

УДК 66.092.088

**Численное исследование процессов
теплопереноса в реакторе
плазмохимической установки,
предназначенной для обезвреживания
полихлорированных бифенилов***

И.А. Бассина¹, Ю.П. Малков¹, Г.А. Трошиненко¹, И.М. Засыпкин²

¹*Российский научный центр «Прикладная химия»,
Санкт-Петербург*

²*Институт теоретической и прикладной механики
им. С.А. Христиановича СО РАН, Новосибирск*

E-mail: rotinian@rscac.spb.ru, lab16@itam.nsc.ru

Проведены численные расчеты газодинамических и тепловых характеристик газового потока в проточной части малогабаритного плазмохимического реактора уничтожения трихлорбифенила. Исследования выполнены без учета химического взаимодействия компонентов: при расчетах уничтожаемое вещество заменено имитатором — водяным паром, в качестве окислителя также принят водяной пар. Математическая модель течения построена на основе полной системы уравнений Навье–Стокса в рамках осесимметричной постановки задачи с учетом закрутки газового потока. По результатам расчетов выбраны оптимальные геометрические параметры конструкции реактора.

Ключевые слова: плазмохимический реактор, пиролиз, обезвреживание, трихлорбифенил, газодинамика и теплообмен, конструкция реактора, оптимальные геометрические параметры.

В последние годы возникла экологическая проблема, имеющая международное значение. Она связана с необходимостью создания промышленной технологии безопасного уничтожения различных галогенорганических соединений, ранее произведенных в больших количествах и не считавшихся опасными. Сейчас эти соединения запрещены к производству и подлежат обязательному уничтожению. К таким веществам прежде всего следует отнести полихлорированные бифенилы (ПХБ), озоноразрушающие хладоны, а также промышленные отходы, содержащие эти хладоны и другую фтор- и хлорорганику.

* Работа выполнена при финансовой поддержке Федерального агентства по науке и инновациям по программному мероприятию 1.5 в рамках ФЦП “Исследования и разработки по приоритетным направлениям развития научно-технологического комплекса России”.

Для решения указанной задачи были предложены различные технологии, использующие как термические, так и химические методы.

Среди этих методов следует особо отметить плазмохимический, который имеет ряд существенных преимуществ перед остальными. Главными из этих преимуществ являются:

- возможность достижения в плазменной струе высоких среднемаховых температур (более 5500 К);
- возможность использования в качестве плазмообразующих сред практически любых технологически необходимых газов;
- возможность регулирования температурного режима в очень широких пределах.

Реализация высокотемпературных технологий связана с серьезными проблемами, которые возникают при конструировании реакторов. Эти проблемы определяются наличием коррозионно-активных компонентов в продуктах разложения. Наиболее эффективной защитой от их коррозионного воздействия на стенки реактора является водяное охлаждение стенок, однако в данном случае возникает опасность появления у стенок относительно холодного пристеночного слоя, в котором процесс деструкции уничтожаемого вещества будет протекать неэффективно, с образованием в данной зоне вторичных высокотоксичных соединений. Уменьшить эту опасность можно за счет применения огнеупорного теплозащитного материала для облицовки внутренней поверхности реактора, что позволит существенно повысить температуру стенки и, соответственно, температуру пристеночного слоя.

Огнеупорная керамика широко применяется в печных агрегатах, которые используются для уничтожения различных промышленных и бытовых отходов. При их эксплуатации температура в зоне разложения уничтожаемых веществ не превышает 1500 К, но даже в этом случае возникает необходимость в периодическом (обычно не реже одного раза в год) ремонте и замене облицовочного материала, подвергающегося сильному термическому, химическому и механическому воздействию газа.

При использовании плазмохимических технологий процесс разложения уничтожаемых веществ осуществляется при более высоких температурах, поэтому воздействие коррозионной среды на стенки реакторов в случае их изготовления из огнеупорного материала будет значительно интенсивнее, что потребует еще более частого ремонта и замены вышедших из строя реакторов.

Указанный серьезный недостаток огнеупорной теплоизоляции заставил отказаться от ее использования в реакторе плазмохимической установки, которая была создана в РИЦ «Прикладная химия». Для уменьшения тепловых потерь в реакторе пришлось использовать способ, заключающийся в разделении процесса разложения и окисления уничтожаемого вещества на две стадии [1, 2]. Первая из них осуществлялась вне реактора и заключалась в предварительном нагреве смеси галогенорганических веществ с окислителем (водяным паром) до температур, близких, но не превышающих температуры начала разложения уничтожаемых веществ. Подготовленная таким образом смесь для выполнения второй, основной, стадии вводилась в высокотемпературную зону реактора, где процесс разложения галогенорганических соединений, благодаря их предварительной подготовке, можно было осуществлять при минимально возможном времени пребывания продуктов разложения в рабочем канале реактора. В связи с этим процесс деструкции уничтожаемых веществ можно было реализовать в малогабаритном реакторе с водяным охлаждением стенок при относительно небольших потерях тепла.

