапе процесса (2) происходит распад центров квазиэксимерного типа на два атома в основном состоянии. Решение динамической задачи [9] показывает, что в случае процесса (3) при автолокализации экситона вблизи поверхности может десорбироваться как возбужденный атом, так и атом в основном состоянии.

Десорбция атомов в возбужденном состоянии происходит по механизму "выброса микрополостью" ("cavity ejection" или SE-механизм) [10] (рис. 2). Этот механизм является аналогом механизма дефектообразования вследствие квазиатомной автолокализации экситонов (рис. 2(а)→(б)) применительно к квазиатомному центру, локализованному на поверхности кристалла (рис. 2(в)→(г)) [15]. Формирование, вследствие от-

рицательного сродства к электрону, микрополости вокруг возбужденного атома в твердых Ne и Ag, если оно происходит на поверхности (рис. 2(в)), создает несбалансированные силы отталкивания ридберговского электронного облака с окружающими атомами [2,15], что приводит к десорбции (эжекции) возбужденного атома с поверхности образца. Расчеты методом молекулярной динамики подтвердили такой механизм для десорбции возбужденных атомов и возможно даже эксимеров [16]. SE-механизм десорбции был подтвержден экспериментально детектированием люминесценции возбужденных атомов и эксимеров из области пространства над поверхностью образца [17].

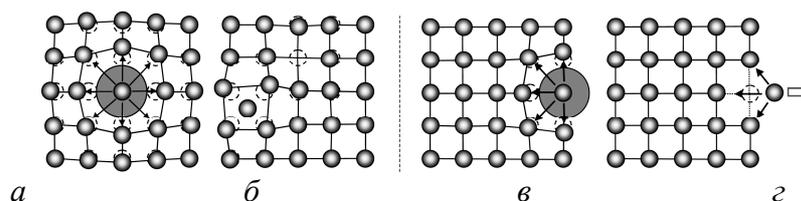


Рисунок 2 – Схема неупругих процессов, индуцированных квазиатомной автолокализацией электронных возбуждений в атомарных кристаллах:

$a \rightarrow b$ – образование пары Френкеля;

$b \rightarrow c$ – десорбция возбужденного атома с поверхности кристалла

Схемы механизмов десорбции эксимеров вследствие локализации электронных возбуждений показаны на рис. 3. Энерговыделение в процессах (1)–(3) происходит как на стадии локализации, так и на стадии распада возбуждения. При этом эксимеры могут быть продуктами десорбции по механизмам, соответствующим процессам (1) и (2). В большинстве работ (см., например, [9,11,17]) измерялся суммарный выход нейтральных атомов. Парциальный вклад в десорбцию возбужденных атомов определен в работах [10,18], где прямо показано, что она вызвана первичным возбуждением экситонов. Установлено, что в этом процессе принимают участие как поверхностные, так и объемные экситоны. Однако вопрос о том, какая энергетическая группа экситонов в зоне вносит основной вклад в перенос энергии к поверхности, остался нерешенным.

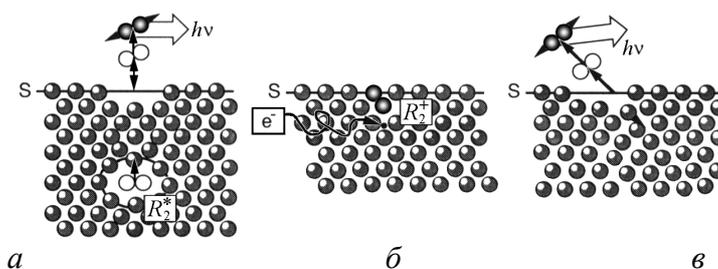


Рисунок 3 – Схема механизмов десорбции эксимеров:

a – автолокализация вблизи поверхности S квазимолекулярного экситона R_2^* ,

b – рекомбинация автолокализованной дырки R_2^+ с электроном e^- ,

c – димеризация эжектируемого возбужденного атома с соседним атомом

В литературе [6] существует условное деление десорбционных механизмов на два класса процессов, первый из которых, называемый "экситонным", объединяет механизмы, в которых разрыв связи кристалл – десорбирующаяся частица происходит вследствие квазиупругого напряжения наноразмерной области на поверхности кристалла, вызванного, например, автолокализацией экситона, сопровождающейся образованием микрополости. В этом смысле SE-механизм (рис. 2(г) и рис. 3(а)) является примером "экситонного" процесса. Другой класс процессов, называемый условно "электронным", объединяет механизмы десорбции, в которых разрыв связи происходит

вследствие возбуждения специфического электронного состояния, имеющего диссоциативный характер, как, например, антисвязывающие молекулярные орбитали, или радикально изменяющего характер и величину взаимодействия возбужденного центра с кристаллическим окружением. В этом смысле диссоциативно-рекомбинационный механизм десорбции эксимеров (рис. 3(в)) является "электронным".

Для экспериментального исследования процесса десорбции эксимеров мы использовали люминесцентный метод детектирования десорбирувавшихся частиц при селективном фотовозбуждении твердого аргона синхротронным излучением [5] в сочетании с возможностью зондировать образец на различную глубину методом катодоллюминесценции [4]. В качестве чувствительного индикатора интенсивности десорбции эксимеров была использована люминесценция полосы W . Спектры фотовозбуждения полосы W измеренные при $T = 20$ К и $T = 25$ К приведены на рис. 4(а).

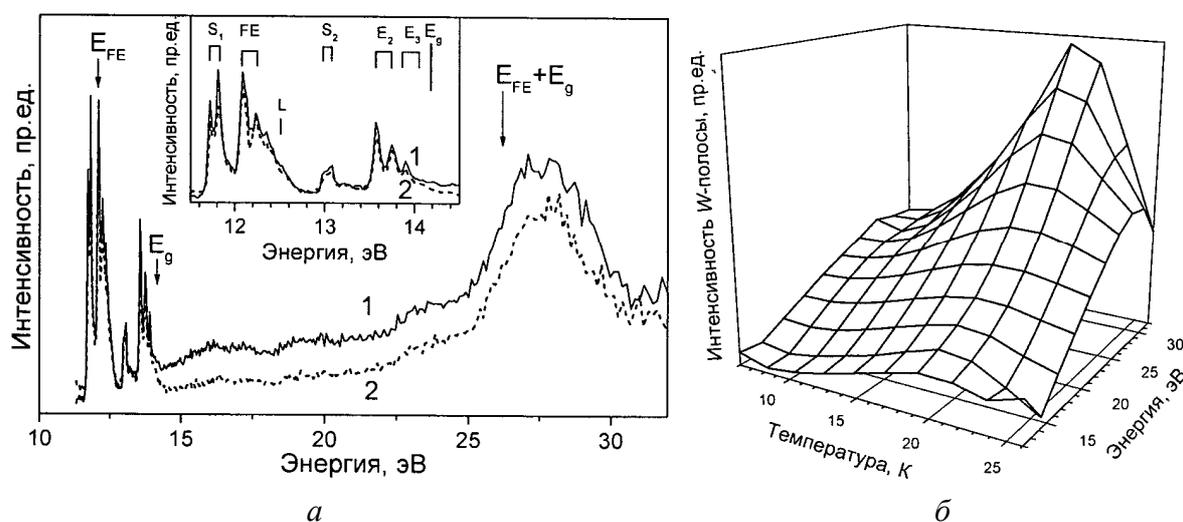


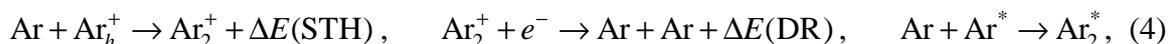
Рисунок 4 – Влияние температуры на спектры твердого аргона:

а – спектры возбуждения полосы W (1 – при $T = 20$ К, 2 – при $T = 25$ К),

б – зависимость интенсивности полосы W от температуры и энергии фотовозбуждения

Наличие четкой экситонной структуры в области поверхностных (S_1, S_2) и объемных $\Gamma(1/2)$ и $\Gamma(3/2)$ экситонов (E_{FE}, E_2, E_3) [5] дает основание утверждать, что образование экситонов, как в объеме кристалла, так и на его поверхности, является необходимым условием для десорбции эксимеров. Для разрыва межатомной связи в случае десорбции, так же как и при образовании дефектов в объеме кристалла, необходимо выполнение энергетического и временного критериев превращения энергии электронного возбуждения в кинетическую энергию десорбирующегося эксимера [1]. Выполнение этих критериев обеспечивает автолокализация экситонов вблизи поверхности кристалла, которая сопровождается значительным энерговыделением в соответствии с процессами: $Ar + Ar_{ex}^* \rightarrow Ar_2^* + \Delta E_M^*$ и $Ar_2^* \rightarrow hv(Ar_2^*) + Ar + Ar + \Delta E^0$, где Ar_{ex}^* – свободный экситон. SE-механизм десорбции эксимеров предполагает образование микрополости вокруг возбужденного центра вблизи поверхности кристалла вследствие отрицательного сродства к электрону у твердого аргона. Однако, в работе [19] экспериментально, методом HREEL-спектроскопии ("High Resolution Electron Energy Loss spectroscopy"), было показано, что сродство к электрону меняет свой знак на поверхности твердого аргона и становится положительным и, следовательно, SE-механизм не может объяснить десорбцию эксимеров с поверхности аргона. В то же время, диссоциативная рекомби-

нация электронов (e^-) с автолокализованными дырками (Ar_2^+) может стимулировать десорбцию эксимеров в результате следующей последовательности процессов:



где Ar_h^+ обозначает свободную дырку.

Спектры фотовозбуждения полосы W показывают, что рекомбинация электронов с дырками усиливает десорбцию эксимеров из твердого Ar. В диапазоне энергий $E > E_g$ резкий рост интенсивности полосы W наблюдается вблизи пороговой энергии $E = E_{FE} + E_g$ (рис. 4(a)). Это является экспериментальным свидетельством проявления в десорбции эксимеров процессов неупругого электрон-электронного рассеяния [20]. Неупругое рассеяние фотоэлектронов с энергиями $E > E_{FE} + E_g$ приводит к генерации дополнительных электрон-дырочных пар, что сопровождается ростом полосы W , а, следовательно, и десорбции эксимеров. Снижение же интенсивности полосы W при поглощении фотонов с энергией $E \approx E_g$ происходит вследствие конкуренции релаксационных каналов, подробно рассмотренных в [21].

Рекомбинационные процессы определяют спектр термолюминесценции кристаллов [22]. Термоактивация процессов электрон-дырочной рекомбинации в сочетании с методом селективного фотовозбуждения люминесценции полосы W подтвердили рекомбинационный механизм десорбции эксимеров (рис. 4(б)) [17]. Изменение температуры приводит к изменению концентрации активных ловушек, на которых могут быть захвачены компоненты электрон-дырочных пар. Те же ловушки, высвобождение электронов из которых приводит к формированию пиков термолюминесценции [22], определяют и интенсивность полосы W . Рекомбинация автолокализованных на поверхности кристалла дырок с высвободившимися из ловушек электронами (процесс (4)), приводит к десорбции эксимеров (рис. 3(б)→(в)).

Энергия необходимая для стимуляции десорбции переносится к поверхности кристалла электронными возбуждениями различной природы. При этом для реализации SE-механизма необходим как транспорт энергии свободными экситонами, так и локализация экситонов на поверхности кристалла. Автолокализованные экситоны и дырки также являются подвижными возбуждениями, причем характер их движения по кристаллу различен [23,24]. Мы исследовали процесс переноса энергии электронных возбуждений к поверхности кристалла с помощью катодолюминесцентного метода, изменяя энергию возбуждающих электронов и, тем самым, варьируя глубину возбуждения образца. Поведение полос катодолюминесценции твердого аргона, связанных с десорбцией атомов (полоса b) и эксимеров (полоса W), демонстрирует различную зависимость от энергии E_e возбуждающих электронов (рис. 5(a)). Десорбция атомов происходит по экситонному SE-механизму. Отличие в поведении полос W и b отражает различие в процессах переноса энергии к тем точкам поверхности, в которых происходит процесс эжекции атомов или молекул.

Длина пробега $R(E_0)$ электронов с энергией E_0 может быть рассчитана, если известна величина линейных потерь энергии в веществе $(dE_e/dx) = -K\rho E_e^{-1} \ln(4E_e/I_{\text{ио}})$, где $K = 2\pi e^4 N_A = 2800 \text{ кэВ}^2 \cdot \text{см}^2/\text{г}$ – константа, N_A – число Авогадро, ρ – плотность вещества, $I_{\text{ср}}$ – средний потенциал ионизации вещества.

В этом случае длина пробега $R(E_0)$ аналитически выражается в виде

$$R(E_0) = - \int_{E_0}^0 \left(\frac{dE_e}{dx} \right)^{-1} dE_e = \frac{1}{\rho K} \int_0^{E_0} \frac{E_e dE_e}{\ln(4E_e/I_{cp})} \approx \left(\frac{I_{cp}}{2} \right)^{0,6} \frac{E_0^{1,4}}{2\rho K} = B \cdot E_0^{1,4}, \quad (5)$$

где B – характерная постоянная для данного вещества. Так R (нм) = $34E_0^{1,4}$ (кэВ) для твердого Ar [11].

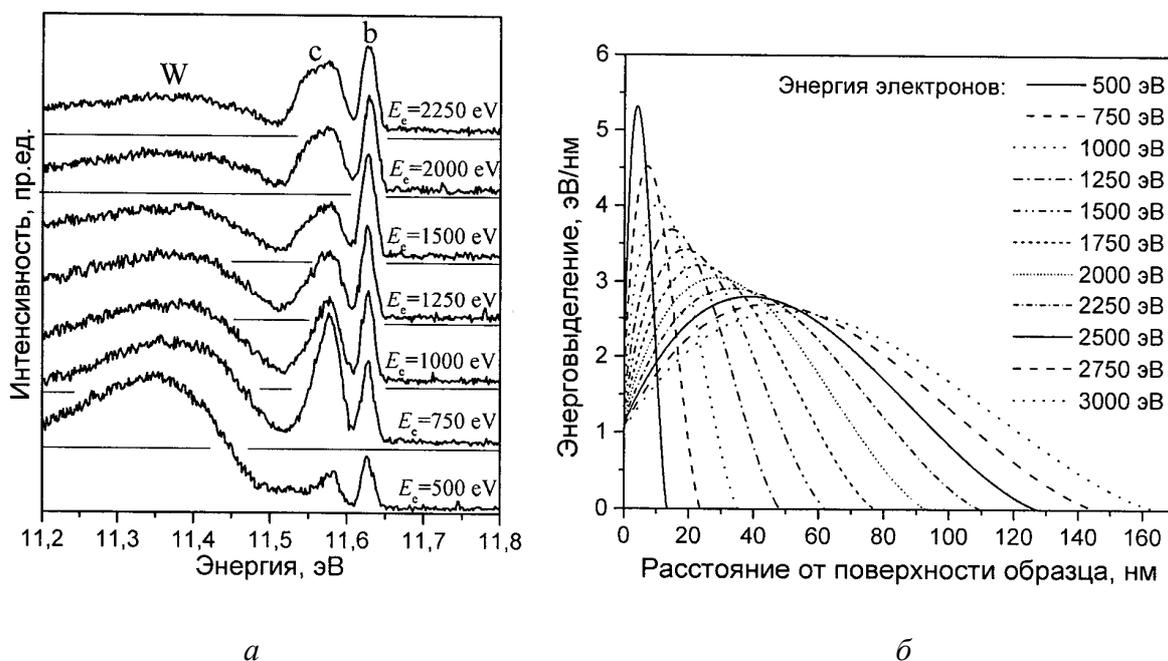


Рисунок 5 – Влияние энергии электронов E_e на спектры катодолуминесценции твердого аргона: a – спектры катодолуминесценции при $T = 5K$, b – кривые энерговыделения электронов $D_e(x, E_e)$

Функция, описывающая диссипацию энергии электронами с энергией E_e в зависимости от расстояния x от поверхности образца, может быть экстраполирована полиномом третьей степени [12]:

$$D_e(x, E_e) = a_0(E_e) + a_1(E_e) \cdot y(x, E_e) + a_2(E_e) \cdot y(x, E_e)^2 + a_3(E_e) \cdot y(x, E_e)^3, \quad (6)$$

где $a_0(E_e) = 0,54 \cdot (E_e/R(E_e))$, $a_1(E_e) = 5,6 \cdot (E_e/R(E_e))$, $a_2(E_e) = -11,2 \cdot (E_e/R(E_e))$, $a_3(E_e) = 5,12 \cdot (E_e/R(E_e))$ – коэффициенты полинома, $y(x, E_e) = x/R(E_e)$ – нормализованная по глубине проникновения электронов координата. Рассчитанные по формуле (6) профили выделения энергии электронами в твердом аргоне $D_e(x, E_e)$ представлены на рис. 5(б). В зависимости от глубины, на которую проникают первичные электроны, будет изменяться и спектр катодолуминесценции, содержащий излучение как объемных, так и поверхностных центров свечения.

Для количественного описания транспорта энергии электронными возбуждениями к поверхности мы использовали квазиодномерную модель переноса энергии подвижными возбуждениями, предложенную в работе [11]. Поведение подвижных возбуждений описывается их коэффициентом диффузии D и временем жизни τ в свободном состоянии. Эти два параметра задают длину свободного пробега $l_0 = (D \cdot \tau)^{1/2}$ возбуждения. Решение дифференциального уравнения $D \cdot (d^2 W/dx^2) = (\partial W/\partial t) + W \cdot \tau^{-1}$ определяет ве-

роятность $W(x, x', l_0, t)$ того, что возбуждение, созданное в момент времени $t = 0$ на расстоянии x' от поверхности кристалла, достигнет к моменту времени t область кристалла, находящуюся на глубине $[x, x + dx]$ образца толщиной d . Величиной, непосредственно связанной с выходом десорбции, является плотность локализовавшихся возбуждений $A(x, x', l_0) = \tau^{-1} \int_0^\infty W(x, x', l_0, t) dt$. Для случая $x < x' < d$:

$$A(x, x', l_0) = \frac{1}{2l_0} \frac{\exp(x/l_0) + \exp(-x/l_0)}{1 + \exp(-2d/l_0)} \left[\exp\left(-\frac{x'}{l_0}\right) - \exp\left(\frac{x'}{l_0}\right) \cdot \exp\left(-\frac{2d}{l_0}\right) \right]. \quad (8)$$

Выход десорбции пропорционален числу подвижных возбуждений, локализовавшихся на поверхности образца ($x = 0$). На рис. 6(a) представлены зависимости

$$Y(E_e, l_0) \sim \int_0^d D_e(x', E_e) \cdot A(0, x', l_0) dx', \quad (9)$$

рассчитанные с использованием данных для $D_e(x, E_e)$ для различных значений l_0 .

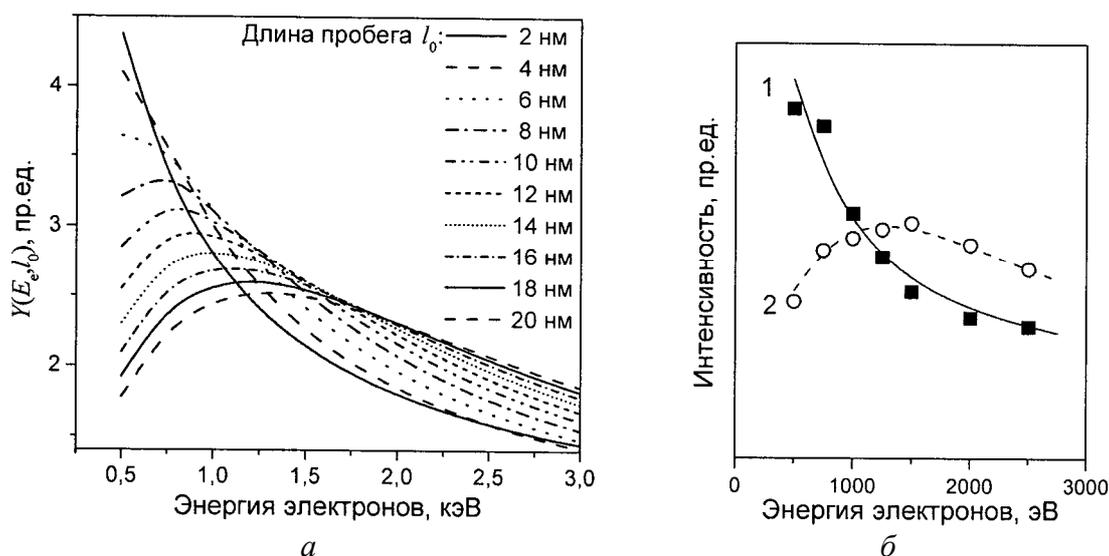


Рисунок 6 – Зависимости от энергии E_e электронного пучка: а – выход люминесценции поверхностных центров $Y(E_e, l_0)$, б – интенсивность полос твердого аргона: 1 – полоса W, 2 – полоса b

Расчет зависимости $Y(E_e, l_0)$ хорошо описывает экспериментальные данные (рис.5(a)) при $l_0 = 20$ нм для полосы b и $l_0 = 2$ нм для полосы W (рис.6(б)). Длина пробега свободных экситонов в аргоне $l_0^{FE} = 20$ нм [9], что подтверждает экситонный механизм десорбции возбужденных атомов. Отметим, что и $l_0 = 2$ нм для полосы W по порядку величины совпадает с областью пространства, которую занимает подвижная дырка при ее распространении вдоль атомной цепочки [23]. В целом зависимость интенсивности полосы W от энергии возбуждающих фотонов отражает характер энергетической зависимости длины свободного пробега фотоэлектронов [20].

Таким образом, данные полученные методами термоактивационной, катодо- и фотоселективной люминесцентной спектроскопии свидетельствуют в пользу рекомбинационного механизма десорбции эксимеров и экситонного механизма десорбции атомов с поверхности атомарных кристаллов. Проведенные расчеты выделения энер-

гии электронами в образце и выхода десорбции хорошо коррелируют с экспериментальными данными. В сочетании с люминесцентно-кинетическим методом анализа радиационно-стимулированных процессов [25] предложенные механизмы могут быть использованы как для контролируемой модификации поверхности образцов, так и для аналитического контроля и сертификации кристаллов в ходе технологической обработки пучками электронов, фотонов и ионов.

Литература

1. Огурцов А.Н. Радиационные технологии модификации модельных кристаллов электронными возбуждениями: 1. Локализация электронных возбуждений и подпороговое дефектообразование // ИТЕ. – 2005. – №4. – С. 66–75.
2. Огурцов А.Н. Радиационные технологии модификации модельных кристаллов электронными возбуждениями: 2. Неупругие процессы, индуцированные ридберговскими состояниями // ИТЕ. – 2006. – №1. – С. 61–70.
3. Огурцов А.Н., Близнюк О.Н. Радиационные технологии модификации модельных кристаллов электронными возбуждениями: 3. Рекомбинационные механизмы // ИТЕ.– 2006. – №3. – С. 47–56.
4. Огурцов А.Н. Экспериментальные аналитические методы исследования подпороговых радиационно-индуцированных процессов в криокристаллах: 1. Катодолюминесцентная спектроскопия / Вестник НТУ "ХПИ". – 2005. – №52. – С. 51–64.
5. Огурцов А.Н. Экспериментальные аналитические методы исследования подпороговых радиационно-индуцированных процессов в криокристаллах: 2. Фотодолюминесцентная спектроскопия с временным разрешением / Вестник НТУ "ХПИ". – 2006. – №11. – С. 39–48.
6. Itoh N., Stoneham A.M. *Materials Modification by Electronic Excitation*. – Cambridge: Cambridge University Press, 2001. – 520 p.
7. Ogurtsov A.N. *Advances in Spectroscopy of Subthreshold Inelastic Radiation-Induced Processes in Cryocrystals / Spectroscopy of Emerging Materials*. – Dordrecht: Kluwer Academic Publishers, 2004. – P. 45–56.
8. Feulner P., Menzel D. *Electronically stimulated desorption of neutrals and ions from adsorbed and condensed layers / Laser spectroscopy and photochemistry on metal surfaces*. – London: World Scientific. – 1995. – P. 627–684.
9. Johnson R.E., Schou J. *Sputtering of inorganic insulators* // K. Dan. Vidensk. Selsk. Mat. Phys. Medd. – 1993. – V. 43, № 1. – P. 403–493.
10. Runne M., Zimmerer G. *Excitonic excitations and desorption from rare-gas solids* // Nucl. Instrum. Meth. Phys. Res. B. – 1995. – V. 101, № 1. – P. 156–168.
11. Ellegaard O., Pedrys R., Schou J., Sørensen H., Børgensen P. *Sputtering of solid argon by keV electrons* // Appl. Phys. A. – 1988. – V. 46, № 4. – P. 305–312.
12. Everhart T.E., Hoff P.H. *Determination of kilovolt electron energy dissipation vs penetration distance in solid materials* // J. Appl. Phys. – 1971. – V. 42, № 13. – P. 5837–5846.
13. *Desorption induced by electronic transitions DIET-IV* / Ed. by G. Betz, P. Varga. – Berlin: Springer-Verlag, 1990. – 392 p.
14. Wieser J., Ulrich A., Fedenev A., Salvermoser M. *Novel Pathways to the Assignment of the Third Rare Gas excimer continua* // Opt. Commun. – 2000. – V. 173, № 1. – P. 233–245.

15. Ogurtsov A.N., Savchenko E.V., Vielhauer S., Zimmerer G. Excitonic Mechanisms of Inelastic Radiation-Induced Processes in Rare-Gas Solids // *J. Luminesc.* – 2005. – V.112, №1. – P. 97–100.

16. Chen L.F., Huang G.Q., Song K.S. Desorption of atoms and excimers upon self-trapping of excitons in rare gas solids // *Nucl. Instrum. Meth. Phys. Res. B.* – 1996. – V. 116, № 1. – P. 61–65.

17. Reimann C.T., Brown W.L., Grosjean D.E., Nowakowski M.J. Dimer desorption from solid argon films electronically excited by MeV He ions // *Phys. Rev. B.* – 1992. – V. 45, № 1. – P.43–55.

18. Leclerc G., Bass A.D., Mann A., Sanche L. Time-resolved patterns for electron-stimulated desorption of metastable atoms from thin Ar(111) films // *Phys. Rev. B.* – 1992. – V. 46, № 8. – P. 4865–4873.

19. Schlichting H. Methoden und Mechanismen der thermischen Desorption: Adsorptions-, Desorptions-Kinetik, Epitaxie und Ordnung von Edeltgasschichten auf Ru(001): Dissertation, Fakultät für Physik, TUM München. – München, 1990. – 685 p.

20. Ogurtsov A.N., Savchenko E.V., Becker J., Runne M., Zimmerer G. Photoelectron scattering in CO doped solid Ar // *Chem. Phys. Lett.* – 1997. – V. 281, № 4. – P. 281–284.

21. Ogurtsov A.N., Ratner A.M., Savchenko E.V., Kisand V., Vielhauer S. Branched relaxation of electronic excitations in rare-gas crystals with traps of different types // *J. Phys.: Condens. Matter.* – 2000. – V. 12, № 12. – P. 2769–2781.

22. Огурцов А.Н., Савченко Е.В., Григорашенко О.Н., Губин С.А., Фуголь И.Я. Термолюминесценция твердого аргона: кинетический анализ кривой термовысвечивания // *ФНТ.* – 1996. – Т. 22, № 10. – С. 1205–1209.

23. Ratner A.M. Coherent motion of two-site self-trapped excitons and energy transport in wide-band dielectrics // *Phys. Lett. A.* – 2001. – V. 291, № 2. – P. 165–174.

24. Ogurtsov A.N., Ratner A.M. Formation and properties of essentially nonequilibrium polaritons in small crystals seen through luminescence of solid xenon // *Phys. Lett. A.* – 2004. – V. 332, № 5. – P. 441–448.

25. Ogurtsov A.N., Masalitina N.Yu., Bliznyuk O.N. Kinetic study of inelastic radiation-induced processes in rare-gas cryocrystals // *Low Temp. Phys.* – 2007. – V. 33, № 6. – P. 689–693.

Bibliography (transliterated)

1. Ogurtsov A.N. Radiatsionnyie tehnologii modifikatsii modelnyih kristallov elektronnyimi vzbuzhdeniyami: 1. Lokalizatsiya elektronnyih vzbuzhdeniy i podporogovoe defektoobrazovanie ITE. – 2005. – #4. – p. 66–75.

2. Ogurtsov A.N. Radiatsionnyie tehnologii modifikatsii modelnyih kristallov elektronnyimi vzbuzhdeniyami: 2. Neuprugie protsessyi, indutsirovannyye ridbergovskimi sostoyaniyami ITE. – 2006. – #1. – p. 61–70.

3. Ogurtsov A.N., Bliznyuk O.N. Radiatsionnyie tehnologii modifikatsii modelnyih kristallov elektronnyimi vzbuzhdeniyami: 3. Rekombinatsionnyie mehanizmy ITE.– 2006. – #3. – p. 47–56.

4. Ogurtsov A.N. Eksperimentalnyie analiticheskie metodyi issledovaniya podporogovyih radiatsionno-indutsirovannyih protsessov v kriokristallah: 1. Katodolyumi–nestsennaya spektroskopiya Vestnik NTU "HPI". – 2005. – #52. – p. 51–64.

5. Ogurtsov A.N. Eksperimentalnyie analiticheskie metodyi issledovaniya podporogovyih radiatsionno-indutsirovannyih protsessov v kriokristallah: 2. Fotolyumi-

nestsentnaya spektroskopiya s vremennym razresheniem Vestnik NTU "HPI". – 2006. – #11. – p. 39–48.

6. Itoh N., Stoneham A.M. *Materials Modification by Electronic Excitation*. – Cambridge: Cambridge University Press, 2001. – 520 p.

7. Ogurtsov A.N. *Advances in Spectroscopy of Subthreshold Inelastic Radiation-Induced Processes in Cryocrystals Spectroscopy of Emerging Materials*. – Dordrecht: Kluwer Academic Publishers, 2004. – P. 45–56.

8. Feulner P., Menzel D. *Electronically stimulated desorption of neutrals and ions from adsorbed and condensed layers Laser spectroscopy and photochemistry on metal surfaces*. – London: World Scientific. – 1995. – P. 627–684.

9. Johnson R.E., Schou J. *Sputtering of inorganic insulators K. Dan. Vidensk. Selsk. Mat. Phys. Medd.* – 1993. – V. 43, # 1. – P. 403–493.

10. Runne M., Zimmerer G. *Excitonic excitations and desorption from raregas solids Nucl. Instrum. Meth. Phys. Res. B.* – 1995. – V. 101, # 1. – P. 156–168.

11. Ellegaard O., Pedrys R., Schou J., Sørensen H., Børgensen P. *Sputtering of solid argon by keV electrons Appl. Phys. A.* – 1988. – V. 46, № 4. – P. 305–312.

12. Everhart T.E., Hoff P.H. *Determination of kilovolt electron energy dissipation vs penetration distance in solid materials J. Appl. Phys.* – 1971. – V. 42, # 13. – P. 5837–5846.

13. *Desorption induced by electronic transitions DIET-IV* Ed. by G. Betz, P. Varga. – Berlin: Springer-Verlag, 1990. – 392 p.

14. Wieser J., Ulrich A., Fedenev A., Salvermoser M. *Novel Pathways to the Assignment of the Third Rare Gas excimer continua Opt. Communs.* – 2000. – V. 173, # 1. – P. 233–245.

15. Ogurtsov A.N., Savchenko E.V., Vielhauer S., Zimmerer G. *Excitonic Mechanisms of Inelastic Radiation-Induced Processes in Rare-Gas Solids J. Luminesc.* – 2005. – V.112, #1. – R. 97–100.

16. Chen L.F., Huang G.Q., Song K.S. *Desorption of atoms and excimers upon self-trapping of excitons in rare gas solids Nucl. Instrum. Meth. Phys. Res. B.* – 1996. – V. 116, # 1. – P. 61–65.

17. Reimann C.T., Brown W.L., Grosjean D.E., Nowakowski M.J. *Dimer desorption from solid argon films electronically excited by MeV He ions Phys. Rev. B.* – 1992. – V. 45, # 1. – P.43–55.

18. Leclerc G., Bass A.D., Mann A., Sanche L. *Time-resolved patterns for electron-stimulated desorption of metastable atoms from thin Ar(111) films Phys. Rev. B.* – 1992. – V. 46, # 8. – P. 4865–4873.

19. Schlichting H. *Methoden und Mechanismen der thermischen Desorption: Adsorptions-, Desorptions-Kinetik, Epitaxie und Ordnung von Edelgasschichten auf Ru(001): Dissertation, Fakultät für Physik, TUMünchen.* – München, 1990. – 685 p.

20. Ogurtsov A.N., Savchenko E.V., Becker J., Runne M., Zimmerer G. *Photoelectron scattering in CO doped solid Ar Chem. Phys. Lett.* – 1997. – V. 281, # 4. – P. 281–284.

21. Ogurtsov A.N., Ratner A.M., Savchenko E.V., Kisand V., Vielhauer S. *Branched relaxation of electronic excitations in rare-gas crystals with traps of different types J. Phys.: Condens. Matter.* – 2000. – V. 12, # 12. – P. 2769–2781.

22. Ogurtsov A.N., Savchenko E.V., Grigorashenko O.N., Gubin S.A., Fugol I.Ya. *Termolyuminescenciya tverdogo argona: kineticheskiy analiz krivoy termovyisvechivaniya FNT.* – 1996. – T. 22, # 10. – p. 1205–1209.

23. Ratner A.M. *Coherent motion of two-site self-trapped excitons and energy transport in wide-band dielectrics Phys. Lett. A.* – 2001. – V. 291, # 2. – P. 165–174.

24. Ogurtsov A.N., Ratner A.M. Formation and properties of essentially nonequilibrium polaritons in small crystals seen through luminescence of solid xenon Phys. Lett. A. – 2004. – V. 332, # 5. – P. 441–448.

25. Ogurtsov A.N., Masalitina N.Yu., Bliznjuk O.N. Kinetic study of inelastic radiation-induced processes in rare-gas cryocrystals Low Temp. Phys. – 2007. – V. 33, # 6. – P. 689–693.

УДК 538.95, 543.068.5, 544.542

Огурцов О.М.

**РАДІАЦІЙНІ ТЕХНОЛОГІЇ МОДИФІКАЦІЇ МОДЕЛЬНИХ КРИСТАЛІВ
ЕЛЕКТРОННИМИ ЗБУДЖЕННЯМИ:
4. ДЕСОРБЦІЯ АТОМАРНИХ КРІОКРИСТАЛІВ**

Десорбція атомів та ексимерів з атомарних кріокристалів внаслідок релаксації електронних збуджень була досліджена методами термоактиваційної, катодо- та фотоселективної люмінесцентної спектроскопії. Були розрізнені екситонні та електронні нанорозмірні механізми десорбції атомарних кріокристалів. У поєднанні з люмінесцентно-кінетичним аналізом радіаційно-індукованих процесів ці механізми можуть бути використані як для керованої модифікації поверхні зразків, так і для аналітичного контролю та сертифікації кристалів під час технологічної обробки струмами електронів, фотонів та іонів.

УДК 66. 047. 57. 004. 68

Ульянов В.П., Ковалик О.Н., Булавин В.И., Ульянова И.В.

РАЗРАБОТКА ВНУТРЕННЕЙ НАСАДКИ ВРАЩАЮЩИХСЯ БАРАБАНЫХ СУШИЛОК

УкрГНТЦ «Энергосталь» разработана [1] новая конструкция внутренней насадки средней части промышленных барабанных сушилок для сушки мелкодисперсных шламов металлургического производства.

В настоящее время на металлургических предприятиях действуют барабанные сушилки с комбинированной насадкой: передняя (загрузочная) часть барабана оснащена приемно-винтовыми лопастями, средняя – цепными перегородками в виде завес, разгрузочная – подъемными листовыми лопастями. В процессе их эксплуатации выявлен ряд существенных недостатков, свойственных сушилкам такой конструкции: низкая производительность барабана по исходному шламу и испаренной воде, малая поверхность контакта теплоносителя с высушиваемым материалом, высокая трудоемкость ремонтных работ.

Низкие показатели процесса сушки обусловлены невысокой температурой газов на входе в барабан и недостаточной эффективностью работы внутренних насадочных устройств, в результате чего тепловой КПД сушильного барабана не превышает 50 %. Малая эффективность цепных насадок объясняется следующими причинами: цепи забиваются влажным материалом, а их поверхность под действием сил сцепления захватывает лишь незначительную часть влажного материала; захваченный материал освобождает цепи только при соударении их о стенки барабана, вследствие чего он перемещается только вдоль этих стенок. При этом уменьшается поверхность контакта теплоносителя с влажным материалом, и ухудшаются условия тепло- и массообмена в этой зоне. Практически работает только периферийная зона барабана, где скорость и температура теплоносителя ниже, чем в осевой зоне, которая почти не используется для сушки влажного материала. Кроме того, цепи быстро изнашиваются, обрываются и выносятся из барабана вместе с высушиваемым материалом, что приводит к увеличению объема ремонтных работ.

В насадке новой конструкции (см. рисунок 1) цепные перегородки заменены согнутыми под прямым углом с одинаковой кривизной изгиба парными, обращенными друг к другу выпуклыми поверхностями перегородками. Каждая последующая по длине барабана пара перегородок смещена относительно предыдущей на 45° (причем все в одном направлении, например по часовой стрелке). Между перегородками соосно барабану размещены дисковые турбулизаторы. Парные перегородки с дисками размещены с шагом, равным 0,05–0,08 длины барабана, а диски расположены от перегородок на расстоянии, равном 0,4–0,5 этого шага. Отношение диаметра диска к диаметру барабана составляет 1: (4–6). Перегородки и диски съемные. Барабан имеет загрузочную камеру для подачи влажного материала, патрубков для подвода теплоносителя и разгрузочную камеру для выгрузки высушенного материала и отвода отработанных газов.

Новая насадка барабанных сушилок испытана [2] на шламах газоочисток конвертерного производства ОАО «Новолипецкий металлургический комбинат» (НЛМК). Сушке подвергали обезвоженный на вакуум-фильтре Ду 68–2,5 шлам с влажностью 25–30 %.

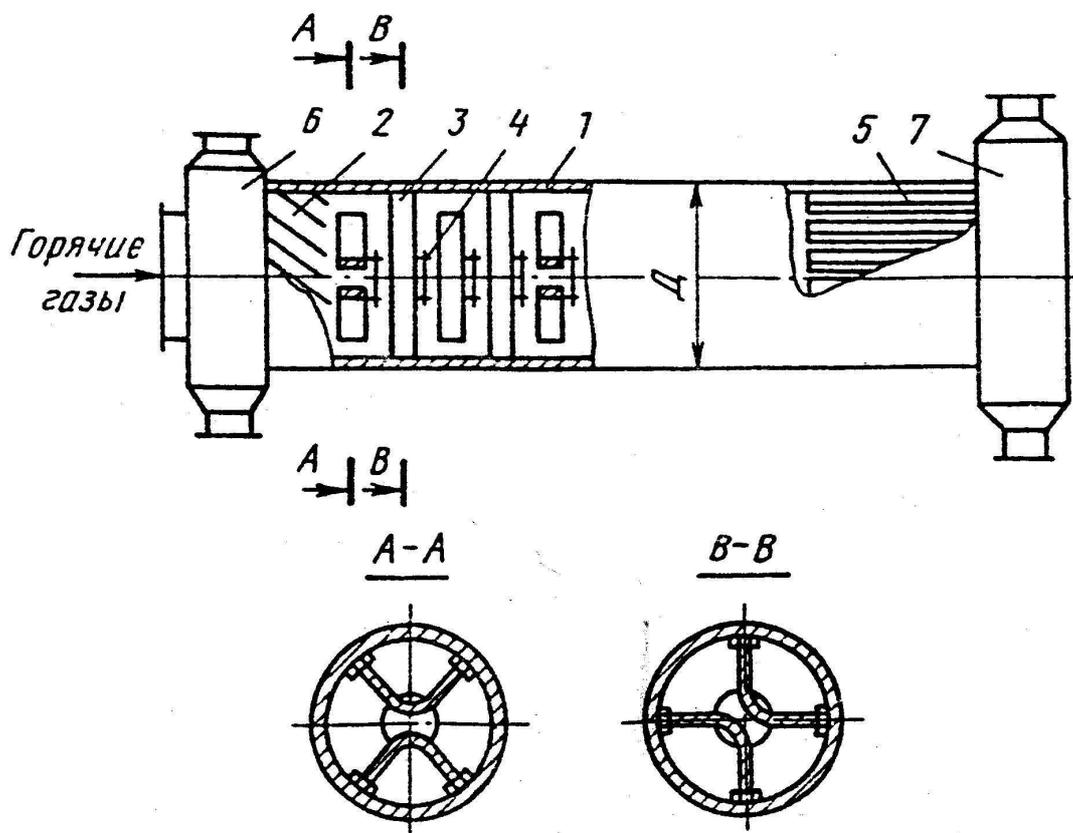


Рисунок 1 – Усовершенствованная конструкция внутренней насадки вращающейся барабанной сушилки (длина барабана 16 м диаметр 2,2 м):
 1 – сушильный барабан; 2 – приемно-винтовая часть насадки; 3 – перегородки;
 4 – турбулизаторы; 5 – подъемные листовые лопасти; 6 – загрузочная камера барабана;
 7 – разгрузочная камера

Для обогрева рабочего пространства сушильного барабана используют дымовые газы из топки, установленной перед барабаном, в которой сжигают природный газ. Шлам поступает во вращающийся сушильный барабан на приемно-винтовую часть насадки, которая перемещает его в среднюю часть барабана; захватываемый перегородками материал поступает в верхнюю зону барабана, перекачивается по поверхности перегородок, перемещаясь в продольном направлении к противоположному краю; срываясь с перегородки, шлам дробится на мелкие куски, которые при падении подсушиваются в перекрестном потоке теплоносителя. Обтекая турбулизатор, теплоноситель перераспределяется по сечению барабана, отклоняясь от центра к периферийной его зоне, где оседает падающий с перегородок материал, который затем подхватывается перегородками следующей пары, смещенной относительно предыдущей на 45° . Это смещение обеспечивает равномерное поступление материала на следующие перегородки и улучшает условия сушки благодаря тому, что сформировавшийся на предыдущих перегородках поток теплоносителя при входе в зону последующих перегородок имеет развитую поверхность контакта с высушиваемым материалом, что повышает тепло и массообмен. Подсушенный в средней части барабана материал поступает на подъем-

ные листовые лопасти разгрузочного конца барабана, откуда направляется в камеру выгрузки.

