

## ВОСПЛАМЕНЕНИЕ ГАЗОВЗВЕСИ ЧАСТИЦ УГЛЯ. ТОЧЕЧНОЕ ПРИБЛИЖЕНИЕ

Ю. А. Гостеев, А. В. Фёдоров

Институт теоретической и прикладной механики СО РАН, 630090 Новосибирск

Методами механики реагирующих гетерогенных сред построена математическая модель воспламенения взвеси угольных частиц в газе. Изучены некоторые ее качественные особенности, позволяющие выявить разные характерные варианты тепловой динамики смеси: гетерогенное воспламенение посредством реакции окисления коксового остатка, гомогенное воспламенение, вызванное процессом окисления летучих веществ в газовой фазе, смешанное воспламенение за счет одновременного действия поверхностной и объемной реакций. Проведена верификация модели по известным опытным данным, относящимся к задержкам воспламенения взвесей частиц угля в воздухе и кислороде в отраженных ударных волнах.

Актуальность проблемы воспламенения угольных аэровзвесей вызвана их широким использованием в качестве топливных смесей в различных энергетических установках, необходимостью обеспечения взрыво- и пожаробезопасности в угледобывающей и энергетической отраслях промышленности.

Обширный экспериментальный материал по характеристикам воспламенения одиночных относительно крупных частиц угля (радиусом более 20 мкм) в условиях слабой конвекции окисляющего газа в реакционную камеру содержится в монографии [1]. Работы по физическому моделированию воспламенения пылеугольных смесей, в том числе в условиях течения за ударными волнами, носят достаточно разрозненный характер.

Теоретическому изучению проблемы воспламенения угольных аэровзвесей посвящено достаточно много работ (см. обзор [2]). В исследованиях, выполненных в рамках точечных моделей воспламенения угольных частиц и их аэровзвесей, для формулировки критических условий воспламенения/погасания широко использовались положения теории теплового взрыва Н. Н. Семенова. Этому способствует и принятое в большинстве работ упрощенное кинетическое описание. Делались попытки привлечь для теоретического анализа аппарат теории цепно-теплового взрыва. Для работ, выполненных на основе распределенного подхо-

да, характерным является описание процессов тепло- и массообмена либо в газовой среде вокруг одиночной реагирующей частицы, либо в потоке двухфазной смеси. В обоих случаях воспламенение и горение обычно рассматривались как единый процесс реагирования. Для моделирования течений угольных аэровзвесей привлекались также и уравнения механики гетерогенных сред в том или ином приближении.

В данной работе с использованием подходов теории теплового взрыва представлена математическая модель воспламенения многокомпонентной газовзвеси угольных частиц в точечном приближении механики реагирующих гетерогенных сред. В качестве приложения построенной математической модели решена задача о воспламенении угольной аэровзвеси в отраженной ударной волне.

### 1. МОДЕЛЬ ВОСПЛАМЕНЕНИЯ ГАЗОВЗВЕСИ УГОЛЬНЫХ ЧАСТИЦ

#### Соотношения для средних параметров гетерогенной смеси

Рассмотрим неподвижную взвесь угольных частиц в газе, заполняющую одномерное пространство. Смесь состоит из двух фаз: газовой (индекс 1) и дисперсной (2). Газовая фаза содержит следующие компоненты: кислород (11), горючие летучие (12), газообразные продукты реакции окисления горючих летучих (13), газообразные продукты реакции окисления углерода (14), инертный компонент исходной газовой смеси (для воздуха — азот, 15),

Работа выполнена при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (проект 99-01-00587), INTAS OPEN 97-2027 и МНТЦ (проект 612).

инертные летучие (16). Дисперсная фаза включает компонент летучих в конденсированном состоянии (22), углерод (23) и инертный компонент топлива (зола, 24). Фазы характеризуются средними плотностями  $\rho_i$  и температурами  $T_i$ , причем выполняются равенства

$$\rho_1 = \sum_{j=1}^6 \rho_{1j}, \quad \rho_2 = \sum_{j=2}^4 \rho_{2j},$$

где средние плотности компонентов  $\rho_{ij}$  определяются через их истинные плотности  $\rho_{ij}^0$  и объемные концентрации  $m_{ij}$  — посредством соотношений

$$\rho_{1j} = m_{1j} \rho_{1j}^0, \quad \rho_{2j} = m_{2j} \rho_{2j}^0.$$

Объемные концентрации фаз  $m_1$  и  $m_2$  связаны между собой основным равенством механики гетерогенных сред

$$m_1 + m_2 = 1,$$

а объемные концентрации твердых компонентов  $m_{2j}$  — геометрическим соотношением

$$m_2 = m_{22} + m_{23} + m_{24} = \frac{4}{3} \pi r^3 n,$$

где  $r = d/2$  — радиус угольной частицы,  $n$  — число частиц в единице объема смеси. Твердые компоненты считаются несжимаемыми, т. е.

$$\rho_{2j}^0 = \rho_{2j,0}^0 = \text{const.}$$

Кроме того, сохраняется неизменным объемное содержание инертного компонента (золы):

$$m_{24} = m_{24,0}.$$

Газовая фаза представляет собой газовую смесь, поэтому в соответствии с законом Дальтона ее давление  $p$  связано с другими термодинамическими параметрами уравнением

$$p = \frac{\rho_1}{m_1} \mathcal{R}_1 T_1, \quad \mathcal{R}_1 = \sum_{j=1}^6 \xi_{1j} \mathcal{R}_{1j}.$$

Здесь относительные массовые концентрации газовых компонентов  $\xi_{1j}$  определяются равенствами  $\xi_{1j} = \rho_{1j}/\rho_1$ ; удельные газовые постоянные  $\mathcal{R}_{1j}$  выражаются через универсальную газовую постоянную  $\mathcal{R}$  и молекулярные массы  $j$ -го газового компонента  $\mu_{1j}$ :  $\mathcal{R}_{1j} = \mathcal{R}/\mu_{1j}$ .

Для внутренней энергии смеси справедливо соотношение

$$e = \xi_1 e_1 + \xi_2 e_2,$$

где  $e_i = c_{v,i}(T_i - T_0) + e_i^0$  — внутренняя энергия,  $c_{v,i}$  и  $e_i^0$  — изохорная теплоемкость и энергия производства  $i$ -й фазы, определяемые через аналогичные величины для компонентов  $c_{v,i,j}$  и  $e_{ij}^0$  формулами

$$c_{v,1} = \sum_{j=1}^6 \xi_{1j} c_{v,1j}, \quad c_{v,2} = \sum_{j=2}^4 \xi_{2j} c_{v,2j},$$

$$e_1^0 = \sum_{j=1}^6 \xi_{1j} e_{1j}^0, \quad e_2^0 = \sum_{j=2}^4 \xi_{2j} e_{2j}^0.$$

### Физико-химические процессы

Предполагаем, что в газозвеси одновременно протекают процессы термической деструкции угольных частиц с выходом летучих в газовую фазу, газофазного окисления горючей части летучих, а также гетерогенная химическая реакция окисления углерода.

