

УДК 536.468

## ВЛИЯНИЕ ДИФФУЗИИ ПРОДУКТОВ ПИРОЛИЗА УГЛЯ НА ХАРАКТЕРИСТИКИ И УСЛОВИЯ ВОСПЛАМЕНЕНИЯ КАПЕЛЬ ВОДОУГОЛЬНОГО ТОПЛИВА

Г. В. Кузнецов<sup>1</sup>, В. В. Саломатов<sup>2</sup>, С. В. Сыродой<sup>1</sup><sup>1</sup>Томский политехнический университет, 634050 Томск, ssyrodoy@yandex.ru<sup>2</sup>Институт теплофизики им. С. С. Кутателадзе СО РАН, 630090 Новосибирск

Проведено теоретическое исследование процессов термической подготовки и зажигания капли водоугольного топлива при интенсивном радиационно-конвективном нагреве в условиях диффузии газообразных продуктов пиролиза твердого топлива во внешнюю газовую среду. Установлено, что газообразные продукты пиролиза воспламеняются на расстоянии от поверхности нагрева, примерно равном радиусу капли, после чего происходит зажигание кокса основного слоя топлива. При этом время между воспламенением летучих и коксового остатка составляет менее 0.5 с. Сравнение времен задержки зажигания, полученных путем математического моделирования и экспериментально, показало удовлетворительное соответствие теоретических и экспериментальных значений.

Ключевые слова: водоугольное топливо, зажигание кокса, воспламенение летучих, диффузия продуктов пиролиза.

DOI 10.15372/FGV20180604

### ВВЕДЕНИЕ

Экономическая перспективность использования водоугольного топлива (ВУТ) в качестве основного для тепловых электрических станций обоснована уже давно [1–3]. Однако до сих пор технология ВУТ не получила достаточно большого распространения в современной энергетике. Это связано с отсутствием общей теории зажигания и горения таких существенно неоднородных гетерогенных топлив. Разработанные к настоящему времени математические модели и методы решения задач зажигания частиц ВУТ условно можно разделить на три группы.

К первой относятся нульмерные модели [4–6], при разработке которых принимается, что температурное поле частицы топлива однородно и процесс испарения сосредоточен непосредственно на ее поверхности. Такие модели наиболее просты и позволяют получить аналитические выражения для расчета характеристик зажигания. При этом гипотеза о локализации фронта испарения на поверхности частицы является существенным допущением

и может привести к большим погрешностям при прогнозировании условий и характеристик воспламенения.

Ко второй группе можно отнести модели [7–9], в которых процесс зажигания ВУТ разбивается на ряд последовательных стадий, соответствующих определенным физическим процессам (инертный прогрев, испарение воды, термическое разложение органической части топлива, зажигание). Но при этом необходимо отметить, что на практике процессы термической подготовки в течение большого периода времени протекают совместно. Соответственно дискретизация процесса зажигания на отдельные временные стадии может привести к существенным погрешностям при моделировании воспламенения капель ВУТ.

Наиболее же общая — третья группа моделей зажигания ВУТ построена на базе уравнений математической физики [10]. Процесс воспламенения описывается системой нестационарных дифференциальных уравнений в частных производных. При этом учитываются [10] основные физические и химические процессы, протекающие в период индукции. Но пока с использованием математического аппарата [10] исследовано влияние лишь небольшой группы значимых факторов (тепловое излучение [11],

Работа выполнена при финансовой поддержке фонда Президента РФ по государственной поддержке ведущих научных школ (проект НШ-7538-2016.8).

© Кузнецов Г. В., Саломатов В. В., Сыродой С. В., 2018.

форма частицы [12], степень метаморфизма угля [13], гетерогенность пористой структуры топлива [14]) на условия и характеристики зажигания ВУТ. В постановках [10–14] предполагается, что процесс зажигания летучих протекает в очень узкой (можно сказать, бесконечно тонкой) приповерхностной пленке. Однако из работ [15] и [16] известно, что при зажигании твердого топлива (например, угля) существенную роль (можно сказать, определяющую) играют процессы диффузии. Одна из наиболее полных моделей воспламенения капли ВУТ приведена в [17]. В ней описываются процессы испарения воды и термического разложения органической части топлива, сопровождающиеся выходом летучих и их воспламенением в газовой фазе. Но в [17] испарение воды учитывается в рамках условий Стефана (равновесность температуры и скорости на границе фронта испарения). Однако еще Г. Герцем [18] было установлено, что скорость испарения зависит от температуры поверхности фронта фазового перехода и концентрации паров жидкости у этой поверхности.

На основании вышеизложенного можно сделать вывод, что моделирование зажигания существенно неоднородных частиц ВУТ при описании основных взаимосвязанных физических процессов термической подготовки (включая диффузию летучих), протекающих совместно как в самой частице, так и в ее малой окрестности в период индукции, является актуальной и не решенной до настоящего времени задачей.