Конструкция насадки, – изогнутые под одинаковым углом перегородки с равной кривизной изгиба, симметричное расположение перегородок попарно выпуклыми поверхностями друг к другу, – обуславливает разделение барабана на равновеликие секторы, что обеспечивает равномерность сушки, практически одинаковую влажность высушенного материала. Было установлено, что при угле изгиба перегородок 60° увеличивается число перегородок, а, следовательно, металлоемкость внутренней насадки. Кроме того, при острых углах влажный материал налипает на близко расположенные одна к другой поверхности перегородок, что исключает из процесса сушки приосевую область барабана, где наиболее высоки температура и скорость теплоносителя. При изгибе перегородок под углом 120° очередная пара перегородок частично входит в зону потока теплоносителя и материала, созданную предыдущей парой перегородок, что снижает эффективность сушки.

Увеличение или уменьшение угла смещения парных перегородок приводит к необходимости увеличения числа перегородок и уменьшению сечения для прохода теплоносителя и материала, а также к ухудшению перемещения последних, что, в конечном счете, ухудшает аэродинамический режим барабана и процесс сушки.

Установка за каждой парой перегородок дисков различного диаметра создает по длине барабана область переменных давлений и скоростей, что способствует интенсификации тепло- и массообмена при сушке. Лучшие результаты были достигнуты при отношении диаметра диска к диаметру барабана 1:4–1:6. При отношении более 1:6 снижаются скорость теплоносителя в местах установки дисков и интенсивность процесса сушки; при отношении менее 1:4 возрастает аэродинамическое сопротивление и увеличивается количество пыли, выносимой из барабана.

В результате исследования были установлены оптимальные шаг установки перегородок с дисками (0,05–0,08 длины барабана) и расстояние между диском предыдущей пары перегородок и перегородками последующей пары (0,4–0,5 шага установки перегородок) – такие параметры обуславливают интенсификацию процесса сушки материала в результате эффективного дробления при падении его с перегородок, а также исключают образование застойных зон. При уменьшении шага до 0,03–0,04 длины барабана возрастает аэродинамическое сопротивление барабана; увеличение шага до 0,09–0,10 длины барабана приводит к ухудшению процесса сушки вследствие уменьшения пульсационного характера движения теплоносителя. Уменьшение ширины зазора между дисками и перегородками (менее 0,4 шага) приводит к зарастанию насадки, а увеличение ширины зазора более 0,5 шага – к образованию застойных зон, что отрицательно влияет на интенсификацию процесса и качество сушки.

Достоинствами разработанной насадки для барабанной сушилки являются эффективное разрыхление и более равномерное (по сравнению с насадкой старой конструкции) распределение влажного материала в средней части рабочего объема барабана, уменьшение длительности пребывания материала в наиболее холодной зоне (около стенок барабана), увеличение поверхности контакта материала с теплоносителем. Более высокая температура поверхностей перегородок и дисков препятствует налипанию на них влажного материала, в результате чего создается дополнительная поверхность нагрева влажного материала в зоне высоких температур. Сушка практически завершается в средней части барабана, где установлены перегородки с дисками.

Технико-экономические показатели работы вращающейся барабанной сушилки с различными системами внутренней насадки приведены ниже:

Производительность, т/ч:	Насадки	
	старая	новая
по исходному шламу	8	12
по испаренной влаге	1,6	2,88
Влажность шлама, %		
до сушки	30	30
после сушки	10–12	6–8
Удельный расход:		
топлива (природный газ), м ³ /т шлама	60–63	50–52
тепла, кДж/кг	10676,3	7410,6
Напряжение объема сушилки по испаренной влаге, кг/(м ³ ч)	26,3	47,4
Продолжительность сушки шлама, мин	50–55	30–35

При износе отдельных элементов насадки их можно заменить новыми, так как перегородки с дисками выполнены съемными.

Выводы

Разработана новая комбинированная внутренняя насадка вращающейся барабанной сушилки. Ее испытание на трудновысушиваемых шламах конвертерного производства показало, что она обеспечивает повышение интенсивности процесса и качество сушки, снижение удельного расхода топлива до 21 % и трудоемкости ремонтных работ.

Новая насадка принята в промышленную эксплуатацию на ОАО «НЛМК».

Литература

1. В.П. Ульянов и др. Насадка вращающегося барабана // Авт. свид. СССР, № 1267146, Кл. F 26 B 25/16. – Открытия. Изобретения. – 1986. – № 40. – с. 138.
2. В.П. Ульянов, В.Я. Дмитриев, В.Д. Поминов и др. Усовершенствование внутренней насадки вращающейся барабанной сушилки // Черная металлургия: Бюлл. НТИ. – 1990. – № 6. – с. 42–43.

Bibliography (transliterated)

1. V.P. Ulyanov i dr. Nasadka vraschayuschegosya barabana Avt. svid. SSSR, # 1267146, Kl. F 26 B 25/16. – Otkryitiya. Izobreteniya. – 1986. – # 40. – p. 138.
2. V.P. Ulyanov, V.Ya. Dmitriev, V.D. Pominov i dr. Usovershenstvovanie vnutrenney nasadki vraschayuscheysya barabannoy sushilki Chernaya metallurgiya: Byull. NTI. – 1990. – # 6. – p. 42–43.

УДК 66.047.57.004.68

Ульянов В.П., Ковалік О.М., Булавін В.І., Ульянова І.В.

**РОЗРОБКА ВНУТРІШНЬОЇ НАСАДКИ
ОБЕРТОВИХ БАРАБАННИХ СУШАРОК**

УКРГНТЦ "Унергосталь" розроблена нова конструкція внутрішньої насадки обертової барабанної сушарки. Насадка випробувана на конвертерних шламах ВАТ "НЛМК". Результати випробувань показали, що насадка забезпечує підвищення інтенсивності процесу і якість сушіння, зниження питомої витрати палива до 21 %.

ДОСЛІДЖЕННЯ ПРОЦЕСУ ЗАКАЧУВАННЯ ШЛАМІВ У ВІДПРАЦЬОВАНІ СОЛЯНІ СВЕРДЛОВИНИ НА МАЛОМАСШТАБНИХ МОДЕЛЯХ

Найбільш шкідливим і об'ємним відходом виробництва кальцинованої соди аміачним способом є дистилерна суспензія, що утворюється в кількості 8–10 м³ на 1 т соди. Це зумовлено самою технологією, по якій неможливо досягти повного використання сировини. Дистилерна суспензія є розчин хлоридів кальцію і натрію, гідроксиду і сульфату кальцію із загальним масовим вмістом компонентів 15–16 % [1].

Загальний матеріальний індекс на 1 т продукції в перерахунку на тверді з'єднання при виробництві соди, кальцинованої аміачним способом, складає 4,7 т.

Численні спроби зробити спосіб безвідходним або маловідхідним дотепер успіхом не увінчалися. Складування в наземних полігонах і скидання рідких відходів в підземні водоносні горизонти не вирішує проблеми і приводить до ще більшого порушення екологічної рівноваги.

У зв'язку з цим використання підземних пустот, може знайти широке застосування для вирішення проблеми накопичування відходів содового виробництва в наслідок їх використання в якості тампонажного матеріалу, що, в свою чергу, сприятиме підвищенню стійкості земної поверхні. Крім того, існує можливість використання рідких відходів содового виробництва в якості розчинника кам'яної солі замість прісної води.

Основним завданням лабораторних досліджень було фізичне моделювання процесу осадконакопичування в маломасштабних моделях. Оскільки виконання всіх умов однозначності при експерименті досить важко, то здійснювалося наближене моделювання процесу.

У даній роботі як підземні порожнечі розглядаються відпрацьовані камери підземного вилуговування. Ці камери характеризуються наступними фізичними показниками: (системи) – геометричними розмірами – діаметром основи (припустимо, що камера є прямий циліндр) і висотою; однорідним полем концентрації: камеру заповнює розсіл з концентрацією насичення.

Строго кажучи, зміна температури по висоті камери відповідно до геотермічного градієнта складає величину близько 0,5–1 °С. Внаслідок чого створюється деякий градієнт концентрації по висоті камери. Проте його величина така незначна, що неврахування цього явища не приводить до скільки-небудь істотної помилки. Процес вилуговування, тобто розчинення соляних поверхонь в камері, повністю відсутній і, отже, ніяких спотворень однорідності концентраційного поля, пов'язаного з масообміном в камері не є. Найбільш грубим допущенням в цій картині є допущення про циліндрову форму камери. Проте навіть значні відхилення форми камери від циліндрової, принципово не впливає на процес закладки шламів, оскільки шламова пульпа, що нагнітається в камеру, розтікається по ній в горизонтальній площині заповнюючи всі нерівності.

В процесі закладки шламової пульпи в нижню зону камери необхідно виділити наступні три основні явища:

- 1) седиментація шламу з шламової пульпи;
- 2) дифузія іонів Ca²⁺ і Mg²⁺ у надпульпову зону розсолу;
- 3) формування зони шламів, що ущільнюється.

Результатом першого є утворення в нижній частині камери зони згущування шламів і їх подальше ущільнення, а під впливом другого, над зоною згущування шламів утворюється зона розсолу, забрудненого іонами Ca і Mg. Швидкістю осідання частинок шламу, що випробовують опір, залежний від фільтру і форми частинок шламу d ,

в'язкістю і щільністю розсолу. Якщо опір R , що випробовує частинкою при його русі, віднесене до площі її перетину F представити як тиск P , то в загальному вигляді залежність тиску від перерахованих вище параметрів представиться так [2]:

$$P = f(d, u, \rho, \mu, g). \quad (1)$$

Аналіз розмірності дозволяє знайти вид функції. Оскільки величина опору R є шуканою, то критерій Ейлера

$$Eu = \frac{P}{u^2 \rho}$$

представляється як визначуваний критерій, а критерій Рейнольдса

$$Re = \frac{ud\rho}{\mu},$$

що визначає, тобто

$$Eu = f(Re). \quad (2)$$

Шлами представляють дрібнодисперсний матеріал. Розмір частинок (для простоти приймаємо форму частинок кулястими) коливається від декількох мікрон до декількох міліметрів.

Тому частина частинок в процесі седиментації випробовуватиме опір, пропорційний в'язкості, тобто знаходитиметься у області дії закону Стокса.

Значення чисел Рейнольдса в цій області знаходиться в інтервалі 10^{-4} –0,4. Інша частина частинок відчуватиме опір, залежний від сил інерції. Воно підкорятиметься залежності Алена при значеннях чисел Рейнольдса

$Re = 2$ –500. Деякі частинки в області чисел Рейнольдса $Re = 1000$ – $2 \cdot 10^5$ відчуватимуть опір пропорційне квадрату швидкості осідання частинок, тобто згідно закону Ньютона.

Як видно для всього діапазону розмірів шламу закономірність осідання частинок не залежить від зовнішніх параметрів вміщаючої області за межами системи частинки - рідина. Тому умови подібності будуть виконані, якщо буде дотримана постійність критеріїв Ейлера і критерію Рейнольдса одночасно з дотриманням геометричної подібності, тобто:

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{d_n}{d_\mu} = Ld; \\ Eu = idem; \\ Re = idem. \end{array} \right. \quad (3)$$

При вивченні швидкості відстоювання дотримання умов подібності (3) досягалося виконанням наступної рівності:

$$d_n = d_m; q_n = q_m; \rho_n = \rho_m; \mu_n = \mu_m; F_n = F_m; R_n = R_m; u_n = u_m. \quad (4)$$

Таким чином, використовувалися реальні шлами і розсоли, а швидкість осадження шламів визначалася по стандартній методиці Дорра. Відстійник Дорра – основний апарат процесу безперервного очищення розсолу, званий освітлювачем. Треба врахувати, що очищення розсолів проводять при температурі не нижче 12°, інакше швидкість відстоювання шламу знижується. Визначення швидкості осадження здійснювалося в циліндровій трубці діаметром 30 мм, що виключає вплив краєвого ефекту на процес осідання.

Умови подібності для очікуваного дифузійного процесу переходу іонів Ca^{2+} і Mg^{2+} через поверхню контакту шламової пульпи і вище розміщеного розсолу будуть дотримані, якщо будуть дотримані, згідно законів Фіка наступні умови:

$$D_n = D_m; \quad \left(\frac{\partial C}{\partial N} \right)_n = \left(\frac{\partial C}{\partial N} \right)_m, \quad (5)$$

де D – коефіцієнт дифузії; $\frac{\partial C}{\partial N}$ – градієнт концентрації дифундуючих компонентів у напрямі їх руху.

Як видно, для дотримання подібності в даному процесі ніяких обмежень не накладається на параметри вміщуючої системи.

Тому для вивчення процесу дифузії іонів Ca^{2+} і Mg^{2+} з шламової пульпи в розсіл можна використовувати лабораторні циліндри, заповнені натуральними шлами і розсолами.

Розглянемо явище, пов'язане з розподілом шламу по радіусу дна камери вилуговування в процесі розтікання шламової пульпи по камері. Шламова пульпа, що вводиться в камеру, має турбулентну структуру. Чим більша інтенсивність турбулентності, тим далі відносяться потоком осідаючі частинки. Інтенсивність турбулентності залежить від продуктивності нагнітання шламової пульпи і від швидкості її розтікання, від в'язкості рідини. Згідно правилам моделювання цих явищ [3, 4] подібності буде досягнуто при дотриманні наступних умов подібності:

$$\begin{cases} \text{Re} = \frac{vd}{\gamma} \geq \text{Re}_q; \\ \frac{v}{u} = idem; \\ \frac{v^2}{\rho'qd} = idem. \end{cases} \quad (6)$$

Як лінійний розмір береться діаметр частинок шламу.

Згідно дослідженням Н.П. Куліша [5] значення $\text{Re}_q = 150$.

Оскільки значення $\text{Re}_n > \text{Re}_q$, то і значення Re_m для моделі повинне бути більше Re_q .

Третя вимога є слідством кінематичної подібності, а четверте – є умовою ваблення потоком твердих частинок.

В умовах моделі використовуються нагнітаючі колони, конструктивні розміри яких не можуть бути виконані відповідно до вимог геометричної подібності і умов (6). Це обумовлено і тим, що для моделювання використовуються натуральні шлами тобто

$\rho'_n = \rho'_m$; $d_n = d_m$; $u_n = u_m$. Проте $v_n \neq v_m$ виконати цю рівність на моделях малого масштабу неможливо. Але виходячи з шляхів подолання цього утруднення знаходиться у використанні подібних матеріалів, тобто в підборі відповідної щільності шламових частинок і в'язкості несучої рідини. В даний час ми не маємо в своєму розпорядженні подібних матеріалів, тому моделювання цього явища носило якісний характер.

Лабораторні дослідження проводилися в НЮХІМі в п'ять етапів.

На першому етапі досліджень ставилася мета визначити характер розподілу шламів по дну камери залежно від крупності зерен.

Дослідження велися на дні просторової циліндричної моделі камери діаметром 40 см та висотою 20 см зі вклеєною смугою кам'яної солі, яка мала певні нерівності і виступи.

Шламова пульпа готувалася з суміші твердих відходів з дослідного шламонакопичувача в концентрованому соляному розчині зі співвідношенням фаз Р:Т=5:1. Для попередження відстоювання шламу в пульпі перед подачею в шламоподаючу колону пульпа постійно перемішувалася в на лабораторній установці (рис. 1) магнітною мішалкою. подача шламової пульпи проводилася з продуктивністю 50 м³/годину в перерахунку на натуру.

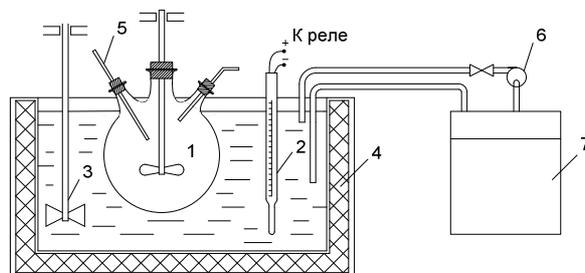


Рисунок 1 – Лабораторна установка для приготування пульпової суспензії

Для приготування пульпової суспензії в колбу (поз. 1) подавали приготовлений розчин концентрованого розсолу та навіски твердих відходів у необхідному для дослідження співвідношенні твердої та рідкої фази (досліджування велись при співвідношенні Р:Т від 5 до 20). Після перемішування до однорідної суміші (протягом 15–20 хв.) і додавання домішок досліджувану рідину зливали в мірні склянки та спостерігали процес розділення неоднорідної системи Р:Т, або виконували інші дослідження. Увесь час проведення опитів регулювали температуру в термостаті (поз. 4) та в досліджуваній колбі таким чином, щоб вона підтримувалась близько 10 °С (значення температури, яка відповідає температурі охолодження шламової суспензії при транспортуванні по підземним трубопроводам та температурі в розсільній свердловині). Значення температури регулювали завдяки контактному термометру (поз. 2), шляхом перекачки охолоджуючої рідини з ємності (поз. 7) в термостат встановленим насосом (поз. 6).

Моделювання показало, що згущена і ущільнена в нижній частині камери тверда фаза шламової пульпи має достатньо горизонтальну поверхню розділу з рідкою фазою. Було доведено, що при заливці пульпи відбувається розшарування і сортування фракцій закладного матеріалу в придонній частині камери. У місці подачі пульпи осідають частинки крупніше 0,4–0,5 мм, частинки середньої крупності (0,25–0,40 мм) розподіляються майже рівномірно по всій довжині камери. Дрібні частинки (<0,25 мм) осідають в основному в околичних частинах камери. При співвідношенні Т:Р від 1:2 до 1:5 середні кути відкладення шарів рівні 6–8°, кути відкладень крупних фракцій досягають 10–12° (для шламу кут природного укосу рівний 18°).

На другій стадії експериментів досліджувався процес ущільнення шламової суспензії в підземній камері.

Експериментальні дослідження процесу ущільнення шламової суспензії проводилися багатьма дослідниками для шламосховищ, гідрозакладки калійних копалень і камер підземного вилуговування. Встановлено, що процес тривалого ущільнення шламів калійних підприємств можна описати рівнянням:

$$M_k = 2,56 - b \cdot \left(2,56 + \frac{\rho_{рф}}{\rho_{тф}} \right) \cdot (\ln T_k - 0,4343), \quad (7)$$

де $M_k = C_{H_2O} \cdot C_{HO}$; ρ – щільність твердої і рідкої фаз шламу, т/м³; T_k – тривалість ущільнення шламу, доба.

Щільність рідкої фази шламу, що є суміш розсолу хлориду натрію і дистилерної рідини (рідкої фази шламу) при рекомендованому нами співвідношенні в шламовій суспензії Р:Т=5–6 складе 1,65 т/м³; щільність твердої фази шламу 2,65 т/м³.

На калійних підприємствах шлами представлені, зокрема, сульфатами і карбонатами кальцію; рідка фаза шламів – хлоридами лужних металів. Екстраполюючи вищенаведене рівняння на процес ущільнення шламів ВАТ "Лисичанська сода", в яких вміст в твердій фазі сухого шламу кристалічних солей (CaCO₃, CaSO₄) складає не менше 60 %, приймаємо коефіцієнт $b = 0,3$.

Нижче (таблиця 1) наводимо відомі дані [6], одержані на підставі систематичного спостереження за діючим шламосховищем. Другого Рудоуправління Солігорського комбінату, що відображають залежність кінетики ущільнення суспензії глинисто-сольового шламу, від її складу.

Досвід експлуатації шламонакопичувачей підприємств кольорової металургії також показує, що чим вище вміст глинистих компонентів в шламовій суспензії, тим повільніше протікає процес її ущільнення.

Враховуючи, що вміст н.о. в шламів, складає, за даними ВАТ "Лисичанська сода", 4±2 % мас, (для інших видів шламів, що накопичуються в "білому морі", зміст н.о. не перевищує 8 % мас), а також кристалічну структуру карбонату кальцію і коагуляцію гідроокисів магнію, кальцію і інших компонентів за допомогою поліакриламід, рекомендованого нами як флокулянта, слід чекати досить високої швидкості ущільнення шламової суспензії після її закачування в камеру підземного вилуговування.

Таблиця 1 – Залежність кінетики ущільнення суспензії глинисто-сольового шламу, від її складу

Тривалість ущільнення, діб	Глибина відбору проб, м	Склад сухої твердої фази, % мас		$M_k = \frac{C_{H_2O}}{C_{HO}}$
		Зміст сольових компонентів (CaSO ₄ , NaCl KCl, MgCl і ін.)	Зміст глинистих компонентів (н.о.)	
330	0,65	41,8	58,2	2,90
	1,40	46,7	53,3	1,36
540	0,48	72,8	27,2	1,03
	1,23	73,0	27,0	0,85

Таким чином, розраховані граничні значення щільності шламів (рис. 2), які підлягають експериментальній перевірці при закладці шламів в камери підземного вилуговування.

Ці значення кореспондуються з результатами лабораторних експериментів, виконаних в Канадському науково-дослідному центрі [7].

Таблиця 2 – Результати розрахунку характеристик суспензії в залежності від тривалості ущільнення

Тривалість ущільнення, діб	M_k	Вологість, % мас	Густина суспензії, т/м ³
30	1,62	39,3	1,61
100	1,15	31,5	1,74
365	0,64	20,4	1,98

Дослідженню піддавалися шлами, включаючої 50 % меленої солі і 50 % нерозчинних матеріалів (сланцевий порошок, глина і т.д.). При початковій пористості шламу 42 % через 600–700 годин випробувань залежно від методу випробувань вона знизилася до значень 12–22 % (рис. 2).

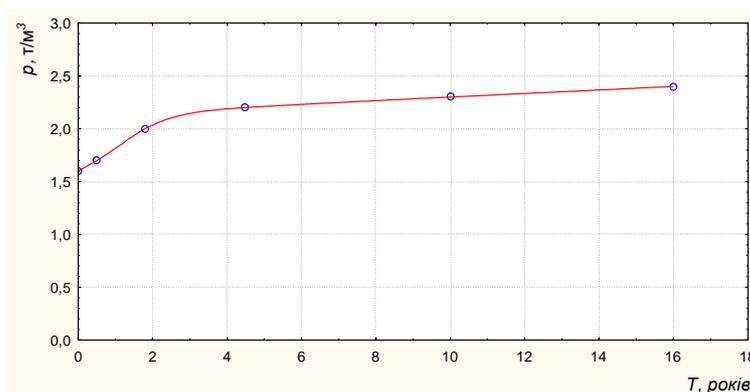


Рисунок 2 – Щільність шламової суспензії в залежності від тривалості ущільнення

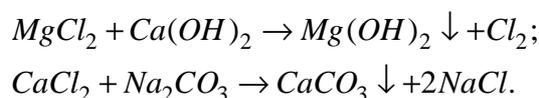
Солевідходи в основному складаються з кам'яної солі і невеликої кількості сильвініта, ангідриту і нерозчинного залишку. По гранулометричному складу солеотходи відносять до пісків. Крупна частинок варіює від 0,15–1,0 мм (солевідходи флотації) до 0,3–6,0 мм (солевідходи збагачення).

При щільності частинок 2,15–2,16 т/м³ максимальна ущільнючість при закладці, визначена по методу стандартного ущільнення, складає 1,6–1,72 т/м³ при вологості 10–12 %, тобто ступінь досягнутого ущільнення рівний 0,70–0,75.

Цей показник шахтної гідравлічної закладки в цілому відповідає значенням, одержаних нами розрахунковим шляхом і прийнятих з подальших розрахунках.

На третьому етапі визначався вплив дифузії на чистоту розсолу.

Сирі розсоли, які отримують з розсільних свердловин, як правило потребують вапняно-содового очищення від солей кальцію і магнію відповідно реакціям [8]:



Основними компонентами шламів для поховання є також шлами дистилерної рідини, котрі складають 98–99 % твердої фази шламу у досліджуваному відпрацьованому шламонакопичувачі. Також присутнє деяка кількість полуторних гідроокисей силікатів та ін.

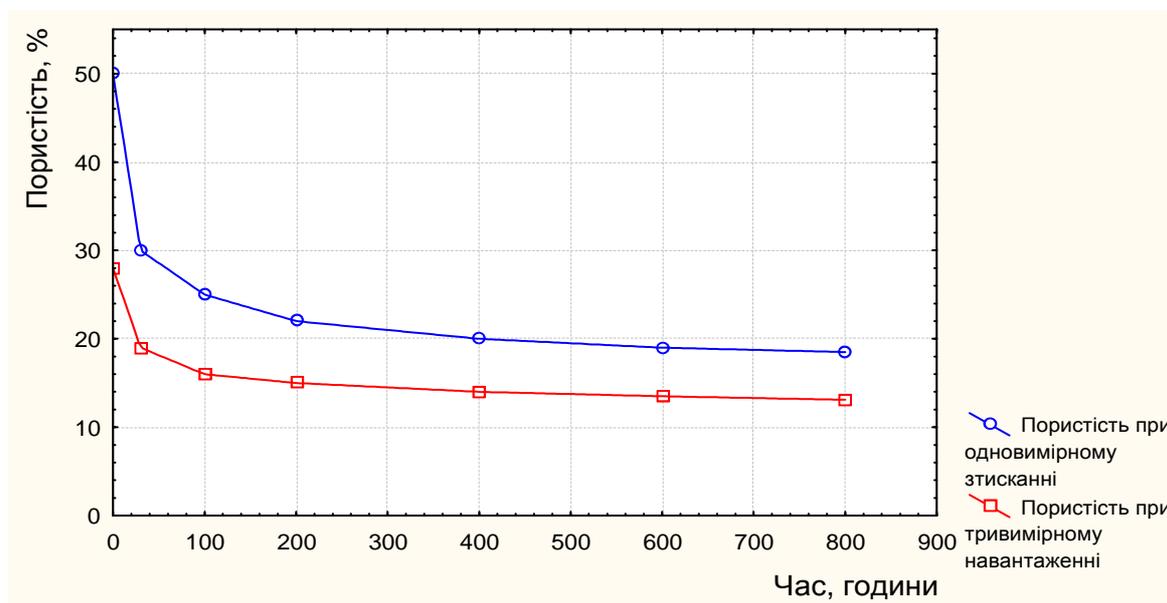


Рисунок 3 – Лабораторні дослідження пористості при ущільненні шламів

Для заповнення необхідного об'єму підземних порожнин твердою фазою до вільного об'єму ущільненого шламу (приблизно 0,5) необхідно багато часу, який може сягати декількох років.

За цей час іони кальцію і магнію будуть дифундувати з зони закладки шламу у розсіл, який знаходиться вище цієї зони, створюючи зону підвищеного вмісту цих компонентів в розсолі. Для оцінки впливу дифузійного механізму забруднення кальцієм і магнієм розсолу у відповідності до умов подібності був поставлений наступний експеримент. В п'яти літрових циліндрах був налитий хлорнатрієвий розсіл і потім в придонну частину введена шламова пульпа, приготовлена з шламів з співвідношенням Р:Т=5:1. Після цього через певні інтервали часу над зоною ущільнення відбирали проби розсолу та визначали вміст в них іонів кальцію та магнію. Результати досліджень представлені на графіку (рис. 4).

З графіку видно, що зменшення вмісту кальцію і магнію в розсолі за першу добу носить седиментаційний характер, а носіями досліджуваних компонентів є тверді нерозчинні частинки.

Після декількох діб (5–7 діб) вміст кальцію і магнію знов збільшується і носить дифузійний характер. К кінцю 30 доби вміст кальцію в розсолі збільшується від 0,019 до 0,06. Таке збільшення вмісту кальцію і магнію можна вважати допустимим, а зону з перевищенням вмісту цих компонентів вважати відсутньою у зв'язку з тим, що вона дуже незначна і майже не впливає на кондицію розсолу.

На четвертій стадії експериментів вивчалися різні варіанти закачування шламу і відбору розсолу, зокрема стосовно наших умов значного рознесення точок подачі шламу розсолотранспорту.

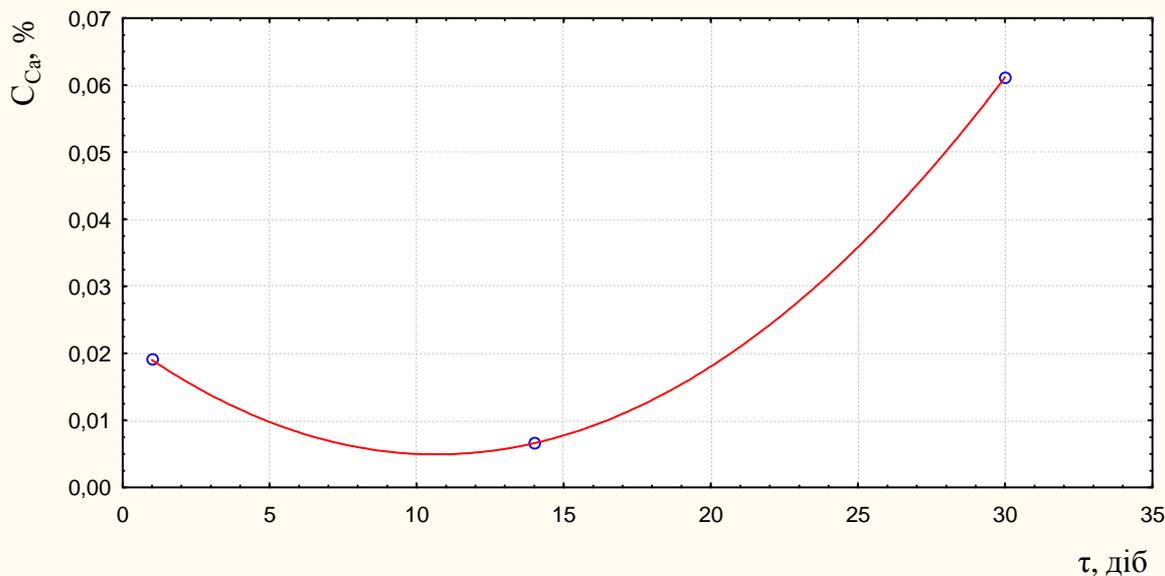


Рисунок 4 – Графік залежності концентрації Ca⁺ в розсолі від часу

Для дослідів використовувалися кювети розмірами 300x120x120 і 240x170x120 з вклеєною вертикальною пластиною солі з різними розташуваннями трубок, що імітують колони труб.

Для визначення концентрації розсолу і його каламутності за об'ємом моделі були змонтовані системи пробовідбірників. Формоутворення камер фіксувалося відеомагнітофоном, ступінь каламутності визначався за допомогою нефелометра ЛМФ-69.

Для спостереження за траєкторією окремих частинок в камері застосовувалися фарбувальні і флюоресцируючі мітки.

Як шлам використовувалися частинки розміром не більше 0,2 мм (просівалися через сито 0,2 мм), при цьому шламозна суспензія готувалася на розсолах різних концентрацій.

На п'ятому етапі велись розрахунки за математичною моделлю.

Результати лабораторних досліджень показали наступне:

1. Динаміка осадкоутворення залежить від розташування точки шламоподачі по відношенню до дна камери і ступеня насичення розсолу: при розташуванні точки подачі високо над дном камери ($h_2 \approx 1/3 H_{\text{зар}}$, h_2 – перевищення над дном), струмінь шламозної суспензії ($\rho > \rho_p$) опускається, зберігаючи свої контури і створює у дна камери майже горизонтальний шар осаду. Сприятливі умови осадкоутворення зберігаються при подачі шламозного розчину, приготованого на насиченому розсолі, у дна камери: в цьому випадку струмінь шламу реверсує і що виходить з освіченого каналу в осаді шлам не змучує розсіл в камері, а розтікається поблизу поверхні осаду. У міру руху розчину вгору відбувається його освітлювання. Такий режим шламоподачі достатньо зручний для камер, невеликих по висоті розмірів, проте, вимагає безперервного процесу подачі шламу і підйому колони при зупинці. Шламозна суспензія, приготована на насиченому розсолі ($\rho < \rho_p$), обумовлює реверсування струменя поблизу точки подачі, її руйнування і як наслідок - змучування розсолу майже за всім обсягом камери.

2. Зміна співвідношення Т:Р в пульпі в межах від 1:3 до 1:10 істотно не змінює картину осадкоутворення в камері.

3. Прилипання і осадження дрібнодисперсного шламу відбувається на поверхнях, що розчиняються, при кутах нахилу до 70° до горизонту.

4. При поєднанні розсолдобичу із закладкою шламу в одиночні камери доцільно використовувати метод МЗВ з тим, що максимально можливим розноситься рівнів розсолзабору і шламоподачі. При ступені насичення розчинника до 0,90–0,92 геометричні параметри камери змінилися тільки в активній зоні (поблизу стелі камери) на 1,0–1,6 м, нижче точки водоподачі конфігурація вироблення практично не змінилася.

5. Експерименти показали, що найвигідніше для закладки шламу використовувати систему камер, що збилися, оскільки зникають складнощі процесів властиві одиначній камері. Рекомендується закладку шламу проводити постійно в одну камеру, а з іншої витягувати освітлений розсіл.

6. У міру осідання шламу відбувається його ущільнення, ступінь ущільнення залежить від гранулометричного складу шламу, періоду ущільнення і тиску стовпа рідини.

Література

1. Ткач Г.А., Шапоров В.П., Титов В.М. Производство соды по малоотходной технологии.– Харьков: ХГПУ, 1998.– 429 с.
2. Циборовский Я. Процессы химической технологии. Гос. И – т изд. П. 1958 г.
3. Кнороз В.С. Безнапорный гидротранспорт и его расчет, Изв. ВНИИГ, т. 44, 1951 г.
4. Дементьев М.А. Общие уравнения и динамическое подобие взвесенесущих потоков, Изв. ВНИИГ, т. 78, 1963 г.
5. Кулеш Н.П. К вопросу о расчете длины отстойников, Тр. ЛПИ, Гидротехника № 208, Госэнергоиздат, 1960 г.
6. Девидзон Б., Дюссо Б., Демере Р. Размещение получаемых от Соловей-производства твердых отходов в камерах подземного выщелачивания. Материалы рабочей встречи SMRI, El Paso, 5–8 октября 1997.
7. Вязов В.В., Авилов В.Н. Складирование глинистых шламов калийного производства. Тр. ВНИИГ, вып. 59. Л., 1972.
8. Фурман А.А. Приготовление и очистка рассола. 1966 г.
9. Бобко П.С. и др. Строительство скважин подземного выщелачивания солей. Обзор. информ. НИИТЭХИМ, М., 1976.

Bibliography (transliterated)

1. Tkach G.A., Shaporev V.P., Titov V.M. Proizvodstvo sodyi po maloethodnoy tehnologii.– Harkov: HGPU, 1998.– 429 p.
2. Tsiborovskiy Ya. Protsessyi himicheskoy tehnologii. Gos. I – t izd. P. 1958 g.
3. Knoroz V.S. Beznapornyiy gidrotransport i ego raschet, Izv. VNIIG, t. 44, 1951 g.
4. Dementev M.A. Obschie uravneniya i dinamicheskoe podobie vzvesenesuschih potokov, Izv. VNIIG, t. 78, 1963 g.
5. Kulesh N.P. K voprosu o raschete dlinyi otstoynikov, Tr. LPI, Gidrotehnika # 208, Gosenergoizdat, 1960 g.
6. Devidzon B., Dyusso B., Demere R. Razmeschenie poluchaemyih ot Solovey-proizvodstva tverdyyih othodov v kamerah podzemnogo vyischelachivaniya. Materialyi rabochey vstrechi SMRI, El Paso, 5–8 oktyabrya 1997.
7. Vyazov V.V., Avilov V.N. Skladirovanie glinistyih shlamov kaliynogo proizvodstva. Tr. VNIIG, vyip. 59. L., 1972.

8. Furman A.A. Prigotovlenie i ochistka rassola. 1966 g.
9. Bobko P.S. i dr. Stroitelstvo skvazhin podzemnogo vyischelachivaniya soley. Obzorn. inform. NIITENIM, M., 1976.

УДК 504.064.4

Шестопалов А.В.

**ИССЛЕДОВАНИЕ ПРОЦЕССА ЗАКАЧКИ ШЛАМОВ В ОТРАБОТАННЫЕ
СОЛЯНЫЕ СКВАЖИНЫ НА МАЛОМАСШТАБНЫХ МОДЕЛЯХ**

Описано условие подобия процесса закачки шламов в отработанные соляные скважины. Приведены результаты лабораторных исследований на маломасштабных моделях. Представлены данные уплотнения осадка в подземных пустотах. Исследован риск загрязнения рассола ионами кальция и магния. Проанализированы условия захоронения отходов содового производства в отработанных камерах выщелачивания.

Бугаенко О.М.

УСТАНОВКА ДЛЯ ЛИКВИДАЦИИ ПОСЛЕДСТВИЙ ЗАГРЯЗНЕНИЙ ВОДНЫХ АКВАТОРИЙ И ГРУНТА НЕФТЕПРОДУКТАМИ

Важнейшее значение во всем мире имеют сегодня вопросы экологии. Угрожающее загрязнение окружающей среды достигло масштабов, влияющих на жизнь планеты в целом. Одним из аспектов этой проблемы является загрязнение земной поверхности и водных акваторий в результате аварийных ситуаций, связанных с изношенностью устаревших танкеров, перевозящих нефтепродукты, нефтепроводов, а также с изношенностью устаревших танкеров, перевозящих нефтепродукты, нефтепроводов, а также несанкционированных врезок в них с целью хищения нефти и нефтепродуктов. В связи с этим расширилась география нефтезагрязненных территорий страны и водоемов, как внутренних (реки, водохранилища, озера), так и акваторий морей и океанов.

Засорение нефтепродуктами водных акваторий любого географического района приводит к созданию сложной экологической обстановки, для ликвидации, которой необходимы значительные финансовые затраты, а также длительное время. Традиционно в таких случаях применяются боновые заграждения, препятствующие растеканию нефтепродуктов, с последующим их сбором с помощью различных технических устройств: нефтемусоросборщиков, скиммеров, насосов, ковшевых черпалок и др. [1]. При этом на водной поверхности остается тонкая пленка нефтепродуктов, собрать которую очень сложно. Для сбора нефтепродуктов или других углеводородных соединений с водной поверхности в настоящее время применяются различные сорбенты – материалы способные поглотить в свои поры загрязняющие соединения, а также разместить их на своей поверхности за счет эффекта смачивания. В данной статье рассматривается применение одного из простейших и недорогих сорбентов – древесной стружки.

Технология доставки и распределение сорбента на большие загрязненные поверхности в течение короткого времени требует применения специализированных установок. Основываясь на мировом опыте, следует признать, что на сегодняшний день наиболее эффективным являются газотурбинные технологии. В Национальном аэрокосмическом университете им. Н.Е. Жуковского «ХАИ» разработана экспериментальная установка [2] на базе газотурбинного двигателя ГТД-5. Она позволяет переместить частицы сорбента с расходом 2–10 кг/с на расстояние до 40 метров. Установка может быть установлена на различных транспортных средствах, масса ее не превышает 120 кг.

В состав газотурбинной установки входят следующие модули:

- газотурбинный двигатель (ГТД);
- многофазное эжекторное сопло с бункером для загрузки сорбента (рис. 2).