**Выход летучих.** Принимаем, что летучие вещества в газовой фазе состоят из реагирующего компонента (водород  $\text{H}_2$ , метан  $\text{CH}_4$ , смола) с условной химической формулой  $\text{C}_5\text{H}_{10}$  и инертного компонента (оксид углерода  $\text{CO}_2$  и водяной пар  $\text{H}_2\text{O}$ ) с условной формулой  $\text{C}_X\text{H}_Y\text{O}_Z$  [3]. Доля реагирующих летучих в общей массе летучих определяется с помощью эмпирического соотношения [4]

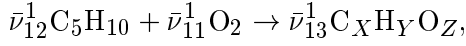
$$\xi_{12}^* = 0,033 + 5,94 \xi_{22,0} - 11,3 \xi_{22,0}^2,$$

где  $\xi_{22,0}$  — начальное массовое содержание летучих в топливе. Массовая скорость пиролиза выбирается в виде следующей диффузионно-кинетической зависимости [4]:

$$w_v = \frac{\mathcal{K}_v \rho_{22}}{1 + (V/S)(\mathcal{K}_v/\mathcal{K}_{v,D})},$$

где  $\mathcal{K}_v = K_v \exp(-E_v/T_2)$  — кинетическая,  $\mathcal{K}_{v,D} = D_v/2r$  — диффузионная константа скорости,  $K_v$ ,  $E_v$  — предэкспонент и энергия активации пиролиза,  $D_v$  — коэффициент диффузии летучих веществ внутри частицы,  $V$  и  $S$  — объем и площадь поверхности частицы.

**Окисление летучих.** Пусть реакция окисления летучих веществ описывается уравнением



которое можно записать в виде стехиометрического соотношения

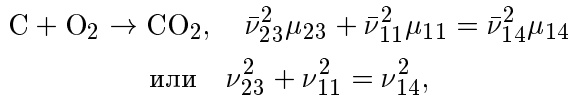
$$\bar{\nu}_{11}^1 \mu_{11} + \bar{\nu}_{12}^1 \mu_{12} = \bar{\nu}_{13}^1 \mu_{13} \text{ или } \nu_{11}^1 + \nu_{12}^1 = \nu_{13}^1,$$

где  $\nu_{ki}^l = \bar{\nu}_{ki}^l \mu_{ki}$ ,  $l = 1, 2$ ,  $k = 1, 2$ , — приведенный стехиометрический коэффициент. Массовая скорость этой реакции определяется выражением

$$w_1 = \mathcal{K}_{B1} \xi_{11}^{a_1} \xi_{12}^{a_2},$$

где  $\mathcal{K}_{B1} = K_{B1} p^{a_3} \exp(-E_{B1}/T_1)$  — константа скорости,  $K_{B1}$ ,  $E_{B1}$  — предэкспонент и энергия активации реакции окисления летучих.

**Окисление углерода.** Окисление углерода примем для простоты одностадийным процессом, описываемым уравнениями



где  $\mu_{23}$  — молекулярная масса углерода. Порядок итоговой реакции по кислороду первый, выражение для массовой скорости в диффузионно-кинетическом режиме имеет вид

$$w_2 = \frac{\mathcal{K}_{B2} \xi_{11} \rho_{23}}{1 + (V/S)(\mathcal{K}_{B2}/\mathcal{K}_{D2})}.$$

В дальнейшем будем рассматривать воспламенение взвесей мелких частиц угля при сравнительно высоких температурах газовой фазы. Поэтому внутренним реагированием углерода (на поверхностях пор) пренебрегаем. Тогда кинетические и диффузионные константы скорости определяются выражениями [4]

$$\mathcal{K}_{B2} = K_{B2} \exp(-E_{B2}/T_2), \quad \mathcal{K}_{D2} = \text{Nu} D_{11}/2r,$$

где  $K_{B2}$ ,  $E_{B2}$  — предэкспонент и энергия активации реакции окисления углерода,  $\text{Nu}$  — число Нуссельта,  $D_{11}$  — коэффициент диффузии кислорода. Зольная часть частицы также не оказывает влияния на скорость окисления углерода (зольное ядро постоянной массы).

### Законы сохранения

Изменения средних плотностей компонентов в результате протекающих в газозвеси физико-химических процессов описываются уравнениями сохранения массы

$$\partial_t \rho_{11} = -\hat{\nu}_{11}^1 w_1 - \hat{\nu}_{11}^2 w_2,$$

$$\partial_t \rho_{12} = \xi_{12}^* w_v - \hat{\nu}_{12}^1 w_1, \quad \partial_t \rho_{13} = \hat{\nu}_{13}^1 w_1,$$

$$\partial_t \rho_{14} = \hat{\nu}_{14}^2 w_2, \quad \partial_t \rho_{15} = 0, \quad (1)$$

$$\partial_t \rho_{16} = (1 - \xi_{12}^*) w_v, \quad \partial_t \rho_{22} = -w_v,$$

$$\partial_t \rho_{23} = -\hat{\nu}_{23}^2 w_2, \quad \partial_t \rho_{24} = 0.$$

Здесь  $\hat{\nu}_{11}^1 = \nu_{11}^1/\nu_{12}^1$ ,  $\hat{\nu}_{12}^1 = \nu_{12}^1/\nu_{12}^1 = 1$ ,  $\hat{\nu}_{13}^1 = \nu_{13}^1/\nu_{12}^1$ ,  $\hat{\nu}_{11}^2 = \nu_{11}^2/\nu_{23}^2$ ,  $\hat{\nu}_{14}^2 = \nu_{14}^2/\nu_{23}^2$ ,  $\hat{\nu}_{23}^2 = \nu_{23}^2/\nu_{23}^2 = 1$ .

