УДК 004.94

МОДЕЛИРОВАНИЕ ПОТОКА ЗАРЯЖЕННЫХ ЧАСТИЦ В ПРОЦЕССАХ ОЧИСТКИ ГАЗА

Митин К.В., Дорогавцев И.В.

ФГАОУ ВО «Сибирский федеральный университет», Красноярск, e-mail: KMitin@sfu-kras.ru, IDorogavtsev@sfu-kras.ru

Целью проведения данного исследования является анализ существующих методов моделирования потоков частиц, а также анализ применимости методов для моделирования потоков заряженных частиц в электростатическом поле электродов пластинчатого электрофильтра очистки отходящих газов ЭГАВ 1-40-9-6-3 и создание математической модели движения заряженных частиц. Выделяют три основные группы методов частиц: частица-частица (лагранжевы методы частиц), частица-сетка (эйлеров подход) и частица-частица – частица-сетка (смешанные методы частиц). Большинство вышеприведенных методов частиц носят научноисследовательский характер, но они практически не имеют приложений в технике, но при соответствующей адаптации могут быть успешно применены в моделировании процессов электролиза, газоочистки, движения газа при трубопроводном проветривании. В основу математической модели движения заряженной частицы положены законы движения электрона под действием электростатического поля. Для каждого участка траектории строятся отдельные уравнения движения. Смоделированы также случаи столкновения частиц друг с другом и столкновения частицы со стенкой электрофильтра. Для компьютерного моделирования потока частиц пыли была создана программа эмулятор, где электрофильтр представлен как пространство между катодом и анодом, окруженное стенками (диэлектриками).

Ключевые слова: заряженная частица, поток частиц, электростатическое поле, сплайн, 3D моделирование

MODELING OF PARTICLE CHARGED FLOW IN GAS CLEANING PROCESSES Mitin K.V., Dorogavtsev I.V.

Siberian Federal University, Krasnoyarsk, e-mail: KMitin@sfu-kras.ru, IDorogavtsev@sfu-kras.ru

The purpose of this study is to analyze existing methods for modeling particle flows, as well as to analyze the applicability of methods for modeling flows of charged particles in the electrostatic field of electrodes of a plate electrostatic precipitator for cleaning exhaust gases EGAV 1-40-9-6-3 and create a mathematical model of the movement of charged particles. There are three main groups of particle methods: particle-particle (Lagrangian particle methods), particle-mesh (Euler approach) and particle-particle-particle-mesh (mixed particle methods). Most of the above particle methods are of a scientific research nature, but they practically have no applications in technology, but with appropriate adaptation, they can be successfully applied in modeling the processes of electrolysis, gas cleaning, gas movement during pipeline ventilation. The mathematical model of the motion of a charged particle is based on the laws of motion of an electron under the action of an electrostatic field. For each section of the trajectory, separate equations of motion are constructed. The cases of collision of particles with each other and collision of a particles, an emulator program was created, where the electrostatic precipitator is represented as a space between the cathode and the anode, surrounded by walls (dielectrics).

Keywords: the charged particle, particle charged flow, an electrostatic field, spline, 3D modeling

Выделяют три основные группы методов частиц: частица-частица (лагранжевы методы частиц), частица-сетка (эйлеров подход) и частица-частица – частица-сетка (смешанные методы частиц) [1, 2]. Большинство вышеприведенных приложений методов частиц носят научно-исследовательский характер [2, 3]. Однако они практически не имеют приложений в технике, но при соответствующей адаптации могут быть успешно применены в моделировании процессов электролиза, газоочистки, движения газа при трубопроводном проветривании [4–6].

Целью проведения данного исследования является анализ существующих методов моделирования потоков частиц, а также анализ применимости методов для моделирования потоков заряженных частиц в электростатическом поле электродов пластинчатого электрофильтра очистки отходящих газов ЭГАВ 1-40-9-6-3 и создать математическую модель движения заряженных частиц. Результаты моделирования должны согласоваться с процессом очистки отходящих газов в электрофильтре.

Моделирование

Пусть электроды расположены на границе трехмерной прямоугольной области, то есть параллелепипеда. Без ограничения общности можно рассматривать только случай, когда электроды расположены на гранях. Будем считать при этом, что заряды на гранях параллелепипеда известны и распределены равномерно. Если грань не является поверхностью электрода, заряд полагается равным нулю. При таких условиях характеристики электростатического поля (потенциал, напряженность), создаваемого между электродами внутри параллелепипеда, зависят только от переменных *x* и *y*. Таким образом мы можем моделировать процесс только в плоскости *XOY*.