Цель работы — математическое моделирование процессов тепло- и массопереноса, протекающих совместно при воспламенении частицы ВУТ с учетом диффузии газообразных продуктов термического разложения во внешнюю газовую область.

## 1. ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ

### 1.1. Физическая постановка задачи

Основные закономерности исследуемого процесса установлены в экспериментальных исследованиях [14]. На основании результатов [14] принята физическая модель процессов тепло- и массопереноса в условиях совместно протекающих интенсивных фазовых (испарение воды) и физико-химических (термическое разложение, выход летучих, взаимодей-

ствие водяных паров и углерода кокса, газофазное воспламенение продуктов пиролиза) превращений, соответствующих условиям экспериментов [14].

В начальный момент времени частица ВУТ вводится в высокотемпературную среду и нагревается за счет конвекции и излучения. В результате интенсивного нагрева инициируется процесс испарения воды. Фронт испарения движется от поверхности в глубь топлива. В результате формируется пористый угольный каркас с высоким термическим сопротивлением. Водяные пары, образующиеся при испарении, фильтруются сквозь слой сухого топлива, вступая в термохимическое взаимодействие с углеродом с образованием горючих газообразных продуктов ( $\text{CO}$  и  $\text{H}_2$ ). Прогрев частицы ВУТ приводит к термическому разложению и выходу летучих. Последние совместно с парами воды и продуктами их термохимического взаимодействия с углеродом фильтруются к поверхности частицы топлива. После этого они диффундируют во внешнюю газовую среду. В результате формируется парогазовая смесь с существенным градиентом концентраций продуктов пиролиза. При достижении критических значений температуры и массового соотношения летучих и окислителя происходит воспламенение. В результате интенсивного теплового воздействия пламени летучих инициируется горение кокса ВУТ.

Необходимо отметить, что при термическом разложении выделяется газовая смесь, химический состав которой существенно зависит от группы факторов — степени метаморфизма угля, влажности, месторождения.

### 1.2. Математическая постановка задачи

Математическая постановка задачи воспламенения ВУТ, соответствующая сформулированной выше физической модели, включает в себя систему нестационарных дифференциальных уравнений.

Область решения задачи (частица ВУТ — газовая среда) приведена на рис. 1. В результате интенсивного нагрева инициируется испарение воды и формируется существенно неоднородная структура, состоящая из твердых, жидких и газообразных компонентов. Распределение температуры в такой неоднородной гетерогенной системе описывает уравнение энергии [10], учитывающее испарение воды, термическое разложение органической части топли-

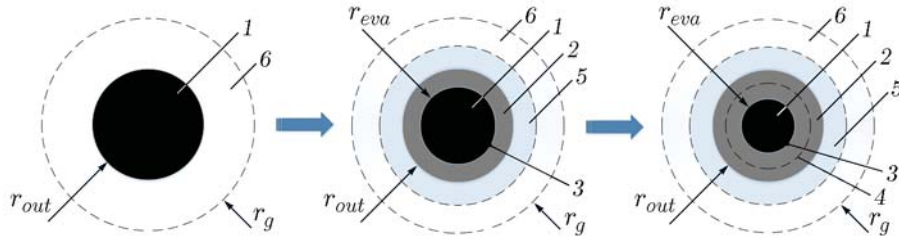


Рис. 1. Схема области решения задачи:

1 — исходное топливо, 2 — сухой угольный каркас, 3 — граница раздела системы исходное топливо — сухой угольный каркас, 4 — граница раздела системы сухой уголь — термически разлагающийся уголь, 5 — парагазовая смесь, 6 — внешняя газовая область

ва, термохимическое взаимодействие водяных паров и углерода, а также движение водяного пара и продуктов термического разложения сквозь пористый каркас:

$$\frac{\partial H}{\partial t} = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left[ r^2 \lambda_{wcf} \frac{\partial T}{\partial r} \right] - \frac{Q_{eva} W_{eva}}{h_d} \delta(r_{eva}) - \sum_{i=1}^{i=2} Q_i W_i - c_s \rho_s U_s \frac{\partial T}{\partial r} \theta(r - r_{eva}), \quad (1)$$

$$t > 0, \quad 0 < r < r_{out}.$$

Здесь

$$\sum_{i=1}^{n=2} Q_i W_i = Q_{c \rightarrow vol} W_{c \rightarrow vol} + Q_{C+H_2O} W_{C+H_2O},$$