Уравнения движения удовлетворяются тождественно, так как скорости фаз равны нулю,  $u_i = 0$ ,  $p = p(t)$ . Уравнения притока тепла в энтальпийной форме имеют вид

$$\left( \sum_{j=1}^6 \rho_{1j} c_{p,1j} \right) \partial_t T_1 - m_1 \partial_t p =$$

$$= q_1 w_1 + \alpha_{q2} q_2 w_2 - |\lambda| L w_v + Q_{12}, \quad (2)$$

$$\left( \sum_{j=2}^4 \rho_{2j} c_{p,2j} \right) \partial_t T_2 - m_2 \partial_t p =$$

$$= (1 - \alpha_{q2}) q_2 w_2 - (1 - |\lambda|) L w_v - Q_{12}.$$

Здесь величины  $q_1$  и  $q_2$  определяют выделение тепла за счет химических реакций окисления соответственно летучих и углерода,  $L$  — поглощение тепла в ходе реакции пиролиза. Выражения для этих величин следующие:

$$q_1 = q_{1,0} + (\hat{\nu}_{11}^1 c_{p,11} + \hat{\nu}_{12}^1 c_{p,12} - \hat{\nu}_{13}^1 c_{p,13})(T_1 - T_0),$$

$$q_2 = q_{2,0} + (\hat{\nu}_{11}^2 c_{p,11} - \hat{\nu}_{14}^2 c_{p,14})(T_1 - T_0) +$$

$$+ \hat{\nu}_{23}^2 (T_2 - T_0),$$

$$L = L_0 + (\xi_{12}^* c_{p,12} + (1 - \xi_{12}^*) c_{p,16})(T_1 - T_0) -$$

$$- c_{p,22}(T_2 - T_0),$$

где  $q_{1,0}$  и  $q_{2,0}$  — стандартные теплоты реакций,  $L_0$  — теплота пиролиза. Часть теплоты гетерогенной реакции окисления углерода  $\alpha_{q2}$  выделяется в газовой фазе, а другая часть  $(1 - \alpha_{q2})$  — в дисперсной. Аналогично этому часть теплоты пиролиза  $|\lambda|$  поглощается из газовой, а часть  $(1 - |\lambda|)$  — из дисперсной фазы.

Член  $Q_{12}$  задает межфазный теплообмен и при учете конвективного и радиационного потоков тепла имеет вид

$$Q_{12} = Q_{12}^{conv} + Q_{12}^{rad}, \quad Q_{12}^{conv} = nS\alpha_{12}(T_2 - T_1),$$

$$Q_{12}^{rad} = nS\varepsilon_s\sigma(T_2^4 - T_1^4),$$

где  $\alpha_{12} = \lambda_1 \text{Nu}/2r$  — коэффициент теплоотдачи,  $\varepsilon_s$  — интегральная степень черноты частицы,  $\sigma$  — постоянная Стефана — Больцмана. Отметим, что система уравнений (1), (2) близка к приведенной в [5] для описания динамики реагирующей смеси газа, твердых частиц и жидких капель углеводородного топлива.

### Безразмерная система уравнений

Введем масштаб времени  $t_M$ , расстояния  $x_M = r_0$ , плотности  $\rho_M = \rho_0$ , температуры  $T_M$ , давления  $p_M = \xi_{1,0}\rho_M \mathcal{R}_{1,0}T_M/m_{1,0}$ , теплоемкости  $c_M = \xi_{1,0}\mathcal{R}_{1,0}/m_{1,0}$ , энергии  $e_M = c_M T_M$  и числа частиц  $n_M = n_0$ . Величины с нулевым индексом соответствуют начальному состоянию смеси. В расчетах принималось  $T_M = 300$  К,  $t_M = 10^{-3}$  с. В результате обезразмеривания законы сохранения и замыкающие соотношения переходят в систему уравнений (соответствующие величины обозначены значком  $\hat{\cdot}$  сверху):

$$\frac{d\hat{\rho}_{11}}{d\hat{t}} = -\hat{\nu}_{11}^1 \hat{w}_1 - \hat{\nu}_{11}^2 \hat{w}_2, \quad \frac{d\hat{\rho}_{12}}{d\hat{t}} = \xi_{12}^* \hat{w}_v - \hat{\nu}_{12}^1 \hat{w}_1,$$

$$\frac{d\hat{\rho}_{13}}{d\hat{t}} = \hat{\nu}_{13}^1 \hat{w}_1, \quad \frac{d\hat{\rho}_{14}}{d\hat{t}} = \hat{\nu}_{14}^2 \hat{w}_2, \quad \frac{d\hat{\rho}_{15}}{d\hat{t}} = 0,$$

$$\frac{d\hat{\rho}_{16}}{d\hat{t}} = (1 - \xi_{12}^*) \hat{w}_v, \quad \frac{d\hat{\rho}_{22}}{d\hat{t}} = -\hat{w}_v,$$

$$\frac{d\hat{\rho}_{23}}{d\hat{t}} = -\hat{\nu}_{23}^2 \hat{w}_2, \quad \frac{d\hat{\rho}_{24}}{d\hat{t}} = 0,$$

$$\left( \sum_{j=1}^6 \hat{\rho}_{1j} \hat{c}_{p,1j} \right) \frac{d\hat{T}_1}{d\hat{t}} - m_1 \frac{d\hat{P}}{d\hat{t}} = \\ = \hat{q}_1 \hat{w}_1 + \alpha_{q2} \hat{q}_2 \hat{w}_2 - |\lambda| \hat{L} \hat{w}_v + \hat{Q}_{12}^{conv} + \hat{Q}_{12}^{rad}, \quad (3)$$

$$\left( \sum_{i=2}^4 \hat{\rho}_{2i} \hat{c}_{p,2i} \right) \frac{d\hat{T}_2}{d\hat{t}} - m_2 \frac{d\hat{P}}{d\hat{t}} =$$

$$= (1 - \alpha_{q2}) \hat{q}_2 \hat{w}_2 - (1 - |\lambda|) \hat{L} \hat{w}_v - \hat{Q}_{12}^{conv} - \hat{Q}_{12}^{rad},$$

$$m_{2i} = \hat{\rho}_{2i} / \hat{\rho}_{2i}^0,$$

$$\hat{r}^3 = \left[ \frac{m_{22} + m_{23} + m_{24}}{m_{2,0}} \right]^{1/3},$$

$$m_2 = m_{2,0} \hat{r}^3, \quad m_1 = 1 - m_2,$$

$$\hat{P} = \frac{\hat{\rho}_1 \hat{T}_1 \hat{\mathcal{R}}_1}{m_1}.$$

Выражения для безразмерных источников массы и потоков тепла таковы:

$$\hat{w}_v = \frac{\hat{\rho}_{22}}{\tau_v} \frac{\exp(-\hat{E}_v/\hat{T}_2)}{1 + (\text{Da}_v/6)\hat{r}^2 \exp(-\hat{E}_v/\hat{T}_2)},$$

$$\hat{w}_1 = \frac{\hat{\rho}_{11}^{a_1} \hat{\rho}_{12}^{a_2} \hat{P}^{a_3}}{\tau_{B1}} \exp(-\hat{E}_{B1}/\hat{T}_1),$$

$$\hat{w}_2 = \frac{\xi_{11} \hat{\rho}_{23}}{\tau_{B2}} \frac{\exp(-\hat{E}_{B2}/\hat{T}_2)}{1 + (\text{Da}_2/6\text{Nu})\hat{r}^2 \exp(-\hat{E}_{B2}/\hat{T}_2)},$$

$$\hat{Q}_{12}^{conv} = \frac{\hat{r}}{\tau_{conv}} (\hat{T}_2 - \hat{T}_1), \quad (4)$$

$$\hat{Q}_{12}^{rad} = \frac{\hat{r}^2}{\tau_{rad}} (\hat{T}_2^4 - \hat{T}_1^4).$$