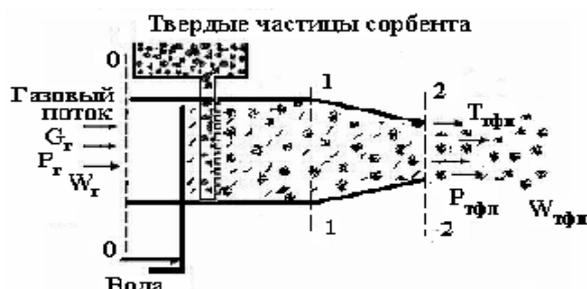


Рисунок 1 – Схема разгонного трехфазного сопла

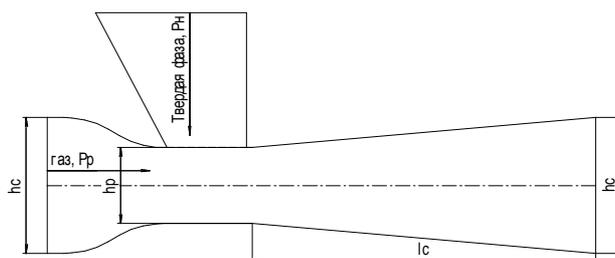


Рисунок 2 – Схема инжекционной подачи твердой фазы

Задача ГТД – формирование газового потока (несущей фазы) с заданными параметрами в выходном устройстве.

Принцип действия разгонного сопла показан на (рис. 1). Частицы сорбента (твердая фаза), подаются в выходное устройство установки. На участке 0–1 происходит подача твердых частиц сорбента, к которым затем на участке 1–2 подводится кинетическая энергия от газового потока двигателя, и твердые частицы ускоряются и перемещаются с газовым потоком.

В качестве твердой фазы могут рассматриваться пористые материалы органического, минерального происхождения или на основе полимеров, обладающие эффектом адсорбции, которые позволят эффективно собирать пленку нефтепродуктов с водной поверхности. Простейшим сорбентом может быть, как сказано выше, обычная древесная стружка.

Выходное устройство должно обеспечить необходимую объемную концентрацию дисперсной фазы и дальнобойность двухфазного потока для различных типов сорбента. Для обеспечения дальнобойности потока возможна дополнительная подача жидкой фазы – воды, которая позволяет увеличить импульс потока сорбента. Кроме того, подача воды позволяет снизить температуру газового потока в случае применения сорбентов или биосорбентов, чувствительных к повышенным температурам. В этом случае поток в выходном устройстве будет трехфазным.

Проектирование выходного устройства осуществлялось на базе его математической модели [3], которая обеспечивает необходимую объемную концентрацию дисперсной фазы и дальнобойность сорбентного потока.

Математическая модель (ММ) выходного устройства содержит дифференциальные уравнения: закон сохранения энергии смеси, массы и количества движения каждой фазы; уравнения притока тепла к жидкой и твердой фазам; уравнения состояния фаз и вспомогательные соотношения.

Однако, для работы рассматриваемого разгонного устройства необходимо осуществлять принудительную подачу сорбента в сопло, например, с помощью шнека. Применение шнека усложняет конструкцию установки и ее эксплуатацию. В связи с этим нами было предложено использование в специализированной установке эжекторного сопла. В настоящей статье предлагается конструктивное решение и расчет эжекторного разгонного сопла.

Расчет инжектора для подачи твердой фазы проводился по методике, изложенной в [4]. Предполагалось, что инжектируемой средой является твердое тело без смеси с газом, что допустимо при малом массовом расходе смешиваемого газа ($G_{инт} \ll G_T$).

Оптимальное отношение сечений инжектора определяется по зависимости

$$\frac{f_c}{f_p} = \frac{-b + \sqrt{b^2 - 4ac}}{2a},$$

где $a = \varphi_1$;

$$b = - \left(\varphi_1 + 2\varepsilon_{pn} \left(\frac{v_c}{2v_p} (1 + u_T)^2 - (\varphi_2 - 0.5) \frac{v_T}{v_p} u_T^2 \right) \right);$$

$$c = \varepsilon_{pn} \frac{v_c}{v_p} (1 + u_T)^2.$$

Уравнение характеристики инжектора имеет вид:

$$\frac{p_n - p_c}{p_n} = k \left(\frac{2}{k+1} \right)^{\frac{k}{k-1}} \frac{p_p}{p_n} \frac{f_p}{f_c} q_{pn}^2 \left(\varphi_1 \frac{\lambda_{pn}}{q_{pn}} + \left(\frac{2}{k+1} \right)^{\frac{1}{k-1}} \left((\varphi_2 - 0.5) \frac{f_p}{f_n} u_T^2 \frac{v_T}{v_p} - \frac{f_p}{2f_c} (1 + u_T) \right) \right),$$

где u_T – коэффициент инжекции твердой фазы; $v_p, v_T, v_c = v_p \frac{1}{1 + u_T} + v_T \frac{u_T}{1 + u_T}$ – удельный объем рабочего газа, твердой фазы и смешанного потока соответственно, м³/кг; φ_1, φ_2 – коэффициенты скорости ($\varphi_1 = 0.9491$ и $\varphi_2 = 0.8455$ по [5]); f_c, f_p, f_n – площади соответствующих сечений, м² (рис. 1), $f_c = f_p + f_n$; p_c, p_p, p_n – давления в соответствующих сечениях, Па; k – показатель адиабаты; $\varepsilon_{pn}, \lambda_{pn}, q_{pn}$ – газодинамические функции (относительная плотность, приведенная скорость и приведенная массовая скорость соответственно).

Данные функции находятся по таблицам газодинамических функций по относительному давлению

$$\Pi_{pn} = p_n / p_p.$$

Длина камеры смешения определяется по зависимости

$$l_c = \frac{h_c - 0.984h_p}{1.2a},$$

где $a = 0.09 - 0.16$ эмпирический коэффициент; h_c, h_p – высота соответствующих сечений.

По приведенным выше зависимостям определяются геометрические размеры рабочего сопла инжектора, а также параметры газа на входе в разгонное сопло (на выходе из камеры смешения). В результате расчета были получены такие результаты:

площадь рабочего сопла инжектора $f_p = 0.008041 \text{ м}^2$;

высота рабочего сопла инжектора $h_p = 0.043 \text{ м}$;

длина камеры смешения $l_c = 0.195 \text{ м}$;

давление на входе в разгонное сопло $p_c = 126634 \text{ Па}$.

Используя результаты расчетов, нами было спроектировано и изготовлено эжекторное сопло применительно к параметрам газового потока двигателя ГТД5. На основании ММ разгонного устройства, при известной геометрии, скорость твердой фазы на срезе сопла, с учетом инжекционной подачи, 42 м/с. При стендовых испытаниях было установлено, что дальнобойность при нулевом угле атаки установки

к горизонту составила 24 м, а протяженность пятна орошения 26 м². Газотурбинная установка с эжекторным соплом представлена на (рис. 3).



Рисунок 3 – Распыл древесной стружки с использованием эжекторного сопла

Для исследования сорбентных возможностей древесной стружки нами был проведен лабораторный эксперимент сбора нефтяных углеводородных соединений, в частности, дизельного топлива, с поверхности воды.

Для этой цели в емкость с водой, загрязненной дизельным топливом, помещалась древесная стружка из расчета 0,35 кг на квадратный метр. Насыщение стружки продолжалось в течение двух суток. Взвешивание извлеченной стружки после удаления из ее пор воды показало увеличение веса за счет насыщения дизельным топливом в 1,5 раза, что свидетельствует о высоких сорбентных качествах древесной стружки.

В заключении можно отметить, что создана методика расчета эжекторного сопла газотурбинной установки, позволяющего осуществлять быструю доставку сорбента на поверхности, загрязненные нефтью. Кроме того, проведена оценка сорбентных свойств древесной стружки, которая показала эффективность ее применения при ликвидации загрязнений нефтепродуктами.

Литература

1. Соловьев В.И. Медицинские аспекты и санитарно-гигиеническая оценка бактериальных препаратов, применяемых для борьбы с нефтяным загрязнением водоемов/. В.И Соловьев, В.А. Пушкина, Г.А. Кожанова, Т.В. Гудзенко // Вода и здоровье 2001: Сб. научн. статей. □, Одесса: ОЦНТЭИ, 2001 С. 195–200.
2. Бугаенко О.М. Многофазный генератор на базе газотурбинного двигателя для решения задачи очистки водной поверхности от нефтепродуктов / Бугаенко О.М., Гусев Ю.А., Епифанов С.В., Скляр А.В. // Сучасні проблеми охорони довкілля раціонального використання водних ресурсів та очистки природних і стічних вод:: Тр. Міжнар. наук. практ. конф. – К.: Товариство «Знання», 2007 С. 49–52.
3. Епифанов С.В. Математическое моделирование многофункциональных генераторов трехфазных потоков на базе авиационных ГТД/ Епифанов С.В., Бугаенко О.М., Гусев Ю.А., Скляр А.В. // Авиационно-космическая техника и технология: Научн. техн. журн. 2005. Вып. 8(24). С. 58–61.
4. Соколов Е.Я., Зингер Н.М. Струйные аппараты. – М.: Энергоатомиздат, 1989. 208 с.

Bibliography (transliterated)

1. Solovev V.I. Meditsinskie aspekty i sanitarno-gigienicheskaya otsenka bakterialnyih preparatov, primenyaemyih dlya borbyi s neftyanyim zagryazneniem vodoemov. V.I Solovev, V.A. Pushkina, G.A. Kozhanova, T.V. Gudzenko Voda i zdorove 2001: Sb. nauchn. statey.-, Odessa: OTsNTEI, 2001 p. 195–200.
2. Bugaenko O.M. Mnogofaznyiy generator na baze gazoturbinnogo dvigatelya dlya resheniya zadachi ochistki vodnoy poverhnosti ot nefteproduktov Bugaenko O.M.,

Gusev Yu.A., Epifanov S.V., Sklyarov A.V. Suchasni problemi ohoroni dovkilliya rationalnogo vikoristannya vodnih resursiv ta ochistki prirodnih i stichnih vod.: Tr. Mizhnar. nauk. prakt. konf. – K.: Tovaristvo «Znannya», 2007 p. 49–52.

3. Epifanov S.V. Matematicheskoe modelirovanie mnogofunktsionalnyih generatorov trehfaznyih potokov na baze aviatsionnyih GTD Epifanov S.V., Bugaenko O.M., Gusev Yu.A., Sklyarov A.V. Aviatsionno-kosmicheskaya tehnika i tehnologiya: Nauchn. tehn. zhurn. 2005. Vyip. 8(24). p. 58–61.

4. Sokolov E.Ya., Zinger N.M. Struynnye apparaty. – M.: Energoatomizdat, 1989. 208 p.

УДК 66.02 (075.32)

Бугаєнко О.М.

**ГАЗОТУРБИНА УСТАНОВКА З ЕЖЕКТОРНИМ СОПЛОМ
ДЛЯ ВИРШЕННЯ ЗАДАЧ ОЧИСТКИ ПРИ НАФТОВОМУ ЗАБРУДНЕННІ**

Розглянуто питання розрахунку та конструювання ежекторного сопла газотурбінної установки, призначеної для доставки сорбенту в зону аварійного розливу нафти. Розглянуто сорбційні властивості стружки з дерева.

УДК 621.387.14:621.1.001.572

Лоян А.В., Нарыжный А.Г., Планковский С.И.

**ТЕМПЕРАТУРНОЕ ПОЛЕ ЭМИТТЕРА
ТЕХНОЛОГИЧЕСКОГО ПЛАЗМОТРОНА**

В настоящее время существуют теоретические основы для разработки плазменных технологий: термодинамика и кинетика высокотемпературных процессов, теория равновесной и неравновесной плазмохимии, закономерности тепломассобмена в плазменных установках. Возможность создания эффективных плазменных технологий была подтверждена в ходе экспериментальных работ, а также при создании опытно-промышленных установок в металлургии [1], химической промышленности [2, 3] и переработке отходов [4]. Можно предполагать, что на основе плазменных технологий в ближайшее время возможна техническая и технологическая революция в ряде базовых отраслей промышленности и народного хозяйства. Малая распространенность плазменных технологий в настоящее время связана с недостаточными характеристиками существующих генераторов плазмы, прежде всего, с низкими значениями мощности и ресурса.

Повышение ресурса плазменных генераторов возможно за счет применения конструкций с распределенной диффузной привязкой дуги к электродам. Наиболее часто такое решение может быть использовано при применении термоэмиссионных катодов при условии обеспечения требуемого состава атмосферы в приэлектродном пространстве [5, 6]. Основное влияние на ресурс таких электродов оказывает интенсивное тепловое воздействие дуги при пуске, переходных и стационарных режимах. Тепловое состояние стержневых термокатодов на стационарных режимах исследовалось в ряде работ [7, 8], в то время как тепловые процессы в термокатадах при запуске практически не исследованы, хотя именно на этом этапе наблюдается повышенная эрозия термокатодов. Мало исследованы тепловые процессы для полых катодов, работающих при атмосферном давлении, хотя ряд авторов обоснованно считают их перспективными для создания высокоресурсных генераторов плазмы.

Настоящая статья посвящена анализу теплообмена в технологическом плазмотроне, предназначенном для разогрева потоком плазмы металла при металлургическом переплаве. Характеристики плазмотрона как важнейшего узла, определяющего технологические параметры, производительность и долговечность установки, зависят от характера распределения поля и величины температур. Кроме того, поле температур порождает специфическое напряженно-деформированное состояние элементов плазмотрона, которое определяет, с одной стороны, прочность и, с другой стороны, величины зазоров и интенсивность контактного теплообмена между элементами. Для оптимизации и управления техпроцессом плазменного переплава металла необходим анализ закономерностей и особенностей распределения полей температур в пространстве и времени.

Непосредственное экспериментальное изучение поля температур плазмотрона технически и экономически трудно провести с достаточной степенью точности и в достаточном объеме. В настоящей работе для определения и изучения поля температур использован метод компьютерного моделирования, основанный на численном решении задач теплообмена.

Плазмотрон как объект температурного анализа. Плазмотрон предназначен для длительной работы в циклическом режиме. В течение однократного цикла работы плазмотрона можно выделить три характерных с точки зрения особенностей поля температур этапа – начальный этап разогрева, стационарный режим работы и остывание.

На начальном этапе холодный плазмотрон нагревается за счет локального теплообмена с электрической дугой со стороны эмиттера. При этом нагреве происходит локальное изменение поверхностных свойств и проводимости эмиттера, вследствие чего дуга скачком меняет место своего расположения относительно первоначального положения, причем такие скачки имеют циклический характер. Общим итогом является случайное блуждание контактных пятен дуги по поверхности эмиттера в пределах одной четверти окружности.

Для начального этапа характерны наибольшие градиенты температур, в то время как при стационарном режиме температуры достигают своих максимальных значений.

Плазмотрон представляет собой осесимметричную систему, включающую 1 – эмиттер, 2 – капсулу и 3 – державку (рис. 1, общий вид и сечение).

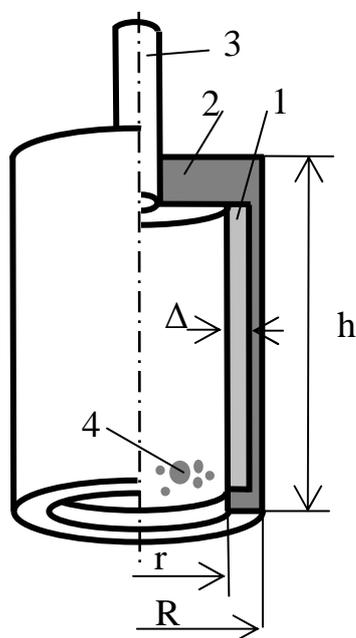


Рисунок 1 – Схема плазмотрона

Как показывают наблюдения, дуга расщепляется на 5–6 рукавов, из которых один диаметром около 5 мм, 1 или 2 – диаметром 1 мм и остальные – диаметром 0.5 мм. На рис.1 схематически показаны 4 – пятна контакта дуги и эмиттера. Контакт дуги и эмиттера наблюдается в области, распространяющейся в окружном направлении на четверть окружности, а в осевом – на 6–8 мм от торца. Длительность периода «стояния» дуги около 0,01 с.

Математическая модель теплообмена (ММО) включает дифференциальные уравнения, описывающие теплообмен на внешних и внутренних поверхностях, а также внутри элементов системы. Влиянием державки на теплообмен пренебрегаем.

Уравнение теплопроводности [9] имеет вид

$$\rho_k c_k \frac{\partial T}{\partial t} = \sum_{i=1}^3 \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\lambda_k \frac{\partial T}{\partial x_i} \right) + \gamma, \quad (1)$$

где T – искомое поле температур, t – время, $x_i, i = 1, 2, 3$ – декартовы координаты точки, $\rho_k, k = 1, 2$ – плотность молибдена и вольфрама (1 – эмиттер, 2 – капсула), $c_k = c_k(T), \lambda_k = \lambda_k(T)$ – теплоемкость и коэффициент теплопроводности молибдена и вольфрама, соответственно, как функции температуры, γ – плотность внутренних источников тепла как функция координат и времени.

Граничные условия описывают тепловой поток в эмиттер со стороны дуги в пределах пятна теплового контакта

$$\begin{aligned} -\lambda_1 \sum_{i=1}^3 \left(\frac{\partial T}{\partial x_i} n_i \right) &= Q, T \leq T_{\max}, \\ T &= T_{\max}, t^* < t \leq t^* + \tau, \end{aligned} \quad (2)$$

где $n_i, i = 1, 2, 3$ – компоненты вектора внешней нормали к поверхности, Q – величина теплового потока внутрь эмиттера как функция координат и времени. При достижении в пятне контакта критической температуры T_{\max} начинается абляция низкотемпературной компоненты, вследствие чего температура в пятне в течение некоторого времени τ сохраняет свое постоянное значение. Затем пятно контакта скачком меняет свою дислокацию.

Конвективный теплообмен с потоком газа, омывающего поверхность эмиттера изнутри и обоймы снаружи, описывается выражением

$$-\lambda_k \sum_{i=1}^3 \left(\frac{\partial T}{\partial x_i} n_i \right) = \alpha_k (T - T_k), \quad (3)$$

где α_k – коэффициент поверхностной теплоотдачи, T_k – температура потока газа внутри и снаружи плазмотрона.

Условия теплообмена между эмиттером и капсулой учитывают сложный радиационно-кондуктивный характер переноса тепла. Полный поток тепла

$$q = q' + q'' = h(T' - T''), \quad (4)$$

где q', q'' – кондуктивный и радиационный потоки тепла, соответственно, T', T'' – температура поверхности эмиттера и капсулы по обе стороны зазора, соответственно, h – эффективный коэффициент теплопередачи, определяемый как

$$h = \begin{cases} h_{cont}, & 0 \leq \Delta \leq \Delta_{\min}, \\ h_c + h_r, & \Delta_{\min} < \Delta \leq \Delta_{\max}, \\ 0, & \Delta_{\max} < \Delta, \end{cases}$$

где Δ – величина зазора между эмиттером и капсулой, определяемая по условиям деформирования элементов конструкции, $\Delta_{\min}, \Delta_{\max}$ – нормируемые минимальная и максимальная величина зазора, h_{cont} – коэффициент теплопередачи контакта, h_c, h_r – коэффициент теплопередачи кондукцией и излучением, соответственно.

Описанная ММТО, представляет систему нелинейных дифференциальных уравнений в частных производных с нелинейными алгебраическими ограничениями на решение, не имеющую решений в аналитических функциях.

Решение задач по определению поля температур в рамках модели производится численно с помощью смешанной дискретизации по методу конечных элементов по пространственным переменным и по неявному методу конечных разностей – по времени [10]. Для непосредственной реализации ММТО на компьютере использована ограниченная версия пакета LS-DYNA [11]

Результаты и обсуждение. Рассмотрена модель плазмотрона в $1/4$ размера в окружном направлении. Результаты получены при следующих значениях параметров модели. Основные размеры: $h = 70$ мм – высота, $R = 20$ мм – наружный радиус корпуса, $r = 15,8$ мм – внутренний радиус поверхности эмиттера, $\Delta = 3,3$ мм – толщина эмиттера. Теплофизические параметры вольфрама – плотность $\rho = 18000$ кг/м³, удельная теплоемкость $c = 373$ Дж/кг К, коэффициент теплопроводности $\lambda = 384$ Вт/(м К). Плотность

молибдена $\rho = 10000 \text{ кг/м}^3$. Теплофизические параметры молибдена приведены в таблице.

$T, \text{ К}$	273	573	773	973	1173	1373	1573	1900
$c, \text{ Дж/кг К}$	2470	2640	3140	3300	3500	3600	3800	4000
$\lambda, \text{ Вт/(м К)}$	1300	1210	1090	1030	1038	960	880	660

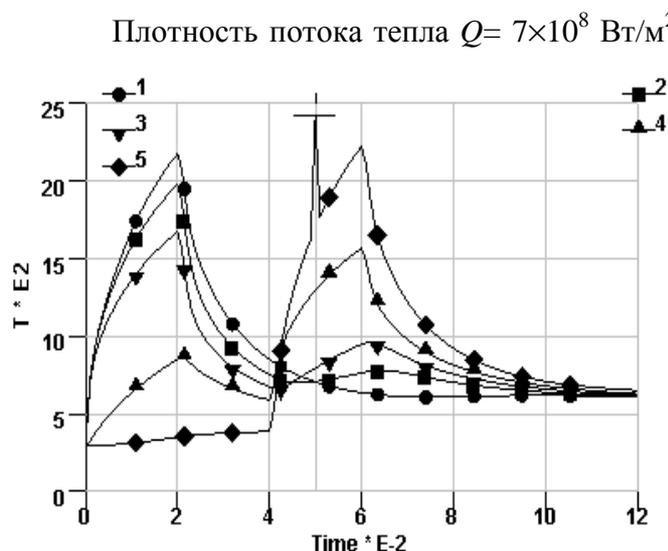


Рисунок 2 – Зависимость температур на поверхности эмиттера от времени

эмиттера, расположенных вдоль окружного направления между центрами двух больших пятен (1 и 3 цикла нагрева) теплового контакта дуги.

Максимальные значения температур достигаются в центрах пятен (точки 1 и 5) и равны 2179 К и 2223 К, соответственно.

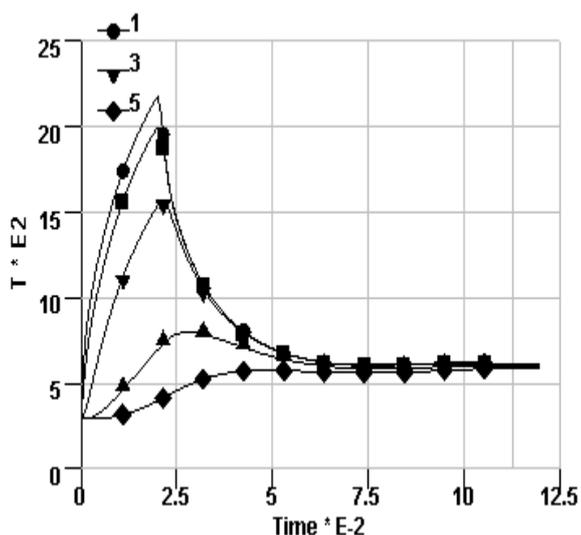


Рисунок 3 – Зависимость температур от времени в центре пятна в различных по глубине точках

Приведенные результаты определены при шаге дискретизации 10^{-5} с .

На рис. 2 показана зависимость температур от времени в 5 различных точках на внутренней поверхности эмиттера, расположенных вдоль окружного направления между центрами двух больших пятен (1 и 3 цикла нагрева) теплового контакта дуги. Максимальные значения температур достигаются в центрах пятен (точки 1 и 5) и равны 2179 К и 2223 К, соответственно. Различие максимальных значений температур объясняется накоплением тепла в пятне и общим нагревом. Точки между пятнами испытывают влияние обоих пятен. После прекращения действия дуги происходит интенсивное остывание за счет кондукции. Другой стороной кондукции является разогрев эмиттера, например 5 точка к началу непосредственного действия дуги ($4 \times 10^{-2} \text{ с}$) нагревается на 96 К. Наблюдается повышение средних температур до 650 К (или на 360 К) в конце периода расчета во всех точках. Локальное увеличение температур в 5 точке объясняется влиянием малого пятна нагрева из промежуточной серии.

Небольшой подъем графиков в конце периода объясняется действием других пятен нагрева дуги.

На рис. 3 показана зависимость температур от времени в различных по глубине точках под центром пятна. Максимальные значения температур уменьшаются с глубиной, причем время достижения максимума увеличивается в сравнении с моментом окончания импульса нагрева. В конце периода расчета температура по толщине эмиттера выравнивается на уровне 520 К, возрастая по сравнению с первоначальным уровнем на 220 К.

На рис. 4 показана картина распределения температур на внутренней поверхности эмиттера в момент времени 0,045 с в форме изополос. Цифрами 1, 2 и 3 обозначены нагретые области дугой в течение 1, 2 и 3 циклов соответственно.

Максимальные температуры в центрах 1, 2 и 3 серий равны 750 К, 1400 К и 1500 К, соответственно.

Пятна 1 и 2 в состоянии кондуктивного остывания, пятно 3 – в состоянии нагрева дугой. Распределение температур неоднородно, что объясняется, с одной стороны, наличием нескольких локальных пятен 3 серии, с другой стороны, – последствием

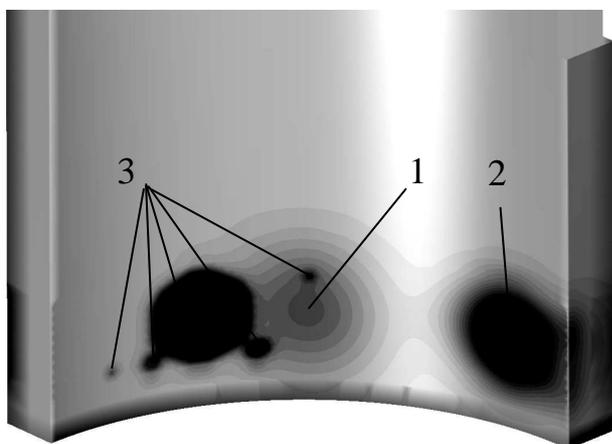


Рисунок 4 – Картина распределения температур на внутренней поверхности эмиттера

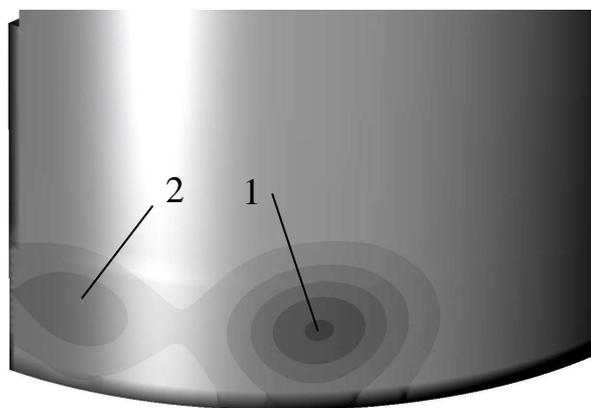


Рисунок 5 – Картина распределения температур на наружной поверхности эмиттера

нагрева 1 и 2 серий. Максимальные температуры в центрах 1, 2 и 3 серий равны 750 К, 1400 К и 1500 К, соответственно.

На рис. 5 для того же момента времени показана картина распределения температур на противоположной, наружной, поверхности эмиттера. В эпицентре пятна первой серии нагрев достиг 650 К, в эпицентре пятна второй серии – всего 400 К. Третья серия к этому моменту времени не привела к сколько-нибудь значительному нагреву наружной поверхности эмиттера.

Для начала нагрева эмиттера характерна очаговая неоднородность поля температур (локальность), которая быстро сменяется одномерной градиентной структурой поля температур.

Тепло начинает распространяться в тело эмиттера за пределы очагов контакта с дугой. На рис. 6 показана картина распределения температур на наружной поверхности эмиттера в момент времени 0,12 с после пяти циклов перескакивания дуги. Максимальная температура в очаге 950 К. На боковых поверхностях модели видно, что изотермы перпендикулярны поверхностям эмиттера, то есть эмиттер прогревается насквозь и

равномерно по толщине. Градиент поля температур направлен вдоль оси вращения эмиттера.

На рис. 7 показана структура поля температур на оборотной стороне эмиттера, обращенной к капсуле. Максимальные температуры достигают 650 К. Поле температур становится более однородным в окружном направлении и по толщине. Поток тепла вне зоны нагрева принимает одномерный характер (вдоль слоя эмиттера).

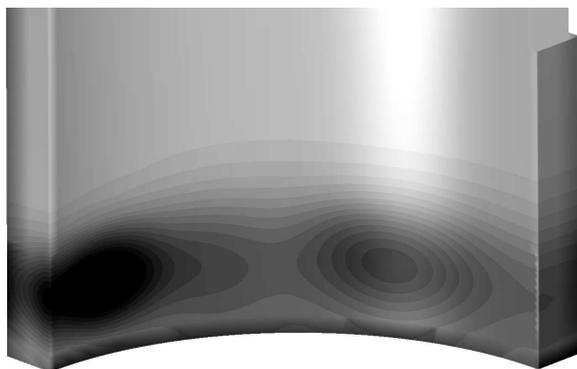


Рисунок 6 – Картина распределения температур на внутренней поверхности эмиттера в конце периода моделирования

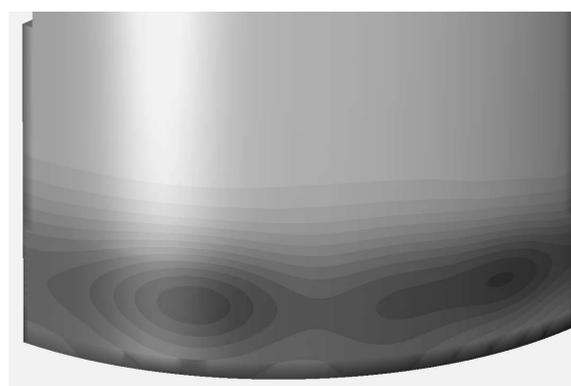


Рисунок 7 – Картина распределения температур на наружной поверхности эмиттера в конце периода моделирования

Выводы

Решение задач теплообмена с использованием предложенной модели устойчиво в широком диапазоне шага дискретизации по времени 10^{-5} – 10^{-4} с, при этом максимальные изменения значений температуры не превосходят 3 К или 0,15 %. Использование большой величины шага по времени позволит повысить эффективность моделирования теплообмена.

В основном динамика нагрева, величины и структура поля температур определяется крупными пятнами теплового контакта. Вначале поле температур имеет очаговую структуру, которая уже через 0,12 с сменяется одномерной. Поток тепла в эмиттере за пределами зоны теплового контакта с электрической дугой на расстоянии 8–10 мм от нижнего торца приобретает одномерный характер (вдоль оси вращения).

В зоне теплового воздействия дуги эмиттер прогревается до температуры выше 650 К за время 5 циклов (в среднем 70 К за один цикл). После 5 циклов температура в предыдущем пятне к началу нагрева в следующем не снижается ниже 1400 К. Указанные температуры являются пороговыми для перехода к иному (регулярному) режиму взаимодействия эмиттера и электрического разряда. При таком темпе нагрева температуры в среднем достигнут порогового значения через 20 циклов или через 4 с.

Зависимости температур в отдельных точках элементов от времени и по пространственным переменным, оценки точности и сходимости, оптимальные значения параметров компьютерной модели. Картины распределения температур на различных поверхностях различных элементов конструкции плазмотрона. Зависимость скорости нагрева от мощности потока.

Литература

1. Цветков Ю.В., Панфилов С.А. Низкотемпературная плазма в процессах восстановления – М.: Наука, 1980.– 359 с.
2. Использование плазмы в химических процессах / Под ред. Ф.Р. Баддура, Р.С. Тимминса.– М.: Мир, 1970.– 256 с.
3. Плазмохимическая технология / В.Д. Пархоменко, П.И. Сорока, Ю.И. Краснокутский и др.– Новосибирск: Наука. Сиб. отделение, 1991.– 392 с.– (Низкотемпературная плазма. Т.4).
4. R.W. Beck. Review of plasma arc gasification and vitrification technology for waste disposal. January 23, 2003.– <http://www.opala.org/TECH/plasma/PlasmaArc.pdf>.
5. Кривцов В.С., Планковский С.И., Цегельник Е.В., Островский Е.К., Таран А.О., Лоян А.В. Газодинамічні характеристики потоку інертного газу в каналі плазмотрона / Наукові вісті НТТУ «КПІ».– 2006.– №2. С. 87–99.
6. Кривцов В.С., Планковский С.И., Цегельник Е.В., Островский Е.К., Таран А.О., Лоян А.В. Оптимізація газодинамічних характеристик дугових плазмотронів з порожнистим катодом/ Наукові вісті НТТУ «КПІ».– 2006.– №3. С. 106–113.
7. Математическое моделирование катодных процессов/ А.М. Зимин, И.П. Назаренко, И.Г. Паневин, В.И. Хвесьюк.- Новосибирск: Наука. Сиб. отделение, 1993.– 194 с.– (Низкотемпературная плазма. Т.11).
8. Приэлектродные процессы в дуговых разрядах/ М.Ф. Жуков, Н.П. Козлов, А.В. Пустогаров и др.– Новосибирск: Наука., 1982.– 157 с.
9. Карслоу Г., Егер Д. Теплопроводность твердых тел. – М.:Наука, 1964. – 488 с.
10. Зенкевич О., Морган К. Конечные элементы и аппроксимация. – М.: Мир, 1986. – 318 с.
11. LS-DYNA Keyword User's Manual. Version 971. Livermore Software Technology Corporation, 2006.– 2130 p.

Bibliography (transliterated)

1. Tsvetkov Yu.V., Panfilov S.A. Nizkotemperaturnaya plazma v protsessah vosstanovleniya – M.: Nauka, 1980.– 359 p.
2. Ispolzovanie plazmyi v himicheskikh protsessah Pod red. F.R. Baddura, R.S. Timminsa.– M.: Mir, 1970.– 256 p.
3. Plazmohimicheskaya tehnologiya V.D. Parhomenko, P.I. Soroka, Yu.I. Krasnokutskiy i dr.– Novosibirsk: Nauka. Sib. otdelenie, 1991.– 392 p.– (Nizkotemperaturnaya plazma. T.4).
4. R.W. Beck. Review of plasma arc gasification and vitrification technology for waste disposal. January 23, 2003.– <http://www.opala.org/TECH/plasma/PlasmaArc.pdf>.
5. Krivtsov V.S., Plankovskiy S.I., Tsegelnik E.V., Ostrovskiy E.K., Taran A.O., Loyan A.V. Gazodinamichni harakteristiki potoku inertnogo gazu v kanali plazmotrona Naukovi visti NTTU «KPI».– 2006.– #2. p. 87–99.
6. Krivtsov V.S., Plankovskiy S.I., Tsegelnik E.V., Ostrovskiy E.K., Taran A.O., Loyan A.V. Optimizatsiya gazodinamichnih harakteristik dugovih plazmotroniv z porozhnistim katodom Naukovi visti NTTU «KPI».– 2006.– #3. p. 106–113.
7. Matematicheskoe modelirovanie katodnyih protsessov A.M. Zimin, I.P. Nazarenko, I.G. Panevin, V.I. Hvesyuk.- Novosibirsk: Nauka. Sib. otdelenie, 1993.– 194 p.– (Nizkotemperaturnaya plazma. T.11).

8. Prielektrodneye protsessyi v dugovyih razryadah M.F. Zhukov, N.P. Kozlov, A.V. Pustogarov i dr.– Novosibirsk: Nauka., 1982.– 157 p.
9. Karslou G., Eger D. Teploprovodnost tverdyih tel. – M.:Nauka, 1964. – 488 p.
10. Zenkevich O., Morgan K. Konechnyye elementy i approksimatsiya. – M.: Mir, 1986. – 318 p.
11. LS-DYNA Keyword User's Manual. Version 971. Livermore Software Technology Corporation, 2006.– 2130 p.

УДК 621.387.14:621.1.001.572

Лоян А.В., Нарижний О.Г., Планковський С.І.

ТЕМПЕРАТУРНИЙ СТАН ЕМІТЕРА ТЕХНОЛОГІЧНОГО ПЛАЗМОТРОНА

Розглянуті математична модель складного теплообміну, а також закономірності та особливості розвитку температур в емітері плазмотрона на початку роботи. Аналіз теплообміну запроваджено на засаді результатів математичного моделювання процесу теплообміну.

Алексахин А.А.

**ОПРЕДЕЛЕНИЕ ТЕПЛОПТЕРЬ ТРУБОПРОВОДАМИ
РАЗВЕТВЛЕННЫХ ТЕПЛОВЫХ СЕТЕЙ***Харьковская национальная академия городского хозяйства*

Решение тактических вопросов энергосбережения базируется на детальном анализе потерь энергии в узлах системы и выявлении ее наиболее проблемных элементов. Одним из недостатков централизованных систем теплоснабжения, состоящих из источников тепловой энергии, тепловых сетей и систем теплоснабжения, является большая протяженность сетей и, как следствие, существенные потери теплоты при ее транспортировке. По данным [1] уровень тепловых потерь в сетях г. Харькова, имеющих протяженность 1556 км, составляет около 16,1 % от отпущенной тепловой энергии.

Величину тепловых потерь через изоляцию эксплуатируемых сетей определяют при проведении тепловых испытаний. Методика испытаний магистральных тепловых сетей изложена, например в [2, 3].

В соответствии с методикой предварительно выбирают участки магистрали, которые составляют циркуляционное кольцо с необходимыми типами прокладки участков и параметрами конструкции теплоизоляции. Необходимый тепловой и гидравлический режимы в испытываемом кольце обеспечивают на источнике теплоты. Испытания проводят после окончания отопительного сезона, в период времени, когда температура грунта и наружного воздуха максимально приближены. Замеры расходов теплоносителя и температур проводят при установившихся тепловых условиях. Показателем достижения установившегося теплового состояния является постоянство температуры теплоносителя в обратной линии кольца на входе в источник теплоты. В период испытаний все потребители теплоты отключены.

Особенностью городских тепловых сетей является их большая разветвленность. Общая длина квартальных тепловых сетей, как правило, в несколько раз превышает протяженность магистральных, поэтому, даже при меньших диаметрах трубопроводов, тепловые потери в микрорайонных сетях больше. Так, по данным [4], длина квартальных участков в г. Харькове более чем в 2,5 раза больше длины магистральных. Это обуславливает то, что при средних диаметрах трубопроводов соответственно 133 и 403 мм [4] нормативные потери теплоты [5] через изоляцию в квартальных сетях примерно на 30 % больше. Поэтому задача определения тепловых потерь трубопроводами микрорайонных сетей представляется актуальной. Проведение же тепловых испытаний квартальных сетей по указанной выше методике затруднительно.

Целью данного исследования является получение расчетной зависимости для определения тепловых потерь в разветвленных тепловых сетях.

При допущении о равномерном распределении расхода теплоносителя из подающего трубопровода вместо реального ступенчатого изменение температуры теплоносителя по длине теплопровода можно найти из предложенного в [6] уравнения, в соответствии с которым температура в сечении трубопровода, отстоящем на расстоянии L от начала координат, равна

$$\tau_1(L) = t_{окр} + (\tau_1 - t_{окр}) (1 - \alpha \cdot G_n / G_o)^A, \quad (1)$$

$$A = q_1' \cdot L / (C \cdot \Delta t_1 \cdot G_n),$$

где $\tau_1, t_{окр}$ – температура теплоносителя на входе в трубопровод и окружающей среды для соответствующей прокладки сетей; G_o и G_n – соответственно расход теплоносителя на входе в теплопровод и через ответвления; q_1' – удельные теплотери при разнице температур теплоносителя и окружающей среды, равной Δt_1 ; C – удельная теплоемкость теплоносителя.

Записывая величину остывания теплоносителя на участке $\Delta \tau_1 = \tau_1(L) - \tau_1$, после преобразований получаем выражение для средних по длине L потерь теплоты подающим трубопроводом, приведенных к разности температур Δt_1

$$\bar{q}_1 = \frac{\Delta t_1 \cdot C \cdot G_n}{L} \cdot \frac{B}{B}; \quad (2)$$

$$B = \ln \left[1 - \Delta \tau_1 / (\tau_1 - t_{окр}) \right], \quad B = \ln \left[1 - G_n / G_o \right].$$

Поскольку величина теплотери зависит от температурного фактора, при анализе теплового состояния теплопроводов целесообразно фактические теплотери соотносить с нормативными, полученными для разницы температур Δt_1 .