Рассмотрим прямоугольник D в плоскости XOY, высота которого равна l_1 , а длина основания – 2d (рис. 1). Будем использовать для границ прямоугольника те же обозначения, что и для граней параллелепипеда, к которым они принадлежат. Обозначим через q_i заряд на поверхности P_i .

$$D = \{(x, y) | x \in (-d, d), y \in (0, l_1) \}.$$

Граничные условия имеют вид

$$\varphi(-d, y) = q_1, \varphi(d, y) = q_2, y \in [0, l_1], (1)$$

 $\varphi(x,0) = q_3, \varphi(x,l_1) = q_4, x \in (-d,d)$. (2)

Для расчета потенциала необходимо, чтобы выполнялись условия согласования

$$\lim_{x \to -d} \varphi(x,0) = \lim_{y \to 0} \varphi(-d, y) = q_1,$$

$$\lim_{x \to d} \varphi(x,0) = \lim_{y \to 0} \varphi(d, y) = q_2,$$

$$\lim_{x \to -d} \varphi(x,l_1) = \lim_{y \to l_1} \varphi(-d, y) = q_1,$$

$$\lim_{x \to d} \varphi(x,0) = \lim_{y \to l_1} \varphi(d, y) = q_2.$$



Рис. 1. Область D

Этого можно добиться, заменив условия (2) приближенными условиями

$$\varphi(x,0) \approx \mu_1(x) = \begin{cases} \varphi_1(x), -d < x < -d + \delta \\ 0, \quad -d + \delta \le x \le d - \delta \\ \varphi_2(x), d - \delta < x < d, \end{cases}$$
(3)

$$\tilde{\varphi}(x, l_1) = \mu_2(x) = \begin{cases} \varphi_3(x), -d < x < -d + \delta \\ 0, -d + \delta \le x \le d - \delta \\ \varphi_4(x), d - \delta < x < d, \end{cases}$$
(4)

где $\delta > 0$ – достаточно малое действительное число, $\varphi_i(x)$, i = 1,2,3,4 – дважды непрерывно дифференцируемые функции, $\varphi_1(-d) = \varphi_3(-d) = q_1, \varphi_2(d) = \varphi_4(d) = q_2$.

Пусть $\tilde{\phi}(x, y)$ – решение краевой задачи (1), (3), (4). Наиболее удобно взять ϕ_1 и ϕ_2 в виде кубических сплайнов:

$$\varphi_1(x) = q_1 \left(1 - \frac{x+d}{\delta} \right)^3, \varphi_2(x) = q_2 \left(1 + \frac{x-d}{\delta} \right)^3$$

При таком выборе $\phi_1(x)$ и $\phi_2(x)$

$$\int_{-d}^{d} \tilde{\varphi}^2(x) dx = \int_{-d}^{-d+\delta} q_1 \left(1 - \frac{x+d}{\delta}\right)^6 dx + \int_{d-\delta}^{d} q_2 \left(1 + \frac{x-d}{\delta}\right)^6 dx = \left(q_1 + q_2\right) \frac{\delta}{7} \to 0 \quad \text{при } \delta \to 0 \quad .$$

Это доказывает, что функция $\tilde{\varphi}(x,0)$ аппроксимирует граничные данные (2).

Из уравнения Лапласа следует, что

$$-\int_{D} (\varphi - \tilde{\varphi}) div \operatorname{grad}(\varphi - \tilde{\varphi}) dx = \int_{-d}^{-d+\delta} (\varphi'_{1}(x)) (-\varphi_{1}(x)) dx - \int_{d-\delta}^{d} (-\varphi'_{2}(x)) (-\varphi_{2}(x)) dx + \int_{D} |\operatorname{grad}(\varphi - \tilde{\varphi})|^{2} dx = \frac{1}{2} (q_{1}^{2} - q_{2}^{2}) + \int_{D} |\operatorname{grad}(\varphi - \tilde{\varphi})|^{2} dx = 0,$$

откуда

$$\int_{D} \left| grad \left(\varphi - \tilde{\varphi} \right) \right|^{2} dx = \frac{1}{2} \left(q_{2}^{2} - q_{1}^{2} \right).$$
(5)