Выделение (поглощение) тепла в ходе реакций задается величинами

$$\hat{q}_1 = \hat{q}_{1,0} + (\hat{\nu}_{11}^1 \hat{c}_{p,11} + \hat{\nu}_{12}^1 \hat{c}_{p,12} - \hat{\nu}_{13}^1 \hat{c}_{p,13}) \times \\ \times (\hat{T}_1 - \hat{T}_0),$$

$$\hat{q}_2 = \hat{q}_{2,0} + (\hat{\nu}_{11}^2 \hat{c}_{p,11} - \hat{\nu}_{14}^2 \hat{c}_{p,14}) (\hat{T}_1 - \hat{T}_0) + \\ + \hat{\nu}_{23}^2 \hat{c}_{p,23} (\hat{T}_2 - \hat{T}_0), \quad (5)$$

$$\hat{L} = \hat{L}_0 + [\xi_{12}^* \hat{c}_{p,12} + (1 - \xi_{12}^*) \hat{c}_{p,16}] (\hat{T}_1 - \hat{T}_0) - \\ - \hat{c}_{p,22} (\hat{T}_2 - \hat{T}_0).$$

Константы в вышеприведенных выражениях определяются формулами:  $\text{Da}_v = K_v d_0^2 / D_v$  — число Дамкелера для реакции пиролиза,  $\text{Da}_2 = K_{B2} d_0^2 / D_{11}$  — число Дамкелера для реакции

окисления углерода,  $\tau_v = (K_v t_M)^{-1}$ ,  $\tau_{B1} = (K_{B1} t_M \rho_M^{a_1+a_2-1} p_M^{a_3})^{-1}$ ,  $\tau_{B2} = (K_{B2} t_M)^{-1}$ ,

$$\tau_{conv} = \frac{2\rho_M c_M r_0^2}{3m_{2,0} \text{Nu} \lambda_1 t_M}, \tau_{rad} = \frac{\rho_M c_M r_0}{3m_{2,0} \varepsilon_s \sigma T_M^3 t_M}$$

— характерные времена химической (первые три) и тепловой релаксации (конвективный и радиационный теплообмен). Начальные условия для параметров смеси таковы:

$$\hat{t} = 0: \quad \hat{\rho}_{11} = \hat{\rho}_{11,0} = \xi_{11,0} \hat{\rho}_{1,0}, \\ \hat{\rho}_{15} = \hat{\rho}_{15,0} = (1 - \xi_{11,0}) \hat{\rho}_{1,0},$$

$$\hat{\rho}_{12} = \hat{\rho}_{13} = \hat{\rho}_{14} = \hat{\rho}_{16} = 0, \quad \hat{\rho}_{2i} = \hat{\rho}_{2i,0}, \quad (6)$$

$$\hat{T}_j = \hat{T}_{j,0}, \hat{r} = 1.$$

Итак, для описания процесса воспламенения газозвеси частиц угля под действием высокой начальной температуры газовой фазы имеем систему обыкновенных дифференциальных уравнений (3)–(5) и начальных условий (6).

## 2. КАЧЕСТВЕННЫЕ ОСОБЕННОСТИ МАТЕМАТИЧЕСКОЙ МОДЕЛИ

### Характерные времена и режимы тепловой динамики

Как уже упоминалось, в смеси одновременно протекают несколько неравновесных процессов с разными временными масштабами: тепловая релаксация фаз посредством конвективного и радиационного теплообмена, химическая релаксация посредством реакций пиролиза, окисления летучих и окисления углерода частиц. Заметим, что при реагировании угольных частиц тепловые эффекты экзотермических реакций являются величинами одного порядка, тогда как теплота пиролиза почти на два порядка меньше. Это приводит к малой доле тепловых потерь на термическую деструкцию топлива в общем тепловом балансе фаз. В то же время реакция пиролиза является лимитирующей для процесса гомогенного реагирования летучих веществ. Поэтому в итоге выход летучих опосредованно (через последующее их окисление) сказывается и на тепловой динамике смеси.

В общем случае реакции пиролиза и окисления углерода могут протекать как в кинетической ( $\text{Da}_v, \text{Da}_2 \ll 1$ ), так и в диффузионной области ( $\text{Da}_v, \text{Da}_2 \gg 1$ ). На первом этапе исследования ограничимся рассмотрением только кинетической и промежуточной областей. В зависимости от соотношения между указанными выше характерными временами будут осуществляться различные варианты тепловой динамики газозвеси. Качественно будем различать режимы с воспламенением частиц топлива (Ч1) и без воспламенения с «регулярным» нагревом (Ч2), а также с воспламенением (Л1) и «регулярным» нагревом (Л2) летучих.

В адиабатических условиях «регулярные» режимы нагрева Ч2, Л2 могут быть вызваны, как известно, существенным кинетическим торможением, т. е. выгоранием топлива и недостаточным тепловыделением реакции окисления.

В качестве критерия воспламенения в режиме Ч1 принимаем, в соответствии с представлениями теории теплового взрыва, появление у зависимости температуры дисперсной фазы от времени точки перегиба, в которой достигается максимальная скорость нагрева частиц:

$$\frac{d\hat{T}_2}{d\hat{t}} \Big|_{\hat{t}=\hat{t}_{ign}} \rightarrow \max, \quad \frac{d^2\hat{T}_2}{d\hat{t}^2} \Big|_{\hat{t}=\hat{t}_{ign}} = 0.$$

Считаем, что воспламенение летучих в режиме Л1 достигается в точке, где максимальная скорость образования газообразного продукта реакции [6], т. е.

$$\frac{d\hat{\rho}_{13}}{d\hat{t}} \Big|_{\hat{t}=\hat{t}_{ign}^v} \rightarrow \max.$$

Режимы тепловой динамики Л1 и Ч1, как правило, реализуются совместно. Поэтому в газозвеси имеется два периода индукции — летучих ( $\hat{t}_{ign}^v$ ) и коксового остатка частиц ( $\hat{t}_{ign}$ ), причем из экспериментальных данных (см., например, [7]) известно, что обычно воспламенение кокса предшествует воспламенению летучих веществ в объеме возле частицы, т. е.  $\hat{t}_{ign}^v < \hat{t}_{ign}$ . Этот физически интересный режим тепловой динамики реализуется, в частности, при выполнении условия  $\tau_v \ll \tau_{B1} < \tau_{B2}$  на времена химической релаксации (разумеется, при достаточно высоком начальном содержании летучих  $\xi_{22,0}$ ). При  $\tau_v \gg \tau_{B1}$  динамика воспламенения будет определяться в основном скоростью либо реакции пиролиза, если

$\tau_{B1} < \tau_{B2}$ , либо реакции окисления углерода, если  $\tau_{B1} > \tau_{B2}$ .