$H = c_{wcf}(r) \rho_{wcf}(r) T(r, \tau)$  — энтальпия;  $r$  — радиус ( $r_{out}$  — внешний) частицы;  $\delta(r_{eva})$  — функция Дирака;  $\theta(r_{eva})$  — функция Хэвисайда;  $h_d$  — параметр размазывания фронта испарения [19];  $T$  — температура;  $\lambda_{wcf}$ ,  $c_{wcf}$ ,  $\rho_{wcf}$  — коэффициент теплопроводности (Вт/(м·К)), теплоемкость (Дж/кг) и плотность (кг/м<sup>3</sup>) топлива соответственно;  $U_s$  — скорость фильтрации водяных паров и газообразных продуктов термического разложения, м/с;  $c_s$ ,  $\rho_s$  — теплоемкость и плотность смеси водяных паров и газообразных продуктов пиролиза;  $Q$ ,  $W$  — тепловой эффект и скорость протекания соответствующего процесса (с индексом  $eva$  — испарение воды,  $c \rightarrow vol$  — термическое разложение,  $C + H_2O$  — термохимическое взаимодействие водяных паров и углерода). Теплофизические характеристики ( $\lambda_{wcf}$ ,  $c_{wcf}$  и  $\rho_{wcf}$ ) принимались с учетом положения границы фазового перехода. Массовая скорость испарения вычислялась из выражения [20]

$$W_{eva} = W_f \exp \left[ \frac{Q_{wat} \mu (T(r_{eva}, \tau) - T_f)}{RT_f T(r_{eva}, \tau)} \right] \quad [\text{кг}/(\text{м}^2 \cdot \text{с})], \quad (2)$$

где  $\mu$  — молярная масса воды, кг/моль;  $R$  — универсальная газовая постоянная, Дж/(моль·К); индексом  $wat$  обозначены параметры, относящиеся к воде. Координата границы испарения находилась из выражения

$$r_{eva} = r_{out} - \int_0^t u_{fe} dt, \quad (3)$$

где  $u_{fe} = W_{eva}/\rho$  — линейная скорость продвижения фронта испарения, м/с.

Распределение температуры в газовой области описывается уравнением энергии. Последнее учитывает экзотермические эффекты реакций окисления основных горючих компонентов:

$$c_g \rho_g \frac{\partial T}{\partial t} = \frac{\lambda_g}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left[ r^2 \frac{\partial T}{\partial r} \right] + \sum_{i=1}^{n=4} Q_i W_i, \quad (4)$$

$$r_{out} < r < r_g,$$

где

$$\sum_{i=1}^{n=4} Q_i W_i = Q_{CH_4+O_2} W_{CH_4+O_2} + Q_{CO+O_2} W_{CO+O_2} + Q_{H_2+O_2} W_{H_2+O_2} - Q_{N_2+O_2} W_{N_2+O_2},$$

$Q_i$ ,  $W_i$  — тепловой эффект и скорость химической реакции окисления компонентов газовой

смеси. На границе раздела частица ВУТ — газовая среда условия приняты по аналогии с [21, 22]. При этом учитывались экзотермический эффект реакции углерода с кислородом воздуха  $Q_{C+O_2}W_{C+O_2}$  и тепловое излучение внешней среды:

$$\frac{\partial T}{\partial r} = K_\lambda \frac{\partial T}{\partial r} + \frac{\varepsilon \sigma (T|_{r=r_g}^4 - T|_{r=r_{out}}^4)}{\lambda_{wcf}} + \frac{Q_{C+O_2}W_{C+O_2}}{\lambda_{wcf}}, \quad (5)$$

$$T(r_{out}, t)|_{r=r-0} = T(r_{out}, t)|_{r=r+0}.$$

Здесь  $K_\lambda = \lambda_g/\lambda_{wcf}$ ,  $\varepsilon$  — интегральная степень черноты,  $\sigma$  — постоянная Стефана — Больцмана. Скорость реакции  $C + O_2 = CO_2 + 18.67$  МДж/кг вычислялась с использованием математического выражения закона Аррениуса:

$$W_i = k_{C+O_2} \left( 1 - \sum_{i=1}^n C_i(r_{out}, t) - C_{H_2O}(r_{out}, t) \right) \times \rho_g \exp\left(-\frac{E_{C+O_2}}{RT}\right), \quad (6)$$

где  $k$  — предэкспоненциальный множитель, м/с;  $E$  — энергия активация химической реакции, Дж/(моль · К);  $C_i$  — концентрация  $i$ -го компонента. Принято, что водяные пары совместно с продуктами термического разложения движутся сквозь пористый угольный каркас. Распределение давления по радиусу частицы определялось из уравнения пьезопроводности:

$$\frac{\partial p}{\partial t} = \frac{\chi}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left( r^2 \frac{\partial p}{\partial r} \right) + \frac{1}{m\rho Z} \sum_{i=1}^{n=2} f_i, \quad (7)$$

$$t > 0, 0 < r < r_{out}, p \geq p_g,$$

где

$$\sum_{i=1}^{n=2} f_i = \frac{1}{s} (W_{c \rightarrow vol} + W_{C+H_2O \rightarrow CO+H_2}),$$

$s$  — характерный размер поры, м;  $p$  — давление, Па;  $f_i$  — функция, определяющая изменение массового расхода парогазовой смеси в