В процессе создания этой плазмохимической установки были проведены предварительные численные исследования влияния основных параметров реактора (в том числе его размеров) на газодинамические и тепловые характеристики газового потока, который формируется в рабочем канале при подаче в него смеси ПХБ с окислителем. Целью этих исследований был выбор оптимальных размеров реактора и режимов его эксплуатации.

Численные исследования характеристик газового потока в реакторе, которые определяют условия разложения и окисления ПХБ, проводились без учета химического взаимодействия компонентов. Это допущение пришлось принять в связи с тем, что в настоящее время отсутствуют достаточно достоверные данные о физико-химических свойствах ПХБ при температурах выше температур их кипения, а также о константах скорости соответствующих химических реакций, которые необходимы для оценки влияния химического взаимодействия на течение смеси в реакторе. Вместе с тем можно предположить, что это влияние незначительно, так как высокие температуры газа в реакторе достигаются в основном за счет его нагрева от плазменной струи, а не за счет теплового эффекта химических реакций.

ПХБ содержат в своем составе большое количество углерода, для окисления которого до CO_2 необходимо использовать значительное количество окислителя, что приводит к большим затратам тепла на процесс разложения и окисления этих веществ.

Из различных типов ПХБ, широко применявшихся и еще применяемых в промышленности, наибольшее количество углерода (55,96 %) содержится в трихлорбифениле ($\text{C}_{12}\text{H}_7\text{Cl}_3$). Это вещество используется в качестве электроизоляционной жидкости в промышленных конденсаторах. При проведении рассматриваемых исследований трихлорбифенил был выбран в качестве уничтожаемого вещества из-за того, что для его нагрева в смеси с окислителем требуется, по сравнению с другими ПХБ, наибольшее количество тепла.

Ввиду отсутствия данных о физико-химических свойствах трихлорбифенила (ТХБ) пришлось при приведении расчетов заменить его имитатором — водяным паром, обладающим высокой теплоемкостью, которая соизмерима с теплоемкостью данного продукта. Как указано выше, в качестве окислителя также рассматривался водяной пар.

Для оценки условий формирования газового потока в реакторе и определения полей температуры, скорости и концентраций была выбрана схема проточной части рабочего канала реактора, которая представлена на рис. 1.

При проведении расчетов характеристик газового потока в реакторе предполагалось, что ввод в него плазменной струи осуществляется из соосно установленного плазмотрона ЭДП-109/200М, диаметр выходного канала которого равен 0,016 м. В качестве плазмообразующего газа был выбран азот. Его массовый расход (0,01 кг/с) и среднемаховая температура плазменной струи (5273 К) были приняты соответствующими номинальному режиму, на котором этот плазмотрон обычно эксплуатируется в промышленных условиях.

Тепловые и газодинамические характеристики газового потока в реакторе определялись

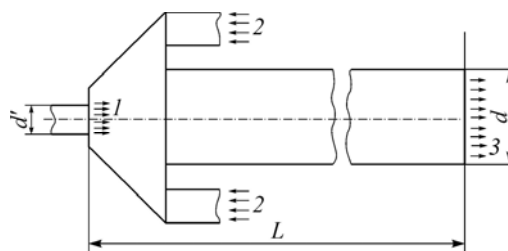


Рис. 1. Схема рабочего канала реактора. 1 — плазменная струя азота, 2 — смесь уничтожаемого вещества с окислителем, 3 — продукты разложения. Диаметр канала подачи плазменной струи азота $d' = 0,016$ м.

в предположении, что стенки реактора охлаждаются водой. В связи с этим температура внутренней поверхности рабочего канала была принята равной 300 К.

Расчеты проводились для трех значений расхода имитатора ПХБ: 0,003 кг/с, 0,005 кг/с и 0,007 кг/с. Количество окислителя, необходимое для окисления углерода до CO_2 , определялось с учетом коэффициента избытка кислорода 1,2. При этом для расхода имитатора 0,003 кг/с расход водяного пара составлял 0,00604 кг/с, для второго режима (расход имитатора 0,005 кг/с) — 0,01007 кг/с, а для третьего (расход имитатора 0,007 г/с) — 0,0141 кг/с. Предполагалось, что имитатор и окислитель поступают в реактор предварительно нагретыми до 773 К.

Исследования выполнялись для четырех значений диаметра внутреннего канала реактора: 0,05 м, 0,07 м, 0,1 м и 0,15 м. При этом считалось, что длина реактора остается неизменной и равной 1,2 м. Предполагалось также, что ввод смеси имитатора с окислителем в реактор производится с закруткой, причем продольная составляющая скорости смеси равна тангенциальной. Давление газа в реакторе принималось постоянным и равным 10^5 Па.