Используя неравенство Гельдера

$$\left| \int_{D} uv \, dx \right| \leq \left(\int_{D} u^4 \, dx \right)^{\frac{1}{4}} \left(\int_{D} v^{\frac{4}{3}} \, dx \right)^{\frac{3}{4}}$$

и тот факт, что $\phi - \tilde{\phi} \equiv 0$ в области $(-d + \delta, d - \delta) \times (0, l_1)$ как решение задачи Дирихле для уравнения

$$-div \mathbf{E} = div \operatorname{grad} \boldsymbol{\varphi} \equiv \frac{\partial^2 \boldsymbol{\varphi}}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \boldsymbol{\varphi}}{\partial y^2} = 0$$
(6)

с однородными граничными условиями, из (5) получаем

$$\int_{D} \left| \operatorname{grad} \left(\varphi - \tilde{\varphi} \right) \right|^{\frac{3}{2}} dx = \int_{-d}^{-d+\delta} dx \int_{0}^{l_{1}} \left| \operatorname{grad} \left(\varphi - \tilde{\varphi} \right) \right|^{\frac{3}{2}} dy + \int_{d-\delta}^{d} dx \int_{0}^{l_{1}} \left| \operatorname{grad} \left(\varphi - \tilde{\varphi} \right) \right|^{\frac{3}{2}} dx \leq \\ \leq \left(\delta l_{1} \right)^{\frac{1}{4}} \left[\int_{-d}^{-d+\delta} dx \int_{0}^{l_{1}} \left| \operatorname{grad} \left(\varphi - \tilde{\varphi} \right) \right|^{2} dy \right]^{\frac{3}{4}} + \left(\delta l_{1} \right)^{\frac{1}{4}} \left[\int_{d-\delta}^{d} dx \int_{0}^{l_{1}} \left| \operatorname{grad} \left(\varphi - \tilde{\varphi} \right) \right|^{2} dy \right]^{\frac{3}{4}} \leq \\ \leq 2 \left(\delta l_{1} \right)^{\frac{1}{4}} \left[\int_{D} \left| \operatorname{grad} \left(\varphi - \tilde{\varphi} \right) \right|^{2} dy \right]^{\frac{3}{4}} \leq 2 \left(\delta l_{1} \right)^{\frac{1}{4}} \left[\frac{1}{2} \left(q_{2}^{2} - q_{1}^{2} \right) \right]^{\frac{3}{4}} = \delta^{\frac{1}{4}} \left[2 l_{1} \left(q_{2}^{2} - q_{1}^{2} \right)^{\frac{3}{4}} \rightarrow 0$$

при $\delta \to 0$, откуда следует, что $\int_{D} \left| \mathbf{E} - \tilde{\mathbf{E}} \right|^{\frac{3}{2}} \to 0$ при $\delta \to 0$, где $\tilde{\mathbf{E}} = grad \; \tilde{\boldsymbol{\phi}}$. Таким образом, $\tilde{\mathbf{E}}$ аппроксимирует \mathbf{E} .



Рис. 2. Пятиточечный шаблон

Задачу (1) и (3) будем решать численно, используя разностный метод (метод сеток) [4, 5]. Для этого построим разностную схему на пятиточечном шаблоне (рис. 2). Зададим сетку в области D с шагом \hat{h}_x по x и \hat{h}_y по y. Положим

$$M = \frac{2d}{h_x}, \quad N = \frac{l_1}{h_y}, \quad x_i = -d + ih_x, \quad y_j = jh_y, \quad i = 0, 1, 2, ..., M, \quad j = 0, 1, 2, ..., N$$

Вторые производные в уравнении (6) заменим симметричными разделенными разностями:

$$\frac{\partial^2 \tilde{\varphi}}{\partial x^2} \approx \frac{\tilde{\varphi}_{i+1,j} - 2\tilde{\varphi}_{i,j} + \tilde{\varphi}_{i-1,j}}{h_x^2},$$
$$\frac{\partial^2 \tilde{\varphi}}{\partial y^2} \approx \frac{\tilde{\varphi}_{i,j+1} - 2\tilde{\varphi}_{i,j} + \tilde{\varphi}_{i,j-1}}{h_y^2},$$