результате выхода летучих и поглощения водяных паров при их термохимическом взаимодействии с углеродом;  $\chi$  — коэффициент пьезопроводности, м<sup>2</sup>/с;  $Z$  — коэффициент сжимаемости водяных паров, 1/Па;  $m$  — пористость топлива. Скорость фильтрации пара определялась из дифференциального выражения закона Дарси:

$$U_s = -\frac{K_p}{\nu} \frac{\partial p}{\partial r}, \quad (8)$$

где  $\nu$  — коэффициент динамической вязкости, Па · с;  $K_p$  — коэффициент проницаемости среды, м<sup>2</sup>. При постановке задачи принято, что водяной пар вступает в эндотермическое химическое взаимодействие с углем. Скорость реакции  $C + H_2O = CO + H_2 - 118.485$  МДж/кг вычислялась по формуле

$$W_{C+H_2O} = k_{C+H_2O} c_{H_2O} \rho_s \exp\left(-\frac{E_{C+H_2O}}{RT}\right). \quad (9)$$

При достижении на поверхности частицы условия  $T_{sur} \geq T_{std}$  начинается разложение органической части топлива с выделением летучих ( $T_{sur}$  — температура поверхности топливной частицы,  $T_{std}$  — температура начала термического разложения). Процесс термического разложения описывается уравнением химической кинетики

$$\frac{\partial \eta}{\partial t} = [1 - \eta] k_{c \rightarrow vol} \exp\left(-\frac{E_{c \rightarrow vol}}{RT}\right), \quad (10)$$

$$t > 0, 0 < r < r_{out},$$

где  $\eta$  — степень пиролиза топлива. Скорость пиролиза рассчитывалась по следующему выражению:

$$W = V_0 [1 - \eta] k_{c \rightarrow vol} \rho_{wcf} \exp\left(-\frac{E_{c \rightarrow vol}}{RT}\right). \quad (11)$$

При постановке задачи учитывалось, что газообразные продукты термической деструкции и химического взаимодействия твердого остатка пиролиза угля и водяных паров вдуваются в «пристенную» область, при этом формируется газовая смесь, воспламеняющаяся при достижении критических значений температуры и концентрации горючего. Период времени от начала теплового воздействия на частицу до начала интенсивного химического взаимодействия парогазовой смеси с окислителем (появление локального экстремума на температурной кривой) является, в соответствии с

определением [15], временем задержки воспламенения. Принят критерий воспламенения из работы [15]. В непосредственной близости от поверхности частицы учитывались следующие реакции:

- 1)  $\text{H}_2 + 0.5\text{O}_2 = \text{H}_2\text{O} + 141.900 \text{ МДж/кг}$ ,
- 2)  $\text{CO} + 0.5\text{O}_2 = \text{CO}_2 + 100.90 \text{ МДж/кг}$ ,
- 3)  $\text{CH}_4 + \text{O}_2 = \text{CO}_2 + \text{H}_2\text{O} + 55.00 \text{ МДж/кг}$ ,
- 4)  $\text{N}_2 + \text{O}_2 = 2\text{NO} - 2987 \text{ МДж/кг}$ .

Скорость этих реакций вычислялась с использованием закона Аррениуса:

$$W_i = k_i \left( 1 - \sum_{i=1}^n C_i - C_{\text{H}_2\text{O}} \right) C_i \rho_g \exp \left( -\frac{E_i}{RT} \right). \quad (12)$$

Концентрация горючих компонентов ( $\text{H}_2$ ,  $\text{CO}$ ,  $\text{N}_2$  и  $\text{CH}_4$ ) в малой по толщине пристенной области рассчитывались при решении уравнения диффузии для соответствующего компонента:

$$\rho_g \frac{\partial C_i}{\partial t} = \frac{D_i \rho_g}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left[ r^2 \frac{\partial C_i}{\partial r} \right] - W_i, \quad (13)$$

$$t > 0, \quad r_{out} < r < r_g,$$

где  $D$  — коэффициент диффузии,  $\text{м}^2/\text{с}$ . Концентрации водяных паров и выделяющегося при термическом разложении диоксида углерода определялись аналогично:

$$\rho_g \frac{\partial C_i}{\partial t} = \frac{D_i \rho_g}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left[ r^2 \frac{\partial C_i}{\partial r} \right], \quad (14)$$

$$t > 0, \quad r_{out} < r < r_g.$$

Система уравнений (1)–(14) решалась при следующих граничных условиях:

$$t = 0 \rightarrow \begin{cases} T(r, t) = T_0 = 298 \text{ К}, & p(r, t) = p_g, \\ \eta(r, t) = 0; & 0 < r < r_g, \\ T(r, t) = T_g, & p(r, t) = p_g, \\ c_i(r, t) = 0; & r_{out} < r < r_g, \end{cases}$$