Тепловые и газодинамические процессы, протекающие в реакторе, описывались в рамках осесимметричной постановки задачи с учетом закрутки газового потока на основе полной системы уравнений Рейнольдса с использованием $k-\epsilon$ модели турбулентности [3]. Система включает в себя уравнение неразрывности, уравнения переноса трех составляющих вектора скорости, уравнение переноса энергии и уравнения переноса массы отдельных химических компонентов смеси — азота, имитатора и окислителя, а также два уравнения, соответствующих выбранной $k-\epsilon$ модели турбулентности. Наборы граничных условий соответствовали выбранным режимам работы реактора.

В качестве граничных условий в выходном сечении канала плазмотрона (сечение 1 на рис. 1) задавались однородные профили температуры (5273 К) и продольной составляющей скорости (779,13 м/с, что соответствует расходу азотной струи 0,01 кг/с), остальные компоненты скорости считались равными нулю.

В качестве граничных условий в сечении ввода в реактор смеси имитатора с окислителем (сечение 2 на рис. 1) принимались однородные профили следующих величин: продольной составляющей скорости, определяемой по величине заданного массового расхода смеси; скорости закрутки, равной продольной составляющей скорости (радиальная составляющая полагалась равной нулю); температуры (773 К) и концентраций имитатора и окислителя.

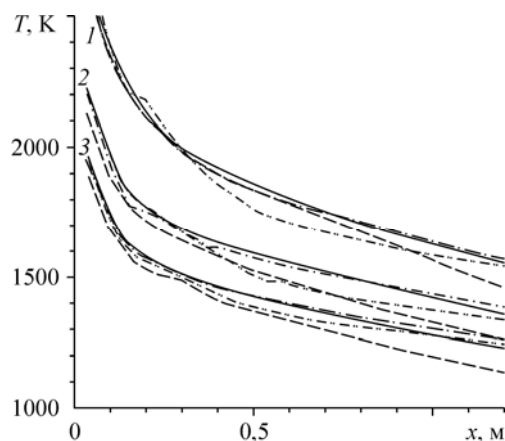
В выходном сечении рабочего канала реактора (сечение 3 на рис. 1) задавались мягкие граничные условия, т. е. производные от определяемых функций по продольной координате полагались равными нулю.

На непроницаемых стенках канала скорость полагалась равной нулю, а температура газовой смеси принималась равной температуре стенки (300 К). На стенках ставились также условия отсутствия массовых потоков компонентов газовой смеси.

Численное интегрирование указанной системы уравнений осуществлялось с помощью стандартного метода на неравномерной сетке, измельченной у твердых границ с целью наиболее точного разрешения пристеночного слоя [4].

Результаты выполненных расчетов представлены на следующих рисунках. Кривые, изображенные на рис. 2, характеризуют изменение среднемассовой температуры газового потока T по длине рабочего канала реактора при различных значениях его диаметра d , расхода имитатора (водяного пара) $G_{\text{им}}$ и расхода окислителя (также водяного пара) $G_{\text{H}_2\text{O}}$.

Рис. 2. Изменение среднemasсовой температуры по длине канала реактора. Расход имитатора $G_{\text{им}} = 0,003$ (1), 0,005 (2), 0,007 (3) кг/с. Расход окислителя $G_{\text{H}_2\text{O}} = 0,00604$ (1), 0,01007 (2), 0,0141 (3) кг/с. Диаметр рабочего канала реактора $d = 0,05$ (штриховые линии), 0,07 (сплошные линии), 0,10 (штрихпунктир), 0,15 м (двойной штрихпунктир).



Результаты расчетов показали, что, как и следовало ожидать, наибольшее влияние на температуру газа в реакторе при выбранном режиме работы плазмотрона оказывает величина расхода смеси имитатора с окислителем. Наблюдаемое во всех случаях существенное снижение температуры по длине реактора вызвано потерей тепла в его охлаждаемую водой стенку, температура которой была принята равной 300 К.

Из рис. 2 также видно, что среднemasсовая температура газа в реакторе слабо зависит от диаметра канала. Это объясняется тем, что с увеличением диаметра и, соответственно, площади внутренней поверхности канала одновременно происходит уменьшение удельных тепловых потоков в стенку, вызванное снижением скорости газового потока. При этом увеличение площади практически полностью компенсируется уменьшением удельных тепловых потоков.

Результаты расчетов, приведенные на рис. 2, свидетельствуют о том, что при выбранной длине реактора 1,2 м только режим, соответствующий $G_{\text{им}} = 0,003$ кг/с и $G_{\text{H}_2\text{O}} = 0,00604$ кг/с, отвечает условию, при котором, в случае его реализации для уничтожения ТХБ, образование вторичных особо токсичных соединений будет маловероятно. На двух других режимах вероятность появления опасных вторичных соединений существует, так как на этих режимах температура газового потока в выходном участке реактора опускается ниже 1500 К.