где $\tilde{\varphi}_{i,j} = \tilde{\varphi}(x_i, y_i), i = 0, 1, 2, ..., M, j = 0, 1, 2, ..., N$. Разностная схема имеет вид

$$\begin{cases} \Delta^{h} \tilde{\varphi} = \frac{\tilde{\varphi}_{i+1,j} - 2\tilde{\varphi}_{i,j} + \tilde{\varphi}_{i-1,j}}{h_{x}^{2}} + \frac{\tilde{\varphi}_{i+1,j} - 2\tilde{\varphi}_{i,j} + \tilde{\varphi}_{i-1,j}}{h_{y}^{2}} = 0, \\ i = 1, 2, ..., M - 1, \quad j = 1, 2, ..., N - 1; \\ \tilde{\varphi}_{0n} = q_{1}, \quad \tilde{\varphi}_{Mn} = q_{2}, \quad n = 0, 1, 2, ..., N; \\ \tilde{\varphi}_{m,0} = \tilde{\varphi}_{m,n} = \mu(x_{m}), \quad m = 1, 2, ..., M - 1. \end{cases}$$

$$(7)$$

Данная разностная схема устойчива. Приближенное решение сеточной задачи (7) сходится к точному решению задачи (1), (3) при $h_x \to 0$ и $h_y \to 0$, причем порядок скорости сходимости совпадает с порядком аппроксимации $h_x^2 + h_y^2$. Пусть в момент t_1 заряженная частица находится в точке с координатами (x_1, y_1) и имеет

скорость $\overline{v}(t_1) = (v_x(t_1), v_y(t_1))$. Уравнение движения частицы вдоль оси X имеет вид

$$mx'' = qE_x . (8)$$

Так как q и Е постоянны, ускорение частицы вдоль оси Х равно

$$a_x = \frac{q \cdot E_x}{m} = \text{const}$$

то есть движение вдоль X равноускоренное. Найдем скорость v_x из (8):

$$\mathbf{v}_x = x' = \frac{q \cdot E_x}{m} \cdot t + C_1 \, .$$

Постоянная интегрирования C_1 определяется из начального условия $v_x = v_x(t_1)$ при $t = t_1$, что дает для C_1 значение, равное нулю. Последнее выражение перепишем следующим образом:

$$\frac{dx}{dt} = \mathbf{v}_x = \frac{q \cdot E_x}{m} \cdot t + \mathbf{v}_x(t_1), \tag{9}$$

отсюда

$$x = \frac{q \cdot E_x}{m} \cdot \frac{t^2}{2} + v_x \left(t_1 \right) \cdot t + C_2 \, .$$

Из начального условия $x(0) = x_1$ следует, что $C_2 = x_1$. Поэтому

$$x = \frac{q \cdot E_x \cdot t^2}{2 \cdot m} + v_x \left(t_1 \right) \cdot t + x_1.$$



Рис. 3. Моделирование потока пыли при работе электрофильтра ЭГАВ 1-40-9-6-3. Данный тип электрофильтров характерен для большинства крупных промышленных предприятий Российской Федерации и стран СНГ [11, 12]

Перейдем к решению уравнения движения вдоль оси *Y*:

$$my'' = qE_{y}.$$
 (10)

Так как q и E_y постоянны, ускорение частицы вдоль оси y равно

$$a_y = \frac{q \cdot E_y}{m} = \text{const}.$$

Таким образом, движение вдоль *У* также равноускоренное:

$$\mathbf{v}_{y} = y' = \frac{q \cdot E_{y}}{m} \cdot t + v_{y}\left(t_{1}\right), \qquad (11)$$

отсюда

$$y = \frac{q \cdot E_y}{m} \cdot \frac{t^2}{2} + v_y(t_1)t + C_6$$

Из начального условия y(0) = 0 получаем для C_6 значение, равное y_1 . Поэтому:

$$y = \frac{q \cdot E_y}{m} \cdot \frac{t^2}{2} + v_y \left(t_1\right)t + y_1.$$

Таким образом, система кинематических уравнений движения частицы в электростатическом поле имеет вид

$$x = \frac{q \cdot E_x \cdot t^2}{2 \cdot m} + v_x (t_1) \cdot t + x_1, \qquad (12)$$

$$y = \frac{q \cdot E_y}{m} \cdot \frac{t^2}{2} + v_y(t_1)t + y_1.$$
(13)

В частности, при параллельном расположении электродов напряженность поля остается постоянной во всей области, причем $E_y = 0$. Поэтому в силу начальных условий x(0) = -d/2, $y(0) = y_0$, $x'(0) = v_{0x}, y'(0) = v_{0y}$ уравнения (12), (13) принимают вид

$$x = \frac{q \cdot E_x \cdot t^2}{2 \cdot m} + v_x (t_1) \cdot t + x_1,$$

 $y = y_0$.