Преобразования формулы, выполненные в соответствии с [7], позволили получить выражение для относительной погрешности нахождения теплотери в виде

$$\frac{\Delta \bar{q}_1}{\bar{q}_1} = \frac{\Delta(\Delta t_1)}{\Delta t_1} + \frac{\Delta(C)}{C} + \frac{\Delta(G_n)}{G_n} + \frac{\Delta(L)}{L} + \frac{\Delta(B)}{B} + \frac{\Delta(B)}{B}.$$

Учитывая, что $\frac{G_{mp}}{G_o} = 1 - \frac{G_n}{G_o}$ и используя разложение в ряд Маклорена функции типа $\ln(1+x) = x - \frac{x^2}{2} + \frac{x^3}{3} - \frac{x^4}{4} + \dots + (-1)^{n-1} \cdot \frac{x^n}{n}$ для условий $\Delta(\Delta t_1) = \Delta(C) = \Delta(L) = 0$ окончательно получим

$$\frac{\Delta \bar{q}_1}{\bar{q}_1} = \frac{\Delta(G_n)}{G_n} + \xi_1 \cdot \left[1 + \frac{\sum_{i=2}^n (i-1) \cdot D_i}{\sum_{i=1}^n D_i} \right] + \xi_2 \cdot \left[1 + \frac{\sum_{i=2}^n (i-1) \cdot E_i}{\sum_{i=1}^n E_i} \right],$$

$$D_i = \frac{[\Delta \tau / (\tau_1 - t_{окр})]^i}{i}, \quad E_i = \frac{(G_n / G_o)^i}{i},$$

$$\xi_1 = 2 \cdot \Delta(t) \left[\frac{1}{\Delta \tau} + \frac{1}{\tau_1 - t_{окр}} \right], \quad \xi_2 = \left[\frac{\Delta(G_n)}{G_n} + \frac{\Delta(G_o)}{G_o} \right], \quad (3)$$

где $\Delta(\dots)$ – абсолютная погрешность соответствующей величины

Структура формулы (3) свидетельствует, что в области малых значений $\psi = G_{mp} / G_0$, характерных для гидравлического режима квартальных сетей, возрастает значение множителя ξ_2 , зависящего от величины расхода. Как видно из рис. 1, при $\psi = 0,1$ величина множителя примерно в четыре раза превышает его значение при $\psi = 0,8$.

Результаты, представленные на рис. 1, получены в предположении, что погрешность величины расхода в исходных данных составляет $\Delta(G) / G = 0,015$.

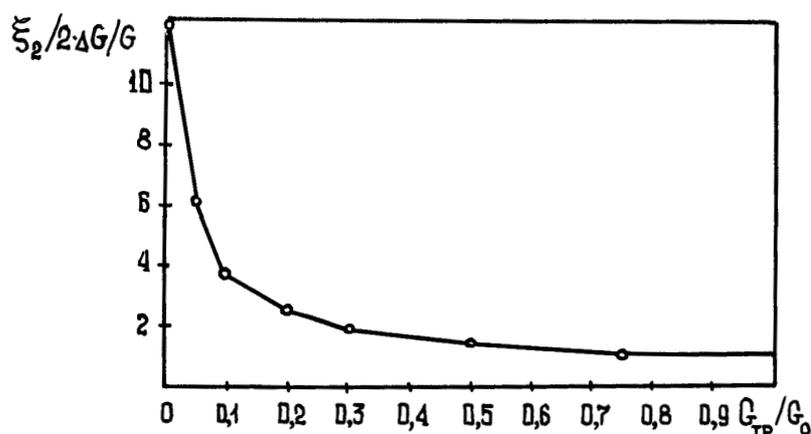


Рисунок 1 – Изменение расходного слагаемого относительной погрешности нахождения тепловых потерь в зависимости от соотношения расходов

Уменьшить расходную компоненту погрешности нахождения величины теплопотерь можно увеличением значения ψ , например, путем смещения конечной расчетной точки на ветви к началу теплопровода. Изменение расходного слагаемого погрешности в зависимости от изменения координаты конечной расчетной точки на ветви показано на рис. 2. Выбирая в качестве конечной расчетной точки точку c координатой $x / L = 0,9$, можно более, чем вдвое уменьшить погрешность, а при $x / L = 0,8$ обеспечивается снижение расходного слагаемого до уровня $\xi_2 \leq 7,5$ %. Однако уменьшение расчетной длины, с другой стороны, приводит к снижению величины фиксируемого охлаждения теплоносителя и росту относительной погрешности измерения разности температур.

Оценка величины температурного слагаемого в уравнении (3) выполнена при условии, что теплопотери трубопроводами находятся на уровне допустимых значений. В соответствии с [8] потери теплоты не должны составлять при длине трубопроводов до 1000 м более 4,8 % от отпущенного количества теплоты, а при длине более 1000 м – не более 13 %. Приняв также, на основании анализа данных [8], соотношение между теплопотерями подающими и обратными трубопроводами 60 % и 40 %, получено значение максимального охлаждения сетевой воды.

При длине до 1000 м для температур наружного воздуха в точке излома температурного графика ($\bar{Q}_o \approx 0,35$) оно равно $0,8^\circ \text{C}$, при расчетной для отопления темпера-

туре наружного воздуха ($\bar{Q}_o = 1,0$) охлаждение составляет 2,3 °С. При длине теплопроводов более 1000 м 2,2 °С и 6,2 °С, соответственно. Исходя из этих значений была оценена координата, для которой может иметь место данное охлаждение теплоносителя. Расчеты выполнены для подземного способа прокладки сетей при допущениях, что погрешность измерения температуры равна 0,1 °С, температура сетевой воды на входе в теплопровод при $\bar{Q}_o = \bar{Q}'_o$ равна 70 °С и при $\bar{Q}_o = 1-120$ °С, температура грунта на оси заложения трубопровода соответственно равна 2,5 °С и 4,5 °С. Для оценки теплотерь приняты нормативные значения [5] для среднего диаметра тепловых сетей $D_{cp} = 133$ мм, приведенные к конкретным температурным условиям. Расход теплоносителя на входе в теплопровод принят для D_{cp} из условия, что удельные потери давления не превосходят рекомендуемую для ответвлений величину 300 Па/м.

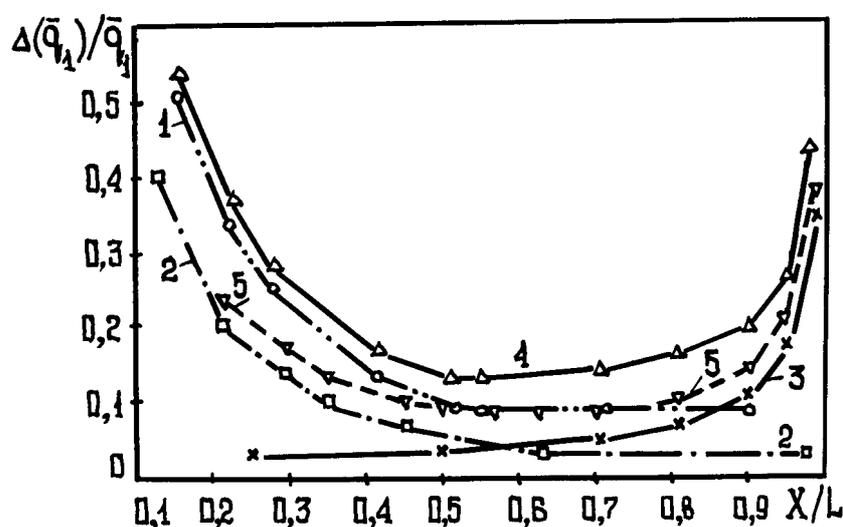


Рисунок 2 – Относительная погрешность определения теплотерь в подающем трубопроводе теплосети по формуле (2):

- 1, 2 – значение температурной компоненты в (3) при $\bar{Q}_o = \bar{Q}'_o$ и $\bar{Q}_o = 1$ соответственно;
- 3 – расходная компонента; 4, 5 – общая погрешность при $\bar{Q}_o = \bar{Q}'_o$ и $\bar{Q}_o = 1$ соответственно

Результаты расчетов, приведенные на рис. 2, показывают изменение значений ξ_1 и ξ_2 для $\psi = 0,01$ в зависимости от выбора координаты конечной расчетной точки на ветви сети. Там же приведена вычисленная по (3) общая погрешность определения теплотерь для двух характерных значений температуры наружного воздуха. Полученные данные свидетельствуют, что минимальную погрешность следует ожидать при выборе координаты конечной расчетной точки на ветви в области значений $0,5 \leq x/L \leq 0,8$. Относительная погрешность $\Delta \bar{q}_1 / \bar{q}_1$ в области значений $\bar{Q}_o = 1$ ожидается примерно на 30 % ниже, чем при температурах наружного воздуха, близких к точке излома температурного графика, что делает это время отопительного сезона более предпочтительным для проведения испытаний.

Как следует из приведенных на рис. 3 графиков, для тепловых сетей с более равномерным распределением расхода вдоль трубопровода ошибка определения тепловых

потерь меньше, что исключает необходимость выбора на ветви координаты конечной расчетной точки.



Рисунок 3 – Влияние соотношения расходов на погрешность определения теплотерь

$$\text{при } \bar{Q}_0 = 0,35 : 1 - \frac{G_{mp}}{G_0} = 0,01; 2 - 0,1; 3 - 0,2.$$

В качестве примера рассмотрен фрагмент жилого микрорайона, схема и характеристика тепловых сетей которого приведены в [6]. Распределение расхода теплоносителя по длине расчетной ветви характеризуется соотношением $\psi = 0,0098$ и следует ожидать высокую ошибку определения тепловых потерь. Предварительно было рассчитано охлаждение теплоносителя по длине трубопровода $L = 704,5$ м при начальной температуре 120 °С, температуре грунта $4,5$ °С, нормативных линейных потерях теплоты и значении коэффициента местных потерь $\beta = 1,15$. Варианты расчетов различались выбором конечной расчетной точки на длине ветви. Результаты вычислений теплотерь по формуле (2) и сопоставление их с принятыми исходными значениями выполнено в таблице 1.

Таблица 1 – Сопоставление результатов определения теплотерь на расчетной ветви (1–10) [5]

Номер варианта	Конечная расчетная точка ветви		ψ	$\Delta\tau_1, \text{ }^\circ\text{C}$	Теплотери, Вт/м		$\left \frac{\Delta q}{q} \right , \%$	
	№	Координата			ф. (2)	[7]		
		$x, \text{ м}$						x/L
1	10	704,5	1,0	0,0098	11,22	181,98	93,95	93,7
2	8	641,5	0,91	0,048	5,65	107,35	98,0	9,5
3	7	563	0,80	0,12	3,52	109,18	102,5	5,5
4	4	279	0,4	0,6	1,0	119,67	124,1	3,6
5	3	142	0,2	0,76	0,425	118,51	121,84	2,7

Представленные данные подтверждают возможность использования формулы (2) и согласуются со сделанными ранее выводами о характере изменения ошибки счета. Расчеты по формуле (2) для режима $\bar{Q}_0 = 0,35$ при внесении в исходные данные искус-

ственной ошибки $\Delta(\tau_1) = -0,1$ °С, $\Delta(\tau_1 - t_{окр}) = 0,2$ °С, $\Delta(G)/G = 0,015$ удовлетворительно согласуются с соответствующей линией общей погрешности на рис. 2.

Выводы

1. Предложенная расчетная зависимость позволяет с достаточной для инженерной практики точностью определить теплотери в разветвленных тепловых сетях.
2. Повышение точности нахождения теплотерь в сетях с неравномерным распределением расхода вдоль ветви можно достичь выбором конечной расчетной точки ветви в диапазоне $0,5 < \frac{x}{L} < 0,8$.
3. Более высокая точность может быть получена в области наружных температур воздуха, близких к расчетной для отопления.

Литература

1. Андреев С.Ю., Голованев Н.П., Репин А.П. Энергосбережение в коммунальной теплоэнергетике//Энергосбережение. Энергетика. Энергоаудит.– 2007.– № 3.– С. 62–68.
2. Методические указания по определению тепловых потерь в водяных тепловых сетях. РД 34.09.255-97. Служба передового опыта ОРГРЭС. Департамент науки и техники. – М.: 1998.
3. Методические указания по определению тепловых потерь в водяных и тепловых сетях. – МУ 34-70-080-84. – М.: СПО Союзэнерго, 1985.
4. Програма розвитку і реформування житлово-комунального господарства в м. Харкові на 2003–2010 рр. (Коллектив авторів під керівництвом Шутенка Л.М., Бабаєва В.М., Семенова В.Т.). – Харків: ХДАМГ, 2003. – 208 с.
5. Тепловая изоляция / Под ред. Г.Ф.Кузнецова. – М.: Стройиздат, 1995. – 421 с.
6. Алексахин А.А. Определение охлаждения теплоносителя в трубопроводах тепловых сетей // Коммунальное хозяйство городов: Научн.-техн. сб. Вып. 74. – К.: Техніка, 2006. – С. 349–355.
7. Осипова В.А. Экспериментальное исследование процессов теплообмена. – М.: Энергия, 1979. – 320 с.
8. Норми та вказівки по нормуванню витрат палива та теплової енергії на опалення житлових та громадських споруд, а також на господарсько-побутові потреби в Україні. КТМ 204 України 244–94.

Bibliography (transliterated)

1. Andreev S.Yu., Golovanev N.P., Repin A.P. Energoberezhenie v kommunalnoy teploenergetike Energoberezhenie. Energetika. Energoaudit.– 2007.– # 3.– p. 62–68.
2. Metodicheskie ukazaniya po opredeleniyu teplovyih poter v vodyanyih teplovyih setyah. RD 34.09.255-97. Sluzhba peredovogo opyita ORGRES. Departament nauki i tehniki. – M.: 1998.
3. Metodicheskie ukazaniya po opredeleniyu teplovyih poter v vodyanyih i teplovyih setyah. – MU 34-70-080-84. – M.: SPO Soyuzenergo, 1985.
4. Programa rozvitku i reformuvannya zhitlovo-komunalnogo gospodarstva v m. Harkovi na 2003–2010 rr. (Kolektiv avtoriv pid kerivnitstvom Shutenka L.M., Babaeva V.M., Semenova V.T.). – Harkiv: HDAMG, 2003. – 208 p.

5. Teplovaya izolyatsiya Pod red. G.F.Kuznetsova. – M.: Stroyizdat, 1995. – 421 p.
6. Aleksahin A.A. Opredelenie ohlazhdeniya teplonositelya v truboprovodah teplovyykh setey Kommunalnoe hozyaystvo gorodov: Nauchn.-tehn. sb. Vyip. 74. – K.: Tekhnika, 2006. – . 349–355.
7. Osipova V.A. Eksperimentalnoe issledovanie protsessov teploobmena. – M.: Energiya, 1979. – 320 p.
8. Normi ta vkazivki po normuvannu vitrat paliva ta teplovoyi energii na opalennya zhitlovykh ta gromadskikh sporud, a takozh na gospodarsko-pobutovi potrebi v Ukrayini. KTM 204 Ukrayini 244–94.

УДК 658.24

Алексахін О.О.

ВИЗНАЧЕННЯ ТЕПЛОВИТРАТ ТРУБОПРОВОДАМИ РОЗГАЛУЖЕНИХ ТЕПЛОВИХ МЕРЕЖ

Запропоновано розрахункову залежність для визначення витрат теплоти на ділянці подавального трубопроводу розгалуженої теплової мережі. Досліджено вплив температурних умов та співвідношення витрат теплоносія у початковій та кінцевій координатах вітки мережі на точність розрахунків.

УДК 622.276.6:661.96:532.528

Кравченко О.В.

ОБОБЩЕННАЯ МОДЕЛЬ СИСТЕМЫ ФОРМИРОВАНИЯ ПРОЦЕССОВ И ТЕХНОЛОГИЙ ПОВЫШЕНИЯ ЭФФЕКТИВНОСТИ ДОБЫЧИ, ПЕРЕРАБОТКИ И ИСПОЛЬЗОВАНИЯ УГЛЕВОДОРОДНЫХ ЭНЕРГОНОСИТЕЛЕЙ

Применение системного анализа является одним из путей дальнейшего совершенствования и оптимизации функционирования энерготехнологических комплексов. Основная его цель в данном случае – раскрытие реального механизма функционирования рассматриваемой системы энергопреобразования и составление адекватной модели формирования сложных физико-химических процессов и технологий. Согласно [1–9], понятие система определяется как множество элементов, объединенных общими правилами и алгоритмами взаимодействия и представляющих собой не простое суммирование, а особое их соединение, которое придает всей системе в целом новые качества, отсутствующие у каждого из элементов.

Процессы, лежащие в основе технологий интенсификации добычи, переработки и использования углеводородных энергоносителей, представляют комплекс целого ряда изменений в веществе и связаны с большим числом разнородных факторов влияния. Предметом исследования в данной работе являются следующие технологические процессы:

- интенсификация добычи углеводородного горючего;
- глубокая переработка нефти и нефтепродуктов;
- получение и сжигание композитных горючих на основе углеводородов.

Анализируется весь отрезок технологического цикла от добычи до сжигания в камерах сгорания. В качестве главной особенности цикла рассмотрены физико-химические процессы и эффекты, протекающие на границах раздела фаз непосредственно в углеводородных энергоносителях, на поверхности контактирующих разнородных жидкостей, на границах с твердыми включениями и поверхностями исполнительных органов.

Для анализа и последующей рациональной организации таких сложных процессов с высокими значениями выбранных критериев эффективности необходимо разработать обобщенную модель, позволяющую применить к ней известные и хорошо апробированные методы системного анализа. В настоящее время такая обобщенная модель системы формирования процессов и технологий применительно к интенсификации добычи, комплексной переработке и использованию углеводородных энергоносителей в соответствующих энерготехнологических установках, на основании которой можно было бы сформулировать рекомендации по совершенствованию процессов и аппаратов, отсутствует.

Создание обобщенной модели системы формирования процессов и технологий повышения эффективности добычи, переработки и использования углеводородных энергоносителей необходимо для изучения сложных закономерностей и взаимосвязей, характеризующих данную проблему как большую развивающуюся систему [4,5]. Разрабатываемые автором физико-химические процессы и технологии подчинены единой цели – экономической целесообразности и экологической безопасности.

Существуют многочисленные определения больших систем. Практически к большой системе можно отнести любую совокупность элементов, функционирование

которых взаимосвязано и направлено на достижение единой цели [3]. Предмет рассмотрения в данной работе подпадает под это определение, поскольку любой из процессов здесь представляет сложную совокупность элементарных стадий или превращений. Большая система включает в качестве базисных компонент совокупность простых либо элементарных систем.

Автором предложена обобщенная модель системы формирования процессов и технологий в виде составной структуры (обобщенный ряд)

$$S = \sum_{i=1}^n a_{ik} s_i, \quad k = 1, 2, 3, \dots, m, \quad (1)$$

где n – размерность, или число базисных компонент; k – число состояний каждой компоненты s_i ; a_{ik} – коэффициенты разложения; s_i – базисные компоненты, отображающие независимые подсистемы формирования процессов и технологий.

Подсистемы s_i также являются составными структурами формирования процессов и технологий энергопреобразования, но на своем уровне. Автором обоснован выбор и проведен анализ следующих базисных компонент в виде процессов и технологий:

- интенсификации добычи углеводородного сырья в скважине;
- гидрокавитационной обработки углеводородных энергоносителей;
- подготовки топлив и аппараты, их реализующие;
- сжигания композитных суспензионных горючих.

Эффективное функционирование системы в целом является первоочередной задачей, хотя образующие ее элементы в отдельные отрезки времени могут и не работать в наиболее экономичном или взаимосогласованном режиме. В общем балансе всех показателей системы их действие в заданном интервале времени может обеспечить выполнение требований к системе для всего периода ее работы.

Основополагающие принципы системного анализа [8, 9] адаптированы автором к моделированию системы формирования процессов интенсификации добычи углеводородного горючего, повышения эффективности технологии глубокой переработки нефти и нефтепродуктов, процессов получения и сжигания композитных горючих на основе углеводов.

Активация – итерационный метод решения проблемы формирования процессов и технологий

Принцип активации органически связан с методами системного анализа и может быть применен на любом уровне структурирования, расширяя возможности математических моделей и поиска оптимальных вариантов и структур [10,11].

Пусть имеется множество вариантов формирования процессов (технологий) S , которые определены комбинацией элементарных стадий или совокупностью параметров: $S = \{s_1, s_2, s_3, \dots, s_k\}$, где $s_k = \{\alpha_{ik}, \beta_k\}$ – k -й вариант, определенный множеством параметров α_{ik} и структурой β_k . Искомый вариант процесса должен удовлетворять заданному множеству ограничений

$$C^* = \{c_1^*, c_2^*, c_3^*, \dots, c_i^*\}. \quad (2)$$

Математической моделью уровня эффективности анализируемого процесса является нахождение максимума функционала эффективности

$$I(\{S^{opt}\}, C, K) \Rightarrow \text{extr} \{S^{opt}\} \subset S, \quad (3)$$

где K – множество, характеризующее состояние других элементов системы, не входящих в состав процесса, и воздействие внешних факторов, причем

$$C_i(\{S^{opt}\}, K) < C_i^*. \quad (4)$$

Рассмотрим i -й иерархический уровень процесса со структурой β_k , который описывается вектором входных параметров $\vec{X}_i = \{\bar{x}_1, \bar{x}_2, \bar{x}_3, \dots, \bar{x}_i\}$ и вектором выходных параметров $\vec{Y}_i = \{\bar{y}_1, \bar{y}_2, \bar{y}_3, \dots, \bar{y}_i\}$. Функционал эффективности (осуществимости) (2) процесса на данном уровне зависит от эффективности элементарных стадий

$$I_i(\vec{Y}_i - \vec{X}_i) = \text{extr} \left\{ \prod_{j=1}^m t_j f(\bar{y}_{j-1} - \bar{x}_j) + \sum_{j=1}^n t_j f(\bar{y}_{j-1} - \bar{x}_j) \right\}. \quad (5)$$

Здесь мультипликативный член соответствует m последовательным стадиям, аддитивный член – n параллельным, t_j – статистический вес j -й стадии в общем процессе.

Наличие конкретной информации по параметрам элементарных стадий $\{\bar{x}_j, \bar{y}_j\}$ позволяет выделить одну или несколько стадий, которые определяют весь процесс (технологию)

$$t_{j=k} \gg t_{j \neq k}. \quad (6)$$

Тогда с учетом (6), функционал эффективности (5) запишется в следующем виде:

$$I_i(\vec{Y}_i - \vec{X}_i) \approx t_{j=k} f(\bar{y}_{k-1} - \bar{x}_k). \quad (7)$$

Таким образом, достижение экстремума функционала эффективности при анализе i -го уровня связано с подбором активирующего фактора применительно к лимитирующей k -й стадии процесса, и в качестве активирующего фактора может быть использован управляемый параметр наибольшего влияния

$$|I_i(\vec{Y}_i - \vec{X}_i) - I_i(\vec{Y}_i^* - \vec{X}_i^*)| \approx |t_{ik} f(\bar{y}_{k-1} - \bar{x}_k + \bar{e})| \geq \Delta, \quad (8)$$

где \bar{e} – активирующий фактор, Δ – необходимый уровень эффективности, \vec{Y}_i – вектор выходных параметров на i -м уровне структурирования с учетом активации. Задача последующей комплексной оптимизации сводится к поиску оптимальной величины активирующего фактора.

Реализация принципа активации рабочего процесса (технологии) с целью оптимальной его организации и достижения максимума функционала эффективности на всех режимах работы предполагает выбор конкретного активирующего фактора.

Теоретический анализ методов и средств повышения эффективности добычи, переработки и использования энергоносителей

Детальное рассмотрение процессов и технологий, связанных с интенсификацией добычи, переработкой и использованием углеводородных энергоносителей, с точки зрения изложенного выше методологического подхода, позволяет выявить некоторые общие характерные особенности и предложить научно обоснованные методы и средства их совершенствования. В качестве главной (лимитирующей) особенности выделены следующие физико-химические процессы, протекающие на границах раздела фаз непосредственно в углеводородсодержащих энергоносителях на:

- поверхности контактирующих разнородных жидкостей;
- границах с твердыми включениями в композитных горючих или пористом теле пласта;
- рабочих поверхностях исполнительных органов технологических аппаратов.

Рассмотрим базисные компоненты системы формирования процессов и технологий повышения эффективности добычи, переработки и использования углеводородных энергоносителей.

1. Процессы и технологии интенсификации добычи углеводородного сырья в скважине. Технология интенсификации притоков нефти, газового конденсата и газа (в том числе метана угольных месторождений) посредством применения новых химических источников энергии [12–15] имеет ряд преимуществ и характерных особенностей по сравнению с традиционно применяемыми химическими и тепловыми воздействиями:

- используемые реагенты являются более энергоёмкими системами;
- в реакциях горения участвует несколько окислителей, основной из которых вода (балласт скважины), дополнительный – азотная кислота, образующаяся из солей. Разница плотностей реагентов на разных стадиях протекания процесса обуславливают в реакционной зоне появление поверхностей раздела и гетерофазных областей смешения;
- процессы энерговыделения и энергообмена протекают, главным образом, не в обсадной колонне, а в продуктивном пласте, т.е. имеет место контакт реагентов в пористом теле пласта;
- в состав рабочего тела, участвующего в процессе, входит смесь горячих газов и паров (продуктов реакции), из которых главная роль, как и в любой цепной химической реакции, принадлежит молекулярному водороду и радикалам – атомарному водороду и кислороду;
- действие продуктов горения на флюид и породу многофункционально, но в основном – химическое: это внутрипластовое превращение высокомолекулярных парафинов в газ и бензин (крекинг-пиролиз), горячая кислотнo-щелочная обработка приводит также к расширению пор, дополнительному трещинообразованию, снятию скин-эффекта, укреплению сыпучих пород и пр. На коллекторах с малой проницаемостью, особенно при интенсификации добычи метана из пластов угольных месторождений необходимо создание более высоких давлений, температур и увеличения количества выделяемого водорода и других активных, участвующих в процессе, реагентов.

Этапы выполнения работ в соответствии по интенсификации добычи углеводородного сырья в скважине схематично могут быть представлены как аппаратная реализация системы формирования процесса и технологии, рис. 1.

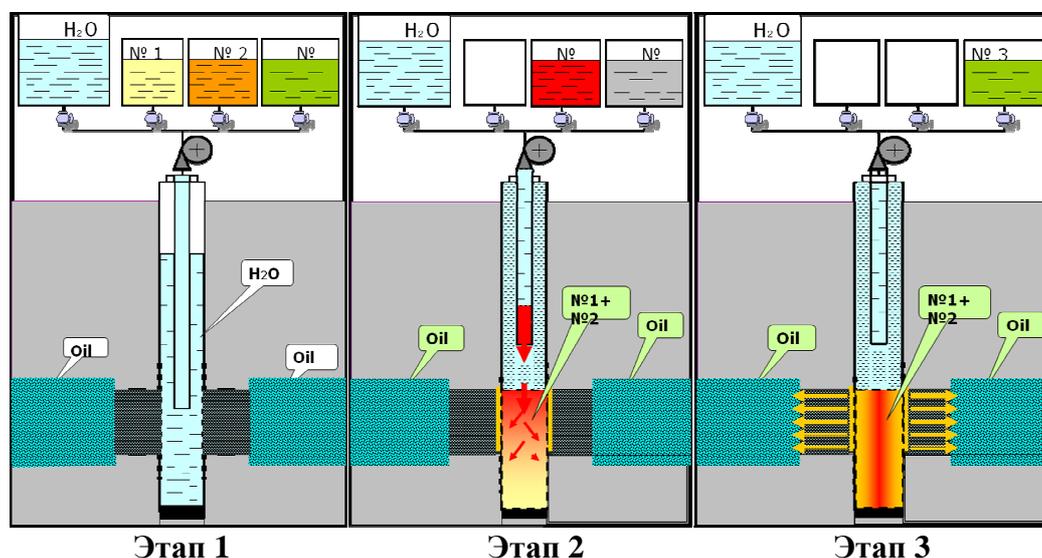


Рисунок 1 – Схема аппаратной реализации процесса интенсификации добычи углеводородного сырья в скважине: **Этап 1**– спуск насосно-компрессорных труб; **Этап 2** – 1. Закачка раствора №1 системы ГОС (водные суспензии порохов и нитрит – нитратных комплексных соединений карбамида с добавками полимерных нитрилсодержащих компонентов и стабилизаторов горения) - ГРС (борорганических соединений, порошковых материалов бора и алюминия в композиции со щелочными металлами, их гидридами или термитными смесями) плотностью 1,2–1,3 г/см³; 2. Подъем насосно-компрессорных труб на 30 м над уровнем пласта; 3. Закачка в буферной жидкости раствора № 2 системы ГОС - ГРС плотностью 1,4 – 1,6 г/см³; 4. Первая тепловая волна, предпламенное горение; **Этап 3** – 1. Задавливание водой; 2. Герметизация (в отдельных случаях) при помощи запорной аппаратуры; 3.Термобарохимический процесс; 4. Закачка раствора нейтрализации

Соответствующим подбором k -фазных гидрореагирующих составов для новых топливных систем и разработки способов доставки реагентов в зону реакции, происходящей при высоких давлениях, получен эффект снижения взрывоопасности, достигнута управляемость скоростью горения в зависимости от выбранного режима обработки скважины. Разработанные топлива – горюче-окислительные смеси (ГОС), а также продукты их реакции представляют собой экологически чистые системы. Их закачивают в призабойную зону продуктивного пласта, где под действием внутрипластовой температуры горючие компоненты в начале окисляются, а затем сгорают, выделяя химически активные газы и тепло, при этом в реакционной зоне формируется гетерофазная термодинамическая система. Ключевая роль в этих процессах принадлежит воде, находящейся в скважине. Основным рабочим телом процесса является молекулярный водород, обладающий чрезвычайно высокой проникающей способностью в породу пласта. Затем смесь газов (водорода, оксидов азота и углерода, паров кислот и пр.) воздействует на пласт. В отличие от существующих аналогов, изменениям подвергаются как порода (увеличивается её проницаемость), так и насыщающий её флюид. Все асфальто-смолопарафиновые отложения при контакте с водородом и радикалами – продуктами реакции меняют результирующее значение отношения S/N за счет увеличения содержания

легких бензиновых и газовых фракций. Также непосредственно в пласте растворяются остатки буровых растворов. В процессе создания и совершенствования технологии, на каждой ее лимитирующей стадии – расширения диапазона рабочего давления, увеличения количества выделяющегося атомарного и молекулярного водорода, повышения химической и каталитической активности реагентов, увеличения энергоемкости создаваемых систем, создании новых гидрореагирующих веществ или горюче-окислительных смесей с заданными свойствами, разрабатывались и применялись методы химической и механохимической активации.

2. Процессы и технологии гидрокавитационной обработки углеводородных энергоносителей. Гидрокавитационная обработка углеводородных энергоносителей позволяет модифицировать их свойства и получать широкий спектр композитных горючих посредством физико-химического воздействия на нефть и нефтепродукты [16–18]. Для реализации этой технологии применяется новый тип роторно-кавитационного диспергатора (РКД). Автором теоретически обоснованы и разработаны новые типы устройств, основанные на диспергировании органических энергоносителей с различными добавками и активаторами, обеспечивающие модификацию свойств нефти и нефтепродуктов в требуемом направлении [19]. Речь идет об управляемом синтезе, направленном на получение жидких материалов с необходимыми физико-химическими свойствами.

Обработка исходного продукта в РКД связана с изменением гидродинамических параметров течения посредством контакта с поверхностями рабочих органов, изменением профиля канала и создания в локальных зонах условий вскипания и кавитации. Фактически это означает, что в потоке создаются условия для возникновения и существования гетерофазных смесей и лимитирующей стадией в данном случае является создание посредством соответствующего профилирования канала необходимых гидродинамических и термодинамических условий в как можно большем объеме обрабатываемой жидкости. Экспериментально в рабочей среде РКД реализованы следующие гидродинамические и физико-химические эффекты: гидрогенизации и гидролиза, гомогенизации, акустического воздействия и сепарирования.

Для активации лимитирующей стадии процесса посредством увеличения размеров реакционно-активной области течения необходимо создание физической и математической моделей течения в РКД с дальнейшими рекомендациями по рациональной организации самого течения. На основании проведенных теоретических и численных исследований были сконструированы новые рабочие органы насоса-кавитатора, который имеет широкий спектр применения (рис. 2).

3. Процессы и технологии подготовки топлив и аппараты, их реализующие. Актуальность вовлечения в номенклатуру сжигаемых топлив широкого спектра веществ, биоотходов, угля, и пр. в настоящее время очевидна. Как правило, для подачи горючего в камеры сгорания используются центробежные, струйные комбинированные форсунки, отличительной особенностью которых является высокие требования к чистоте топлива. Использование суспензионных комбинированных топлив не допускает применения в устройствах для сжигания перечисленных типов форсунок, поскольку наличие дисперсной k -фазы в топливе приводит к быстрому засорению трубопроводов и калиброванных проходных отверстий. В этой связи особый интерес представляют торсионные гидродинамические форсунки [18]. Уникальная особенность данного типа форсунки состоит в возможности обеспечивать подачу в камеры сгорания теплогенера-

рующих установок суспензионные и эмульгированные горючие. В данном случае основной проблемой является недопущение образования конгломератов наполнителя, как вдоль топливоподающего тракта, так и непосредственно в камере сгорания. Как и в случае с РКД, образование конгломератов напрямую связано с параметрами потока, поэтому необходимо создавать физическую и математическую модели потока, выявлять зоны течения, неблагоприятные с точки зрения образования конгломератов и подбирать соответствующие активизирующие факторы. Параметры смесителя-форсунки определяются по результатам численного эксперимента (рис. 3) на модели осесимметричного течения в сложнополостных каналах [20, 21].



Рисунок 2 – Рабочие органы насоса

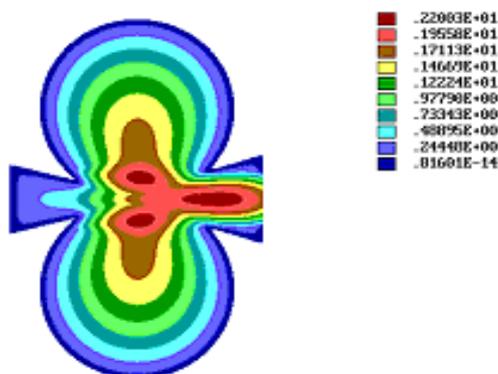


Рисунок 3 – Картина линий тока в смесителе-форсунке

На основании анализа модели форсунки разработана унифицированная методика расчета, что позволило создать и успешно применить в промышленности ряд смесителей-форсунок для различных дисперсных k -фаз в топливе. Численные эксперименты показали, что после диффузора форсунки реализуются термодинамические условия для эффекта коллапса пузырьков горючего, который разбивает на капли пленку горючей смеси. Возможно, что также имеет место распад молекулы воды на радикалы и ионы H^+ и OH^- , что активизирует протекание реакции гидролиза и гидрогенизации высокомолекулярных фракций органических энергоносителей. Однако количественной оценки этого эффекта пока нет. Тем не менее, установлено, что при высоких давлениях можно до-

биться активации эффекта центробежного распыления и усиления коллапса кавитационных пузырьков и локализованного выделения энергии, что подтверждается графиками следующих зависимостей, представленных на рис. 4–6.

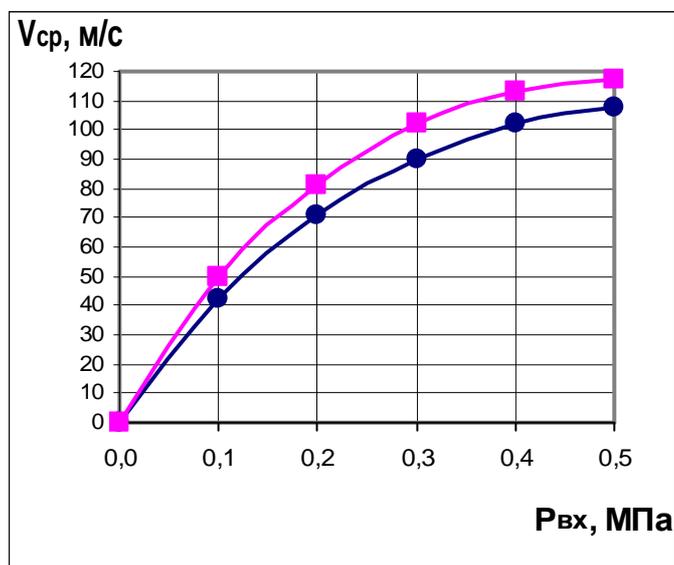


Рисунок 4 – Зависимость скорости течения газовой смеси в камере смешения торсионной форсунки от давления воздуха на входе при разных значениях диаметра тора вихревой камеры и постоянном диаметре сопла:

■ – $d_{соп.} = 4$ мм; $d_{тор.} = 30$ мм; ● – $d_{соп.} = 4$ мм; $d_{тор.} = 20$ мм

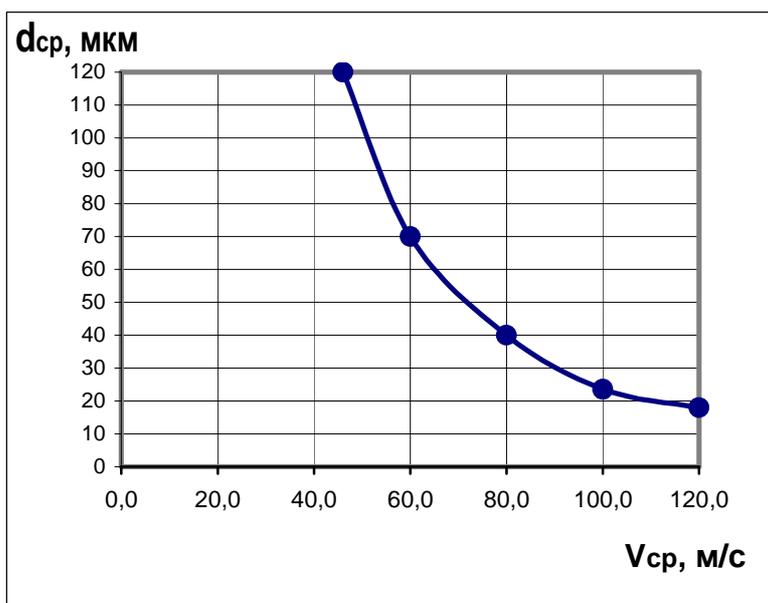


Рисунок 5 – Зависимость среднего диаметра капель в распыленной струе от средней скорости газовой смеси в камере смешения торсионной форсунки, при $d_{соп.} = 4$ мм; $d_{тор.} = 30$ мм

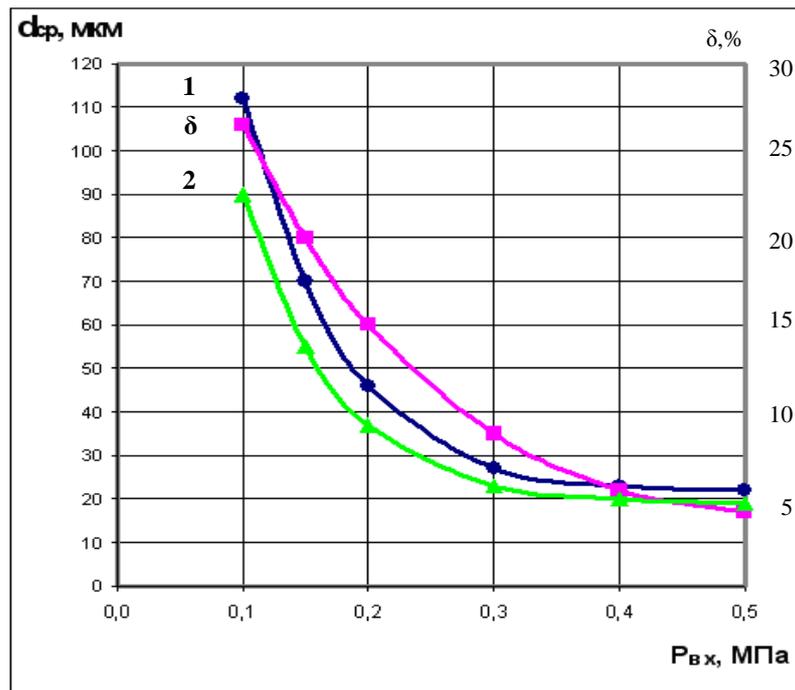


Рисунок 6 – Зависимости среднего диаметра капель распыленной струи торсионной форсунки ($d_{соп.} = 4$ мм, $d_{тор.} = 30$ мм), от давления газа на входе, полученных на основе численного расчета (1), натуральных экспериментов (2), и относительная ошибка (δ) полученных результатов

Теоретические результаты, полученные в [20, 21], позволили создать различные типоразмеры форсунок, которые нашли свое применение в различных отраслях машиностроения и энергетики, в создании новых видов топлива и их сжигании (рис. 7).