В связи с тем, что увеличение диаметра рабочего канала реактора с 0,05 м до 0,15 м слабо отражается на среднemasсовых температурах газа, можно было бы предположить, что выгодно использовать реактор с максимально возможным диаметром, так как в данном случае значительно увеличивается время пребывания в реакторе продуктов разложения, что должно было бы способствовать более эффективному процессу разложения и окисления уничтожаемых веществ. Однако, как показали расчеты, этого не происходит, поскольку увеличение диаметра рабочего канала приводит к такому изменению полей температуры, при котором уменьшается размер высокотемпературной зоны. Для иллюстрации этого на рис. 3 приведены поля температуры в рабочих каналах с диаметром 0,07 м и 0,15 м, которые формируются на режиме с $G_{\text{им}} = 0,003$ кг/с и $G_{\text{H}_2\text{O}} = 0,00604$ кг/с. Сравнение изображенных на рисунке полей показывает, что практически весь газ, проходящий через реактор с $d = 0,07$ м, в его передней части нагревается до температуры не ниже 1900 К, а в реакторе с $d = 0,15$ м только малая часть газового потока приобретает указанную температуру, остальная же его часть нагревается до температуры не выше 1700 К. Учитывая это, при выборе оптимальных размеров реактора следует иметь в виду, что эффективность процесса разложения уничтожаемых веществ существенно зависит не только от времени пребывания газовой

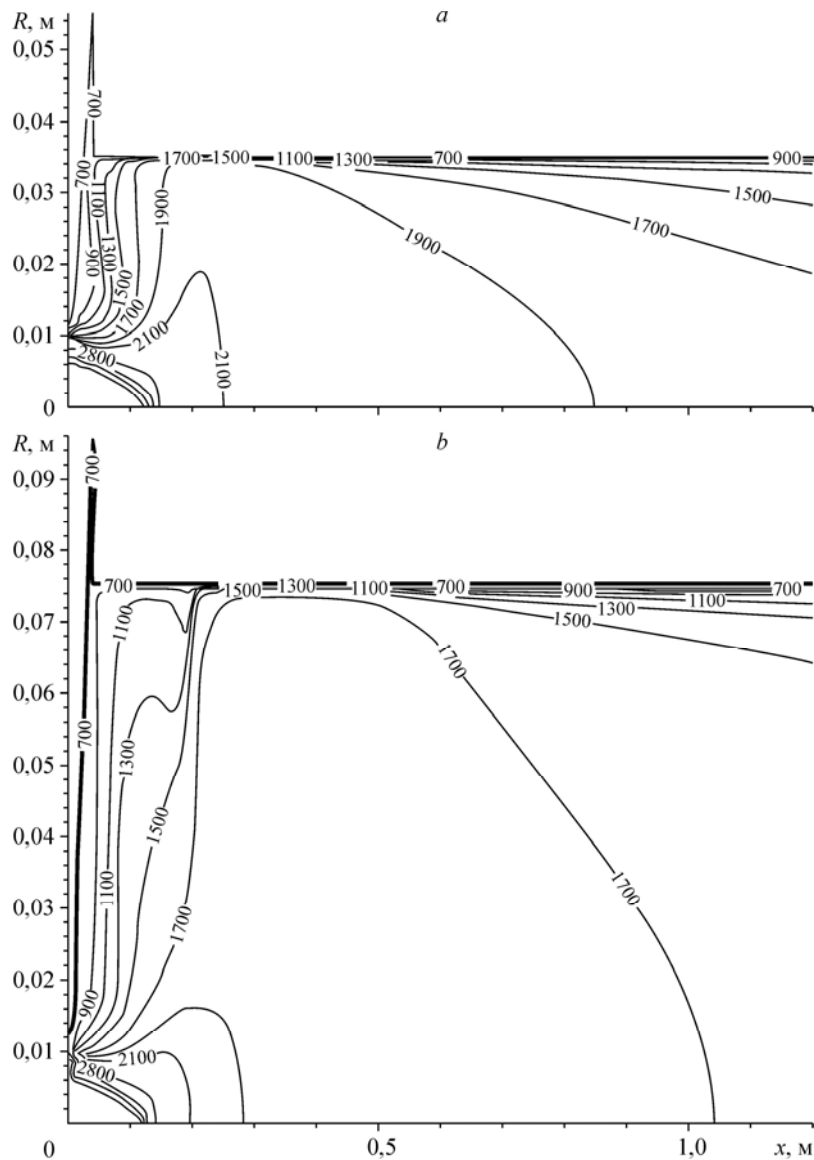


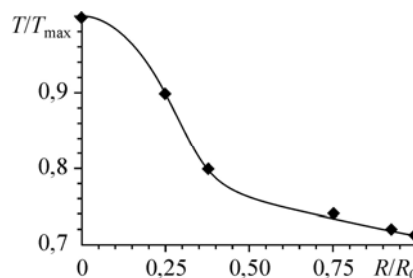
Рис. 3. Изолинии температуры газа в плоскости симметрии канала реактора.