Обратимся теперь к численным примерам, иллюстрирующим некоторые качественные особенности процесса воспламенения смеси.

### Численные примеры

Начальные размерные параметры для взвеси угольных частиц в кислороде имели следующие значения:  $T_{1,0} = 1470$  К,  $p_0 = 2,3$  МПа,  $\rho_{2,0} = 2$  кг/м<sup>3</sup>,  $\xi_{11,0} = 1$ ,  $\xi_{22,0} = 0,26$ ,  $\xi_{23,0} = 0,74$ . Теплофизические параметры газовой фазы соответствовали температуре 1000 К. Задавались следующие кинетические константы реакций:  $E_v = 8900$  К [4],  $a_1 = a_2 = 1$ ,  $a_3 = 0$ ,  $K_{B1} = 1 \cdot 10^7$  с<sup>-1</sup>(кг/м<sup>3</sup>)<sup>-1</sup>,  $E_{B1} = 9000$  К,  $E_{B2} = 9180$  К. Предэкспоненциальные множители  $K_v$  и  $K_{B2}$  варьировались, что приводило к разным соотношениям между временами химической релаксации. Начальный размер частиц изменялся от 0,5 до 5 мкм; это увеличивало время конвективного теплообмена ( $\tau_{conv}$ ) с  $3,9546 \cdot 10^{-3}$  до  $3,9546 \cdot 10^{-1}$  и соответственно длительность зоны тепловой релаксации. Ввиду малых размеров частиц лучистый теплообмен оказывал несущественное влияние на ход нагрева смеси.

Вначале рассмотрим два предельных варианта тепловой динамики угольной взвеси: режимы гетерогенного (заморожены либо процесс выхода летучих веществ при  $\tau_v \rightarrow \infty$ , либо реакция окисления летучих при  $\tau_{B1} \rightarrow \infty$ ) и гомогенного (заморожена реакция окисления углерода при  $\tau_{B2} \rightarrow \infty$ ) воспламенения.

### Гетерогенное воспламенение

Гетерогенным воспламенением называем режим реагирования угольной газозвеси Ч1 в том случае, когда заморожены либо процесс выхода летучих веществ ( $\tau_v \rightarrow \infty$ ), либо реакция их окисления ( $\tau_{B1} \rightarrow \infty$ ).

На рис. 1 приведены соответствующие этому случаю зависимости основных параметров реагирующей смеси от времени. После стадии прогрева частиц, когда их температура заметно повышается за счет теплообмена с горячим газом, следует индукционный период, в течение которого все параметры сохраняют примерно постоянные значения. Из рис. 1, а видно, что несмотря на малость размеров частиц температуры фаз заметно различаются

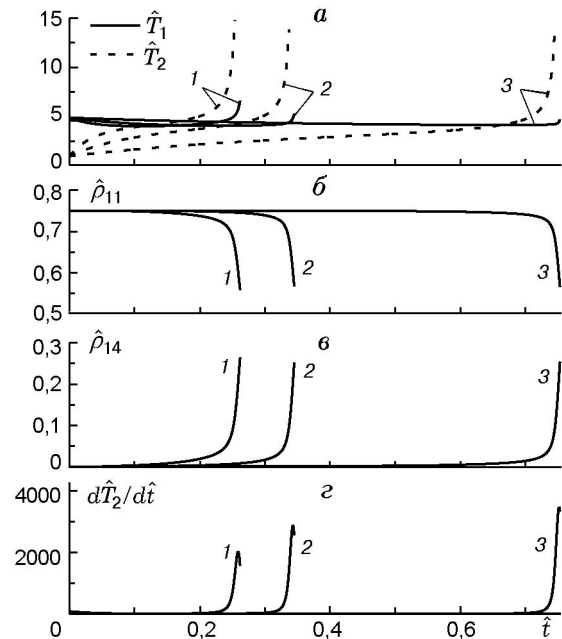


Рис. 1. Динамика нагрева и гетерогенного воспламенения газозвеси частиц угля размером  $r_0 = 1,5$  (1), 2,5 (2) и 5 мкм (3)

во всем интервале времени до момента воспламенения. Это объясняется тем, что в данном примере тепловая релаксация фаз протекает заметно медленнее химической реакции,  $\tau_{conv} = 3,56 \cdot 10^{-2} > \tau_{B2} = 5 \cdot 10^{-3}$ . С ростом размера частиц температуры фаз в момент воспламенения несколько уменьшаются. Количества выгоревшего кислорода (рис. 1, б) и образовавшихся продуктов реакции (рис. 1, в) в течение периода индукции слабо зависят от размера частиц топлива. В то же время максимальная скорость нагрева дисперсной фазы заметно возрастает с увеличением размера частиц (рис. 1, г).

### Гомогенное воспламенение

Гомогенным воспламенением называем режим реагирования угольной газозвеси Л1 в том случае, когда заморожен процесс окисления углерода ( $\tau_{B2} \rightarrow \infty$ ).

Рис. 2 иллюстрирует процесс гомогенного воспламенения угольной газозвеси при  $\tau_{B2} \rightarrow \infty$ . В данном случае фазы обмениваются теплом достаточно быстро, и поэтому их температуры заметно различаются только на коротких участках прогрева частиц и резкого роста их температуры. При этом увеличение размера частиц приводит к более выражен-

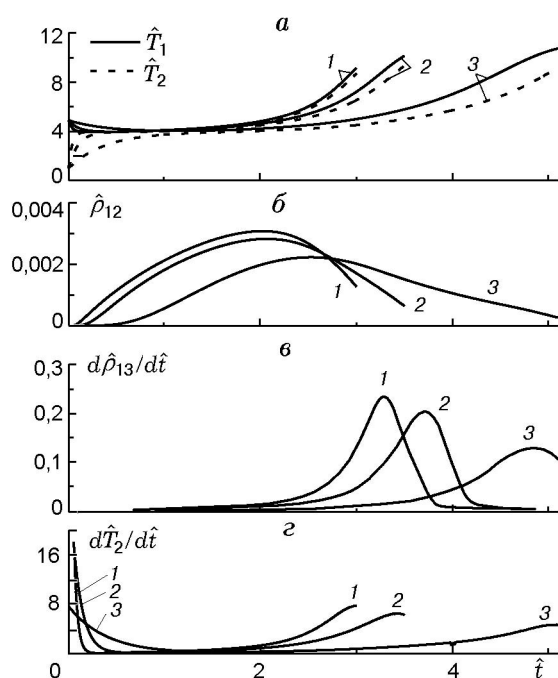


Рис. 2. Динамика нагрева и гомогенного воспламенения газовой взвеси частиц угля размером  $r_0 = 1,5$  (1), 2,5 (2) и 5 мкм (3)