$$\left. \frac{\partial T}{\partial r} \right|_{r=0} = 0, \quad (15)$$

$$\left. \frac{\partial^2 T_g}{\partial r^2} \right|_{r=r_g} = 0, \quad (16)$$

$$\left. \frac{\partial p}{\partial r} \right|_{r=r_{eva}} = -\frac{\nu}{K_p} U_s(r_{eva}, t), \quad (17)$$

$$p(r_{out}, t) = p_g, \quad (18)$$

$$\left. \frac{\partial C_i}{\partial r} \right|_{r=r_{out}} = \frac{W_i}{\rho_g D_i}, \quad (19)$$

$$\left. \frac{\partial c_s}{\partial r} \right|_{r=r_{out}} = \frac{W_{eva}}{\rho_g D_s}, \quad (20)$$

$$\left. \frac{\partial^2 c_s}{\partial r^2} \right|_{r=r_g} = \left. \frac{\partial^2 c_i}{\partial r^2} \right|_{r=r_g} = 0, \quad (21)$$

где  $p_{atm}$  — давление внешней среды.

Теплопроводность, теплоемкость и плотность влажной и «обезвоженной» частей ВУТ рассчитывались с учетом объемных долей  $\varphi$  компонентов:

$$\lambda_{wcf} = \begin{cases} \lambda_1, & r \leq r_{eva}, \\ \lambda_2, & r > r_{eva}, \end{cases}$$

$$c_{wcf} = \begin{cases} c_1, & r \leq r_{eva}, \\ c_2, & r > r_{eva}, \end{cases}$$

$$\rho_{wcf} = \begin{cases} \rho_1, & r \leq r_{eva}, \\ \rho_2, & r > r_{eva}, \end{cases}$$

$$\lambda_1 = \varphi_3 \lambda_3 + \varphi_4 \lambda_4, \quad \lambda_2 = \varphi_3 \lambda_3 + \varphi_5 \lambda_5, \quad (22)$$

$$c_1 = \varphi_3 c_3 + \varphi_4 c_4, \quad c_2 = \varphi_3 c_3 + \varphi_5 c_5, \quad (23)$$

$$\rho_1 = \varphi_3 \rho_3 + \varphi_4 \rho_4, \quad \rho_2 = \varphi_3 \rho_3 + \varphi_5 \rho_5, \quad (24)$$

где индексы означают: 1 — исходное водонасыщенное топливо, 2 — сухой угольный каркас, 3 — уголь, 4 — вода, 5 — водяные пары.

### 1.3. Исходные данные

Принятые при проведении математического моделирования теплофизические свойства исходных компонентов топлива (уголь, вода и водяные пары) приведены в табл. 1. Состав летучих горючих компонентов топлива представлен в табл. 2, константы термодинамических реакций — в табл. 3. Численные исследования выполнены при следующих исходных данных:  $T_0 = 298 \text{ К}$ ,  $p_{atm} = 101325 \text{ Па}$ ,  $\eta_0 = 0$ . Молярная масса воды  $\mu = 0.018 \text{ кг/моль}$ , коэффициент проницаемости угля  $K_p = 10^{-11} \text{ м}^2$ .

Таблица 1  
Теплофизические характеристики основных компонентов топлива

Компонент топлива	$\lambda$ , Вт/(м·К)	$c_p$ , Дж/(кг·К)	$\rho$ , кг/м <sup>3</sup>	Источник
Уголь марки Д	0.206	1 380	614	[23]
Бурый уголь	0.103	1 150	700	[23]
Вода	0.56	4190	1 000	[24]
Водяной пар	0.025	2 038	0.58	[24]

Таблица 2  
Состав газообразных продуктов пиролиза [25]

Компонент	Содержание компонента, %	
	бурый уголь	каменный уголь
CO <sub>2</sub>	15.5	2.3
CO	15.0	5.7
CH <sub>4</sub>	20.5	65.9
H <sub>2</sub>	25.6	18.6
N <sub>2</sub>	23.4	7.5

### 1.4. Метод решения уравнений

Сформулированная задача математической физики решена методом конечных разностей [31, 32]. Аппроксимация уравнений проводилась с использованием неявного четырехточечного разностного шаблона [33]. Например, уравнение (1) аппроксимировалось следующим образом:

$$\frac{\partial H}{\partial t} = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left[ r^2 \lambda_{wcf} \frac{\partial T_1}{\partial r} \right] - \frac{Q_{eva} W_{eva}}{h_d} \delta(r_{eva}) - \sum_{i=1}^{i=2} Q_i W_i - c_s \rho_s U_s \theta(r - r_{eva}) \frac{\partial T}{\partial r} \rightarrow$$

$$\rightarrow \frac{H_i^{n+1} - H_i^n}{\tau} = \frac{1}{r_i^2} \frac{1}{h^2} \left[ r_{i+0.5}^2 \lambda_{i+0.5} (T_{i+1}^{n+1} - T_i^{n+1}) + r_{i-0.5}^2 \lambda_{i-0.5} (T_i^{n+1} - T_{i-1}^{n+1}) \right] - \frac{Q_{eva} W_{eva}}{h} \delta(r_{eva}) - \sum_{i=1}^{i=2} Q_i W_i -$$

$$- c_s \rho_s U_s \theta(r - r_{eva}) \frac{T_{i+1}^{n+1} - T_{i-1}^{n+1}}{2h}, \quad i = 1, \dots, N,$$