Расход имитатора $G_{\text{им}} = 0,003$ кг/с, расход окислителя $G_{\text{H}_2\text{O}} = 0,00604$ кг/с, диаметр канала $d = 0,07$ (a), $0,15$ (b) м.

смеси в рабочем канале, но и от уровня температуры в зоне, где этот процесс в основном протекает.

Рассмотренные результаты исследований процессов, протекающих в реакторе, были получены в предположении однородности профиля температуры плазменной струи азота, поступающей в реактор из плазмотрона. Однако в действительности этот профиль существенно отличается от принятого. Это отличие особенно заметно при использовании плазмотронов с вихревой стабилизацией дугового разряда, к типу которых относится находящийся на плазмохимической установке плазмотрон ЭДП-109/200М. В плазмотроне данной конструкции нагрев поступающего в него газа в основном происходит за счет обдува дугового разряда, который располагается вдоль оси рабочего канала плазмотрона. В связи с этим центральная область плазменной струи, испытывающая непосредственное воздей-

Рис. 4. Профиль температуры в выходном сечении плазмотрона с вихревой стабилизацией разряда, использованный при проведении расчетов (точками отмечены экспериментальные данные).



ствие дугового разряда, имеет существенно более высокую температуру, чем периферийные слои, не прошедшие поблизости от дугового разряда или непосредственно через него. Из-за высокой плотности газа в периферийной области струи значительная часть массового расхода плазмообразующего газа имеет в этом случае более низкую температуру, чем газ, проходящий через центральную зону.

Типичное распределение температуры газа на выходе из плазмотрона с вихревой стабилизацией дугового разряда дано в работах [5, 6]. Это распределение изображено на рис. 4. На этом рисунке представлена зависимость отношения T/T_{\max} , где T — локальное значение температуры, а T_{\max} — максимальная ее величина от относительной координаты R/R_0 , где R — радиальная координата, а R_0 — радиус выходного канала плазмотрона. Для определения этой зависимости были проведены специальные эксперименты, при выполнении которых температура измерялась газодинамическим способом с применением сконструированной для этой цели гребенки.

Как видно из рис. 4, приведенный на нем профиль температуры на входе в канал плазмотрона значительно отличается от принятого в расчетах однородного профиля. В связи с этим оказалось необходимым оценить влияние этого отличия на тепловые и газодинамические характеристики газового потока в реакторе. Для этой цели был выбран рассмотренный ранее режим, соответствующий массовому расходу имитатора ПХБ $G_{\text{им}} = 0,003$ кг/с и расходу окислителя (водяного пара) $G_{\text{H}_2\text{O}} = 0,00604$ кг/с. Расчеты были выполнены для реактора с диаметром $d = 0,07$ м.

На рис. 5 представлены изолинии температуры газа в плоскости симметрии канала реактора для однородного профиля скорости плазменной струи и для профиля, изображенного на рис. 4. Сравнение этих изолиний показывает, что влияние существенно отличающихся друг от друга профилей температуры плазменной струи при одинаковом среднемассовом значении ее температуры (5273 К) на поле температуры в рабочем канале реактора незначительно.

Анализируя приведенные выше результаты численных расчетов, можно сделать вывод, что оптимальным условиям процесса тепломассопереноса более всего отвечает реактор с диаметром рабочего канала 0,07 м. На начальном участке такого канала формируется зона высоких температур, которая распространяется по всей ширине этого участка (см. рис. 3, *a*), а с увеличением диаметра канала эта зона резко сужается (см. рис. 3, *b*). Уменьшение диаметра рабочего канала реактора до 0,05 м, как показали расчеты, практически не влияет на расширение высокотемпературной зоны по длине и радиусу канала, однако в этом случае существенно уменьшается время пребывания продуктов разложения в реакторе. После выбора оптимального диаметра рабочего канала реактора была разработана конструкция его входной части, которая использовалась в опытной плазмохимической установке с плазмотроном ЭДП-109/200М. Эта конструкция изображена на рис. 6.