Рисунок 7 – Типы смесителей-форсунок

В настоящее время интенсивное развитие энергосберегающих технологий и вовлечение в энергетику широкого спектра разнообразных углеводородных топлив, замещающих импортруемый природный газ, является актуальной проблемой. Известная и предварительно апробированная технология обработки тяжелых нефтепродуктов и продуктов нефтепереработки с водой в устройствах типа эмульгатор и кавитатор способствует улучшению как процесса горения и теплообмена продуктов сгорания с теплообменными устройствами в современных котлоагрегатах и технологических установках, так и улучшению экологических показателей продуктов сгорания. При этом вода в виде добавок к углеводородному горючему может рассматриваться в качестве активатора.

Активирующий эффект наличия капель воды в композитном горючем проявляется в изменении механизма горения [19]. В результате проведенного анализа свойств мазута и мазута с добавками воды, прошедшего процедуру кавитационной обработки, получены данные, на основании которых проведен расчет равновесного состава продуктов сгорания [22–25]. Используемые программные продукты позволяют получить данные практически по всем теплофизическим характеристикам. В свою очередь, численные значения таких параметров могут быть представлены в виде функций процентного содержания воды в топливе и коэффициента избытка воздуха α , и этих данных достаточно для подтверждения увеличения изменения коэффициента теплоотдачи от продуктов сгорания к стенкам теплообменника. На рис. 8 приведена соответствующая зависимость.

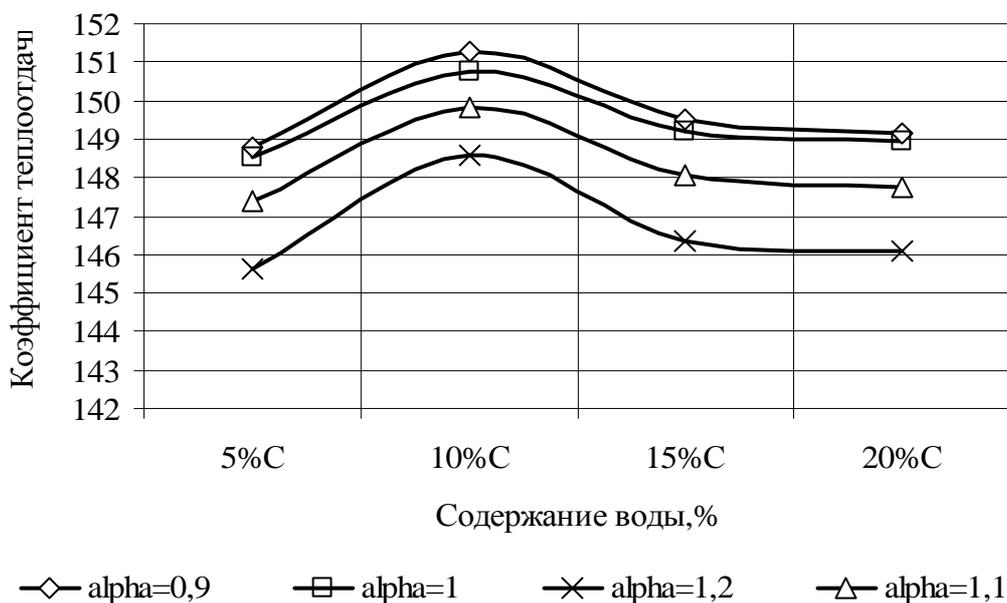


Рисунок 8 – Зависимость коэффициента теплопроводности от содержания воды

Из рисунка видно, что добавка воды может оказать влияние на коэффициент теплоотдачи, причем максимума влияния следует ожидать в области 10%–15% добавок воды. Максимальное значение равновесной температуры топлива сдвигается в сторону меньших значений коэффициента избытка воздуха и лежит в области $\alpha \sim 0,95$ для широкого диапазона процентного содержания воды. При найденных рациональных

значениях процентного состава композитных суспензионных горючих (КСГ) достигается максимальная эффективность процесса массообмена капли КСГ и горения. Реальный процесс горения существенно отличается от адиабатного. Поэтому выводы, сделанные на основании расчетов, имеют качественный характер.

4. Процессы и технологии сжигания композитных суспензионных горючих.

Объемы топлива, которые сжигаются в объектах производства и потребления тепловой энергии в промышленных энергоустановках, настолько велики, что экономически оправданы даже относительно небольшие значения повышения эффективности процесса сжигания. Ранее было предложено использование суспензий на основе жидких углеводородов (печное топливо, мазут) с добавлением угольной пыли [22–25] с целью снижения стоимости генерированной единицы тепловой энергии. Автор продолжил исследования особенностей предпламенных процессов при сжигании искусственных композитных жидких топлив (ИКЖТ) [26, 27].

На примере пылеугольно-мазутной смеси (ПУМС) были рассмотрены стадии процесса горения капли. Экспериментально установленным фактом является наличие двух основных стадий процесса горения капли ПУМС: испарение жидкой основы и образование конгломерата из частиц наполнителя и веществ-активаторов. Сформировавшийся к началу второй стадии конгломерат из частиц наполнителя по мере движения по тракту камеры сгорания (КС) выходит из высокотемпературной зоны, полностью не прореагировав с кислородом воздуха, тем самым снижая результирующую полноту сгорания топлива и повышая содержание вредных веществ в продуктах сгорания (ПС), в первую очередь, сажи. Таким образом, для реализации горения с высокой полнотой сгорания необходимо применить дополнительные мероприятия по активации рабочего процесса. Физические основы активационного подхода рассмотрены в [11]. Известно, что вещества-активаторы, например карбамид и/или соли с кислородсодержащими анионами, вводимые в ПУМС, приводят к интенсификации диспергирования конгломерата (к механическому разрушению конгломерата, локальному повышению температуры и концентрации окислителя с последующим сгоранием непрореагировавшей массы угля) [11]. Присутствие карбамида в зоне горения приводит, кроме описанных изменений механизма горения, к снижению эмиссии окислов азота в ПС [12]. Автором предложено в качестве модельных веществ-активаторов использовать следующие кислородсодержащие соли: NH_4NO_3 , NaNO_3 , NH_4ClO_4 и изучено влияние указанных добавок на особенности процесса горения. Сырьевой базой для выбранных веществ-активаторов являются накопившиеся в Украине излишние запасы боеприпасов, исчерпавших свой ресурс и требующих незамедлительной утилизации. Приготовление ПУМС с веществами-активаторами осуществлено на экспериментальной исследовательской установке, созданной в отделе нетрадиционных энерготехнологий Института проблем машиностроения им. А.Н. Подгорного НАН Украины под руководством автора (рис. 9).

Горение капли горючего есть сложный, многостадийный процесс физико-химического взаимодействия жидкой углеводородной основы горючего с кислородом воздуха. Предпламенные процессы и процессы воспламенения и горения капли горючего осложняются явлениями физико-химического воздействия воды, входящей в состав опытного образца.

Теоретические и численные результаты по организации процессов горения ИКЖТ были подтверждены огневыми испытаниями на очистных сооружениях г. Харькова совместно с Харьковским национальным университетом радиоэлектроники. Реша-

лась проблема утилизации биоила. Такую проблему необходимо решать комплексно – от создания искусственного композитного жидкого топлива (ИКЖТ) до его сжигания в котлах различного назначения [26, 27].

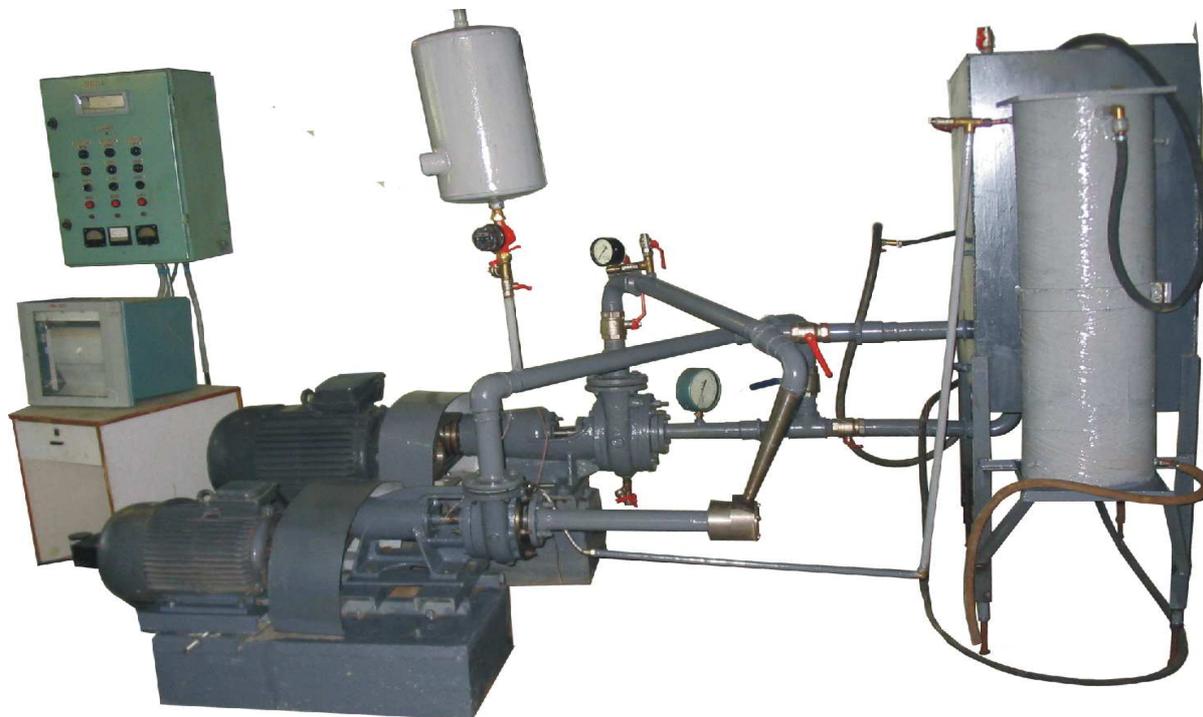


Рисунок 9 – Экспериментальная исследовательская установка

На испытаниях в качестве горелки использовалась смеситель-форсунка [18]. При сжигании альтернативного топлива (рис. 10) были определены некоторые его характеристики. Теплота сгорания альтернативного топлива оказалась равной 43930 кКал/кг, ГОСТ 21261. Массовая доля воды составила 10%, ГОСТ 2477, массовая часть серы 0,15 %, п. 9.4 ДСТУ, зольность 0,22%, ГОСТ 1461.

Попадая в зону горения, капли воды (размерами до 5 мкм) взрываются, в результате чего происходят дополнительное диспергирование и разбрызгивание углеводородной фракции топлива. При этом факел горения увеличивается в объеме на 11–12 % и более плотно заполняет топочную камеру. Часть тепла, которая принимается топкой, увеличивается на 7–10 %, степень сгорания углеводорода достигает 99,5 %, КПД котла можно увеличить на 3–4 %.

Проведенные испытания показали, что для создания и эффективного сжигания жидких топлив необходимы новые гидрокавитационные технологии. В качестве распыливающих устройств при сжигании необходимо применять форсунки-кавитаторы, для которых нет необходимости создания специальных условий, то есть подогрева. Они успешно работают и при минусовых температурах, что подтверждено экспериментально. Показано, что на достижении режимов развитой пузырьковой кавитации можно добиться не только улучшения качества распыла, но и существенного изменения химического состава сжигаемых топливных смесей.



Рисунок 10 – Сжигание ИКЖТ с помощью смесителя-форсунки

Выводы

Разработанная концепция развития процессов и технологий интенсификации добычи, переработки и использования углеводородных энергоносителей, основанная на принципах системного анализа, имеет главную цель – повышение эффективности технологических процессов и возможность осуществления разработки конкурентоспособных аппаратов и устройств для их практической реализации.

Предложенный автором методологический подход открывает новые направления совершенствования физико-химических процессов, а также способы их реализации.

Литература

1. Общая теория систем. – М.: Мир, 1966. – 187 с.
2. Мелентьев Л.А. Системные исследования в энергетике. Элементы теории, направления развития. – М.: Наука, 1983. – 456 с.
3. Честнат Г. Техника больших систем (средства системотехники). Перевод с англ. под ред. О.И. Авена. – М.: Энергия, 1969. – 656 с.
4. Блауберг И.В. Системный подход: предпосылки, проблемы, трудности. – М.: Наука, 1969. – 274 с.
5. Месарович М.Д. Теория многоуровневых иерархических систем. – М.: Наука, 1971. – 483 с.
6. Квейд Э. Анализ сложных систем. – М.: Сов. радио, 1969. – 518 с.
7. Попырин Л.С. Математическое моделирование и оптимизация теплоэнергетических установок. – М.: Энергия, 1978. – 416 с.

8. Шубенко-Шубин Л.А. Цели и основные принципы автоматизации турбин: Препринт/ Л.А. Шубенко-Шубин, А.А. Палагин – Харьков: Ин-т проблем машиностроения АН УССР, 1975. – 40 с.
9. Шубенко-Шубин Л.А. Системным анализ и автоматизация проектирования энергетических турбоустановок/ Л.А. Шубенко-Шубин, А.А. Палагин// Электрон. моделирование. – Киев, 1979. – Вып. 1. – С. 90–95.
10. Бастеев А.В. Принцип активации и его применение в процессах энергопреобразования// Проблемы машиностроения. – Харьков, 1993. – В 39. – С. 81–87.
11. Бастеев А.В. Активация водорода и водородсодержащих энергоносителей/ А.В. Бастеев, М.А. Оболенский, В.В. Соловей В.В. – Киев: Наук. думка, 1993. – 165 с.
12. Кузьмин Д.В. Исследование процессов горения металлизированных горючих/ Д.В. Кузьмин, К.Г. Щербина, О.В. Кравченко// Проблемы машиностроения. 2001. – IV, № 3–4. – С. 124–126.
13. Щербина К.Г. Система $Li-NA_2O_2$ как инициатор горения в воде энергоаккумулирующих веществ/ К.Г. Щербина, О.В. Кравченко// Проблемы машиностроения. 2004. – VII, № 3. – С. 82–84.
14. Щербина К.Г. Обработка нефтеносных пород "горячим" водородом/ К.Г. Щербина, О.В. Кравченко, Д.В. Кузьмин, В.Б. Пода// Интегрированные технологии и энергосбережение. – Харьков, 2004. – №4. – С. 14–18.
15. Кравченко О.В. Получение водорода в процессах гидрокавитационной обработки воды и водосодержащих суспензий и эмульсий // Проблемы машиностроения. 2007. – X, № 2. – С. 103–110.
16. Пат. 79617 Украина, МПК⁷ C10 G15/00. Способ кавитационной гидрогенизации и гидролиза углеводов и устройство для его осуществления /И.И. Мирошниченко, Ю.М. Мацевитый, И.И. Мирошниченко, О.В. Кравченко, А.А. Тарелин (Украина); Институт проблем машиностроения им. А.Н. Подгорного Национальной академии наук Украины (Украина). – № А 2005 00188; Заяв. 10.01.2005; Опубл. 10.07.07. – 6 с.
17. Заявка № 2005 10753 Украина, МПК⁷ B01F 7/00, C 10 G 7/06. Спосіб переробки мазуту та роторно-кавітаційний диспергатор для його здійснення /І.І. Мирошниченко, І.Г. Суворова, Ю.М. Мацевитий, О.В. Кравченко, А.О. Тарелін, І.І. Мирошниченко (Україна). – Заявл. 14.11.05.
18. Пат. на корисну модель № 18922, Україна, МПК⁷ B01F 3/08, B 63 B59/00/ "Змішувач-форсунка" /І.Г. Суворова, О.В. Кравченко (Україна); Інститут проблем машинобудування ім. А. М. Підгорного Національної академії наук України. – № U 2006 06857; Заяв. 19.06.2006; Опубл. 15.11.06, Бюл. № 11. – 4 с.
19. Кравченко О.В. Новые гидрокавитационные технологии в процессах эффективного получения и использования углеводородсодержащих энергоносителей // Вестн. НТУ «ХПИ». – Харьков, 2007. – №2. – С.171–178.
20. Суворова И.Г. Математическое моделирование потока жидкости методом R-функций /И.Г. Суворова, О.В. Кравченко// Системні технології. – Дніпропетровськ, 2006. – Вип. 4 (45). – С. 57–69.
21. Кравченко О.В. Математическое и компьютерное моделирование кавитационных потоков в сложнополостных каналах/ Кравченко О.В., Суворова И.Г., Смирнов Я.В., Холобцев С.С.// Проблемы машиностроения. 2007. – X, № 3. – С. 22–26.

22. Бастеев А.В. Разработка технологии и особенности рабочего процесса сжигания суспензионных горючих / А.В. Бастеев, Мусалам Алаа, В.В. Форфутдинов// Авиаци.-косм. техника и технология. – Харьков, 2001. – Вып. 26. – С. 39–41.
23. Бастеев А.В. Экспериментальное исследование процесса горения суспензионных горючих на основе ПТ и мазута/А.В. Бастеев, Мусалам Алаа, В.В. Форфутдинов, Р.А. Кучмамбетов// Материалы V Междунар. науч.-техн. конф. «АВИА-2003», 23–25 апр. 2003, Киев. – С. 41.13–41.15.
24. Бастеев А.В. Экспериментальное моделирование предпламенных процессов суспензионных горючих на основе печного топлива и мазута, исследование процесса горения суспензионных горючих на основе ПТ и мазута/А.В. Бастеев, Мусалам Алаа, В.В. Форфутдинов, Р.А. Кучмамбетов//Материалы V Междунар. науч.-техн. конф. «АВИА-2003», – Киев, 23–25 апр. 2003. – С. 41.17–41.20.
25. Бастеев А.В. Свойства суспензионных горючих и их продуктов сгорания на основе печного топлива и мазута в высокотемпературной среде/ А.В. Бастеев, Мусалам Алаа, В.В. Форфутдинов, П.В. Карножицкий, Р.А. Кучмамбетов// Вестн. двигателестроения. – Харьков, 2003. – № 1. – С. 118–120.
26. Кравченко О.В. Нетрадиционные методы получения и сжигания жидких топлив/ О.В. Кравченко, И.Г. Суворова, С.С. Холобцев//Вестн. Междунар. славянс. унта./Сер. Технические науки. – Харьков, 2007. – X, №1. – С. 14–19.
27. Кравченко О.В. Нетрадиционные энерготехнологии эффективного получения и использования искусственных композитных жидких топлив/О.В. Кравченко, И.Г. Суворова, Я.В. Смирнов, С.С. Холобцев//Авиаци.-косм. техника и технология. – Харьков, 2006. – № 10(36). – С. 91–97.

Bibliography (transliterated)

1. Obschaya teoriya sistem. - M.: Mir, 1966. -187 p.
2. Melentev L.A. Sistemnyie issledovaniya v energetike. Elementyi teorii, napravleniya razvitiya. - M.: Nauka, 1983. - 456 p.
3. Chestnat G. Tehnika bolshih sistem (sredstva sistemotekhniki). Perevod s angl. pod red. O.I. Avena.- M.: Energiya, 1969. - 656 p.
4. Blauberg I.V. Sistemnyiy podhod: predposylki, problemyi, trudnosti. - M.: Nauka, 1969. - 274 p.
5. Mesarovich M.D. Teoriya mnogourovnevnyih ierarhicheskikh sistem. - M.: Nauka, 1971. - 483 p.
6. Kveyd E. Analiz slozhnyih sistem. - M.: Sov. radio, 1969. - 518 p.
7. Popyirin L.S. Matematicheskoe modelirovanie i optimizatsiya teploenergeticheskikh ustanovok. - M.: Energiya, 1978. - 416 p.
8. Shubenko-Shubin L.A. Tseli i osnovnyie printsipyi avtomatizatsii turbin: Preprint L.A. Shubenko-Shubin, A.A. Palagin - Harkov: In-t problem mashino-stroeniya AN USSR, 1975. - 40 p.
9. Shubenko-Shubin L.A. Sistemnyim analiz i avtomatizatsiya proektirovaniya energeticheskikh turbostanovok L.A. Shubenko-Shubin, A.A. Palagin Elektron. modelirovanie. - Kiev, 1979. - Vyip. 1. - p. 90-95.
10. Basteev A.V. Printsip aktivatsii i ego primeneniye v protsessah energopreobrazovaniya Problemyi mashinostroeniya. - Harkov, 1993. - V 39. -p. 81-87.
11. Basteev A.V. Aktivatsiya vodoroda i vodorodsoderzhaschih energonositeley A.V. Basteev, M.A. Obolenskiy, V.V. Solovey V.V. - Kiev: Nauk. dumka, 1993. -

- 165 p.
12. Kuzmin D.V. Issledovanie protsessov goreniya metallizirovannykh goryuchih D.V. Kuzmin, K.G. Scherbina, O.V. Kravchenko Problemy mashinostroeniya. 2001. - IV, # 3-4. - p. 124-126.
13. Scherbina K.G. Sistema LI-NA O kak initsiator goreniya v vode energoak-kumuliruyuschih veschestv K.G. Scherbina, O.V. Kravchenko Problemy mashinostroeniya. 2004. - VII, # 3. - p. 82-84.
14. Scherbina K.G. Obrabotka neftenosnykh porod "goryachim" vodorodom K.G. Scherbina, O.V. Kravchenko, D.V. Kuzmin, V.B. Poda Integrirovannyye tehnologii i energosberezhenie. - Harkov, 2004. - #4. - p. 14-18.
15. Kravchenko O.V. Poluchenie vodoroda v protsessah gidrokavitatsionnoy obra-botki vody i vodosoderzhaschih suspenziy i emulsiy Problemy mashinostroeniya. 2007. - X, # 2.- p. 103-110.
16. Pat. 79617 Ukraina, MPK S10 G15/00. Sposob kavitatsionnoy gidrogenizatsii i gidroliza uglevodorodov i ustroystvo dlya ego osuschestvleniya I.I. Miroshnichenko, Yu.M. Matsevityiy, I.I. Miroshnichenko, O.V. Kravchenko, A.A. Tarelin (Ukraina); Institut problem mashinostroeniya im. A.N. Podgornogo Natsionalnoy akademii nauk Ukrainyi (Ukraina). - # A 2005 00188; Zayav. 10.01.2005; Opubl. 10.07.07. - 6 p.
17. Zayavka # 2005 10753 Ukrayina, MPK V01F 7/00, S 10 G 7/06. Sposib pererobki mazutu ta rotorno-kavitatsiyniy dispergator dlya yogo zdiysnennya I.I. Miroshnichenko, I.G. Suvorova, Yu.M. Matsevityiy, O.V. Kravchenko, A.O. Tarelin, I.I. Miroshnichenko (Ukrayina). - Zayavl. 14.11.05.
18. Pat. na korisnu model # 18922, Ukrayina, MPK V01F 3/08, V 63 V59/00/ "ZmIshuvach-forsunka" I.G. Suvorova, O.V. Kravchenko (Ukrayina); Institut problem ma-shinobuduvannya Im. A. M. Pidgornogo Natsionalnoy akademiyi nauk Ukrayini. - # U 2006 06857; Zayav. 19.06.2006; Opubl. 15.11.06, Byul. # 11. - 4 p.
19. Kravchenko O.V. Novyye gidrokavitatsionnyye tehnologii v protsessah efek-tivnogo polucheniya i ispolzovaniya uglevodorodsoderzhaschih energonositeley Vestn. NTU «HPI». – Harkov, 2007. – #2. – p.171–178.
20. Suvorova I.G. Matematicheskoe modelirovanie potoka zhidkosti metodom R-funktsiy I.G. Suvorova, O.V. Kravchenko Sistemni tehnologiyi. - Dnipropetrovsk, 2006. - Vip. 4 (45). - p. 57-69.
21. Kravchenko O.V. Matematicheskoe i kompyuternoe modelirovanie kavitatsi-onnykh potokov v slozhnopolostnykh kanalah Kravchenko O.V., Suvorova I.G., Smirnov Ya.V., Holobtsev S.S. Problemy mashinostroeniya. 2007. - X, # 3. - p. 22-26.
22. Basteev A.V. Razrabotka tehnologii i osobennosti rabocheho protsessa szhiganiya suspenzionnykh goryuchih A.V. Basteev, Musalam Alaa, V.V. Forfutdinov Aviats.-kosm. tehnika i tehnologiya. - Harkov, 2001. - Vyip. 26. - p. 39-41.
23. Basteev A.V. Eksperimentalnoe issledovanie protsessa goreniya suspenzi-onnykh goryuchih na osnove PT i mazuta A.V. Basteev, Musalam Alaa, V.V. Forfutdinov, R.A. Kuchmambetov Materialyi V Mezhdunar. nauch.-tehn. konf. «AVIA-2003», 23-25 apr. 2003, Kiev. - p. 41.13-41.15.
24. Basteev A.V. Eksperimentalnoe modelirovanie predplamennykh protsessov suspenzionnykh goryuchih na osnove pechnogo topliva i mazuta, issledovanie protsessa goreniya suspenzionnykh goryuchih na osnove PT i mazuta A.V. Basteev, Musalam Alaa, V.V. Forfutdinov, R.A. Kuchmambetov Materialyi V Mezhdunar. nauch.-tehn. konf. «AVIA-2003», - Kiev, 23-25 apr. 2003. - p. 41.17-41.20.

25. Basteev A.V. Svoystva suspenzionnyih goryuchih i ih produktov sgoraniya na osnove pechnogo topliva i mazuta v vyisokotemperaturnoy srede A.V. Basteev, Musalam Alaa, V.V. Forfutdinov, P.V. Karnozhitskiy, R.A. Kuchmambetov Vestn. dvigatelestroeniya. - Harkov, 2003. - # 1. - p. 118-120.

26. Kravchenko O.V. Netraditsitnyie metodyi polucheniya i szhiganiya zhidkih topliv O.V. Kravchenko, I.G. Suvorova, S.S. Holobtsev Vestn. Mezhdunar. slavyans. un-ta. Ser. Tehnicheskie nauki. - Harkov, 2007. - X, #1. - p. 14-19.

27. Kravchenko O.V. Netraditsionnyie energotehnologii effektivnogo polucheniya i ispolzovaniya iskusstvennyih kompozitnyih zhidkih topliv O.V. Kravchenko, I.G. Suvorova, Ya.V. Smirnov, S.S. Holobtsev Aviats.-kosm. tehnika i tehnologiya. - Harkov, 2006. - # 10(36). - p. 91-97.

УДК 622.276.6:661.96:532.528

Кравченко О.В.

**УЗАГАЛЬНЕНА МОДЕЛЬ СИСТЕМИ ФОРМУВАННЯ ПРОЦЕСІВ
І ТЕХНОЛОГІЙ ПІДВИЩЕННЯ ЕФЕКТИВНОСТІ ВИДОБУВАННЯ,
ПЕРЕРОБКИ ТА ВИКОРИСТАННЯ ВУГЛЕВОДНЕВИХ ЕНЕРГОНОСІЇВ**

На основі концепцій великих систем розроблено узагальнену модель системи формування процесів і технологій підвищення ефективності видобування, переробки та використання вуглеводневих енергоносіїв. Базисними компонентами узагальненої моделі є процеси інтенсифікації видобування, технології переробки, технології використання вуглеводневих енергоносіїв. Узагальнена модель системи формування процесів і технологій енергоперетворення дозволила провести теоретичний аналіз способів підвищення ефективності технологічних процесів інтенсифікації видобування, переробки та використання вуглеводневих енергоносіїв, а також здійснити розробку апаратів і пристроїв для їх практичної реалізації.

Манойло Ю.О., Моисеев В.Ф.

ДОСЛІДЖЕННЯ ЕФЕКТИВНОСТІ РОБОТИ ДИСМЕМБРАТОРА ПРИ ВИРОБНИЦТВІ ПОРОШКОПОДІБНИХ СУМІШЕЙ

Сьогодні існує велика кількість підходів до питання організації методики експериментальних досліджень, як у галузі здрібнення сировинних матеріалів, так і в цілому у хімічній технології.

Результат роботи машин для здрібнення матеріалів визначається технологічною ефективністю та енергоємністю процесу переробки сировинного матеріалу. Дослідження ефективності процесу здрібнення проводилося у декілька етапів: розробка окремих методик експериментальних досліджень; виготовлення лабораторної установки по дослідженню здрібнення сировинних матеріалів для виготовлення порошкоподібних сумішей на прикладі сухої будівельної шпатлівки; підготовка лабораторного обладнання та контрольно-вимірювальної апаратури. Проведення досліджень та аналіз результатів.

Мета проведення досліджень – встановлення закономірностей процесу здрібнення матеріалів при змінах режимів роботи машини та сировинних чинників на властивості кінцевого продукту.

1. Виявлення факторів, які впливають на ефективність роботи дисмембратора

Блок-схема, яка запропонована до розгляду на рисунку 1 відображає класифікацію найвагоміших факторів, при зміні яких можна істотно трансформувати ефективність роботи дослідного дисмембратора.



Рисунок 1 – Фактори, що впливають на ефективність процесу здрібнення

2. Опис дослідної установки та лабораторного обладнання

Для встановлення закономірностей процесу здрібнення матеріалів для виробництва порошкоподібних сумішей на прикладі будівельної шпатлівки на машині дисмембранного типу, спроектовано та виготовлено дисмембратор, здрібнення у якому відбувається комбінованим способом (вільним та скрутним ударом) [1, 2, 3, 4]. Трьохвимірну модель дисмембратора представлено на рисунку 2.

При розробці машини були враховані наступні вимоги:

1. Машина має відповідати вимогам безпеки функціонування.
2. Процес здрібнення у дисмембраторі повинен бути керованим у широких діапазонах.
3. Машина має бути компактною. На процес здрібнення, що реалізується у дисмембраторі повинно витратитися менше енергії, ніж у відомих аналогів.
4. Передбачена можливість розбирання та збирання машини у виробничих умовах.
5. Можливість проведення замірів та контролю вхідних та вихідних параметрів за допомогою простих та надійних пристроїв.
6. Експлуатація машини повинна бути стійкою та не залежати в якому саме режимі відбувається процес здрібнення.

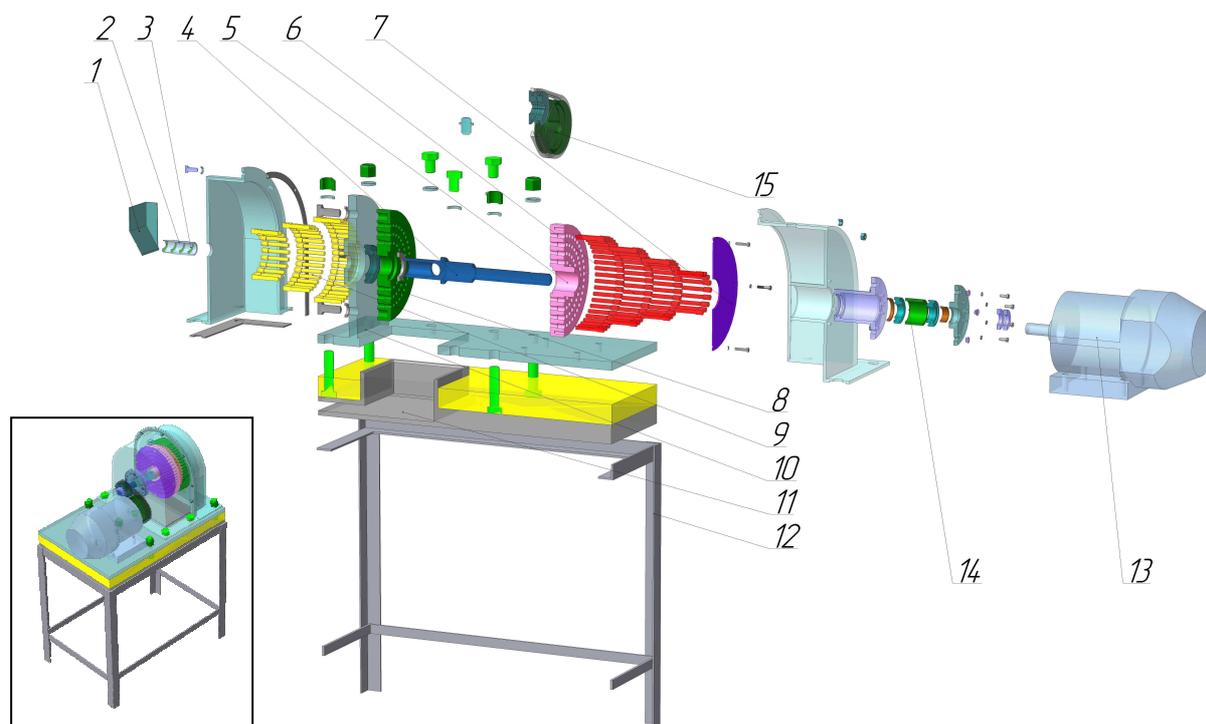


Рисунок 2 – Тривимірна модель лабораторного дисмембратора

Основні елементи з яких складається дисмембратор наступні: бункер вихідної сировини 1, живильний пристрій 2 та 3, привідний вал 4, диск ротора 5, біти ротора 6, упор ротора 7, диск статора 8, біти статора 9, рама 10, опорна плита 11, станина 12, електродвигун 13, підшипниковий вузол 14, ремінна передача 15. Робочими органами дисмембратора, які забезпечують процес здрібнення є біти ротора 6 та біти статора 8,

які закріплено у відповідних дисках по концентричним окружностям, таким чином, що ряди біт ротора та статора взаємо-чергуються, причому, крайніми рядами є біти ротора. Диск ротора 5, знаряджений бітами, закріплений шпонковим з'єднанням на привідному валу із Т-подібним отвором 4. Біти ротора 6 закріплено у відповідному диску посадкою із натягом та додатково фіксовані упором 7.

Привідний вал машини спирається на підшипниковий вузол 14 та підшипник, що центрує, закріплений у головній частині привідного валу 4 на тильній частині диска статора 8. Завдяки такому розташуванню підшипників у дисмембраторі виконується вимога безпечної експлуатації машині при різних режимах її роботи. Диск статора, споряджений бітами закріплено на рамі 10. Оберткові рухи створює електромотор 13 та засобами ремінної передачі 15 передаються на привідний вал 4. Вся конструкція базується на опорній плиті 11, яка має прорублені отвори для забору помелу. Опорна плита 11 встановлена на станіну 12.

Машина працює наступним чином. Частки вихідної сировини знаходяться у бункеру 1, який спроектовано таким чином, щоб кут його схилу сприяв найшвидшому просуванню часток до його нижньої границі. При встановленні значної частоти обертання (більше ніж 600 хв^{-1}) привідного валу, разом із ним починає обертатися стінка пристрою системи живлення машини сировиною 2 та диск ротора, споряджений бітами. Внаслідок оберткових рухів, що утворилися, починається процес пересування сировини із бункеру 1 до внутрішнього об'єму дисмембратора. При попаданні часток сировини до внутрішньої камери вони піддаються багатократним ударам із сторони біт ротору 5 та внаслідок цих зіткнень набувають такої ж швидкості як і біти 5. Одночасно із цим, на частки, що утворилися після первісного здрібнення першим рядом біт ротору, починають діяти відцентрові та аеродинамічні сили, які віддаляють їх від осі привідного валу. За першим рядом біт ротора, конструкцією передбачено нерухомий ряд біт статора, з яким і зіштовхуються частки, які утворилися раніше та додатково здрібнюються, зменшуючи власну швидкість. Загалом в дисмембраторі на якому проводяться дослідження є 4 ряди біт ротора та 3 ряди біт статора. Аналогічні явища по здрібненню відбуваються і на них. По проходженню всіх рядів біт помел, що утворився, осідає у опорній плиті 11.

У таблиці 1 наведені технічні характеристики дослідного дисмембратора.

Таблиця 1 – Технічні характеристики дисмембратора

Показники	Значення
Потужність приводу, кВт	1,5
Частота обертів ротора, хв^{-1}	1000÷3000
Діаметр ротора, мм	230
Вільна довжина (виліт) біт у робочому об'ємі машини, мм	30
Діаметр біт, мм	8
Кількість біт у роторі, од	124
Кількість біт у статорі, од	92
Габарити, мм	432×688×1005
Маса, кг	186

На рисунку 3 зображено принципову електричну схему дослідної установки та залежність енерговитрат при змінах частоти обертів ротора.

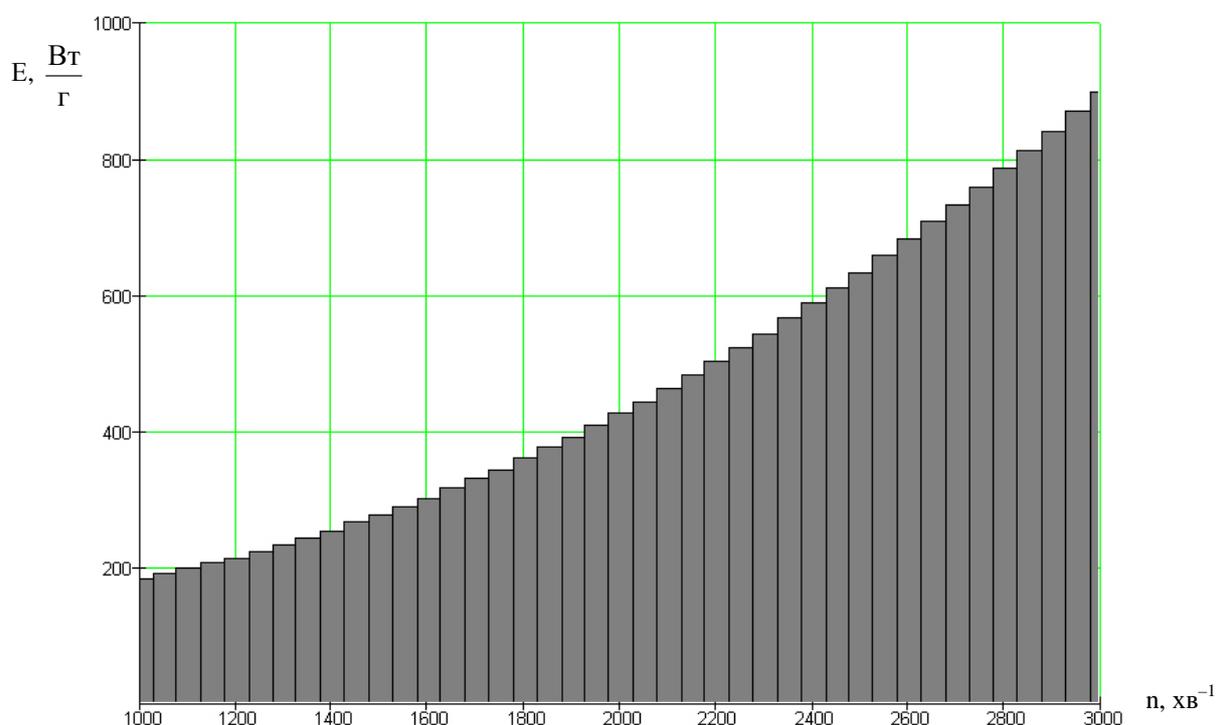
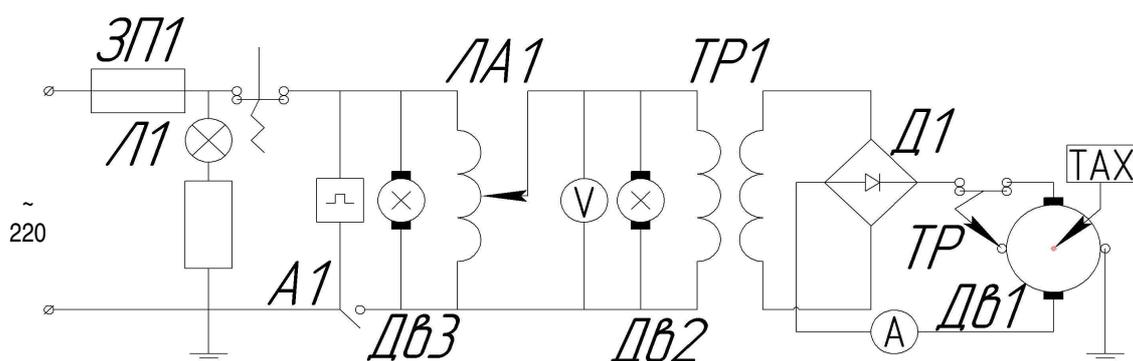


Рисунок 3 – Принципова електрична схема дослідної установки та залежність енерговитрат від навантаження

На вхід електричної схеми подається перемінний струм напругою 220 В. Дана напруга подається на сигнальну лампу ввімкнення установки Л1 через запобіжник ЗП1, через автомат екстреного вимкнення А1. Далі через регулятор ЛАТР – ЛА1 на понижуючий трансформатор ТР1.

На вході ТР1 встановлено вольтметр V, для контролю за напругою, що подається. Коефіцієнт трансформації ТР1 – 1:10.

Вихід трансформатора ТР1 навантажено на випрямляючий мостик, що дозволяє заживити двигун постійного струму Дв1. На валу двигуна встановлено тахометр із градировкою $\times 2$ (через ремінну передачу, з передаточним числом $u = 2$).