Примерные характеристики гомогенного воспламенения угольной аэрозвеси (данные соответствуют рис. 2)

Характеристики	Радиус частиц, мкм		
	1,5	2,5	5
$t_{ign}^v$ , мс	2,96	3,29	4,62
$t_{ign}$ , мс	2,98	3,42	5,09
$T_1(t_{ign}^v)/300$ К	8,836	8,959	9,277
$T_2(t_{ign}^v)/300$ К	8,401	8,015	7,220
$T_1(t_{ign})/300$ К	8,989	9,738	10,727
$T_2(t_{ign})/300$ К	8,555	8,838	9,155

ной температурной неравновесности (см. кривые 1–3 на рис. 2,а). Из сравнения рис. 2,в,г, где представлены скорости образования продуктов окисления летучих и нагрева частиц, следует, что времена задержки воспламенения летучих и кокса достаточно близки между собой. В течение индукционного периода  $(0, t_{ign})$  сильно изменяется лишь плотность газообразных летучих веществ (рис. 2,б). С возрастанием размера частиц сдвигается момент времени максимального насыщения смеси летучими, уменьшается максимальное значение их плотности  $\hat{\rho}_{12}$ . Это объясняется возрастанием

диффузионного сопротивления транспорту летучих сквозь твердый скелет угольной частицы. Действительно, с ростом диаметра частицы увеличивается число Дамкелера  $Da_v$  и согласно (4) уменьшается скорость пиролиза  $\hat{w}_v$ . Как видно (см. рис. 2,з), с увеличением размера частицы темп ее нагрева уменьшается вместе с величиной максимальной скорости нагрева.

О близости задержек воспламенения летучих и коксового остатка говорят и данные таблицы, где для условий рис. 2 приведены характерные параметры процесса гомогенного воспламенения: периоды индукции летучих  $t_{ign}^v$  и коксового остатка  $t_{ign}$ , а также температуры фаз в оба момента воспламенения. Заметим, что мы не определяем температуру воспламенения летучих в качестве критерия воспламенения. Поэтому в момент воспламенения возможна слабая зависимость температуры газовой фазы от размера частиц. Для пояснения этого укажем, что скорость образования газообразных продуктов при окислении летучих веществ и скорость изменения температуры газовой фазы различны, в том числе в силу протекания межфазного теплообмена, интенсивность которого зависит от размера частиц. Поэтому радиус частиц оказывает слабое влияние на величину  $T_1(t_{ign}^v)$ .

Перейдем к рассмотрению характерных особенностей промежуточного режима тепловой динамики смеси.

### Смешанное воспламенение

Смешанным воспламенением называем режим реагирования угольной газовой взвеси Ч1, Л1 в том случае, когда времена релаксации всех физико-химических процессов конечны.

#### Тип I. Гомогенно-гетерогенное воспламенение.

На рис. 3 приведены данные тепловой динамики газовой взвеси при  $\tau_{B1} = 8,02 \cdot 10^{-4}$ ,  $\tau_v = 8,772 \cdot 10^{-3}$ ,  $\tau_{B2} = 5 \cdot 10^{-1}$ . Как видно из рис. 3,а, где в разных масштабах приведены зависимости температур фаз от времени, в первые моменты времени (например, для частиц с  $r = 2,5$  мкм имеем  $t \leq 0,5$ ) наблюдается неравновесный режим нагрева. Затем температуры фаз сравниваются, и наступает воспламенение сначала в газовой фазе летучих, а затем дисперсной фазы. Это можно видеть из рис. 3,д, где представлено изменение во времени скорости образования продуктов горения летучих. Рис. 3,з показывает, что дисперсная фаза воспламеняется несколько позже. Здесь также видно, что

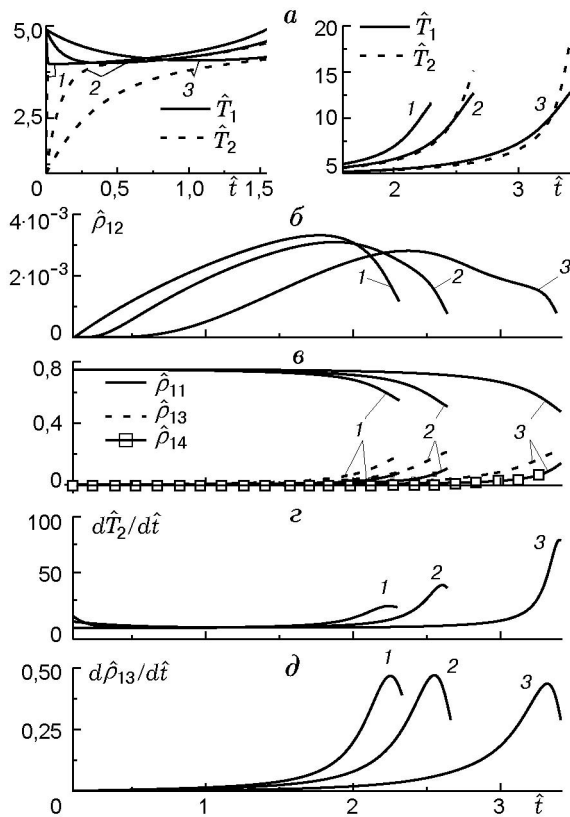


Рис. 3. Динамика нагрева и воспламенения газозвеси частиц угля размером  $r_0 = 0,5$  (1), 2,5 (2) и 5 мкм (3). «Медленное» реагирование углерода (гомогенно-гетерогенное воспламенение)

даже достаточно медленная реакция окисления углерода вносит свой вклад в процесс воспламенения частиц. Заметим, что для малых частиц различие между  $t_{ign}$  и  $t_{ign}^v$  не слишком существенно, с возрастанием размера частиц оно становится более выраженным (сравните время достижения максимального значения на кривых 1–3 рис. 3, г, д). Рис. 3, б, в иллюстрируют поведение активных газовых компонентов в процессе реагирования.