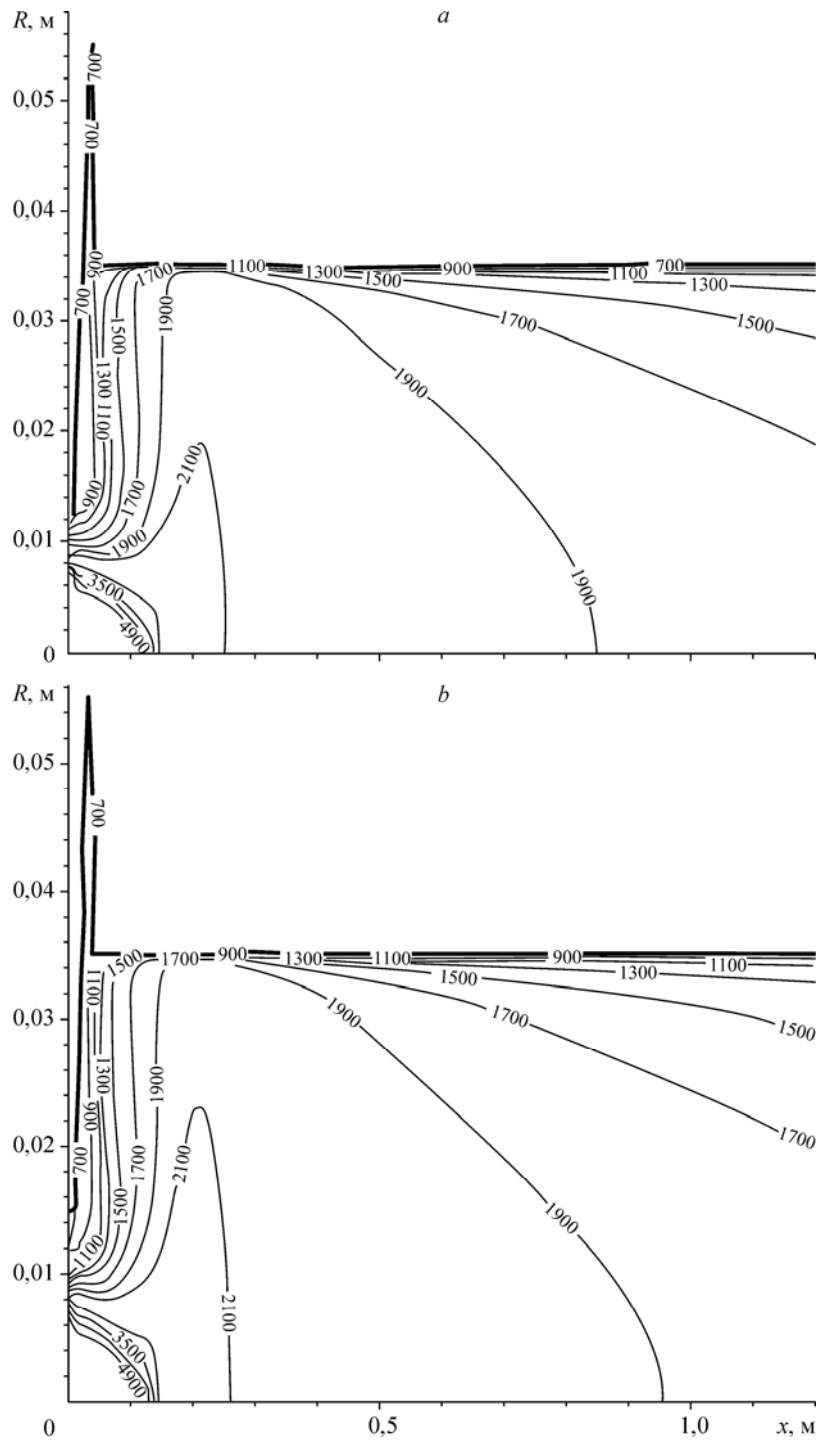


Рис. 5. Изолинии температуры газа в плоскости симметрии канала реактора.

Диаметр канала $d = 0,07$ м, расход имитатора $G_{им} = 0,003$ кг/с, расход окислителя (водяного пара) $G_{H_2O} = 0,00604$ кг/с. Профиль скорости плазменной струи: *a* — однородный, *b* — из эксперимента.

Как показали эксперименты, выполненные на опытной установке, входная часть реактора должна быть электроизолирована от заземленных узлов установки, к которым относится узел анода плазмотрона, соединяющийся с входной частью. В противном случае существует большая опасность пробоя электрического разряда

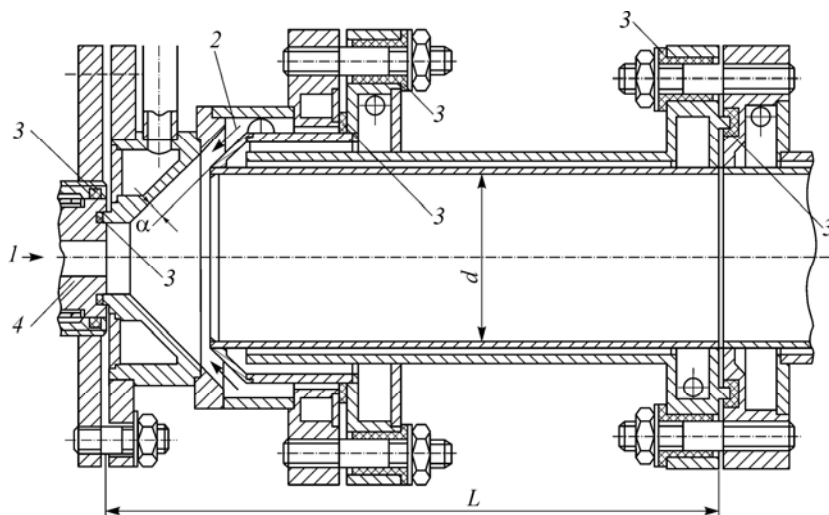


Рис. 6. Входная часть реактора.