Для забезпечення умов безпечності та надійності функціонування машини у електричній схемі передбачено два вентилятора Дв2 – для обдуву трансформатора ТР1 та Дв3 – для обдуву двигуна Дв1.

Крім цього, двигун дисмембратора Дв1 заряджений датчиком температури корпусу, що дозволяє запобігти перегріву та виходу його із ладу.

Зразки, які піддаються здрібненню, являють собою частки кубічної форми шару шпатлівки, яка висохла, заданими геометричними параметрами: у межах дослідних груп відхилення у довжині кубічної грані не перевищує 5 %. Вологість зразків – 7,5 %_{мас.}

3 Дослідження функціональних особливостей живильного пристрою

Мета – експериментальне встановлення оптимального розміру часток, які проходять через живильний пристрій та визначення частоти обертання валу дисмембратора оптимальної за продуктивністю машини.

При проведенні експериментів по встановленню функціональних особливостей системи живлення дисмембратора замірювали масу часток m_N , які в результаті роботи машини опинилися у внутрішньому об'ємі та час t_N за який пройшло їх переміщення із бункеру.

Для встановлення експериментальних залежностей, які характеризують функціональність живильного пристрою дисмембратора доцільно спочатку визначити його продуктивність.

Розрахунки продуктивності живильного пристрою проводимо за наступною формулою:

$$P_N = \frac{m_N}{t_N}. \quad (1)$$

Усереднення отриманих за (1) значень проводимо наступним чином: значення середньої продуктивності для кожного із трьох паралельних експериментів, визначаємо, як середньоарифметичне:

$$\bar{P} = \frac{P_N + P_{N+1} + P_{N+2}}{3}, \quad (2)$$

де P_N , P_{N+1} та P_{N+2} – значення продуктивності паралельних дослідів.

4. Проведення серії експериментів по здрібненню

Мета – експериментальне встановлення оптимального режиму роботи дисмембратора з огляду на якість отриманого у результаті помелу (гранулометричного складу готового продукту).

Провели дослідження по здрібненню часток означених груп (окремо для кожної групи) при частотах обертання ротора машини: $n \in [1\ 000; 3\ 000] \text{ хв}^{-1}$ із кроком 500 хв^{-1} .

У результаті гранулометричного аналізу отримано значення мас, що розподілилися між інтервалами.

Ширину (breadth) n -ного інтервалу можна визначити за формулою:

$$Br_N = b_{\text{MAX}} - b_{\text{MIN}}, \quad (3)$$

де b_{MAX} – більша межа (boundary) у інтервалі, м; b_{MIN} – менша межа у інтервалі, м.

Значення середини інтервалу (middle), визначаємо за формулою:

$$M_N = \frac{b_{MAX} + b_{MIN}}{2} \quad (4)$$

Характеристики інтервалів, що використовуються для подальших розрахунків приведено у таблиці 2. Оскільки логарифмуванню неможна піддавати розмірні величини у таблиці 2 у колонці $\ln(M_N)$ наведені натуральні логарифми не середин інтервалів, а чисельних значень середин інтервалів.

Таблиця 2 – Характеристики інтервалів

Номер інтервалу	Межі, 10^{-6} м	Ширина V_{rN} , 10^{-6} м	Середина M_N , 10^{-6} м	Логарифм значення середини інтервалу $\ln(M_N)$
1	8÷20	12	14	- 11,278
2	20÷30	10	25	- 10,617
3	30÷60	30	45	- 10,068
4	60÷80	20	70	- 9,577
5	80÷115	35	97,5	- 9,252
6	115÷300	185	207,5	- 8,591
7	300÷450	150	375	- 7,909
8	450÷630	180	540	- 7,538
9	630÷850	220	740	- 7,222
10	850÷1 000	150	925	- 6,989

Як видно із таблиці 2 інтервали на рівнозначні за власною шириною. Даний факт використаний при аналізі даних отриманих при проведенні гранулометрії змісту пакетів із помелом.

Дисперсія (variance), як міра розсіву значень розміру часток відносно середнього значення може бути визначена, виходячи із:

$$Var = \frac{\sum_{k=1}^{10} M_k \cdot \left[\frac{\sum_{k=1}^{10} [\ln(M_k) \cdot M_k]}{\sum_{k=1}^{10} M_k} - \ln(M_k) \right]^2}{\sum_{k=1}^{10} M_k} \quad (5)$$

Питома вага фракцій визначається за формулою:

$$D_N = \frac{m_N}{\sum m_N} \cdot 100 \% , \quad (6)$$

де m_N – маса n-ної фракції, кг; $\sum m_N$ – маса змісту пакета, кг.

Середній розмір (average size) часток помелу після здрібнення можна визначити за формулою, м:

$$AvS = \frac{D_N \cdot M_N}{100 \%}. \quad (7)$$

Ступінь здрібнення визначаємо за формулою:

$$\lambda = \frac{d_{I+III}}{AvS}, \quad (8)$$

де d_{I+III} – розмір сировинної частки. $d_{II} = 0,001; 0,002$ або $0,005$ м.

Виходячи із нерівності інтервалів є необхідність привести масу фракції до ширини інтервалу:

$$m'_N = \frac{m_N}{Br_N}. \quad (9)$$

За аналогією, питома вага фракції, що приведена до ширини інтервалу – щільність ймовірності, визначається, як:

$$E_N = \frac{m'_N}{\sum m'_N}, \quad (10)$$

де $\sum m'_N$ – сума приведених до ширини інтервалу мас фракцій.

Час, за який проходить здрібнення сировини у дисмембраторі визначаємо виходячи із продуктивності машини P_N на відповідному режимі її роботи:

$$t = \frac{\sum m_N}{P_N}. \quad (11)$$

Робота, яка витрачається на здрібнення, визначається за формулою:

$$A_B = \frac{U_N^2}{R} \cdot t, \quad (12)$$

де U_N – напруга на вторинній обмотці трансформатора ТР1, яка залежить від режиму роботи машини; R – опір обмотки двигуна. $R = 0,5$ Ом.

Число часток вихідної сировини визначаємо за формулою із використанням функції округлення отриманого значення до найближчого цілого:

$$N_B = \left[\frac{\sum m_N}{m_{I+III}} \right], \quad (13)$$

де $m_{I \rightarrow III}$ – маса вихідної частки.

Кількість часток у пакеті визначаємо за формулою із використанням вищепи-
саної функції:

$$N_K = \left[\sum \frac{m_N}{\rho \cdot M_N^3} \right], \quad (14)$$

де ρ – дійсна щільність гіпсо-полімерної шпатлівки.

Об'єм часток вихідної сировини визначаємо за формулою:

$$V_B = N_B \cdot d_{I \rightarrow III}. \quad (15)$$

Площу часток продукту помелу:

$$S_K = N_K \cdot \sum N_{ГР} \cdot M_N^2, \quad (16)$$

де $N_{ГР}$ – кількість граней у заново-створеної частки.

Дослідники П.М. Сіденко [5] та С.В. Мельников [6] при розгляданні питань утворення нової поверхні робили допущення, що у результаті процесу здрібнення частки кубічної форми, утворюються також частки кубічної форми. Таким чином, Приймаємо $N_{ГР} = 6$ (число поверхонь для кубу). Проте, на відміну від припущень дослідників [5,6] формула (16) дозволить розглядати продукт помелу, не як набір однакових кубічних часток, а як суміш різних за розміром та подібних за геометрією кубів.

Корисну роботу по здрібненню часток у машині можна знайти, як:

$$A_K = \frac{\sigma^2}{2 \cdot E} \cdot V_B + \alpha \cdot S_K, \quad (17)$$

σ – межа міцності матеріалу гіпсо-полімерної шпатлівки при стисканні, $\sigma = 3,36 \times 10^6$ Па; E – модуль пружності матеріалу шпатлівки $3\,000 \times 10^6$ Па; α – характеристика матеріалу по утворенню поверхні виміряна за методом Брунауера-Еммета-Теллера (БЕТ)

[7]. $\alpha = 9 \frac{Дж}{м^2}$.

Коефіцієнт корисної машини на даному режимі:

$$\eta = \frac{A_K}{A_B} \cdot 100 \% . \quad (18)$$

Середнє значення питомої ваги фракцій, що приведені до ширини інтервалів (щільності ймовірності):

$$\bar{E} = \frac{E_N + E_{N+1} + E_{N+2}}{3}, \quad (19)$$

де N, N+1 та N+2 у індексах відповідних значень – номера пакетів дублюючих (паралельних) дослідів.

За результатами розрахунків встановлюються закономірності процесу здрібнення матеріалів у машині дисембраторного типу. Отримані дані складають основу підсумкової.

5. Результати аналізу дослідних даних

На рисунку 5 приведено номограму, завдяки якій існує можливість зміненою режимних та сировинних чинників впливати на основні параметри процесу здрібнення матеріалів у машині дисембраторного типу.

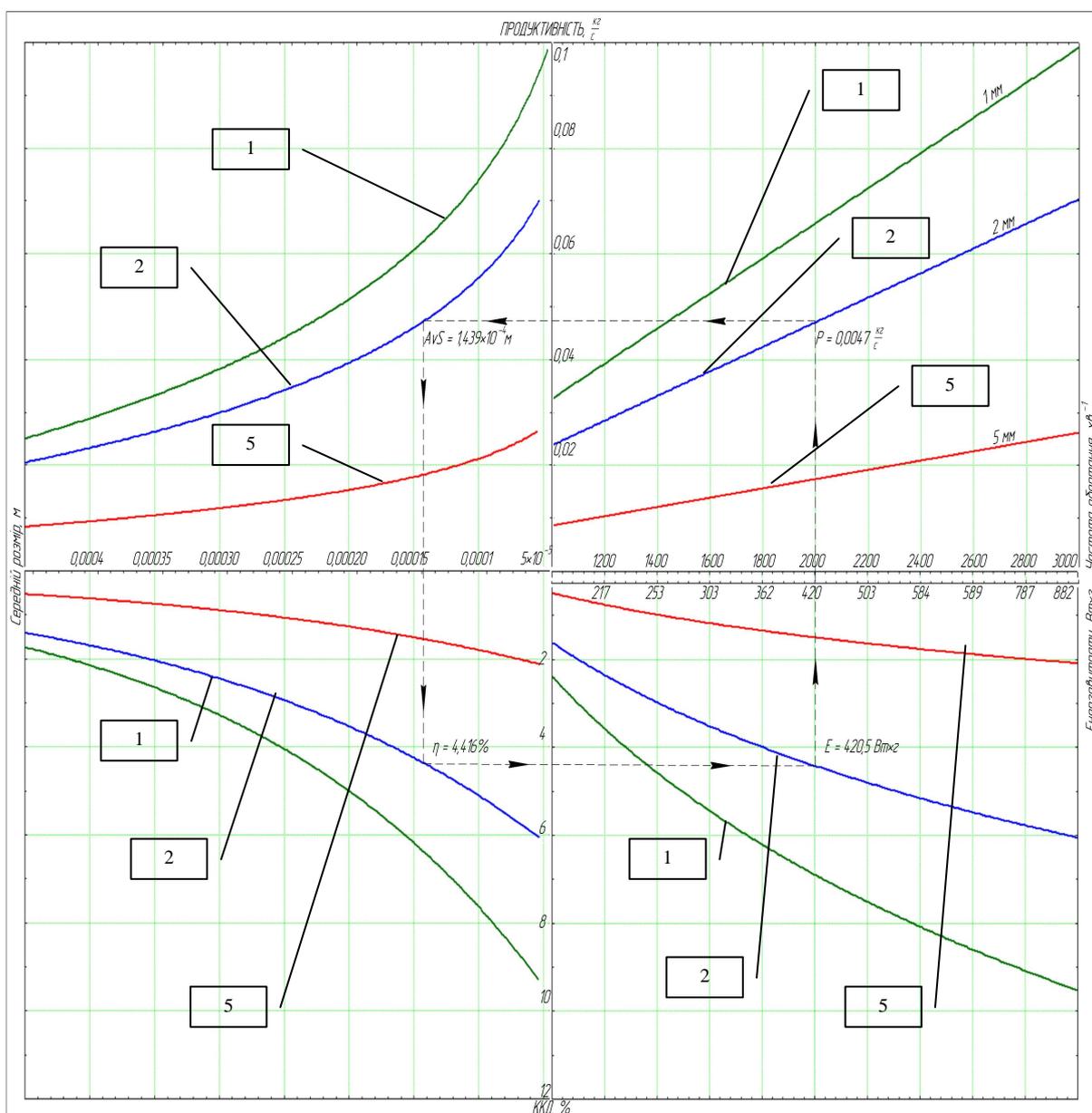


Рисунок 5 – Номограма керування параметрами процесу здрібнення

При створенні номограми нами були використані закономірності процесу здрібнення, встановлені при аналізі дослідних та розрахункових даних, які було приведено до відповідних координатних осей.

Так, для побудови номограми використано наступні функції:

- $P = f(n)$;
- $P = f(AvS)$. Похідна функція від $P = f(n)$ та $AvS = f(n)$;
- $\eta = f(AvS)$. Похідна функція від $\eta = f(n)$ та $AvS = f(n)$;
- $\eta = f(n)$;
- $n \sim E$.

Дані функції побудовано для трьох дослідних груп часток $d_{\Pi} = 1, 2$ та 5 мм.

У номограмі застосовані наступні умовні позначення:

- лінії «1» відповідають залежностям отриманим для $d_{\Pi} = 1$ мм;
- лінії «2» – для $d_{\Pi} = 2$ мм;
- лінії «5» – для $d_{\Pi} = 5$ мм;

Таким чином, знаючи частоту обертів ротору машини дисмембраторного типу та вихідний розмір часток сировинного матеріалу можна визначити продуктивність машини, середній розмір часток у помелі, коефіцієнт корисної дії даного режиму та енергетичні витрати на організацію процесу здрібнення у машині дисмембраторного типу.

6. Висновки

У статті висвітлюються питання організації проведення експериментальних досліджень та подальшого аналізу отриманих даних. Виявлені фактори, які впливають на ефективність роботи дисмембратора. Розроблено тривимірну модель дисмембратора. Приведено його технічні характеристики. Зроблено опис принципової електричної схеми дослідної установки, як механізму регулювання частоти обертів валу машини.

По-стадійно розглянуто проведення серії експериментів по встановленню функціональних параметрів живильного пристрою та закономірностей процесу здрібнення у дисмембраторі. Розкрито питання аналізу отриманих експериментальних даних.

Експериментально доведено, що ступінь здрібнення у машинах дисмембраторного типу може перевищувати $\lambda \leq 40$ [5,8].

Щодо застосовності дослідної машини у виробництві сухої будівельної шпатлівки отримано значення середнього розміру часток у помелі, які дають змогу стверджувати про її доцільність. Домінуючі частки у помелі при встановленому режимі роботи $3\ 000\ \text{хв}^{-1}$ – $AvS \in [45 \div 46]$ мкм, – дозволяють виготовляти на дисмембраторі універсальну шпаклівку.

Отримане розрахунками ККД дисмембратора – перевищує даний показник у аналогічних машин (наприклад ККД струминного млина не перевищує 2 % [9]).

Література

1. Манойло Ю.О., Моїсєєв В.Ф. Здрібнювання матеріалів у хімічній промисловості Матеріали міжнародної наукової конференції «Молодь у вирішенні регіональних та транскордонних екологічних проблем». – Чернівці, 2005. с. 85–90.
2. Манойло Ю.О., Моїсєєв В.Ф., Кузнецов П.В. Теорія здрібнення: енергетичні витрати. // Матеріали міжнародної наукової конференції «Молодь у вирішенні регіональних та транскордонних екологічних проблем» – Чернівці, 2007. с. 116–123.

3. Манойло Ю.А., Моисеев В.Ф., Шапоров П.В. Сухие строительные шпатлевки. К вопросу о рецептуре и технологии производства. Восточно-европейский журнал передовых технологий № 6/1 (24) 2006. с. 23–27.
4. Манойло Ю.О., Моисеев В.Ф., Кузнецов П.В. Сучасні оздоблювальні матеріали: сухі будівельні шпаклівки. // Матеріали міжнародної наукової конференції «Молодь у вирішенні регіональних та транскордонних екологічних проблем» – Чернівці, 2007. с. 106–115.
5. Сиденко П.М. Измельчение в химической промышленности. – М.: Химия, 1979. – 368 с.
6. Мельников С.В. Технологическое оборудование животноводческих ферм. –Л.: Агропромиздат, 1985.
7. Бутягин П.Ю., Стрелецкий А.Н. Кинетика и энергетически баланс в механо-химических превращениях. // Физика твердого тела. т. 47. вып. 5, 2005. – 9 с.
8. Касаткин А.Г. Основные процессы и аппараты химической технологии. – М.: Химия, 1971. – 830 с.
9. Савин А.А., Моисеев В.Ф., Манойло Ю.А. Процесс измельчения материалов в химической промышленности. Типология методов и моделей математического описания. Восточно-европейский журнал современных технологий. №6 (12), 2004. с. 105–108.

Bibliography (transliterated)

1. Manoylo Yu.O., Moiseev V.F. Zdrubnyuvannya materialiv u himichniy promislivosti Materiali mizhnarodnoyi naukovoyi konferentsiyi «Molod u virishenni regionalnih ta transkordonnih ekologichnih problem». – Chernivtsi, 2005. p. 85–90.
2. Manoylo Yu.O., Moiseev V.F., Kuznetsov P.V. Teoriya zdrubnennya: energetichni vitrati. Materiali mizhnarodnoyi naukovoyi konferentsiyi «Molod u virishenni regionalnih ta transkordonnih ekologichnih problem» – Chernivtsi, 2007. p. 116–123.
3. Manoylo Yu.A., Moiseev V.F., Shaporev P.V. Suhie stroitelnyie shpatlevki. K voprosu o retsepture i tehnologii proizvodstva. Vostochno-evropeyskiy zhurnal peredoviyih tehnologiy # 6/1 (24) 2006. p. 23–27.
4. Manoylo Yu.O., Moiseev V.F., Kuznetsov P.V. Suchasni ozdobyvalni materialy: suhi budivelni shpaklivki. Materiali mizhnarodnoyi naukovoyi konferentsiyi «Molod u virishenni regionalnih ta transkordonnih ekologichnih problem» – Chernivtsi, 2007. p. 106–115.
5. Sidenko P.M. Izmelchenie v himicheskoy promyishlennosti. – М.: Himiya, 1979. – 368 s/p.
6. Melnikov S.V. Tehnologicheskoe oborudovanie zhivotnovodcheskih ferm. –L.: Agropromizdat, 1985.
7. Butyagin P.Yu., Streletskiy A.N. Kinetika i energeticheski balans v mehano-himicheskikh prevrascheniyah. Fizika tverdogo tela. t. 47. vyip. 5, 2005. – 9 p.
8. Kasatkin A.G. Osnovnyie protsessy i apparaty himicheskoy tehnologii. – М.: Himiya, 1971. – 830 p.
9. Savin A.A., Moiseev V.F., Manoylo Yu.A. Protsess izmelcheniya materialov v himicheskoy promyishlennosti. Tipologiya metodov i modeley matematicheskogo opisaniya. Vostochno-evropeyskiy zhurnal sovremennyih tehnologiy. #6 (12), 2004. p. 105–108.

УДК 621.926 666.973.6 655.3.06

Манойло Ю.А., Моисеев В.Ф.

**ИССЛЕДОВАНИЕ ЭФФЕКТИВНОСТИ РАБОТЫ ДИСМЕМБРАТОРА
ПРИ ПРОИЗВОДСТВЕ ПОРОШКООБРАЗНЫХ СМЕСЕЙ**

В статье рассматриваются вопросы организации исследований экспериментальной машины. Описана конструкция исследовательской установки. Приведен результат разработки трехмерной модели дисмембратора. Решены вопросы анализа полученных экспериментальных данных. Построена номограмма управления параметрами процесса дробления.

УДК 621.311.25

Ефимов А.В., Потанина Т.В., Белов И.С., Гаркуша Т.А.

ПРИМЕНЕНИЕ МЕТОДА ПРОЕКЦИИ ГРАДИЕНТА ДЛЯ РЕШЕНИЯ ЗАДАЧИ ОПТИМАЛЬНОГО РАСПРЕДЕЛЕНИЯ НАГРУЗОК МЕЖДУ ЭНЕРГОБЛОКАМИ АЭС

Введение. Одним из направлений решения проблемы эффективной, надежной и безопасной эксплуатации действующих энергоблоков ТЭС и АЭС является автоматизация задач технологического управления процессами и объектами – создание АСУ ТП на уровне энергоблоков, электростанций и энергосистем. В то же время, несмотря на имеющуюся текущую информацию в АСУ ТП энергоблоков, ее использование для решения таких важных задач, как оперативный анализ технико-экономических показателей, определение энергетических характеристик оборудования, интеллектуальной поддержки оператора, экологического мониторинга и других, не всегда является достаточно эффективным [1]. Из-за недостаточной надежности средств управления, неподготовленности технологического оборудования и отсутствия необходимого алгоритмического обеспечения в эксплуатирующихся АСУ ТП используются практически только информационно-вычислительные системы. Поэтому возникает необходимость интеграции в рамках АСУ ТЭС и АЭС задач технологического и экономического управления, которое реализуется с помощью алгоритмов оптимального управления, математических программ и, помимо задач поддержания заранее заданных величин регулируемых параметров, решает задачу определения оптимальных стратегий при любом изменении внешних условий.

Постановка задачи. Настоящая статья посвящена разработке методики применения оптимизационного метода проекции градиента для решения с помощью автоматизированного комплекса программ [2] задачи автоматизированного оптимального распределения нагрузок между энергоблоками АЭС с ВВЭР-1000 на основании их эксплуатационных характеристик.

Параметры и характеристики основного и вспомогательного оборудования энергоблоков АЭС, элементов их тепловых схем изменяются в процессе эксплуатации в результате действия различных факторов. Факторы, оказывающие влияние на электрическую мощность и тепловую экономичность энергоблока, можно разбить на следующие группы: 1) энергосистемные условия, определяющие график электрической нагрузки во времени; 2) условия отпуска теплоты, определяющие график теплофикационной нагрузки, количество и качество пара, отпускаемого потребителям; 3) условия циркуляционного водоснабжения, определяющие давление в конденсаторах (температура и качество охлаждающей воды, периодичность чистки трубных пучков конденсаторов и т.д.); 4) эксплуатационные ухудшения экономических характеристик проточной части турбины, теплообменного оборудования, насосов и т.п. в результате изменения их состояния в межремонтный период; 5) показатели надежности основного и вспомогательного оборудования, которые определяют необходимость плановых и аварийных отключений этого оборудования. Оценить результат воздействия перечисленных факторов на основные показатели выработки электрической и тепловой энергии позволяют эксплуатационные характеристики энергоблоков. Они являются исходной информацией при решении задач поиска оптимальных режимов управления работой энергетиче-

ского оборудования, в том числе и задач оптимального распределения нагрузок между энергоблоками АЭС.

В работе [3] были получены интегральные зависимости влияния параметров на электрическую мощность \bar{N} и тепловую экономичность (удельный расход теплоты) \bar{q} турбоустановок энергоблоков АЭС на частичных режимах их работы в диапазоне нагрузок $0,4 \div 1,0 \bar{D}$ ($\bar{D} = D/D_0$, где D – расход свежего пара на исследуемом режиме, D_0 – расход свежего пара на номинальном режиме):

$$\bar{N} = F(\bar{D}, \Delta X_i), \quad \bar{q} = \Phi(\bar{D}, \Delta X_i), \quad i = \overline{1, p}, \quad (1)$$

где ΔX_i – отклонения основных и гидравлических параметров от номинальных значений, p – число параметров, изменение влияния которых учитывается в характеристиках (1).

При эксплуатации энергоблоков АЭС расход свежего пара может отклоняться от номинальных значений в силу различных причин. Важное место среди различных факторов, определяющих уменьшение выработки электроэнергии и на зарубежных, и на отечественных АЭС, занимают повреждения парогенераторов. Поэтому математическая модель эксплуатационных характеристик паротурбинных энергоблоков АЭС должна быть построена с учетом изменяющихся во время эксплуатации параметров этих агрегатов. Из ряда эксплуатационных характеристик парогенераторов ПГВ-1000 определение и исследование зависимостей паропроизводительности (расхода пара) этих агрегатов от изменения в процессе эксплуатации тепловых и гидравлических параметров теплоносителя и рабочего вещества представляют наибольший интерес, так как оказывают основное влияние на эффективность работы энергоблоков [4].

На основании результатов серии численных экспериментов, проведенных на разработанном автоматизированном комплексе программ, имитирующем функциональное состояние энергоблока АЭС с ВВЭР-1000 [2], и их обработке с помощью методов регрессионного и дисперсионного анализа, были получены функциональные зависимости абсолютного значения электрической мощности N энергоблока АЭС с ВВЭР-1000 при изменении параметров его основного и вспомогательного оборудования:

$$\begin{aligned} N = N_0 - [N_0 - f_1(\overline{\Delta X}, \overline{\Delta X}_{PG1}, \overline{\Delta X}_{PG2}, \overline{\Delta X}_{PG3}, \overline{\Delta X}_{PG4})] \times \\ \psi(\overline{\Delta X}_{PG1}, \overline{\Delta X}_{PG2}, \overline{\Delta X}_{PG3}, \overline{\Delta X}_{PG4}) - \\ - f_2(\overline{\Delta X}_K, \overline{\Delta X}_{PG1}, \overline{\Delta X}_{PG2}, \overline{\Delta X}_{PG3}, \overline{\Delta X}_{PG4}) \times \\ \psi(\overline{\Delta X}_{PG1}, \overline{\Delta X}_{PG2}, \overline{\Delta X}_{PG3}, \overline{\Delta X}_{PG4}) - \\ - [N_0 - \psi^T(\overline{\Delta X}_{PG1}, \overline{\Delta X}_{PG2}, \overline{\Delta X}_{PG3}, \overline{\Delta X}_{PG4}) \times \\ f_3(\overline{\Delta X}_T, \overline{\Delta X}_{PG1}, \overline{\Delta X}_{PG2}, \overline{\Delta X}_{PG3}, \overline{\Delta X}_{PG4})], \end{aligned} \quad (2)$$

где N_0 – электрическая мощность, вырабатываемая турбоустановкой при $1,0 \bar{D}$; $\overline{\Delta X} = (\Delta X_1, \dots, \Delta X_p)$ – вектор отклонений тепловых и гидравлических параметров прочной части турбины, системы сепарации и промежуточного перегрева пара, системы регенеративного подогрева питательной воды от номинальных значений; $\overline{\Delta X}_K$ – вектор отклонений параметров конденсатора от номинальных значений; $\overline{\Delta X}_T$ – вектор от-

клонений параметров системы теплофикации; $\overline{\Delta X}_{PGi} = (\Delta t'_1, \Delta t_{PV}, \Delta p_2, \Delta p_1)$ – вектор отклонений параметров i -го парогенератора ($i = 1, \dots, 4$); функция $f_1(\overline{\Delta X}, \overline{\Delta X}_{PG1}, \overline{\Delta X}_{PG2}, \overline{\Delta X}_{PG3}, \overline{\Delta X}_{PG4})$ определяет зависимость влияния на мощность энергоблока отклонений КПД отсеков проточной части турбины, параметров сепаратора-пароперегревателя, гидравлических и тепловых параметров подогревателей систем регенерации высокого и низкого давлений, параметров теплоносителя и рабочего вещества каждого парогенератора; функция $f_2(\overline{\Delta X}_K, \overline{\Delta X}_{PG1}, \overline{\Delta X}_{PG2}, \overline{\Delta X}_{PG3}, \overline{\Delta X}_{PG4})$ определяет зависимость отклонения мощности в зависимости от условий работы конденсационной установки с учетом изменяющихся параметров парогенераторов; функция $f_3(\overline{\Delta X}_T, \overline{\Delta X}_{PG1}, \overline{\Delta X}_{PG2}, \overline{\Delta X}_{PG3}, \overline{\Delta X}_{PG4})$ учитывает влияния на мощность энергоблока отклонений параметров системы теплофикации на различных режимах, при условии что последние определяются отклонением параметров парогенераторов; $\psi(\overline{\Delta X}_{PG1}, \overline{\Delta X}_{PG2}, \overline{\Delta X}_{PG3}, \overline{\Delta X}_{PG4})$ – мощность энергоблока на номинальном или частичном режимах, определяемая только отклонением параметров парогенераторов; $\psi^T(\overline{\Delta X}_{PG1}, \overline{\Delta X}_{PG2}, \overline{\Delta X}_{PG3}, \overline{\Delta X}_{PG4})$ – то же при подключенной системе теплофикации.

В обобщенной форме (2) можно представить в виде функциональной зависимости следующего вида:

$$N = N_0 - \Delta N(\overline{\Delta X}, \overline{\Delta X}_K, \overline{\Delta X}_T, \overline{\Delta X}_{PG2}, \overline{\Delta X}_{PG3}, \overline{\Delta X}_{PG4}). \quad (3)$$

Удельный расход теплоты q при изменении параметров основного и вспомогательного оборудования энергоблока АЭС представляет собой следующее функциональное соотношение:

$$\begin{aligned} q = q_0 - [q_0 - \varphi_1(\overline{\Delta X}, \overline{\Delta X}_{PG1}, \overline{\Delta X}_{PG2}, \overline{\Delta X}_{PG3}, \overline{\Delta X}_{PG4}) \times \\ \nu(\overline{\Delta X}_{PG1}, \overline{\Delta X}_{PG2}, \overline{\Delta X}_{PG3}, \overline{\Delta X}_{PG4})] - \\ - \varphi_2(\overline{\Delta X}_K, \overline{\Delta X}_{PG1}, \overline{\Delta X}_{PG2}, \overline{\Delta X}_{PG3}, \overline{\Delta X}_{PG4}) \times \\ \nu(\overline{\Delta X}_{PG1}, \overline{\Delta X}_{PG2}, \overline{\Delta X}_{PG3}, \overline{\Delta X}_{PG4}) - \\ - [q_0 - \nu^T(\overline{\Delta X}_{PG1}, \overline{\Delta X}_{PG2}, \overline{\Delta X}_{PG3}, \overline{\Delta X}_{PG4}) \times \\ \varphi_3(\overline{\Delta X}_T, \overline{\Delta X}_{PG1}, \overline{\Delta X}_{PG2}, \overline{\Delta X}_{PG3}, \overline{\Delta X}_{PG4})], \end{aligned} \quad (4)$$

где функция q_0 – удельный расход теплоты при $1,0 \bar{D}$; $\varphi_1(\overline{\Delta X}, \overline{\Delta X}_{PG1}, \overline{\Delta X}_{PG2}, \overline{\Delta X}_{PG3}, \overline{\Delta X}_{PG4})$ определяет зависимость влияния на удельный расход теплоты энергоблока отклонений КПД отсеков проточной части турбины, параметров сепаратора-пароперегревателя, гидравлических и тепловых параметров подогревателей систем регенерации высокого и низкого давлений, параметров теплоносителя и рабочего вещества каждого парогенератора; функция $\varphi_2(\overline{\Delta X}_K, \overline{\Delta X}_{PG1}, \overline{\Delta X}_{PG2}, \overline{\Delta X}_{PG3}, \overline{\Delta X}_{PG4})$ определяет зависимость отклонения удельного расхода теплоты энергоблока от условий работы конденсационной установки с учетом изменяющихся параметров парогенераторов; $\varphi_3(\overline{\Delta X}_T, \overline{\Delta X}_{PG1}, \overline{\Delta X}_{PG2}, \overline{\Delta X}_{PG3}, \overline{\Delta X}_{PG4})$ учитывает влияния на q отклонений параметров теплофикационной установки на раз-

личных режимах, при условии что последние определяются отклонением параметров парогенераторов; $\nu(\overline{\Delta X}_{PG1}, \overline{\Delta X}_{PG2}, \overline{\Delta X}_{PG3}, \overline{\Delta X}_{PG4})$ – удельный расход теплоты энергоблока на номинальном или частичном режимах, определяемый только отклонением параметров парогенераторов; $\psi^T(\overline{\Delta X}_{PG1}, \overline{\Delta X}_{PG2}, \overline{\Delta X}_{PG3}, \overline{\Delta X}_{PG4})$ – то же при подключенной системе теплофикации.

В обобщенной форме (4) можно представить в виде функциональной зависимости следующего вида:

$$q = q_0 - \Delta q(\overline{\Delta X}, \overline{\Delta X}_K, \overline{\Delta X}_T, \overline{\Delta X}_{PG1}, \overline{\Delta X}_{PG2}, \overline{\Delta X}_{PG3}, \overline{\Delta X}_{PG4}). \quad (5)$$

Полученные зависимости (2)–(5) позволяют оценивать влияния различных факторов: изменений тепловых и гидравлических параметров теплоносителей и рабочих веществ основного и вспомогательного оборудования, энергосистемных параметров на работу энергоблока АЭС с ВВЭР-1000, климатических условий (температуры охлаждающей воды, температуры окружающего воздуха), оптимизировать режимы работы энергоблока, использовать полученные функциональные соотношения для решения задачи оптимального распределения нагрузок между энергоблоками электростанций.

Задача оптимального распределения электрических нагрузок между параллельно работающими энергоблоками АЭС представляет собой достаточно сложную задачу управления, обусловленную неопределенностью исходной информации, многовариантностью, сложностью учета фактического состояния оборудования энергоблоков и других факторов, и в общем виде может быть сформулирована следующим образом:

$$Q_{CT} = \sum_{j=1}^n Q_j(N_j) \xrightarrow{u} Q_{CT}^{\min}, \quad (6)$$

где Q_{CT} – суммарный расход теплоты на всех энергоблоках АЭС, $Q_j(N_j)$ – расход теплоты j -го энергоблока ($j=1, \dots, n$), Q_{CT}^{\min} – минимум общего расхода теплоты, $u = \{u_j\} \in U$ – множество допустимых управляющих воздействий в виде задания по электрической мощности отдельным энергоблокам.

Задача (6) является классической задачей нахождения условного экстремума функции нескольких переменных.

Эксплуатационные характеристики энергоблока АЭС (2)–(5) позволяют представить расход теплоты Q_j по отдельному энергоблоку в виде функции отклонений параметров энергетического и тепломеханического оборудования от номинальных значений и аппроксимировать ее квадратичным полиномом:

$$Q_j(N_j) = \alpha_j + \beta_j N_j + \gamma_j N_j^2, \quad (7)$$

где $\alpha_j, \beta_j, \gamma_j$ – постоянные коэффициенты, определяемые для каждого режима работы j -го энергоблока методом наименьших квадратов, N_j – электрическая нагрузка j -го энергоблока.

Задача оптимального распределения заданной суммарной электрической нагрузки между n энергоблоками формулируется следующим образом:

$$\text{функция цели} \quad Q_{CT}(N_{CT}) = \sum_{j=1}^n Q_j(N_j) \rightarrow \min, \quad (8)$$

где $Q_{CT}(N_{CT})$ – общий расход теплоты на всех энергоблоках АЭС, зависящий от суммарной нагрузки N_{CT} , $Q_j(N_j)$ – расход теплоты j -го энергоблока, зависящий от нагрузки N_j этого энергоблока.

Ограничения по допустимым электрическим нагрузкам энергоблоков и суммарной электрической нагрузке на всех энергоблоках АЭС:

$$\left. \begin{aligned} N_j^{\min} \leq N_j \leq N_j^{\max} \\ N_{CT} = \sum_{j=1}^n N_j \end{aligned} \right\}. \quad (9)$$

Задача (8)–(9) является задачей оптимального управления, в которой под оптимальным процессом управления будем понимать распределение нагрузок (то есть получение набора N_1^*, \dots, N_n^*), обеспечивающее заданную величину суммарной нагрузки N_{CT} и минимальный общий расход теплоты Q_{CT} . Значения N_1^*, \dots, N_n^* выбираются среди всевозможных комбинаций N_j , для которых выполняется (9).

С учетом (7) поставленная задача (8)–(9) является, вообще говоря, задачей невыпуклого программирования с линейными ограничениями типа равенств и неравенств.

Достаточно эффективным алгоритмом решения задачи (8)–(9) является метод проекционного градиента (метод проекции градиента Розена) [5], который был включен в состав логико-числового оператора $\text{var}(\chi, \Sigma)$, входящего в разработанный автоматизированный программный комплекс, имитирующий функциональное состояние энергоблока АЭС [2]. Известно, что направлением наискорейшего спуска является антиградиент целевой функции. Однако при наличии ограничений движение вдоль такого направления может привести в точки, не принадлежащие множеству возможных решений. В методе проекции градиента, предложенном Розеном, антиградиент проектируется на границу области. Недостатком данного метода является необходимость проведения операции проектирования, которая в общем случае эквивалентна некоторой задаче поиска экстремума. Если же множество ограничений является параллелепипедом, задача проектирования решается просто и в явном виде.

Преобразуем задачу (8)–(9) к следующему виду:

$$\begin{aligned} Q(N) = \sum_{j=1}^n Q_j(N_j) \rightarrow \min; \\ A \cdot N \leq B, \quad H \cdot N = h, \end{aligned} \quad (10)$$

где A – матрица размерности $2n \times n$: $A = \begin{pmatrix} -1 & 0 & \dots & 0 & 0 \\ 1 & 0 & \dots & 0 & 0 \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ 0 & 0 & \dots & 0 & -1 \\ 0 & 0 & \dots & 0 & 1 \end{pmatrix}$,

$$N - n\text{-мерный вектор: } N = \begin{pmatrix} N_1 \\ \dots \\ N_n \end{pmatrix}, B - 2n\text{-мерный вектор: } B = \begin{pmatrix} -N_1^{\min} \\ N_1^{\max} \\ \dots \\ -N_n^{\min} \\ N_n^{\max} \end{pmatrix},$$

$H - n\text{-мерный вектор: } H = (1 \ 1 \ \dots \ 1), h = N_{CT}.$

Предположим, что точка $N^* = (N_1^*, \dots, N_n^*)$ является допустимой, то есть принадлежит множеству возможных решений задачи (10). Пусть в этой точке выполняется условие:

$$A_1 \cdot N^* = B_1, A_2 \cdot N^* < B_2, \tag{11}$$

где $A_1 -$ матрица размерности $q \times n$, соответствующая ограничениям, насыщенным в точке N^* ; $A_2 -$ матрица размерности $(n - q) \times n$;

$$A^T = (A_1^T; A_2^T), B^T = (B_1^T; B_2^T). \tag{12}$$

Метод проекции градиента основан на двух утверждениях:

1) если $P = I - M^T \cdot (M \cdot M^T)^{-1} \cdot M -$ матрица проектирования, где $I -$ единичная матрица, $M^T = (A_1^T; H^T) -$ матрица ранга q , и $P \cdot \nabla Q(N^*) \neq 0$, где $\nabla Q(N^*) = \left(\frac{\partial Q}{\partial N_1}, \dots, \frac{\partial Q}{\partial N_n} \right) \Big|_{N=N^*} -$ градиент функции $Q(N)$ в точке N^* , то вектор

$S = -P \cdot \nabla Q(N^*) -$ возможное направление спуска функции $Q(N)$ в точке N^* .

2) если $P = I - M^T \cdot (M \cdot M^T)^{-1} \cdot M -$ матрица проектирования, где $I -$ единичная матрица, $M^T = (A_1^T; H^T) -$ матрица ранга q , и $P \cdot \nabla Q(N^*) = 0$, тогда в случае $U \geq 0$ в матрице $W^T = (U^T, V^T) = -(M \cdot M^T)^{-1} \cdot M \cdot \nabla Q(N^*)$ и выпуклости функции цели точка N^* является точкой Куна-Таккера (оптимальное решение). Если же $\exists j : u_j < 0$, то в качестве вектора возможного направления спуска принимается вектор $\bar{S} = -\bar{P} \cdot \nabla Q(N^*)$, где $\bar{P} = I - \bar{M}^T \cdot (\bar{M} \cdot \bar{M}^T)^{-1} \cdot \bar{M}$, $\bar{M}^T = (\tilde{A}_1^T; H^T)$, а матрица \tilde{A}_1 получена из матрицы A_1 вычеркиванием строки, соответствующей u_j .

Исходя из этого, алгоритм решения задачи оптимального распределения нагрузок между энергоблоками АЭС (8)–(10) методом проекции градиента предполагает выполнение следующих этапов (рис. 1):

1. Предварительный этап – итерация $k = 0 -$ выбор допустимой точки N^1 и представление матриц A^T и B^T в виде (12).

2. Основной этап – текущая k -я итерация в точке N^k .

Первый шаг. Пусть $M^T = (A_1^T; H^T)$. Если $M = \emptyset$, то положить $P = I$. В противном случае – $P = I - M^T \cdot (M \cdot M^T)^{-1} \cdot M$. Задать $S_k = -P \cdot \nabla Q(N^k)$. Если $S_k \neq 0$, то перейти ко второму шагу. Если $S_k = 0$ и $M = \emptyset$, то остановиться. Если же $M \neq \emptyset$, то положить $W = -(M \cdot M^T)^{-1} \cdot M \cdot \nabla Q(N^k)$. Пусть $W^T = (U^T, V^T)$. Если $U \geq 0$, то остановиться – точка N^k является оптимальным решением. Иначе, выбрать отрицательную компоненту этого вектора u_j и переопределить матрицу A_1 , вычеркивая строку, соответствующую u_j , и повторить первый шаг.