Уравнения (12), (13) параметрически задают прямую $y = y_0$ на плоскости хОу, представляющую траекторию движения заряженной частицы в пространстве между электродами [7–9].

На рис. 3 представлены результаты численного эксперимента в виде компьютерного моделирования движения заряженных частиц пыли в электрофильтре ЭГАВ 1-40-9-6-3 [7–9], где слева – поток заряженных частиц пыли в электрофильтре, справа – потенциалы коронирующего (синий) и осадительного (красный) электродов, в специально разработанной для этого программе [10].

Заключение

Для моделирования потока частиц пыли был разработан метод частиц, относящийся к смешанным алгоритмам, в котором каждый участок траектории движения частицы рассматривается как сплайн и находится путем дискретизации напряженности и интегрирования уравнений движения в электростатическом поле [7-9]. Численный эксперимент по компьютерному моделированию потока частиц пыли в электрофильтре был проведен для электрофильтра ЭГАВ 1-40-9-6-3, тип которого характерен для большинства крупных промышленных предприятий Российской Федерации и стран СНГ [10, 11] и делался в специально разработанной для этого программе [12].

Результаты моделирования согласуются с процессами, происходящими в электрофильтре во время его работы.

Список литературы

1. Вшивков В.А., Терехов А.В. О самодействии в методе частиц в ячейках // Вычислительные методы и программирование: новые вычислительные технологии. 2008. Т. 9. № 1. С. 48–57.

2. Григорьев Ю.Н., Вшивков В.А., Федорук М.П. Численное моделирование методами частиц-в-ячейках. Новосибирск: Издательство СО РАН, 2004. 360 с.

3. Вшивков В.А., Боронина М.А. Трехмерное моделирование динамики ультрарелятивистских пучков заряженных частиц: особенности вычисления начальных и граничных условий // Математическое моделирование. 2012. Т. 24 (2). С. 67–83.

4. Берендеев Е.А., Боронина М.А., Вшивков В.А., Ефимова А.А. Особенности использования цилиндрической геометрии при решении задач физики плазмы методом частиц в ячейках // Параллельные вычислительные технологии (ПаВТ'2016): труды международной научной конференции. 2016. С. 442–453.

5. Боронина М.А., Вшивков В.А. Математическое моделирование движения пучков заряженных частиц с ненулевым углом встречи // Марчуковские научные чтения – 2017. Труды Международной научной конференции. 2017. С. 113–118.

6. Боронина М.А., Вшивков В.А. Параллельный алгоритм для численного моделирования встречных пучков ультрарелятивистских частиц с учетом угла встречи // Вестник Новосибирского государственного университета. Серия: Информационные технологии. 2018. Т. 16. № 4. С. 31–40.

7. Lyubanova A.Sh., Mitin K.V. Modeling of the ions streams by the method of particles // Вычислительные технологии. 2015. Т. 20. С. 14–18.

8. Lyubanova A.Sh., Mitin K.V. Modeling of the ions streams by the method of particles // Вестник Казахского национального университета. Серия: Математика, механика, информатика. 2015. Т. 20. № 3–3 (86). С. 14–18.

9. Митин К.В. Моделирование потоков заряженных частиц применительно к технологическим процессам // Вестник Иркутского государственного технического университета. 2018. Т. 22. № 4 (135). С. 93–100.

10. Митин К.В., Любанова А.Ш. ELECTROMODELSNRCH 1.0 № А.с. № 2012616247 от 22.05.2012.

11. Коузов П.А., Мальгин А.Д., Скрябин Г.М. Очистка газов и воздуха от пыли в химической промышленности. М.: Химия, 1993. 320 с.

12. Морозов С.Д. Алгоритм расчёта эффективности сухого пластинчатого электрофильтра с учётом распределения частиц пыли по размерам // Актуальные проблемы современной науки. 2017. № 4 (95). С. 251–253.