где  $r_{i+0.5} = 0.5(r_i + r_{i+1})$ ,  $r_{i-0.5} = 0.5(r_i + r_{i-1})$ . Так же и для  $\lambda$ :  $\lambda_{i+0.5} = 0.5(\lambda_i + \lambda_{i+1})$ ,  $\lambda_{i-0.5} = 0.5(\lambda_i + \lambda_{i-1})$ .

Уравнения и краевые условия (2)–(21) аппроксимировались по аналогичной схеме. Система (1)–(21) решалась в период времени до достижения условий, адекватных условиям зажигания твердых, жидких и гетерогенных топлив [15]. Необходимо отметить, что расчеты процессов зажигания топлива при наличии интенсивных фазовых превращений (в частности,

Таблица 3  
Константы термохимических реакций

Реакция	Энергия активация $E_i$ , Дж/моль	Предэкспонент $k_i$ , с <sup>-1</sup>	Источник
Термическое разложение $w \rightarrow vol$	$39.4 \cdot 10^3$	178	[26]
$C + O_2 = CO_2$	$124.8 \cdot 10^3$	$6.4 \cdot 10^4$	[26]
$C + H_2O = CO + H_2$	$220 \cdot 10^3$	$2.07 \cdot 10^7$	[27]
$CO + 0.5O_2 = CO_2$	$200.0 \cdot 10^3$	$2.50 \cdot 10^{12}$	[28]
$H_2 + 0.5O_2 = H_2O$	$105.0 \cdot 10^3$	$1.13 \cdot 10^{17}$	[29]
$CH_4 + O_2 = CO_2$	$35 \cdot 10^3$	$5.1 \cdot 10^{14}$	[30]

испарения) являются одними из самых сложных в теории горения. Последнее связано с тем, что испарение воды протекает в очень узкой (много меньше линейного размера частицы) области (фронт испарения). При этом, как правило, тепловые эффекты фазовых переходов очень высоки (до  $2.5 \cdot 10^6$  Дж/кг). В результате во влажной частице возникает внутренний локальный сток теплоты. Численное исследование усложняется еще и тем, что асимптотики процессов испарения и зажигания существенно отличаются (зажигание — быстро протекающий процесс, испарение — существенно более медленный). По этой причине для решения поставленной задачи зажигания разработан специальный алгоритм, основанный на методе неявного выделения фронта фазового перехода [34].

## 2. РЕЗУЛЬТАТЫ И ОБСУЖДЕНИЕ

На рис. 2 приведены результаты сравнительного анализа времен задержки зажигания  $t_{ign}$  капель ВУТ на основе длиннопламенного угля (марки Д), полученных численно (решение системы (1)–(21)) и экспериментально [14]. Можно сказать, что в достаточно широком диапазоне температуры внешней среды ( $800 < T_g < 1300$  К) установлена их удовлетворительная согласованность (в пределах доверительного интервала экспериментальных данных  $\pm 17\%$ ). Анализ зависимостей  $t_{ign}(T_g)$

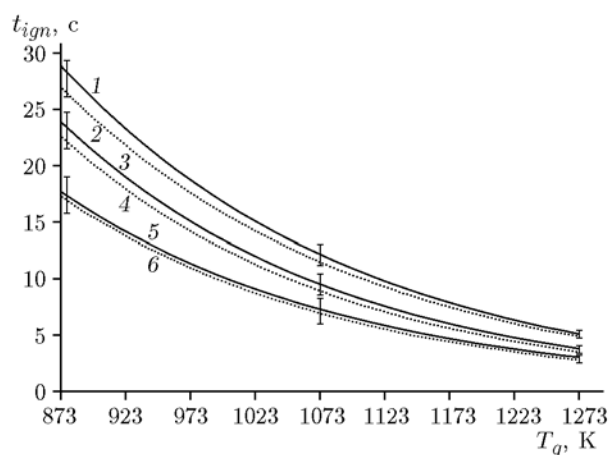


Рис. 2. Время задержки воспламенения частиц водоугольного топлива на основе угля марки Д с различным диаметром частиц ВУТ: 1, 2 —  $d = 3 \cdot 10^{-3}$  м; 3, 4 —  $d = 2.5 \cdot 10^{-3}$  м; 5, 6 —  $d = 2 \cdot 10^{-3}$  м; 1, 3, 5 — эксперимент [14]; 2, 4, 6 — численное решение

показывает, что наибольшие отклонения экспериментальных и рассчитанных численно значений  $t_{ign}$  имеют место при температуре внешней среды менее 970 К.