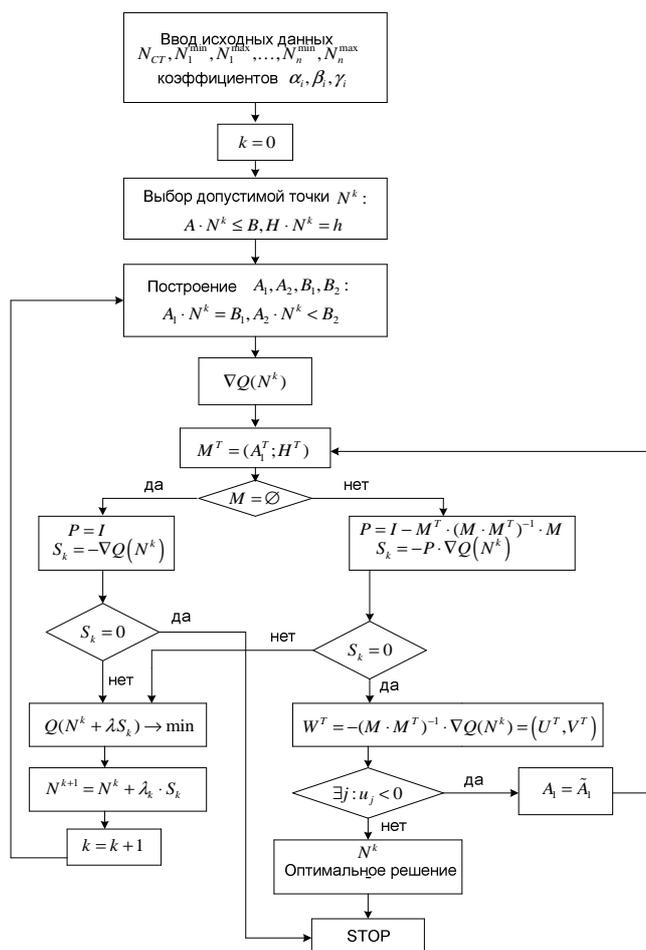


Рисунок 1 – Алгоритм решения задачи оптимального распределения нагрузок между энергоблоками АЭС методом проекции градиента

Второй шаг. Определить шаг λ_k как оптимальное решение задачи линейного поиска:

$$Q(N^k + \lambda S_k) \rightarrow \min, \tag{13}$$

$$\text{при условии } \lambda \in [0; \lambda_{\max}], \text{ где } \lambda_{\max} = \begin{cases} \min_{\tilde{S}_i > 0} \left\{ \frac{\tilde{b}_i}{\tilde{S}_i} \right\}, \\ \infty, \text{ если } \tilde{S}_i \leq 0 (\forall i) \end{cases}, \quad (14)$$

\tilde{b}_i – элемент матрицы $\tilde{B} = B_2 - A_2 \cdot N^k$, \tilde{S}_i – элемент матрицы $\tilde{S} = A_2 \cdot S_k$.

Тогда точка N^{k+1} определяется как

$$N^{k+1} = N^k + \lambda_k \cdot S_k. \quad (15)$$

Далее следует положить $k \leftarrow k + 1$ и перейти к первому шагу.

Выводы. Разработанная методика применения оптимизационного метода проекции градиента для решения задачи автоматизированного оптимального распределения электрических нагрузок между энергоблоками АЭС основана на возможности применять данный метод оптимизации для любого вида эксплуатационных характеристик энергоблоков и учитывать любые ограничения, налагаемые на оптимизируемые параметры, что позволяет автоматизировать процессы управления режимами работы энергоблоков атомных электростанций.

Литература

1. Дуэль М.А. Концептуальные основы построения интегрированной АСУ электростанцией // Энергетика і електрифікація. – 2007. – № 8. – С. 16–24.
2. Ефимов А.В., Потанина Т.В. Разработка имитационной модели энергоблока АЭС с ВВЭР-1000 для решения задач анализа, управления и диагностики // Энергетика: економіка, технології, екологія. – К.: НТУУ «КПІ». – 2006. – № 2. – С. 84–91.
3. Палагин А.А., Ефимов А.В., Меньшикова Е.Д. Моделирование функционального состояния и диагностика турбоустановок. – К.: Наук. думка, 1991. – 201 с.
4. Потанина Т.В., Ефимов А.В. Разработка модели влияния изменения параметров теплоносителя и рабочего вещества на паропроизводительность парогенераторов ПГВ-1000 энергоблоков АЭС с ВВЭР-1000 // Вісник Національного технічного університету «ХПІ». – Харків: НТУ «ХПІ». – 2007. – № 9. – С. 60–65.
5. Васильев Ф.П. Численные методы решения экстремальных задач. – М.: Наука, 1988. – 522 с.

Bibliography (transliterated)

1. Duel M.A. Kontseptualnyie osnovyi postroeniya integrirovannoy ASU elektrostantsiyei Energetika i i elektrifikatsiya. – 2007. – # 8. – p. 16–24.
2. Efimov A.V., Potanina T.V. Razrabotka imitatsionnoy modeli energobloka AES s VVER-1000 dlya resheniya zadach analiza, upravleniya i diagnostiki Energetika: ekonomika, tehnologiyi, ekologiya. – K.: NTUU «KPI». – 2006. – # 2. – p. 84–91.
3. Palagin A.A., Efimov A.V., Menshikova E.D. Modelirovanie funktsionalnogo sostoyaniya i diagnostika turboustanovok. – K.: Nauk. dumka, 1991. – 201 p.
4. Potanina T.V., Efimov A.V. Razrabotka modeli vliyaniya izmeneniya parametrov teplonositelya i rabocheho veschestva na paroproizvoditelnost parogeneratorov PGV-1000 energoblokov AES s VVER-1000 Visnik Natsionalnogo tehničnogo universitetu «HPI». – Harkiv: NTU «HPI». – 2007. – # 9. – p. 60–65.

5. Vasilev F.P. Chislennyye metodyi resheniya ekstremalnyih zadach. – M.: Nauka, 1988. – 522 p.

УДК 621.311.25

Єфімов О.В., Потаніна Т.В., Белов І.С., Гаркуша Т.А.

**ЗАСТОСУВАННЯ МЕТОДА ПРОЕКЦІЇ ГРАДІЄНТА ДЛЯ РОЗВ'ЯЗАННЯ
ЗАДАЧІ ОПТИМАЛЬНОГО РОЗПОДІЛУ НАВАНТАЖЕНЬ
МІЖ ЕНЕРГОБЛОКАМИ АЕС**

В статті запропоновано методику застосування оптимізаційного методу проекції градієнта для розв'язання задачі автоматизованого оптимального розподілу електричних навантажень між енергоблоками АЕС. Методика заснована на можливості застосувати даний метод оптимізації для будь-якого виду експлуатаційних характеристик енергоблоків і враховувати будь-які обмеження, що накладаються на параметри.

УДК 678.5

Рассоха А.Н., Черкашина А.Н.

ВЛИЯНИЕ СДВИГОВЫХ НАПРЯЖЕНИЙ И ЭКСПЛУАТАЦИОННЫХ СРЕД НА РАБОТОСПОСОБНОСТЬ ФУРАНО-ЭПОКСИДНЫХ ЗАЩИТНЫХ ПОКРЫТИЙ

Современный уровень развития техники позволяет создавать защитные градиентные фурано-эпоксидные покрытия с заданным распределением свойств по высоте поперечного сечения с учетом условий эксплуатации, что дает возможность существенно повысить долговечность защищаемых конструкций (из бетона или металла) с различной функциональной нагрузкой на определенные части и слои сечения конструктивных элементов.

Однако, на сегодняшний момент не существует единого подхода к расчету, оценке и прогнозированию работоспособности металлических и железобетонных конструкций с градиентными полимерными покрытиями, в том числе и фурано-эпоксидными.

В ряде случаев уровень надежного функционирования защитных покрытий обусловлен не только градиентом свойств фурано-эпоксидных композитов по высоте поперечного сечения (толщине покрытия δ), но и по длине контактной зоны l . Кроме этого, на характер работоспособности защитных покрытий существенное влияние оказывает природа эксплуатационных сред, в которых функционирует система.

Представляло интерес исследовать влияние структуры защитной системы (градиентного, ортотропного типов), а также природы эксплуатационных сред на работоспособность фурано-эпоксидных покрытий на поверхности металлических и бетонных изделий.

Известно [1], что при работе изгибаемых бетонных или металлических изделий с полимерными покрытиями в контактном (межфазном) слое возникают значительные сдвигающие (касательные) $\tau = \tau(z)$ и нормальные напряжения $\sigma = \sigma(x)$. При этом касательные напряжения характеризуются неравномерным распределением по длине изделия и имеют максимальные значения на его краях, а нормальные – неоднородны по толщине. Поэтому для эффективной совместной работы элемента (из бетона и металла) и полимерного покрытия представляет интерес оценить величину касательных напряжений в фурано-эпоксидных покрытиях $\tau = \tau(z)$, в том числе и на краях изделий.

Соединение фурано-эпоксидного (ФАЭД) покрытия с абсолютно жестким основанием (бетон, металл) в разрабатываемых системах может осуществляться посредством промежуточного (адгезионного) слоя, состоящего либо из полиацеталей (поливинилбутирала – ПВБ, поливинилбутиральфурфурала – ПВБФ и др.), либо из композиции на основе фурано-эпоксидного реакционноспособного олигомера с повышенным содержанием эпоксидного олигомера (ФАЭД-80, ФАЭД-70 и др.). Толщина адгезионного слоя $h = h(x)$ в общем случае переменна.

С целью минимизации влияния на интегральный показатель остаточных внутренних напряжений от химической усадки структурирование защитных систем на основе ФАЭД проводили выше температуры стеклования по следующему ступенчатому режиму: выдержка при 20 °С в течение 24 ч, 60 °С – 2 ч, 80 °С – 1 ч, 100 °С – 5 ч, охлаждение до комнатной температуры осуществляли со скоростью 2–5 °С/мин.

Кроме этого, были исследованы фурано-эпоксидные композиции, функционально модифицированные олигомерными и полимерными материалами, отличающимися химической природой от ФАЭД. Содержание модифицирующего ингредиента в композиции (каменноугольной смолы – КУС, битума – БН, госсиполовой смолы – ГС, низкомолекулярного полиизобутилена – НПИБ) составляет 20–30 %.

В качестве модельных эксплуатационных сред выбраны дистиллированная вода и уайт-спирит, наиболее полно характеризующие спектр реальных эксплуатационных сред.

Распределение напряжений в адгезионном слое может быть представлено в виде [2]:

$$\frac{h_{\xi}}{h_0} \cdot \frac{G_0}{G_{\xi}} = \frac{\tau}{\tau_{\xi}} \cdot \left\{ 1 + \frac{G_0}{E} \cdot \frac{l}{\delta} \cdot \frac{l}{h_0} [F(\xi) - F(0)] \right\},$$

где G_0 и G_{ξ} – модули сдвига (МПа) адгезионного слоя в начале координат и при различном значении безразмерной координаты $\xi = x/l$; E – модуль упругости (МПа) материала адгезионного слоя; τ_0, τ_{ξ} – касательные напряжения в покрытии, МПа.

В приведенной зависимости $F(\xi) = \int I(\xi) d(\xi)$, где $I(\xi)$ определяется по формуле: $I(\xi) = \int_0^{\xi} \frac{\tau(\xi)}{\tau_0} d\xi$. А отношение $f(\xi) = \frac{\tau_{\xi}}{\tau_0}$ определяет характер распределения касательных напряжений $\tau(z)$ в адгезионном слое по длине контактной зоны l . С целью выравнивания касательных напряжений в зоне контакта фурано-эпоксидного покрытия с жестким основанием, примем функцию $f(\xi) = 1$. Тогда приведенные выше выражения имеют вид $I(\xi) = \xi$, $F(\xi) = \xi^2/2$, $F(0) = 0$. Исходя из этого распределение напряжений в адгезионном слое можно представить в виде [2]:

$$\frac{h_{\xi}}{h_0} \cdot \frac{G_0}{G_{\xi}} = 1 + \frac{G_0}{2 \cdot E} \cdot \frac{l}{\delta} \cdot \frac{l}{h_0} \cdot \xi^2.$$

На основании анализа данной зависимости возможны два варианта решения поставленной задачи:

1. Приняв, деформативные параметры адгезионного слоя (G_0 и G_{τ}) стабильны на протяжении всей длины контактной зоны l , т.е. $G_0/G_{\xi} = 1$, то распределение напряжений τ в адгезионном слое регулируется путем изменения его толщины h , которое можно оценить, исходя из формулы:

$$\frac{h_{\xi}}{h_0} = 1 + \frac{G_0}{2 \cdot E} \cdot \frac{l}{\delta} \cdot \frac{l}{h_0} \cdot \xi^2.$$

2. Если принять стабильной толщину адгезионного слоя h , т.е. $h_{\xi}/h_0 = 1$, то целенаправленное регулирование распределения касательных напряжений τ в нем можно осуществлять путем изменения деформационных свойств (G_0 и G_{τ}) этого слоя:

$$\frac{G_{\xi}}{G_0} = \frac{1}{1 + \frac{G_0}{2 \cdot E} \cdot \frac{l}{\delta} \cdot \frac{l}{h_0} \cdot \xi^2}$$

Модули сдвига G_0 материалов адгезионного слоя (табл. 1) определяли при известных значениях модуля Юнга E и коэффициента Пуассона ν из соотношения [3]: $G_0 = E/[2(1+\nu)]$. Оценку распределения касательных напряжений фурано-эпоксидного покрытия со средней толщиной $\delta = 3 \cdot 10^{-3}$ м проводили на базовой длине образца $l = 0,03$ м, т.е. $l/\delta = 10$. Толщина адгезионного слоя h_0 находилась в пределах $h_0 = (0,2-0,5) \cdot 10^{-3}$ м. Соотношение l/h_0 на исследованных образцах составляло $l/h_0 = 1-10$.

Таблица 1 – Деформационно-прочностные параметры материалов адгезионного слоя

Материал	E , МПа	G , МПа	ν	G/E
ФАЭД-80(20) + АФ-2	2750	1040	0,32	0,3782
ПВБ	1600	590	0,37	0,3656
ПВБФ	2400	900	0,33	0,3758
ПВФ	4000	1540	0,30	0,385
ПВЭ	4000	1550	0,30	0,3875
ПВФЭ	3200	1220	0,31	0,3817

На рис. 1–2 приведены типичные для исследованных систем (на примере ПВБФ) зависимости изменения соответственно толщины адгезионного слоя при различном модуле сдвига и модуля сдвига слоя при постоянной ее толщине на разном масштабном уровне – l/h . В связи с близкими значениями соотношениями G/E (табл. 1) характер изменения и уровень значений анализируемых параметров для всех исследованных адгезионных слоев существенно друг от друга не отличается.

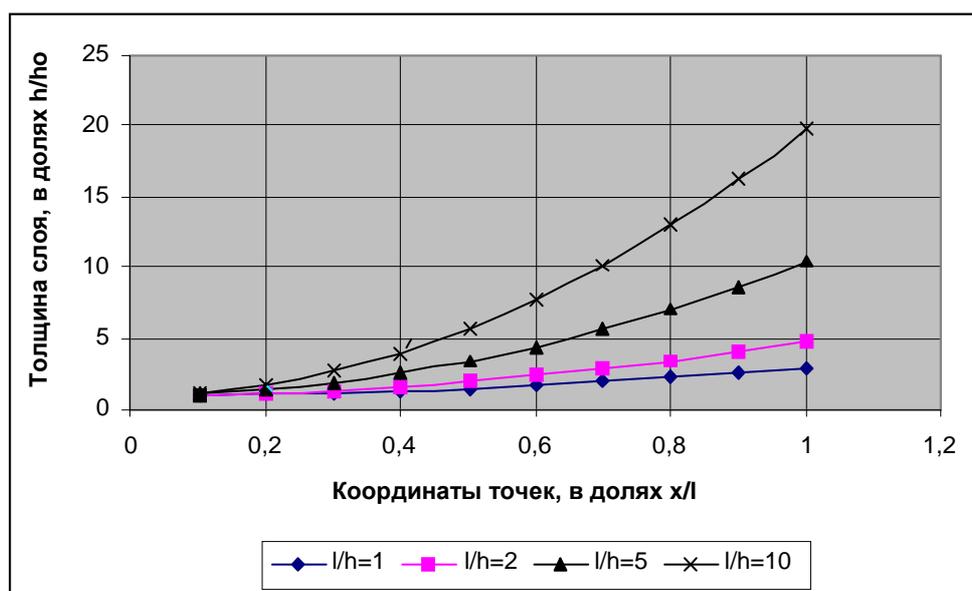


Рисунок 1 – Изменение толщины адгезионного слоя (ПВБФ) при модуле сдвига $G = \text{const}$

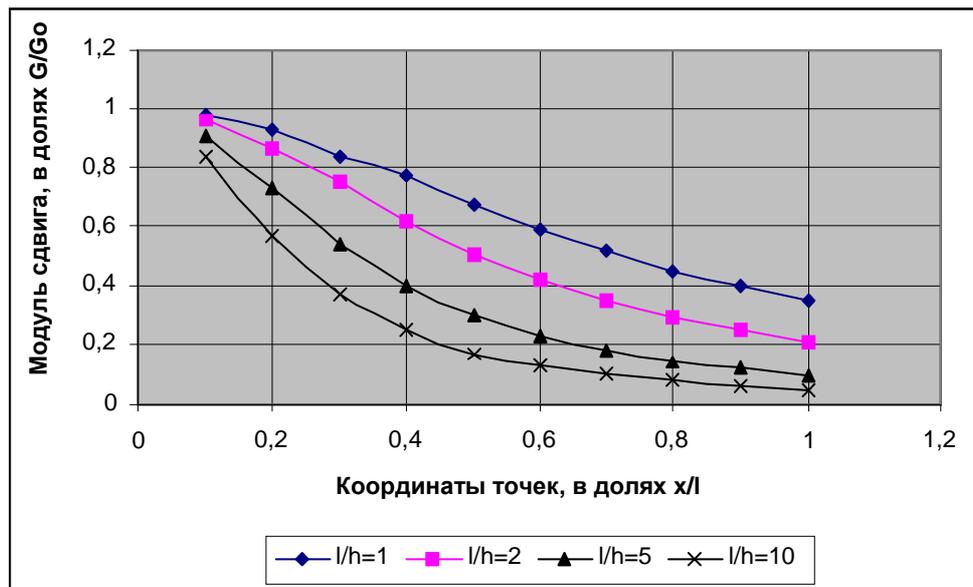


Рисунок 2 – Изменение модуля сдвига адгезионного слоя (ПВБФ) при толщине $h = \text{const}$

Анализ полученных данных позволяет сделать вывод, что касательные напряжения существенно отличаются от нуля на конечных участках защищаемого фурано-эпоксидным градиентным покрытием элемента (металла или бетона).

С ростом длины зоны контакта l между полимерным покрытием и жесткой подложкой (увеличением l/h) существенно возрастают сдвиговые напряжения τ . Так например, в точке с координатой $\xi = 0,5$ касательные напряжения τ выше в сравнении с началом отсчета ($\xi = 0$) на 30 % при $l/h = 1$, на 60 % – $l/h = 2$, в 3,35 раза при $l/h = 5$ и в 4 раза при $l/h = 10$.

Регулировать уровень сдвиговых напряжений τ в покрытии можно, изменяя либо толщину адгезионного слоя h , либо его жесткость (модуль упругости E).

При формировании градиентного фурано-эпоксидного покрытия на поверхности бетона, являющегося капиллярно-пористым материалом (характеризуется наличием сквозных и замкнутых пор, капилляров, трещин и др.) регулировать уровень и характер распределения касательных напряжений τ в зоне контакта целесообразно путем изменения толщины адгезионного слоя, увеличив или уменьшив глубину проникновения полимерного материала в бетон. Для стабилизации уровня напряжений на краях защищаемых элементов возможна пропитка слоя бетона на глубину 6–15 мкм (рис. 1).

При этом происходит упрочнение наружных слоев бетона, обусловленное заполнением материалом адгезионного слоя поверхностных пор, микротрещин, капилляров и повышением поверхностной энергии. В случае получения защитного градиентного покрытия на металлических подложках, практически не обладающих пористостью, целенаправленно варьировать уровнем сдвиговых напряжений можно, изменяя модуль упругости адгезионного материала, вводя в его состав оптимальные количества (как правило, до 6–9 масс. %) низко- или высокомодульных дисперсных наполнителей (например, соответственно суспензионного ПВХ и кварцевой муки).

Диффузионные остаточные напряжения, возникающие вследствие сорбции низкомолекулярной жидкости из эксплуатационной среды можно оценить по следующей формуле [4]:

$$\Sigma \sigma_{\partial} = \varepsilon \cdot E,$$

где σ_0 – диффузионные остаточные напряжения, МПа; ε – относительное изменение геометрического размера покрытия вследствие сорбции низкомолекулярной жидкости.

Для покрытий на основе исходных и функционально модифицированных ФАЭД выдержанных в модельных эксплуатационных жидких средах (вода, уайт-спирит) при температуре 20 °С следует учитывать неблагоприятную роль диффузионных остаточных напряжений, возникающих вследствие сорбции молекул жидкости и также противодействующих межмолекулярных сил (табл 2,3).

Массопоглощение эксплуатационных сред определялось по стандартным лабораторным методикам [5]. Количество параллельных измерений не менее 3.

Таблица 2 – Диффузионные остаточные напряжения в покрытии при экспозиции в воде

Материал	Поглощение (%) через			$\Sigma\sigma_0$ (МПа) через		
	10 сут	30 сут	90 сут	10 сут	30 сут	90 сут
ФАЭД-50(20)+ПЭПА	0,05	0,10	0,10	1,3	2,4	2,5
ФАЭД-50(20)+АФ-2	0	0,05	0,07	0	1,1	1,3
ФАЭД-50(20)+КУС+ПЭПА	0,04	0,07	0,10	1,2	2,1	2,6
ФАЭД-50(20)+КУС+АФ-2	0	0,03	0,05	0	0,9	1,0
ФАЭД-50(20)+БН+ПЭПА	0,03	0,06	0,08	0,8	0,9	1,0
ФАЭД-50(20)+БН+АФ-2	0	0,02	0,04	0	0,4	0,7
ФАЭД-50(20)+ГС+ПЭПА	0,05	0,08	0,12	0,6	1,8	2,6
ФАЭД-50(20)+ГС+АФ-2	0,01	0,07	0,10	0,3	1,5	2,3
ФАЭД-50(20)+НПИБ+ПЭПА	0,02	0,04	0,08	0,4	1,3	2,0
ФАЭД-50(20)+НПИБ+АФ-2	0	0,02	0,05	0	0,7	1,1

Таблица 3 – Диффузионные остаточные напряжения в покрытии при экспозиции в уайт-спирите

Материал	Поглощение (%) через			$\Sigma\sigma_0$ (МПа) через		
	10 сут	30 сут	90 сут	10 сут	30 сут	90 сут
ФАЭД-50(20)+ПЭПА	0,5	1,0	1,1	1,8	2,3	2,5
ФАЭД-50(20)+АФ-2	0,2	0,7	0,9	1,2	1,8	2,0
ФАЭД-50(20)+КУС+ПЭПА	0,6	1,2	1,4	1,8	2,2	2,4
ФАЭД-50(20)+КУС+АФ-2	0,4	0,9	1,1	1,5	1,9	2,1
ФАЭД-50(20)+БН+ПЭПА	0,4	0,7	0,9	1,3	1,7	2,0
ФАЭД-50(20)+БН+АФ-2	0,2	0,6	0,8	1,0	1,6	2,1
ФАЭД-50(20)+ГС+ПЭПА	0,5	0,9	1,1	1,7	2,0	2,2
ФАЭД-50(20)+ГС+АФ-2	0,3	0,7	0,9	1,2	1,6	1,9
ФАЭД-50(20)+НПИБ+ПЭПА	0,6	0,9	1,4	1,9	2,0	2,5
ФАЭД-50(20)+НПИБ+АФ-2	0,4	0,7	1,0	1,4	1,8	2,2

Анализ экспериментальных данных, приведенных в табл. 2–3, свидетельствует о том, что разработанные фурано-эпоксидные композиции в процессе эксплуатации в водных и нефтесодержащих средах обладают невысоким уровнем диффузионных остаточных напряжений (до 2,5 МПа). Этот параметр значительно меньше адгезионной и

когезионной прочности покрытий на основе ФАЭД к металлическим и бетонным субстратам.

Таким образом, разработанные защитные системы на основе функционально модифицированных фурано-эпоксидных материалов с адгезионным подслоем обладают достаточно высоким уровнем работоспособности и могут быть использованы для антикоррозионной защиты металлических и бетонных изделий.

Литература

1. Селяев В.П., Низина Т.А., Лазарев А.Л., Ланкина Ю.А., Цыганов В.В. Функционально-градиентные покрытия на основе полимерных связующих // Известия вузов. Строительство. – 2007.– № 7.– С.36 – 40.
2. Селяев В.П., Карташов В.А., Клементьев В.Д. и др. Функционально-градиентные композиционные строительные материалы и конструкции. – Саранск: Мордов. ГУ, 2005. – 160 с.
3. Ван Кревелен Д.В. Свойства и химическое строение полимеров / Пер. с англ. Под ред. А.Я. Малкина.–М.: Химия, 1976.– 415 с.
4. Миненков Б.В., Стасенко И.В. Прочность деталей из пластмасс.– М.: Машиностроение, 1977.– 264 с.
5. Горловский И.А., Индейкин Е.А., Толмачев И.А. Лабораторный практикум по пигментам и лакокрасочным материалам: Учеб. пособие для вузов.– Л: Химия, 1990.– 240 с.

Bibliography (transliterated)

1. Selyaev V.P., Nizina T.A., Lazarev A.L., Lankina Yu.A., Tsyiganov V.V. Funktsionalno-gradientnyie pokryitiya na osnove polimernyih svyazuyuschih Izvestiya vuzov. Stroitelstvo. – 2007.– # 7.– p.36 – 40.
2. Selyaev V.P., Kartashov V.A., Klementev V.D. i dr. Funktsionalno-gradientnyie kompozitsionnyie stroitelnyie materialyi i konstruktsii. – Saransk: Mordov. GU, 2005. – 160 p.
3. Van Krevelen D.V. Svoystva i himicheskoe stroenie polimerov Per. s angl. Pod red. A.Ya. Malkina.–M.: Himiya, 1976.– 415 p.
4. Minenkov B.V., Stasenko I.V. Prochnost detaley iz plastmass.– M.: Mashinostroenie, 1977.– 264 p.
5. Gorlovskiy I.A., Indeykin E.A., Tolmachev I.A. Laboratornyiy praktikum po pigmentam i lakokrasochnyim materialam: Ucheb. posobie dlya vuzov.– L: Himiya, 1990.– 240 p.

УДК 678.5

Рассоха О.М., Черкашина Г.М.

ВПЛИВ НАПРУГ ЗСУВУ ТА ЕКСПЛУАТАЦІЙНИХ СЕРЕДОВИЩ НА РОБОТОЗДАТНІСТЬ ФУРАНО-ЕПОКСИДНИХ ЗАХИСНИХ ПОКРИТТІВ

В роботі наведені данні, що характеризують вплив структури фурано-епоксидних покриттів на металевих та бетонних поверхнях, а також природи експлуатаційних середовищ на роботоздатність захисних антикорозійних систем.

УДК 554.421: 544.144.7: 541.115

Филончук А.В., Кравченко И.В., Дышловой В.И.

**ЭМПИРИЧЕСКИЙ РАСЧЕТ ПРЕДЭКСПОНЕНЦИАЛЬНЫХ МНОЖИТЕЛЕЙ
В УРАВНЕНИИ КОНСТАНТЫ СКОРОСТИ
ДЛЯ БИМОЛЕКУЛЯРНЫХ РЕАКЦИЙ***Технологический институт Восточноукраинского национального университета
им. В. Даля**Филиал института физико-органической химии и углехимии им. Л.М. Литвиненко*

В литературе [1] для константы скорости простых адиабатических бимолекулярных реакций по теории переходного состояния приводятся уравнения, в которых стерический множитель вычисляется через статистические суммы исходных реагентов и переходного состояния. Сложность заключается в использовании мощного оборудования и программ квантово-химических расчетов. Неточности расчетов [2] статистических сумм обуславливаются приближением геометрических параметров переходного состояния, которое экспериментально не определяется.

Упростить вычисления и увеличить точность расчетов стерических множителей в уравнении константы скорости для бимолекулярных реакций можно путем статистической обработки экспериментально изученных реакций.

Согласно методу переходного состояния, стерический фактор входит в уравнение константы скорости бимолекулярной реакции в виде множителя:

$$P_{\sigma u} = e^{-\frac{\Delta S^\ddagger}{R}} = e^{-\frac{\Delta E_s}{R \cdot T}}, \quad (1)$$

где ΔS^\ddagger – изменение энтропии активации в процессе образования переходного активированного комплекса. Появление стерического фактора вызывает отклонения скорости реакции по причине несовершенной упорядоченности внутреннего движения частиц в составе взаимодействующих молекул из-за недостаточно соответствующей ориентации молекул при ударе и осложнениях (экранировании) при активации рвущейся связи.

Считают [3], что переходной комплекс бимолекулярной реакции, концентрация которого принята равной 1 молю, на вершине энергетического барьера связей практически не имеет. Поэтому переходный активированный комплекс – не молекула, а смесь исходных частиц возбужденного состояния [4], после которого начинается образование химических связей в продуктах реакции. Взаимодействие частиц активированного комплекса разнообразное, поэтому разнообразны и типы химических связей. Однако многообразие взаимодействия описывают единой теорией химической связи, которая учитывает корпускулярно-волновой дуализм микрочастиц. Вопрос о природе химической связи выяснен, она электрическая, других сил взаимодействия, кроме электрических, не существует.

Состояние переходного активированного комплекса представляется как еще не сформированные новые молекулы на вершине энергетического барьера, т.е. частицы владеют всеми возможными степенями свободы движения (Ψ). При образовании связей правило сохранения орбитальной симметрии должно выдерживаться и для движения частиц по отдельным степеням свободы. Поэтому энергия энтропии активации должна

представлять энергию для осуществления работы по затуханию степеней свободы (Ψ_3), не соответствующих сохранению орбитальной симметрии. Сохраняются только те степени свободы движения частиц, которые отвечают согласованности движения и правилу антипараллельности спинов при образовании химической связи. Таким образом, химическая связь между элементами представляет собой сумму соответственно отдельных согласованных степеней свободы. Как несогласованное движение пары электронов приводит к отталкиванию атомов, которое ведет к разрушению связи, так и несогласованные отдельные степени свободы движения электронов приведут к резонансу или детонации, нарушающих (разрыхляющих) связь. Работа по затуханию данных несогласованных движений осуществляется на вершине энергетического барьера в переходном активированном комплексе. Одно направление движения характеризуется двумя степенями свободы, поэтому образованию одной связи отвечает $\Sigma \Psi_3 / 2 = L$ ненаправленных движений. Если известно количество ненаправленных движений, приходящихся на одну связь при ее образовании (L), количество связей в продуктах реакции (m) и парциальные концентрации реагентов в активированном комплексе (C_n), можно определить энергию для осуществления работы по затуханию несогласованных степеней свободы как работу сжатия газа (ΔE_S) [5]:

$$\Delta E_S = 0,5 \cdot R \cdot T \cdot L \cdot m \cdot \sum C_n \cdot \ln(1/C_n), \quad (2)$$

где 0,5 – коэффициент, учитывающий противоположность движения. Подставляя (2) в (1), получаем выражение для расчета стерического множителя:

$$P_{\sigma u} = e^{-\frac{\Delta E_S}{R \cdot T}} = e^{-\frac{0,5 \cdot R \cdot T \cdot L \cdot m \cdot \sum C_n \cdot \ln(1/C_n)}{R \cdot T}} = e^{-0,5 \cdot L \cdot m \cdot \sum C_n \cdot \ln(1/C_n)}. \quad (3)$$

Из уравнения (3) видно, что степень при экспоненте представляет собой часть энергии сжатия условных двухатомных молекул, не вступивших в реакцию, от энергии сжатия 1 моля активированного комплекса, куда входят эти условные молекулы, или концентрационную часть этих не вступивших в реакцию молекул в активированном комплексе. Знак «-», установленный экспериментально для бимолекулярных реакций, показывает, что выражение степени при экспоненте характеризует обратную величину – часть энергии сжатия или часть концентрации активированного комплекса, который переходит через энергетический барьер в продукты реакции.

Вероятно, существует зависимость взаимодействия симметричных электронных орбиталей в данной системе от количества одинарных связей, образующихся в продуктах реакции.

Для бимолекулярной реакции множитель $\sum C_n \ln(1/C_n)$ в показателе степени определяется величиной:

$$\sum C_n \ln(1/C_n) = 0,5 \ln(1/0,5) + 0,5 \ln(1/0,5) = 0,693,$$

тогда

$$P_{\sigma u} = e^{-0,5 \cdot L \cdot m \cdot 0,693} = e^{-0,3466 \cdot L \cdot m}. \quad (4)$$

Из выражения (4) видно, что сложным в этой формуле является определение величины L – количества затухающих движений, которые приходятся на одну одинарную усредненную химическую связь в молекулах продуктов реакции. Сложность заключается в том, что вариантов расчета L должно быть не меньше, чем столько, сколько су-

существует расхождений в многообразии химических связей, которые систематизированы в основные типы – ковалентные, ионные, донорно-акцепторные и др. Поэтому уравнение (4) учитывает базис величины ($L \cdot m$), когда условно принята тождественность одинарных связей. С учетом сглаживания разнообразия связей, уравнение (4) можно представить в виде:

$$P_{\text{бу}} = e^{-0,3466 \cdot (L_1 + L_2 + \dots + L_m)}, \quad (5)$$

где индексы $1, 2, \dots, m$ – очередность перечисления одинарных связей в продуктах реакции.

Естественно, каждая пара Ψ_s вносит неравноценный вклад в значение ΔS^\ddagger . Погрешность величины L может быть в самом учете количества степеней свободы в движениях отдельных фрагментов молекулы. Неучтенные действующие в молекуле между ядрами и электронами гравитационные и магнитные силы, которые в сравнении с электрическими силами очень малы, также внесут некоторую погрешность в величину L , поэтому неэмпирические уравнения (4,5), при получении данных высокой точности, достаточно сложны для решения. Однако, принципиально то, что значение стерического множителя бимолекулярной реакции зависит от количества усредненных одинарных связей в продуктах реакции. Поэтому более точные значения стерического множителя ($P_{\text{бу}}$) можно, вероятно, получить из эмпирической зависимости $P_{\text{бу}} = f(m)$ по статистическому анализу экспериментально изученных к настоящему времени реакций, где на точность результата может повлиять только средняя погрешность многих экспериментов. В статистическом анализе значения известных стерических множителей определялись как отношение предэкспоненциальных множителей $k_{0 \text{ эксп.}} / k_{0 \text{ макс.}}$, где $k_{0 \text{ макс.}}$, определялось при стерическом множителе $P = 1$ и трансмиссионном коэффициенте $\chi = 1$. Значения m и P отдельных известных бимолекулярных реакций представлены в таблице 1:

Таблица 1 – Значения m и P отдельных бимолекулярных реакций

№	Реакция	m	Экспериментальные					По эмпирической формуле		
			lg k_0/T	E_a , кДж/моль	$P_{\text{экс.}}$		откл., раз	P	откл., раз	
					литер	теор.			от $P_{\text{экс.}}$	от $P_{\text{экс.теор.}}$
1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11
1	$H + n-H_2 = o-H_2 + H$	2	8,940	23,012	0,035	0,031	1,13	0,115	2,17	2,45
2	$H + D_2 = HD + D$		9,000	27,196	0,044	0,035	1,26	0,115	1,73	2,17
3	$D + H_2 = HD + H_2$		8,990	20,502	0,047	0,035	1,34	0,115	1,62	2,17
4	$D + n-D_2 = o-D_2 + D$		8,710	25,104	0,029	0,018	1,61	0,115	2,62	4,22
5	$H + Br_2 = HBr + Br$		9,830	3,766	0,150	0,239	1,59	0,115	1,97	3,14
6	$H + HBr = H_2 + Br$		8,912	3,766	0,033	0,029	1,14	0,115	2,30	2,62
7	$H + HCl = H_2 + Cl$		9,400	16,736	0,110	0,089	1,24	0,115	1,45	1,17
8	$Cl + H_2 = HCl + H$		9,690	20,920	0,270	0,173	1,56	0,115	3,55	2,28
9	$Br + H_2 = HBr + H$		9,308	73,638	0,120	0,072	1,67	0,115	1,58	1,06
10	$Br + HBr = Br_2 + H$		9,130	174,891	0,200	0,048	4,17	0,115	2,63	1,58
11	$I + H_2 = HI + H$		9,750	139,746	0,350	0,199	1,76	0,115	4,61	2,62

1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11
12	$Cl + COCl = Cl_2 + CO$	3	9,130	8,117	2,000	0,048	41,66	0,025	80,00	1,92
13	$Cl + NOCl = Cl_2 + NO$		8,590	3,138	0,042	0,014	3,00	0,025	1,68	1,79
14	$NO + Cl_2 = NOCl + Cl$	4	8,000	82,006	0,014	0,004	3,50	0,016	1,14	4,00
15	$O_3 + O = O_2 + O_2$		8,980	23,430	0,011	0,034	3,09	0,016	1,15	2,13
16	$CO + Cl_2 = COCl + Cl$	5	8,500	214,639	0,040	0,011	3,64	0,0086	6,35	1,75
17	$H + CH_4 = H_2 + CH_3$		8,550	35,564	0,019	0,013	1,46	0,0066	3,02	2,06
18	$Br + CH_4 = HBr + CH_3$		9,170	74,475	0,200	0,052	3,85	0,0066	31,70	8,25
19	$Br + CH_3Br = HBr + CH_2Br$		9,130	65,270	0,230	0,048	4,79	0,0066	36,50	7,62
20	$Br + CHCl_3 = HBr + CCl_3$		7,820	37,070	0,001	0,002	2,00	0,0066	6,30	3,15
21	$Br + CCl_3Br = Br_2 + CCl_3$		9,370	40,836	0,035	0,083	2,37	0,0066	5,56	13,2
22	$CH_3 + D_2 = CH_3D + D$		7,610	49,371	0,003	0,001	3,00	0,0066	2,10	6,30
23	$CD_3 + H_2 = CD_3H + H$		7,810	46,442	0,003	0,002	1,50	0,0066	2,10	3,15
24	$COCl + Cl_2 = COCl_2 + Cl$		8,000	11,297	0,013	0,004	3,25	0,0086	2,06	1,58
25	$NO + O_3 = NO_2 + O_2$	6	7,800	9,623	0,008	0,002	4,00	0,0038	2,11	1,90
26	$COCl + NOCl = COCl_2 + NO$		9,220	3,347	0,210	0,059	3,56	0,0038	55,30	15,50
27	$NO + ClNO_2 = NOCl + NO_2$	7	7,730	27,614	0,010	0,002	5,00	0,0025	4,00	1,75
28	$CH_3 + NH_3 = CH_4 + NH_2$		7,600	41,840	0,005	0,001	5,00	0,0023	2,00	2,50
29	$CH_3 + CH_3 = C_2H_6$		9,240	0	0,500	0,031	16,10	0,0023	200	12,40
30	$H + C_2H_6 = H_2 + C_2H_5$	8	8,010	26,778	0,003	0,004	1,33	0,0015	1,57	2,22
31	$CH_3 + CH_3F = CH_4 + CH_2F$		6,960	36,401	0,0009	0,0003	3,00	0,0015	2,00	6,00
32	$CH_3 + CH_3Cl = CH_4 + CH_2Cl$		7,400	39,330	0,0025	0,0009	2,78	0,0015	1,39	2,00
33	$CH_3 + CH_2Cl_2 = CH_4 + CHCl_2$		6,660	30,125	0,0004	0,00016	2,50	0,0015	4,50	11,25
34	$CH_3 + CH_2Br_2 = CH_4 + HBr_2$		7,260	36,401	0,0012	0,0006	2,00	0,0015	1,50	3,00
35	$C_2H_5 + D_2 = C_2H_5D + D$		7,200	55,647	0,001	0,0006	1,67	0,0015	1,80	3,00
36	$CH_3 + CH_3OH = CH_4 + \text{радикал}$	9	6,400	34,309	0,0002	0,00009	2,22	0,0013	6,50	14,4
37	$NO_2 + NO_2 = N_2O_4$		7,780	0	0,010	0,0011	9,09	0,0013	7,69	1,18
38	$CH_3 + CH_3NH_2 = CH_4 + \text{радикал}$	10	7,020	75,146	0,001	0,0004	2,50	0,00096	1,04	2,40
39	$CH_3 + \text{окись этилена} = CH_4 + \text{радикал}$		6,830	45,187	0,0005	0,0002	2,50	0,00096	1,92	4,80
40	$CH_3 + C_2H_4 = CH_4 + C_2H_3$		6,970	41,840	0,0007	0,0003	2,50	0,00096	1,37	3,20
41	$CH_3 + C_2H_6 = CH_4 + C_2H_5$	11	6,990	43,514	0,0007	0,0003	2,50	0,00057	1,06	2,47
42	$CH_3 + Hg(CH_3)_2 = CH_4 + CH_2HgCH_3$		6,050	37,656	0,00008	0,0001	1,25	0,00057	9,25	7,40
43	$CH_3 + CH_3CHO = CH_4 + CH_3CO$		7,620	31,380	0,0037	0,0015	2,47	0,00074	5,00	2,03
44	$CH_3 + C_2H_5OH = CH_4 + C_2H_5O$	12	7,180	36,401	0,0012	0,0005	2,40	0,00058	2,07	1,16
45	$CH_3 + (CH_3)NH = CH_4 + \text{радикал}$		7,010	30,125	0,00078	0,0004	1,95	0,00058	1,34	1,45
46	$CH_3 + (CH_3)_2O = CH_4 + CH_2OCH_3$		7,210	39,748	0,0012	0,0006	2,00	0,00043	2,07	1,03