**Тип II. Гетерогенно-гомогенное воспламенение.** Перейдем к варианту тепловой динамики смеси, реализуемому при  $\tau_{B1} = 8,02 \cdot 10^{-4}$ ,  $\tau_{B2} = 5 \cdot 10^{-3}$ ,  $\tau_v = 8,772 \cdot 10^{-3}$  (рис. 4). В данном случае реакция окисления углерода оказывает основное влияние на процесс воспламенения, так как она протекает примерно на порядок быстрее гомогенной реакции. Это выражается, например, в том, что к моменту воспламенения остается достаточно большая масса непрореагировавших летучих (рис. 4, в). Кроме того, к этому моменту еще не достиг-

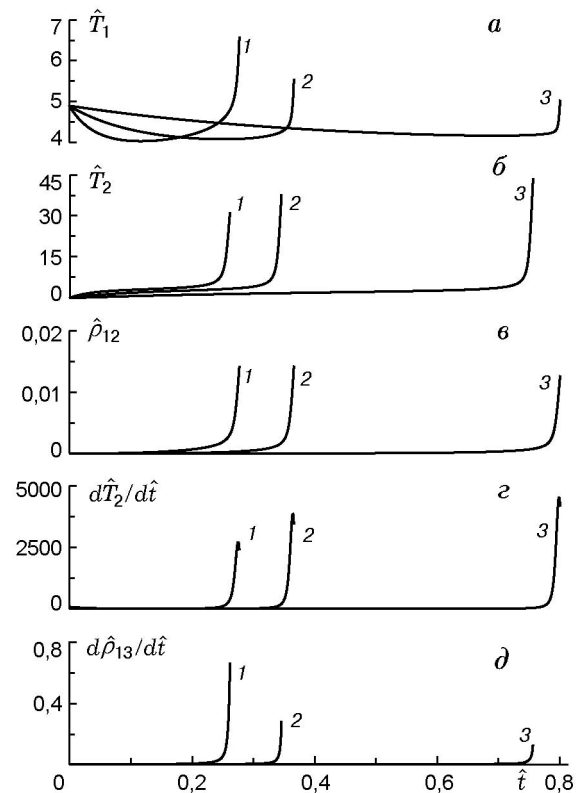


Рис. 4. Динамика нагрева и воспламенения газозвеси частиц угля размером  $r_0 = 1,5$  (1), 2,5 (2) и 5 мкм (3). «Быстрое» реагирование углерода (гетерогенно-гомогенное воспламенение)

нут максимум скорости образования продуктов окисления летучих (см. рис. 4, в, г). Обострение профиля температуры первоначально происходит в фазе частиц, а затем в газовой фазе (рис. 4, а, б).

### 3. МОДЕЛИРОВАНИЕ ВОСПЛАМЕНЕНИЯ СМЕСЕЙ ГАЗА И ЧАСТИЦ УГЛЯ В ОТРАЖЕННЫХ УДАРНЫХ ВОЛНАХ

Рассмотрим приложение построенной математической модели к описанию процесса воспламенения газозвесей угольных частиц в отраженных ударных волнах. Считаем, что после отражения ударной волны от стенки процесс образования смеси газа и частиц угля уже завершен. Теплообмен частиц с горячей газовой фазой приводит к повышению их температуры, инициированию химических реакций термического разложения и окисления и к последующему воспламенению смеси.

В статье [8] приведены времена задержки воспламенения угольных газозвесей в возду-



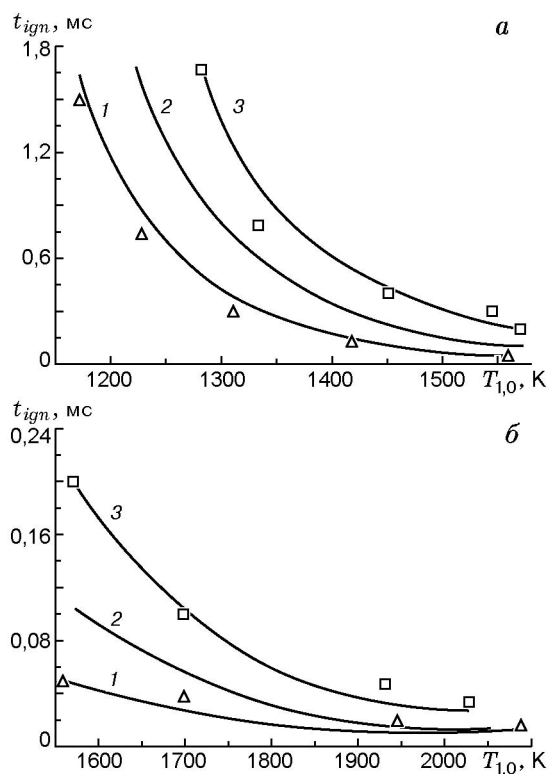


Рис. 5. Зависимость времени задержки воспламенения смеси угольных частиц в кислороде от температуры газа за отраженной ударной волной:

*a* — средние, *b* — высокие значения температуры; линии — расчет при  $\xi_{22,0} = 0,26$  (1), 0,17 (2) и 0,09 (3), значки — экспериментальные данные [8] при  $\xi_{22,0} = 0,26$  ( $\Delta$ ) и 0,09 ( $\square$ )

хе и кислороде в зависимости от температуры газовой фазы за отраженной ударной волной ( $t_{ign}(T_{1,0})$ ). Для физических условий работы [8] нами были выполнены расчеты тепловой динамики угольных взвесей, которые позволили определить параметры формальной кинетики реакций из условия наилучшего совпадения расчетных и экспериментальных данных по зависимости  $t_{ign} = t_{ign}(T_{1,0})$ . Ввиду того, что в физическом эксперименте достигались очень высокие скорости прогрева частицы (порядка  $10^6 \div 10^8$  К/с), к искомым величинам относили и предэкспонент реакции пиролиза  $K_v$ . «Температуру» активации данного процесса брали равной  $E_v = 8900$  К согласно [4]. В результате решения ряда прямых задач получен следующий набор констант:  $K_v = 5 \cdot 10^8$  с<sup>-1</sup>,  $K_{B2} = 9,5 \cdot 10^6$  с<sup>-1</sup>,  $E_{B1} = 18 \cdot 10^3$  К,  $E_{B2} = 15 \cdot 10^3$  К. Константа  $K_{B1}$  оказывается зависящей от начальной массовой концентрации летучих веществ  $\xi_{22,0}$  и определяется по форму-

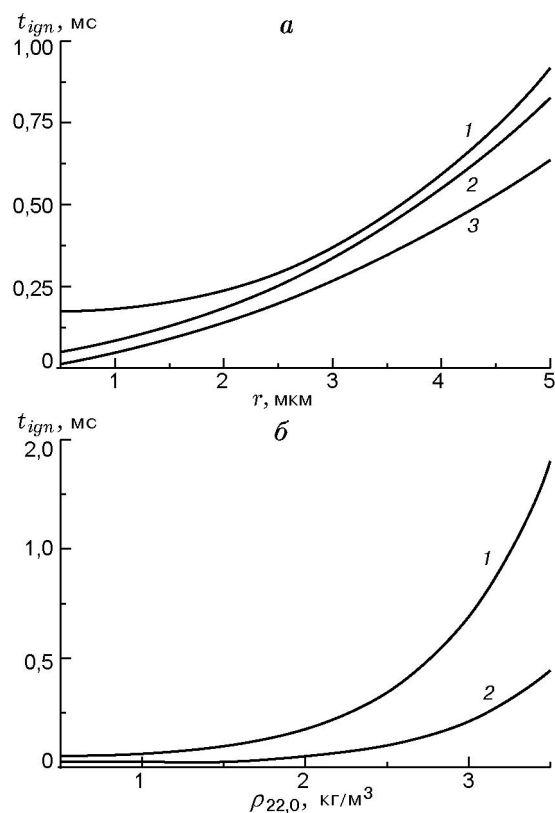


Рис. 6. Влияние размера (*a*) и начальной средней плотности частиц (*b*) на время задержки воспламенения угольной взвеси в кислороде при  $\xi_{22,0} = 0,026$ ,  $T_{1,0} = 1400$  (1), 1558 (2), 2088 К (3)