На рис. 3 приведены зависимости времени задержки воспламенения частицы ВУТ на основе бурого угля (марки Б) от температуры внешней среды. Анализ рис. 2 и 3 показал, что горение капель ВУТ на основе бурого угля начинается намного быстрее, чем на основе угля марки Д. Последнее обусловлено в первую очередь более высоким содержанием летучих в углях марки Б по сравнению с длиннопламенным углем. В целом полученные численно и экспериментально [14] значения времени задержки зажигания находятся в удовлетворительном соответствии.

Рис. 4 иллюстрирует динамику изменения температуры поверхности ( $T_{sur}$ ) капли ВУТ. Весь период термической подготовки можно условно разделить на ряд последовательных характерных стадий. В начальный период времени (до  $t \approx 0.18t_{ign}$ ) идет инертный нагрев капли топлива (температура растет медленно). После этого инициируется процесс интенсивного испарения воды. В результате формируется пористый угольный каркас с низкой теплопроводностью и теплоемкостью. При этом можно отметить, что период испарения воды самый продолжительный. Это, очевидно, связано с высоким эндотермическим эффектом фазово-

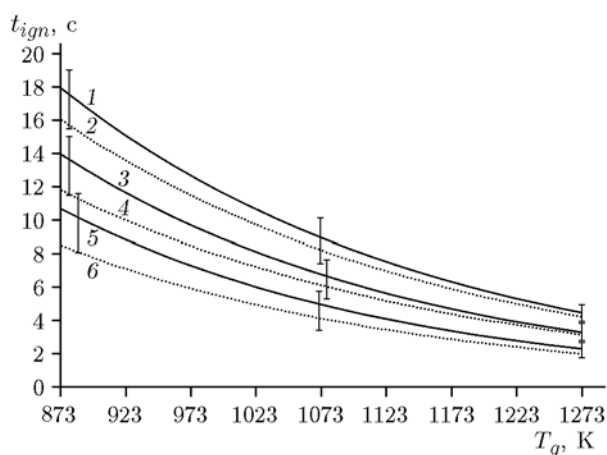


Рис. 3. Время задержки воспламенения частиц водоугольного топлива на основе угля марки Б с различным диаметром частиц ВУТ: 1, 2 —  $d = 3 \cdot 10^{-3}$  м; 3, 4 —  $d = 2.5 \cdot 10^{-3}$  м; 5, 6 —  $d = 2 \cdot 10^{-3}$  м; 1, 3, 5 — эксперимент [14]; 2, 4, 6 — численное решение

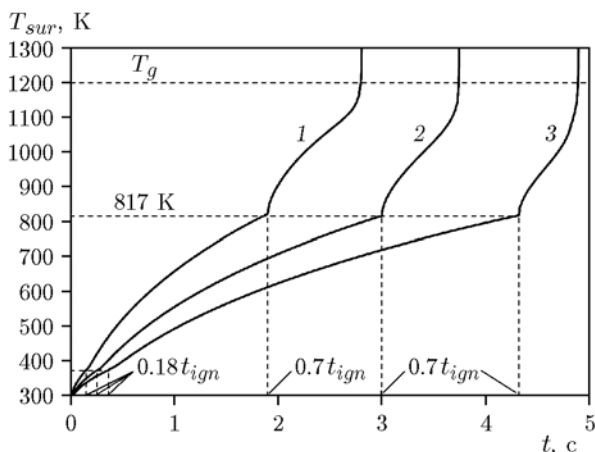


Рис. 4. Динамика температуры поверхности частицы водоугольного топлива в процессе нагрева, при температуре внешней среды  $T_g = 1200$  К:

1 —  $d = 2 \cdot 10^{-3}$  м, 2 —  $d = 2.5 \cdot 10^{-3}$  м, 3 —  $d = 3 \cdot 10^{-3}$  м

го перехода (до 2.5 МДж/кг), что обуславливает замедление темпа роста  $T_{sur}$ . Характерный излом кривой  $T_{sur}(t)$  на рис. 4 в момент времени  $t \approx 0.7t_{ign}$  соответствует моменту воспламенения летучих. В результате интенсивного теплового воздействия пламени их факела происходит инициирование горения коксового остатка. Последнее приводит к резкому изменению скорости роста  $T_{sur}$ . Можно отметить, что зависимость  $T_{sur}(t)$  принимает экспоненциальный характер  $\left(\frac{\partial T}{\partial t} \approx \exp\left[-\frac{E}{RT_{sur}}\right]\right)$ .