Продолжение таблицы 1

1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11
47	2C ₂ F ₄ =цикло-C ₄ F ₈	12	6,580	107,110	0,0078	0,0001	78,00	0,00058	13,4	5,80
48	2C ₂ F ₃ Cl= =цикло-C ₄ F ₆ Cl ₂		5,910	107,110	0,0018	0,00003	60,00	0,00058	3,10	19,30
49	C ₂ F ₄ +C ₂ F ₃ Cl= =цикло-C ₄ F ₇ Cl		6,300	107,110	0,0004	0,00007	5,71	0,00058	1,45	8,29
50	CH ₃ +пропилен= =CH ₄ +радикал	13	6,480	32,217	0,00022	0,0001	2,20	0,00047	2,14	4,70
51	CH ₃ +циклопропан= =CH ₄ +радикал		6,690	43,095	0,00036	0,0002	1,80	0,00034	1,31	2,35
52	Изобутан+HBr= =трет-C ₄ H ₉ Br		6,400	92,466	0,0002	0,0001	2,00	0,00047	2,35	4,70
53	CH ₃ +CH ₃ COCH ₃ = =CH ₄ +CH ₂ COCH ₃	14	7,360	40,585	0,0018	0,0008	2,25	0,00038	4,74	2,11
54	CD ₃ +CD ₃ COCD ₃ = =CD ₄ +CD ₂ COCD ₃		7,570	48,534	0,0031	0,001	3,10	0,00038	8,16	2,63
55	CH ₃ +изо-C ₃ H ₇ OH= =CH ₄ +радикал	15	6,710	30,543	0,00033	0,0002	1,65	0,00032	1,03	1,60
56	CH ₃ +1-бутин= =CH ₄ +радикал		7,610	38,074	0,0031	0,0014	2,21	0,00032	9,69	4,38
57	CH ₃ +2-бутин= =CH ₄ +радикал		7,360	35,982	0,0018	0,0008	2,25	0,00032	5,63	2,50
58	CH ₃ +2-бутен= =CH ₄ +радикал	16	6,880	32,217	0,00048	0,0003	1,60	0,00027	1,78	1,11
59	CH ₃ +изобутан= =CH ₄ +радикал		6,620	30,543	0,00026	0,00015	1,73	0,00018	1,04	1,80
60	CH ₃ +1-бутен= =CH ₄ +радикал		6,890	31,798	0,00048	0,0003	1,60	0,00027	1,78	1,11
61	CH ₃ +циклобутан= =CH ₄ +радикал		7,210	38,911	0,001	0,0006	1,67	0,00018	3,70	2,22
62	CH ₃ +(CH ₃) ₃ N= =CH ₄ +радикал		7,560	36,819	0,0023	0,0013	1,77	0,00018	8,52	4,81
63	CH ₃ +п-C ₄ H ₁₀ = =CH ₄ +C ₄ H ₉	17	6,730	34,727	0,00033	0,0002	1,65	0,00015	1,43	1,16
64	CH ₃ +изобутан= =CH ₄ +C ₄ H ₉		6,690	31,798	0,0003	0,0002	1,50	0,00015	1,30	1,16
65	C ₂ H ₄ +бутадиен= =циклогексен		5,800	111,713	0,00004	0,00002	2,00	0,00023	5,75	11,50
66	CH ₃ + зо пропилен. Эфир=CH ₄ +радикал	18	6,790	30,543	0,00027	0,0002	1,35	0,00019	1,42	1,05
67	Бутадиен+(CN) ₂ = =2-циано-3,6- дигидропиридин		7,560	129,704	0,0023	0,0013	1,77	0,00019	12,10	6,84
68	CH ₃ +1-пентен= =CH ₄ +радикал	19	6,900	31,798	0,00039	0,0003	1,30	0,00017	2,29	1,76
69	CH ₃ +3-метил-1- бутен=CH ₄ +радикал		6,980	30,962	0,00048	0,00034	1,41	0,00017	2,82	2,00
70	CH ₃ +циклопентан= =CH ₄ +радикал		7,090	34,727	0,00078	0,00043	1,81	0,00010	4,59	2,53
71	CH ₃ +бензол= =CH ₄ +радикал		6,120	38,493	0,00007	0,00005	1,40	0,00017	2,43	3,40
72	CH ₃ +п-C ₅ H ₁₂ = =CH ₄ +C ₅ H ₁₁	20	6,740	33,890	0,00028	0,0002	1,40	0,00009	1,87	1,33

1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11
73	Бутадиен+акролеин= =1,2,3,6-тетра- гидроксобензальдегид	20	4,650	80,751	$3 \cdot 10^{-6}$	$14 \cdot 10^{-7}$	2,14	0,00015	50,00	107,0
74	СН ₃ +2,3-диметил-1- бутен=СН ₄ +радикал	22	7,330	32,635	0,0009	0,0008	1,13	0,00011	8,18	7,27
75	СН ₃ +циклогексан= =СН ₄ +радикал		7,030	34,727	0,00054	0,0004	1,35	0,00007	4,91	3,64
76	СН ₃ +толуол=СН ₄ + + радикал		6,830	34,727	0,0003	0,00024	1,25	0,00011	2,73	2,18
77	2 бутадиен= =винилциклогексен		6,460	108,784	0,00036	0,0001	3,60	0,00011	3,27	1,10
78	СН ₃ +п-С ₆ Н ₁₄ =СН ₄ + +С ₆ Н ₁₃	23	6,830	33,890	0,00029	0,0002	1,45	0,00006	2,93	2,02
79	С ₂ Н ₅ + С ₂ Н ₅ СОС ₂ Н ₅ = С ₂ Н ₆ + С ₂ Н ₄ СОС ₂ Н ₅		6,600	30,962	0,0003	0,00014	2,14	0,0001	3,03	1,41
80	С ₂ Н ₅ +С ₂ Н ₅ НгС ₂ Н ₅ = =С ₂ Н ₆ +С ₂ Н ₄ +Нг+ +С ₂ Н ₅	25	6,500	30,962	0,00025	0,00011	2,27	0,000044	3,16	1,39
81	2 [1,3-пентадиен]= =димер		5,920	106,274	0,0001	0,00003	3,33	0,000079	1,72	1,93
82	СН ₃ +2,3,4- триметилпентан= =СН ₄ +радикал	29	7,020	37,054	0,00039	0,00037	1,05	0,000028	7,36	6,98
83	2 [2,3-диметил- бутадиен]=димер	34	5,520	103,345	0,00004	$12 \cdot 10^{-6}$	3,33	$34 \cdot 10^{-6}$	1,18	2,83

В табл. 1 значения трансмиссионных коэффициентов приняты при условии, что для эндотермической реакции обратной является экзотермическая реакция, у которой приблизительное значение энергии активации может быть принято равным нулю, поэтому, следуя рекомендации [6], трансмиссионный коэффициент принимается равным 0,5.

По экспериментальным данным, представленным в табл. 1, графически определили, что зависимость $P_{\sigma u} = f(m)$ должна описываться уравнением кривой со степенным одночленом типа $P_{\sigma u} = a_0 \cdot m^{-a_1}$. Коэффициенты a_0 и a_1 определили по методу наименьших квадратов и получили уравнения:

$$P_{\sigma u} = 0,5 \cdot m^{-2,718}; \quad (6)$$

$$\ln P_{\sigma u} = -0,693 - 2,718 \cdot \ln m. \quad (7)$$

Некоторые отклонения $P_{\text{эксн. (литер.)}}$ (столбец 6) от $P_{\text{эксн. (теор.)}}$ (столбец 7), возможно вызваны тем, что последние не содержат в себе составляющую трансмиссионного коэффициента. Анализ данных табл. 1 свидетельствует о работоспособности эмпирической формулы для теоретического расчета стериических множителей к уравнению для константы скорости на основе подсчета одинарных химических связей в простых бимолекулярных реакциях. Из рассмотренных 83 экспериментов вытекает, что с точностью определения до 1 порядка проведено 91, 6 % опытов и только 8,4 % опытов – с точностью от 1 до 2 порядков.

Многие авторы для адиабатических реакций трансмиссионный коэффициент приравнивают 1, для неадиабатических реакций он меньше 1 [3,4], где элементарные реакции сопровождаются электронными переходами, что приводит к снижению предэкспоненциального множителя. Статистический анализ тех же 83 экспериментов при $\chi = 1$ приводит к зависимости для бимолекулярных реакций:

$$\lg P_{\sigma u} = 0,113 - 3,117 \cdot \lg m. \quad (8)$$

Если, например, оба реагента – одновалентные атомы водорода, то образуется только одна химическая связь ($m = 1$), а стерический множитель, как составная часть предэкспоненциального множителя, должен равняться единице ($P_{\sigma u} = 1$). Анализ уравнения (8) показывает, что в этом случае $P_{\sigma u} = 1,297$, т.е. неточность расчетной формулы составляет 29,7 % в сторону завышения. С учетом корреляции на погрешность для всех бимолекулярных реакций, в которых образуются только одинарные связи, уравнение (8) может быть преобразовано к виду:

$$\lg P_{\sigma u} = -3,117 \cdot \lg m, \quad (9)$$

где при $m = 1$, $P_{\sigma u} = 1$.

Общее уравнение переходного состояния Эйринга-Поляньи для константы скорости газовой простой элементарной реакции [1]:

$$k = e \cdot \frac{k_{\sigma}^{\ddagger}}{h} \cdot T \cdot P_{\sigma u} \cdot e^{-\frac{\Delta H^{\ddagger}}{R \cdot T}}, \quad (10)$$

где $k = e \cdot \frac{k_{\sigma}^{\ddagger}}{h} = 5,662 \cdot 10^{10} \text{ c}^{-1}$ для концентраций, выраженных в моль/л.

Значение энтальпии активации $-\Delta H^{\ddagger}$ составляет [7]:

для бимолекулярных реакций обмена	$-\Delta H^{\ddagger} = 0,847 \cdot R \cdot T - E;$
для бимолекулярных реакций присоединения	$-\Delta H^{\ddagger} = 0,597 \cdot R \cdot T - E.$

При подстановке значений энтальпий активации в уравнение Аррениуса типа $k = k_0 \cdot e^{-\frac{E}{R \cdot T}}$, получаем значения предэкспоненциальных множителей (k_0):

для бимолекулярных реакций обмена

$$k_0 = 4,861 \cdot 10^{10} \cdot T \cdot P_{\sigma u}, \quad (11)$$

для бимолекулярных реакций присоединения

$$k_0 = 3,786 \cdot 10^{10} \cdot T \cdot P_{\sigma u}. \quad (12)$$

Таким образом, приведенными статистическими исследованиями раскрывается сущность стерического множителя к уравнению для константы скорости бимолекулярных реакций, как коэффициента, который учитывает долю столкновений реагентов,

приводящих к реакционному взаимодействию при наличии несогласованных движений частиц.

Поскольку при расчете стерических множителей бимолекулярных реакций по полученным уравнениям имеется достаточное согласование между их расчетными и экспериментальными значениями, то эмпирические уравнения (11) и (12) можно рекомендовать для количественной оценки констант скорости бимолекулярных реакций вне эксперимента.

Литература

1. Лебедев Н.Н., Манаков М.Н., Швец В.Ф. Теория технологических процессов основного органического и нефтехимического синтеза. – М.: Химия, 1975. – 478 с.
2. Бурштейн К.Я., Шорыгин П.П. Квантово химические расчеты в органической химии и молекулярной спектроскопии. – М.: Наука, 1989. – 104 с.
3. Панченков Г.М., Лебедев В.П. Химическая кинетика и катализ. – М.: изд. Московского университета (МГУ), 1961. – 552 с.
4. Краснов К.С. Молекулы и химическая связь. М.: Высшая школа, 1984. – 295 с.
5. Технология связанного азота / Под ред. В.И. Атрощенко. – К.: Высшая школа, 1985. – 328 с.
6. Бенсон С. Основы химической кинетики. – М.: Мир, 1964. – 604 с.
7. Кравченко И.В., Дышловой В.И., Шаповалова И.Н. Низкотемпературное окисление азота. Обоснование возможности расчетными методами (в 4-х сообщениях). Сообщение 3. расчет констант скоростей реакций. – К.: Хімічна промисловість України, № 3, 2005, С. 25–31.

Bibliography (transliterated)

1. Lebedev N.N., Manakov M.N., Shvets V.F. Teoriya tehnologicheskikh protsessov osnovnogo organicheskogo i neftehimicheskogo sinteza. – M.: Himiya, 1975. – 478 p.
2. Burshteyn K.Ya., Shoryigin P.P. Kvantovo himicheskie rascheti v organicheskoy himii i molekulyarnoy spektroskopii. – M.: Nauka, 1989. – 104 p.
3. Panchenkov G.M., Lebedev V.P. Himicheskaya kinetika i kataliz. – M.: izd. Moskovskogo universiteta (MGU), 1961. – 552 p.
4. Krasnov K.S. Molekulyi i himicheskaya svyaz. M.: Vysshaya shkola, 1984. – 295 p.
5. Tehnologiya svyazannogo azota Pod red. V.I. Atroschenko. – K.: Vysshaya shkola, 1985. – 328 p.
6. Benson S. Osnovy himicheskoy kinetiki. – M.: Mir, 1964. – 604 p.
7. Kravchenko I.V., Dyishlovoy V.I., Shapovalova I.N. Nizkotemperaturnoe okislenie azota. Obosnovanie vozmozhnosti raschetnyimi metodami (v 4-h soobscheniyah). Soobschenie 3. raschet konstant skorostey reaktsiy. – K.: Himichna promislolist Ukrayini, # 3, 2005, p. 25–31.

УДК 554.421: 544.144.7: 541.115

Філончук А.В., Кравченко І.В., Дишловий В.І.

**ЕМПІРИЧНИЙ РОЗРАХУНОК ПЕРЕДЕКСПОНЕНЦІЙНИХ МНОЖНИКІВ
У РІВНЯННІ КОНСТАНТИ ШВИДКОСТІ ДЛЯ БІМОЛЕКУЛЯРНИХ РЕАКЦІЙ**

Проведені статистичні дослідження стеричних множників у рівнянні константи швидкості для бімолекулярних реакцій. Виведені емпіричні рівняння розрахунку стеричних множників в залежності від кількості одинарних або одинарних усереднених зв'язків в продуктах реакції, які можна рекомендувати для кількісної оцінки констант швидкості бімолекулярних реакцій поза експериментом.

УДК 661.5:544.4

Гринь Г.И., Казаков В.В., Кузнецов П.В., Кучер К.А.

**РАЗРАБОТКА НОВЫХ ТЕХНОЛОГИЧЕСКИХ СХЕМ
УЧЕНЫМИ НАУЧНОЙ ШКОЛЫ В.И. АТРОЩЕНКО
В ОБЛАСТИ ТЕХНОЛОГИИ СВЯЗАННОГО АЗОТА**

Введение. Начиная с 80-х годов прошлого века ученые проводили широкие исследования проблемы утилизации и обезвреживания сложных многокомпонентных химических систем на основе концентрированной HNO_3 . Такие исследования выполнялись в Харьковском политехническом институте под руководством академика АН УССР В.И. Атрощенко впервые не только в Советском Союзе, но и во всем мире. Активное участие в разработке физико-химических основ для создания новых технологических процессов принимали В.В. Кутовой, В.И. Созонтов, М.М. Караваев, В.М. Каут, А.Г. Удовенко, Н.И. Смалый, В.В. Казаков, С.А. Саломашина, И.В. Волохов и др. Этими авторами проведены исследования сложных систем при различных технологических параметрах, определены оптимальные условия процессов, проведены испытания в промышленных условиях, что сформировало предпосылки создания новых технологических схем.

Целью работы является разработка новых технологических схем утилизации растворов концентрированной нитратной кислоты и оксидов азота, содержащих HF и H_3PO_4 .

Технологические схемы утилизации растворов на основе концентрированной HNO_3 . Некондиционные растворы на основе концентрированной HNO_3 , как показали результаты теоретических и экспериментальных исследований, могут быть переработаны в нитратную кислоту, которая является сырьем для производства аммиачной или кальциевой селитры и других сложных минеральных удобрений, несколькими способами [1–4]:

- непосредственным разбавлением водой или слабой нитратной кислотой;
- ректификацией;
- предварительным извлечением ингибиторов коррозии с помощью азотнокислых солей алюминия или кальция с последующим разбавлением или разделением обесфторенного нитроолеума.

Самым простым и эффективным способом утилизации некондиционных растворов является их непосредственное разбавление водой или слабой нитратной кислотой, проведение которого возможно на существующем промышленном агрегате производства неконцентрированной HNO_3 . Изучение химического равновесия между оксидами азота и водными растворами нитратной кислоты позволило установить влияние фтористого водорода и ортофосфорной кислоты на константу равновесия реакции кислотообразования, а исследование процессов разбавления растворов и абсорбции, образующихся при этом нитрозных газов – определить степень поглощения ингибирующих добавок. Однако, коррозионные испытания конструкционных материалов, из которых изготовлены существующие промышленные агрегаты производства слабой нитратной кислоты, показали, что даже при значительном разбавлении растворов и достижении массовой концентрации HF , равной 0,006 %, скорость разрушения металлов составляет около 10,7–11,1 г/м²·ч, в то время, как при отсутствии HF этот показатель равен 0,1 г/м²·ч.

Единственным устойчивым материалом по отношению к образуемому водному раствору нитратной и плавиковой кислот является дорогостоящий и дефицитный фторопласт. Создание установки из этого материала потребует значительных капитальных затрат. Причем установка может быть смонтирована только в составе производства нитрата кальция или азотнокислого разложения природных фосфатов, так как при получении аммиачной селитры будет образовываться фтористый аммоний – легколетучее и ядовитое вещество.

Процесс ректификации водных растворов нитратной кислоты и оксидов азота, содержащих HF и H_3PO_4 , является более сложным и энергоемким по сравнению с их разбавлением. С целью реализации процесса ректификации было изучено фазовое равновесие жидкость–пар в многокомпонентной системе $HNO_3-N_2O_4-H_2O-HF-H_3PO_4$ и установлено взаимное влияние веществ, находящихся в жидкой фазе, на их содержание в парах и кинетика выделения HF из этих растворов.

Исследования показали, что содержание H_3PO_4 в паровой фазе на 3 порядка ниже, чем в жидкой фазе. С ростом концентраций HF, H_2O и оксида азота (IV) в жидкой фазе содержание H_3PO_4 в парах существенно снижается вследствие образования гидратов и комплексных соединений, а также понижения температуры кипения растворов.

Содержание воды в паровой фазе прямо пропорционально ее концентрации в жидкости, а содержание HF в парах увеличивается с ростом ее концентрации в жидкости и понижением концентрации H_2O и оксида азота (IV) в системе.

На основании равновесных данных рассчитаны числа теоретических тарелок при различных флегмовых числах, которые были уточнены при изучении различных технологических и гидродинамических параметров процесса ректификации. Кинетика процесса выделения HF методом испарения в сочетании с равновесными данными дала возможность разработать конструкцию ректификационной колонны и определить ее габариты.

Проведенные физико-химические и технологические исследования показали, что паровая фаза обогащена HF, оксидами азота и нитратной кислотой, которые при ректификации выводят с дистиллятом, а в кубе получают водный раствор HNO_3 и H_3PO_4 . Полное удаление HF с дистиллятом, которое необходимо для безопасности процесса и надежности работы оборудования, не может быть достигнуто только величиной флегмового числа. Для этого необходимо также разделение флегмы на два потока и подача одного из них в верхнюю, а другого в нижнюю части зоны испарения раствора.

С учетом полученных научно-исследовательских результатов и технических решений разработана технологическая схема утилизации водных растворов нитратной кислоты и оксидов азота, содержащих HF и H_3PO_4 , методом ректификации. Принципиальная схема установки представлена на рисунке 1.

Процесс ректификации проводят при атмосферном давлении. Раствор, содержащий 68,0 % HNO_3 , 25,0 % N_2O_4 , 5,0 % H_2O , 0,7 % HF и 1,3 % H_3PO_4 из емкости 1 подают погружным насосом 2 в верхнюю часть ректификационной колонны 3 на орошение зоны испарения. Пары нитратной кислоты, оксидов азота и фтористого водорода с температурой 65–75 °С через брызгоотделитель, расположенный вверху колонны, поступают в водяной холодильник-конденсатор 8, в котором при 45–50 °С конденсируется часть нитратной кислоты. Парожидкостную смесь разделяют в сепараторе 9. Паровую фазу, содержащую 69,2 % HNO_3 , 30,0 % N_2O_4 и 0,8 % HF из сепаратора 9 направляют в охлаждаемый рассолом с температурой $-12 \div -16$ °С холодильник-конденсатор 10, из которого жидкую фазу с температурой $-5 \div -8$ °С направляют в сборник 12. В сепараторе 9 жидкую нитратную кислоту делят на две части.

Одну часть нитратной кислоты направляют на орошение зоны испарения ректификационной колонны 3, а другую часть под зону испарения на орошение исчерпывающей части колонны. Подача флегмы в верхнюю и нижнюю части зоны испарения позволяет при минимальной ее высоте повысить степень выделения фтористого водорода из раствора за счет обеспечения высокой концентрации HNO_3 во всем объеме зоны испарения.

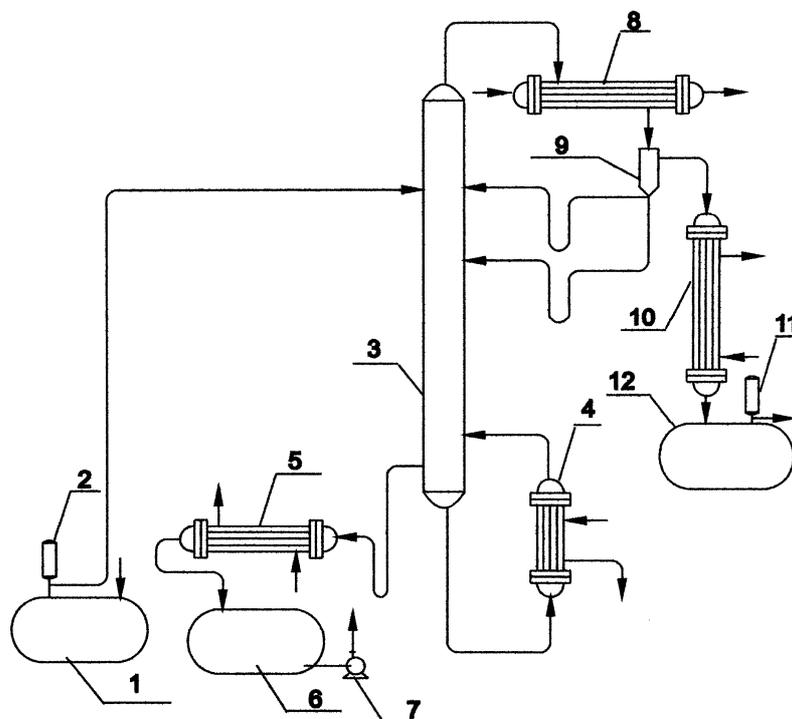


Рисунок 1 – Принципиальная технологическая схема утилизации водных растворов азотной кислоты и оксидов азота, содержащих фтористый водород и ортофосфорную кислоту методом ректификации: 1 – емкость; 2, 7, 11 – насос; 3 – ректификационная колонна; 4 – кипятильник; 5 – холодильник; 6, 12 – сборник; 8, 10 – холодильник-конденсатор; 9 – сепаратор

Из зоны испарения водный раствор HNO_3 и H_3PO_4 поступает на орошение исчерпывающей части ректификационной колонны 3, где он обедняется нитратной кислотой и его температура повышается до $122\text{ }^\circ\text{C}$. Из куба ректификационной колонны 3 68 %-ю HNO_3 , содержащую 6 % H_3PO_4 , подают в водяной холодильник 5, из которого с температурой $40\text{--}45\text{ }^\circ\text{C}$ направляют в сборник 6.

Водный раствор нитратной и ортофосфорной кислот используют в производстве аммиачной и кальциевой селитры или сложных минеральных удобрений, а нитроолеум направляют на приготовление кондиционного раствора нитратной кислоты и оксидов азота, содержащих HF и H_3PO_4 .

При переработке 1000 кг некондиционного раствора получают 830 кг кондиционного нитроолеума и 170 кг водного раствора HNO_3 и H_3PO_4 . Затраты тепла составляют 1300 кДж, а холода – 970 кДж.

Технологическая схема утилизации водных растворов нитратной кислоты и оксидов азота, содержащих HF и H_3PO_4 , методом ректификации дает возможность на 83 % регенерировать продукт, что целесообразно при его дальнейшем потреблении. При отсутствии потребности необходима такая технология, которая позволит получать другие полезные продукты. Одним из реальных и эффективных вариантов реализации технологического процесса утилизации растворов является предварительное извлече-

ние из них фтористого водорода с помощью азотнокислых солей алюминия или кальция, которые образуют нерастворимые фториды в системе. Теоретические исследования, подтвержденные изучением физико-химических свойств системы и технологическими испытаниями, в ходе которых были установлены оптимальные параметры полного извлечения фтористого водорода, позволили разработать способ утилизации растворов. Показано, что существенное влияние на степень извлечения HF оказывает время взаимодействия, исходное соотношение реагентов, концентрация HNO_3 и содержание H_3PO_4 . Полное извлечение HF может быть достигнуто при избытке солей, которое необходимо для смещений равновесий реакций в сторону образования нерастворимых и трудно растворимых соединений. Образующиеся мелкодисперсные частицы необходимо отделять на фильтрующем элементе с диаметром пор не более $2 \cdot 10^{-5}$ м. Твердую фазу, содержащую нитраты, фториды и фосфаты алюминия или кальция, промывают и направляют в отвал или применяют в силикатном и гипсовом производствах. Обесфторенный водный раствор нитратной кислоты и оксидов азота, содержащий примеси фосфатов и нитратов, разделяют в отбелочной колонне. Оксиды азота используют в производстве концентрированной нитратной кислоты, а отбеленную HNO_3 разбавляют и направляют на производство аммиачной селитры. Принципиальная технологическая схема утилизации водных растворов нитратной кислоты и оксидов азота, содержащих фтористый водород и ортофосфорную кислоту, с предварительным извлечением ингибиторов коррозии представлена на рисунке 2.

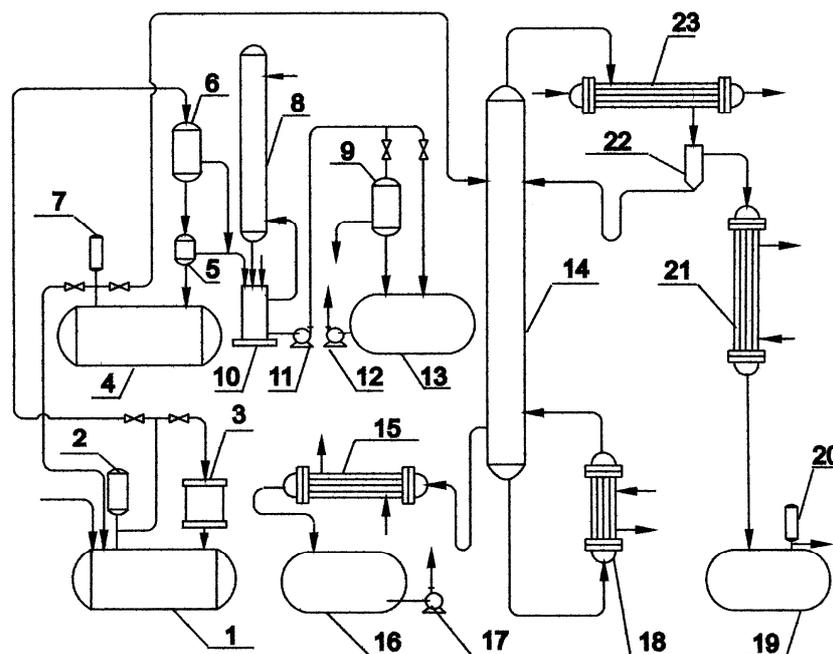


Рисунок 2 – Принципиальная технологическая схема утилизации водных растворов азотной кислоты и оксидов азота, содержащих HF и H_3PO_4 , с предварительным извлечением ингибиторов коррозии:

- 1, 4 – емкость; 2, 7, 20 – погружной насос; 3 – реактор; 5 – фильтр тонкой очистки; 6, 9 – фильтр грубой очистки; 8 – абсорбер; 10 – нейтрализатор; 11, 12, 17 – центробежный насос; 13 – сборник солевого раствора; 14 – отбелочная колонна; 15 – холодильник отбеленной кислоты; 16 – сборник отбеленной кислоты; 18 – кипятивильник; 19 – сборник жидких оксидов азота; 21 – конденсатор; 22 – сепаратор; 23 – головной холодильник

Технологический процесс включает следующие основные стадии:

- полное извлечение фтористого водорода и частичное выделение ортофосфорной кислоты из водных растворов нитратной кислоты и оксидов азота;
- разделение обесфторенного водного раствора нитратной кислоты и оксидов азота в отбелочной колонне;
- нейтрализация твердой фазы после фильтрации суспензии.

Водный раствор нитратной кислоты и оксидов азота, содержащий фтористый водород и ортофосфорную кислоту, из емкости 1 подают погружным насосом 2 в загруженный твердым реагентом реактор 3, где происходит его растворение и взаимодействие с HF и H₃PO₄. Образующаяся суспензия из реактора 3 поступает в емкость 1. При использовании нитрата алюминия процесс циркуляции и отстаивания проводят в зависимости от концентрации нитратной кислоты в течение 2–4 часов, а при использовании нитрата кальция – 4–8 часов. После полного связывания фтористого водорода в нерастворимые соединения суспензию из емкости 1 погружным насосом 2 подают последовательно через фильтр грубой очистки 6 и фильтр тонкой очистки 5 в емкость 4.

Твердую фазу, содержащую около 30–40 % водного раствора нитратной кислоты и оксидов азота, с фильтров 5 и 6 выгружает в нейтрализатор 10, в который через абсорбер 8 подают водный раствор кальцинированной соды или гашеной извести. Суспензию перемешивают воздухом, который поступает в нижнюю часть нейтрализатора 10. При этом кислородом воздуха окисляют выделяющийся в результате реакции кислотообразования монооксид азота и таким образом предотвращают образование нитритов. Очистка выходящих из нейтрализатора 10 газов от кислых паров протекает в абсорбере 8 и далее на существующей установке низкотемпературной каталитической очистки.

Из нейтрализатора 10 суспензию подают насосом 11 на фильтр 9, откуда твердую фазу, содержащую фториды, фосфаты и нитраты, направляют в отвал, а фильтрат в сборник 13, а затем на существующую химическую очистку. Суспензия содержит безвредные компоненты, которые не создают угрозы для окружающей среды, и может быть использована в качестве добавки для аммиачной селитры.

Обесфторенный водный раствор нитратной кислоты и оксидов азота из емкости 4 погружным насосом 7 подают в верхнюю часть отбелочной колонны 14. Газообразные оксиды азота, содержащие нитратную кислоту из верха отбелочной колонны, поступают в головной холодильник 23, где при температуре 35–40 °С частично конденсируют и парожидкостную смесь отводят в сепаратор 22. Жидкую фазу из сепаратора 22 подают на орошение отбелочной колонны 14, а пары поступают в конденсатор 21, в котором полностью конденсируют при температуре –5 ÷ –8 °С, и жидкие оксиды азота направляют в сборник 19. Отбеленную 90–95 %-ю нитратную кислоту с температурой 85–90 °С из куба отбелочной колонны 14 подают в холодильник 15, из которого с температурой 25–30 °С направляют в сборник 16. Жидкие оксиды азота погружным насосом 20 из сборника 19 подают в автоклавное отделение для получения концентрированной нитратной кислоты методом прямого синтеза. Водный раствор нитратной кислоты из сборника 16 центробежным насосом 17 направляют в узел приготовления 58–60 %-й HNO₃, которую используют в производстве аммиачной или кальциевой селитры и других сложных минеральных удобрений. Кроме того, 90–95 %-ю HNO₃ можно применять для получения нитратной кислоты особой чистоты, используемой в электронной промышленности, а также для производства сложных нитрующих смесей на основе растворов HNO₃-N₂O₅.

При переработке 1000 кг водного раствора нитратной кислоты и оксидов азота, содержащих HF и H₃PO₄, получают 240 кг жидких оксидов азота, 750 кг 90–95 %-й

HNO_3 . Расход реагентов составляет 50–100 кг, образуется 50 кг твердых отходов и 60 кг водного раствора солей, затраты тепла равны 336 кДж, а холода – 294 кДж.

Выводы. Таким образом, на основе проведенных исследований разработаны и предложены технологические схемы переработки водных растворов нитратной кислоты и оксидов азота, содержащих фтористый водород и ортофосфорную кислоту, различными методами. Показано, что наиболее эффективным способом полной утилизации растворов является предварительное извлечение фтористого водорода с помощью азотнокислых солей алюминия или кальция и переработка обезфторенного нитроолеума в концентрированную и слабую нитратную кислоту на существующем оборудовании цеха производства концентрированной HNO_3 методом прямого синтеза.

Литература

1. Созонтов В.Г. Технологічні схеми переробки некондиційних розчинів азотної кислоти та оксидів азоту, які містять фтороводень та ортофосфорну кислоту // Хімічна промисловість України. – 1999. – № 3. – С. 10–13.

2. Пат. 72175 України, МКИ 7 С 06 В 47/04, С 01 В 21/38 № 98073603 (UA). Спосіб переробки окислювача на основі азотної кислоти / Созонтов В.Г., Лобойко О.Я., Гринь Г.І., Кармазін І.Г., Казаков В.В. та ін. Заявл. 07.07.1998; Опубл. 15.02.2005; Бюл. № 2.

3. Казаков В.В., Созонтов В.И., Бондарев В.Н. Переработка фторсодержащих меланжей на основе азотной кислоты в полезные продукты // Збірка тез доповідей Всеукраїнської науково – методичної конференції "Екологія та інженерія. Стан, наслідки, шляхи утворення екологічно чистих технологій". – Дніпродзержинськ: ДДТУ. – 1996. – С. 63.

4. Исследование процесса получения аммиачной селитры из растворов азотной кислоты и оксидов азота, содержащих ингибиторы коррозии / Казаков В.В., Кармазин И.Г., Гринь Г.И., Созонтов В.И. // Сборник трудов по технической химии. – Киев. – 1997. – С. 449–451.

Bibliography (transliterated)

1. Sozontov V.G. Tehnologichni shemi pererobki nekonditsiynih rozchiniv azotnoyi kisloti ta oksidiv azotu, yaki mistyat ftorovoden ta ortofosfornu kislotu Himichna promislovist Ukraini. – 1999. – # 3. – p. 10–13.

2. Pat. 72175 Ukraini, MKI 7 S 06 V 47/04, S 01 V 21/38 # 98073603 (UA). Sposib pererobki okislyuvacha na osnovi azotnoyi kisloti Sozontov V.G., Loboyko O.Ya., Grin G.I., Karmazin I.G., Kazakov V.V. ta in. Zayavl. 07.07.1998; Opubl. 15.02.2005; Byul. # 2.

3. Kazakov V.V., Sozontov V.I., Bondarev V.N. Pererabotka ftorsoderzhaschih melanzhey na osnove azotnoy kisloty v poleznyie produkty Zbirka tez dopovidey Vseukrayinskoyi naukovo – metodichnoyi konferentsiyi "Ekologiya ta inzheneriya. Stan, naslidki, shlyahi utvorenniya ekologichno chistih tehnologiy". – Dniprodzerzhinsk: DDTU. – 1996. – p. 63.

4. Issledovanie protsessa polucheniya ammiachnoy selitryi iz rastvorov azotnoy kisloty i oksidov azota, soderzhaschih ingibitoryi korrozii Kazakov V.V., Karmazin I.G., Grin G.I., Sozontov V.I. Sbornik trudov po tehnicheckoy himii. – Kiev. – 1997. – p. 449–451.

УДК 661.5:544.4

Гринь Г.І., Казаков В.В., Кузнєцов П.В., Кучер К.А.

**РОЗРОБКА НОВИХ ТЕХНОЛОГІЧНИХ СХЕМ
УЧЕНИМИ НАУКОВОЇ ШКОЛИ В.І. АТРОЩЕНКА
В ГАЛУЗІ ТЕХНОЛОГІЇ ЗВ'ЯЗАНОГО АЗОТУ**

Розглянуто способи переробки некондиційних розчинів на основі концентрованої нітратної кислоти. Запропоновано технологічні схеми утилізації складних багатокомпонентних систем на основі концентрованої HNO_3 , які вміщують HF і H_3PO_4 . З'ясовано витрати основних компонентів при знешкодженні 1 т речовини.

АНОТАЦІЙНИЙ ЗМІСТ

Aleksahin A.A.

THE CALCULATION OF THERMAL LOSS IN PIPELINES OF BRANCHED HEATING SYSTEMS

The rated relationship to determine thermal loss in an input pipeline of a branched heating system is proposed. The effect of temperature and the relationship of the heat-transport medium in the initial and end-point branches of a system on the accuracy of thermal loss evaluation is studied.

Kravchenko O.V.

GENERALISED MODEL OF A SYSTEM FOR FORMING PROCESSES AND TECHNOLOGIES TO INCREASE THE EFFECTIVENESS OF EXTRACTING, PROCESSING AND USING HYDROCARBON ENERGY CARRIERS

Based on the large systems philosophy, a generalised model has been devised for a system of forming processes and technologies to increase the effectiveness of extracting, processing and using hydrocarbon energy carriers. The base components of the generalised model are processes for intensifying extraction, the processing technology, and the technology of using hydrocarbon energy carriers. The generalised model of the system for forming processes and technologies for energy conversion allowed to conduct a theoretical analysis of methods of increasing the effectiveness of the industrial processes of intensifying extraction, processing and using hydrocarbon energy carriers, as well as to develop apparatuses and devices for the implementation thereof.

Bugaenko O.M.

GAS-TURBINE UNIT WITH EJECTION NOZZLE FOR SOLUTION PROBLEMS OF OIL POLLUTION PURIFICATION

The questions of gas turbine ejection nozzle for passing sorbent to emergency oil overflow area calculation and design are reviewed. Sorbent characteristics of sawdust are also reviewed.

Ogurtsov A.N.

RADIATION TECHNOLOGIES OF MODEL CRYSTAL MODIFICATION BY ELECTRONIC EXCITATIONS: 4. DESORPTION FROM ATOMIC CRYOCRYSTALS

Desorption of atoms and excimers from rare-gas solids as a result of electronic excitation relaxation was studied using the thermoactivation, cathodo-, and photoselective luminescence spectroscopy methods. Excitonic and electronic scale mechanisms of desorption from atomic cryocrystals were distinguished. In combination with luminescence-kinetic analysis of radiation-induced processes these mechanisms may be used for controlled modification of sample surface and for analytical control and certification of crystals during technological treatment by of electron, photon and ion beams.

Lojan A., Narizhniy A., Plankowskiy S.

TEMPERATURE FIELD OF THE TECHNOLOGICAL PLASMATRON EMITER

They are considered mathematical model of complex heat flow, as well as regularities and particularities of the development of the temperature in plasmatron emitter on initial stage. The analysis of heat flow is conducted on base result mathematical simulation of the heat flow process.