ле

$$K_{B1} = \begin{cases} 0, & \xi_{22,0} \leq 0,09, \\ K_{B1}^0 (\xi_{22,0} - 0,09)^{a_4}, & \xi_{22,0} > 0,09, \end{cases}$$

где  $a_4 = 1,568$ ,  $K_{B1}^0 = 6,03627 \cdot 10^{11}$  с<sup>-1</sup>(кг/м<sup>3</sup>)<sup>-1</sup>.

Сравнение расчетных и опытных данных для угольно-кислородной смеси проведено на рис. 5. Как видно, найденные кинетические параметры обеспечивают достаточно хорошее описание периода индукции как при средних (рис. 5, *a*), так и при высоких температурах газа за отраженной ударной волной (рис. 5, *b*). Кроме того, модель способна правильно предсказывать влияние начального содержания летучих веществ ( $\xi_{22,0}$ ) на задержки воспламенения. На рис. 5 кривая 2 относится к расчетным данным при  $\xi_{22,0} = 0,17$  и лежит между кривыми, соответствующими массовым концентрациям летучих  $\xi_{22,0} = 0,09$  и 0,26. Отметим, что при больших значениях температуры за фронтом отраженной ударной волны изменение

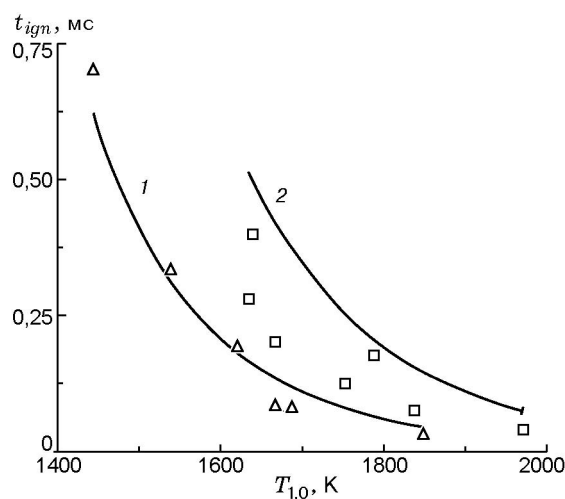


Рис. 7. Зависимость времени задержки воспламенения смеси угольных частиц в воздухе от температуры газа за отраженной ударной волной:

линии — расчет при  $\xi_{22,0} = 0,26$  (1) и  $0,09$  (2),  
 значки — экспериментальные данные [8] при  
 $\xi_{22,0} = 0,26$  ( $\Delta$ ) и  $0,09$  ( $\square$ )

начального содержания летучих веществ слабо влияет на время задержки воспламенения. Связано это с переходом к гетерогенному режиму воспламенения.

Влияние размера частиц и начальной плотности дисперсной фазы на время задержки воспламенения угольной взвеси в кислороде проиллюстрировано на рис. 6 при начальном содержании летучих веществ  $\xi_{22,0} = 0,026$ . Из сопоставления рис. 6,а и рис. 6,б можно сделать вывод о более сильном влиянии начальной плотности дисперсной фазы частиц на время задержки воспламенения  $t_{ign}$ , особенно в области средних температур за отраженной ударной волной.

Найденный набор кинетических констант может быть использован и для определения задержек воспламенения взвеси угольных частиц в воздухе (рис. 7). Правда, в этом случае расчет дает несколько завышенные значения периода индукции смеси при небольшом начальном содержании летучих в топливе ( $\xi_{22,0} = 0,09$ ).

## ЗАКЛЮЧЕНИЕ

1. Построена точечная математическая модель воспламенения взвеси угольных частиц в газе, принимающая во внимание основные

физико-химические процессы: выход в газовую фазу связанных летучих веществ и их окисление, окисление углерода, конвективный и радиационный теплообмен между фазами.

2. В рамках этой модели выявлены характерные варианты тепловой динамики смеси, реализуемые при различных временах релаксации неравновесных процессов:

- гетерогенное воспламенение посредством реакции окисления коксового остатка,
- гомогенное воспламенение, вызванное процессом окисления летучих веществ в газовой фазе;
- смешанное воспламенение за счет одновременного протекания процессов окисления кокса и летучих.

3. Проведена верификация модели по известным опытными данным, относящимся к задержкам воспламенения взвесей частиц угля в воздухе и кислороде в отраженных ударных волнах при изменении температуры за ударной волной и начального содержания летучих.

## ЛИТЕРАТУРА

1. Бабий В. И., Куваев Ю. Ф. Горение угольной пыли и расчет пылеугольного факела. М.: Энергоатомиздат, 1986.
2. Фёдоров А. В., Хмель Т. А., Фёдорова Н. Н., Гостеев Ю. А., Жилин А. А. Математическое моделирование воспламенения и горения угольной пыли за ударными волнами: Отчет № 9/2001 / Ин-т теоретической и прикладной механики СО РАН. Новосибирск, 2001.
3. Асланян Г. С., Директор Л. Б. Численное исследование процессов тепло- и массообмена горячей угольной частицы // Теплофизика высоких температур. 1991. Т. 20, № 3. С. 570–576.
4. Волков Э. П., Зайчик Л. И., Першуков В. А. Моделирование горения твердого топлива. М.: Наука, 1994.
5. Фёдоров А. В. Воспламенение газовзвесей в режиме взаимодействующих континуумов // Физика горения и взрыва. 1998. Т. 34, № 4. С. 57–64.
6. Алексеев Б. В., Гришин А. М. Физическая газодинамика реагирующих сред. М.: Высш. шк., 1985.
7. Основы практической теории горения / В. В. Померанцев и др. Л.: Энергия, 1973.
8. Бойко В. М., Папырин А. Н., Поплавский С. В. О влиянии летучих на задержки воспламенения газовзвесей угольных пылей в ударных волнах // Физика горения и взрыва. 1991. Т. 27, № 2. С. 101–111.

Поступила в редакцию 5/X 2000 г.