α — ширина канала подачи смеси уничтожаемого вещества с окислителем. Диаметр рабочего канала $d = 0,07$ м, длина $L = 0,26$ м. 1 — подача плазменной струи азота, 2 — подача смеси ПХБ с окислителем, 3 — электроизолятор, 4 — анод плазмотрона.

на стенку входной части реактора, что приводит к ее местному перегреву, плавлению и разрушению. Это условие выполнено в предложенной конструкции входной части реактора. Однако для полного устранения указанной опасности необходима не только электроизоляция, но и правильный выбор ширины канала, через который смесь уничтожаемого вещества с окислителем поступает во входную часть реактора, поскольку при малой ширине этого канала опасность пробоя сохраняется. С другой стороны, с увеличением ширины канала уменьшается скорость подачи смеси в реактор, а это должно отразиться на тепловых и газодинамических характеристиках газового потока в реакторе.

Для оценки влияния указанного размера на поле температуры газа в реакторе были выполнены расчеты характеристик потока для двух значений ширины канала: 0,0034 м и 0,015 м. Для расчетов был выбран режим, соответствующий массовому расходу имитатора $G_{\text{им}} = 0,003$ кг/с и расходу окислителя (водяного пара) $G_{\text{H}_2\text{O}} = 0,00604$ кг/с.

На рис. 7 представлены результаты этих расчетов. Можно отметить, что столь значительное изменение ширины канала ввода не оказывает существенного влияния на тепловые характеристики газового потока. Поэтому была выбрана ширина канала ввода, равная 0,01 м, при которой исключается пробой электрического разряда в канале. Можно считать, что предлагаемая конструкция входной части реактора будет полностью защищена от разрушительного воздействия электрического разряда.

Точно определить оптимальную длину реактора, пригодного для разложения и окисления любых галогенорганических соединений, только на основании анализа результатов рассмотренных численных исследований химически замороженного течения невозможно, так как длина, обеспечивающая необходимое время пребывания продуктов разложения в реакторе, может зависеть от типа уничтожаемого вещества и характера протекания химических реакций между компонентами. Однако, как показали последующие экспериментальные исследования процесса уничтожения ПХБ, проведенные в РНЦ «Прикладная химия» на установке, реактор которой имел диаметр рабочего канала 0,07 м и длину 1,2 м, эти размеры, выбранные в результате численных исследований, оказались оптимальными.

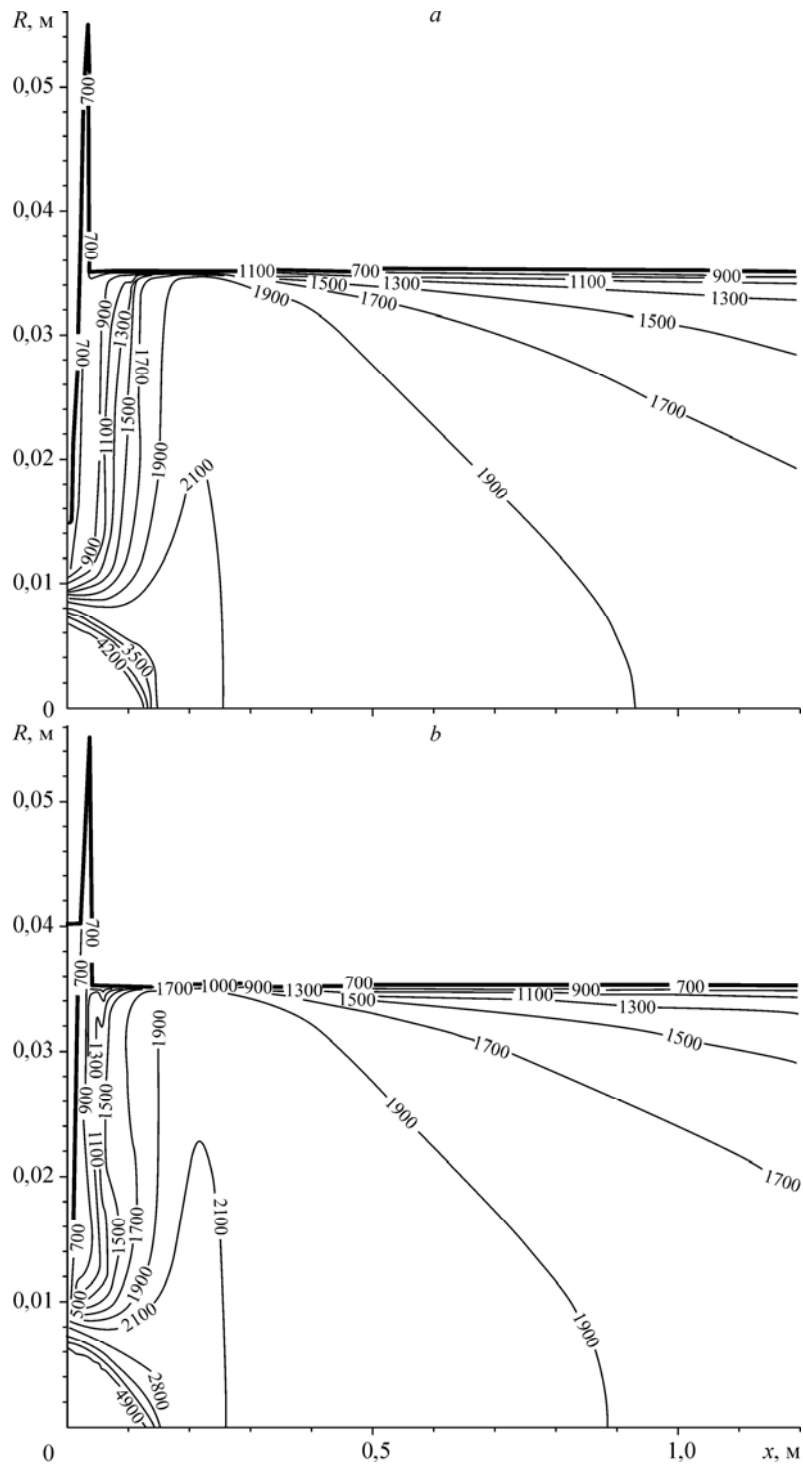


Рис. 7. Изолинии температуры газа в плоскости симметрии канала реактора. Диаметр канала $d = 0,07$ м, расход имитатора $G_{им} = 0,003$ кг/с, расход окислителя (водяного пара) $G_{H_2O} = 0,00604$ кг/с, $\alpha = 0,0034$ (a), $0,015$ (b) м.

В заключение следует отметить, что при создании плазмохимической установки, предназначенной для переработки различных галогенорганических соединений, одной из наиболее сложных задач является разработка оптимальной конст-

рукции реактора. Проведение необходимых для решения этой задачи экспериментальных исследований сопряжено с большими затратами средств и требует особых мер безопасности.

В связи с этим для решения данной задачи был использован альтернативный, более дешевый и быстрый путь, который заключался в проведении численных исследований. Анализ полученных при этом результатов позволяет сделать следующие основные выводы.

1. Величина среднemasсовой температуры газа в реакторе и ее изменение по длине реактора при выбранных режиме работы плазмотрона, массовом расходе и составе смеси уничтожаемого вещества с окислителем, практически не зависят от диаметра рабочего канала реактора в исследованном диапазоне его размеров от 0,05 до 0,15 м.

2. Для увеличения времени пребывания газовой смеси в реакторе желательно использовать рабочие каналы большого диаметра, однако высокотемпературная область во входной части реактора ($T \geq 1900$ К) сужается при увеличении его диаметра. В связи с этим оптимальный диаметр канала, который рекомендуется для реактора, составляет 0,07 м. При этом практически весь газ, проходящий через реактор, в его передней части нагревается до 1900 К.

3. Ширина канала для ввода смеси уничтожаемого вещества с окислителем в реактор практически не влияет на газодинамические и тепловые характеристики реактора в исследованном диапазоне значений от 0,0034 м до 0,015 м.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Пат. 2105928 Российская Федерация, МПК⁶ F23G7/00. Плазмохимический способ обезвреживания газообразных и жидких галогенорганических отходов / Давидян А.А. и др.; заявитель и патентообладатель Российский научный центр "Прикладная химия" № 96100669/03; заявл. 10.01.1996; опубл. 27.02.1998.
2. Пат. Российская Федерация, МПК⁶ F23G7/00. Плазмохимический способ обезвреживания газообразных и жидких галогенорганических веществ и содержащих их отходов / Малков Ю.П. и др.; заявитель и патентообладатель ФГУП Российский научный центр "Прикладная химия" № 2002115550/032002115550, заявл. 10.06.2002; опубл. 10.02.2004.
3. Лапин Ю.В., Стрелец М.Х. Внутренние течения газовых смесей. М.: Наука, 1989. 368 с.
4. Колешко С.Б., Лапин Ю.В., Никулин Д.А., Стрелец М.Х., Чумаков Ю.С. Физические и математические основы численного моделирования гидроаэродинамики и теплообмена. Комплекс специализированных курсов для пользователей пакета прикладных программ COOLIT. СПб: "ОКДАЙЛ", 2005. 262 с.
5. Коротеев А.С., Миронов В.М., Свирчук Ю.С. Плазмотроны: конструкции, характеристики, расчет. М.: Машиностроение, 1993. 296 с.
6. Жуков М.Ф., Засыпкин И.М., Тимошевский А.Н., Михайлов Б.И., Десятков Г.А. Электродуговые генераторы термической плазмы. Новосибирск: Наука. Сиб. предпр. РАН, 1999. 712 с.

Статья поступила в редакцию 1 июля 2010 г.