На рис. 5 представлены распределения безразмерной температуры в системе водоугольная частица — газовая среда в момент воспламенения летучих. Видно, что инициирование горения газообразных продуктов пиролиза начинается на некотором удалении (примерно в половину диаметра капли ВУТ) от поверхности частицы. Соответственно, есть основание предполагать, что диффузия летучих во внешнюю газовую область и формирование протяженного и неоднородного концентрационного поля играют существенную роль в процессе зажигания капель ВУТ. Можно сказать, что применение метода бесконечно тонкой приведенной пленки в зонах зажигания ВУТ целесообразно специально обосновывать при решении задач зажигания ВУТ.

Анализ зависимостей рис. 5 показал также, что возможны режимы зажигания еще во-

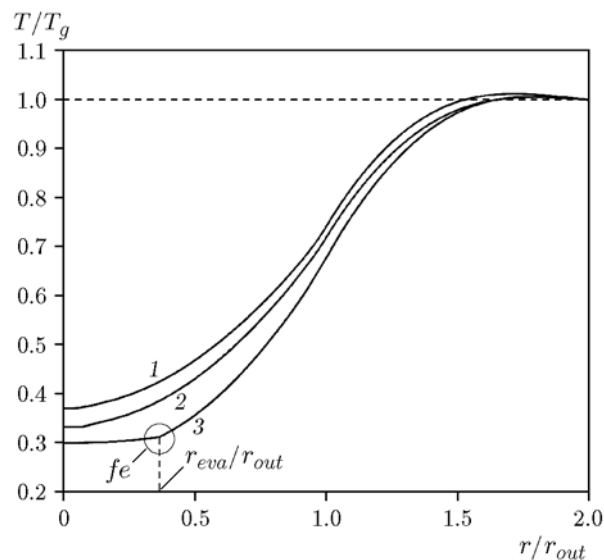


Рис. 5. Распределение температуры в системе водоугольная частица — газовая среда в момент воспламенения летучих:

$fe$  — температура фронта испарения; 1 —  $d = 2 \cdot 10^{-3}$  м, 2 —  $d = 2.5 \cdot 10^{-3}$  м, 3 —  $d = 3 \cdot 10^{-3}$  м

донасыщенных капель ВУТ. Очевидно, что динамика горения частиц ВУТ в условиях продолжающегося испарения воды будет существенно отличаться от окисления сухих углей.

На рис. 6 приведены результаты расчетов времени задержки зажигания частиц ВУТ, выполненных в рамках моделей [10] и (1)–(21). Можно отметить, что значения  $t_{ign}$ , установленные с использованием модели [10], меньше  $t_{ign}$ , полученных при численном решении системы (1)–(21). Последнее обусловлено тем, что в [10–12] не учитывалась диффузия продуктов пиролиза во внешнюю газовую среду.

Анализ литературы показал отсутствие экспериментальных данных по времени задержки зажигания непосредственно коксового остатка. По этой причине проведено прогностическое моделирование процесса инициирования горения углерода. Полученные результаты для кокса угля марки Д представлены на рис. 7. Из анализа зависимостей  $t_{ign}(T_g)$  следует, что кокс начинает гореть практически сразу после воспламенения летучих. Интервал между моментами времени воспламенения летучих и кокса не превышает 0.5 с.

На рис. 8 приведены распределения температуры в системе водоугольная частица — газовая среда в момент зажигания коксового остатка. Разница температур в центре части-



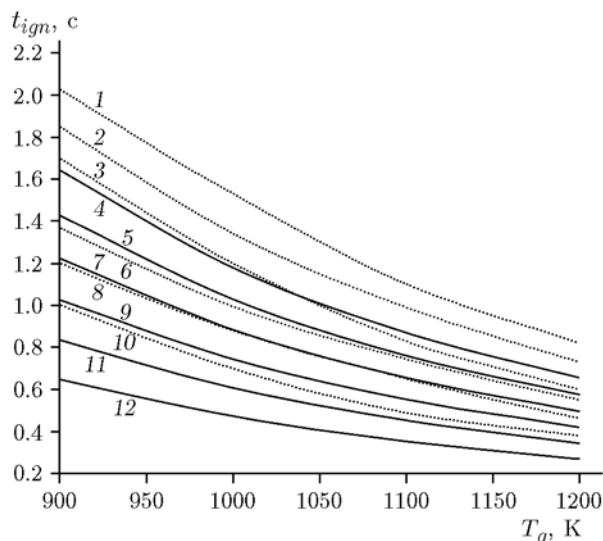


Рис. 6. Время задержки воспламенения частиц водоугольного топлива на основе угля марки Д в зависимости от температуры внешней среды, рассчитанное в рамках разных постановок задачи:

1–3, 6, 8, 10 — система (1)–(21); 4, 5, 7, 9, 11, 12 — модель [10]; 1, 4 —  $d = 0.9 \cdot 10^{-3}$  м; 2, 5 —  $d = 0.8 \cdot 10^{-3}$  м; 3, 7 —  $d = 0.7 \cdot 10^{-3}$  м; 6, 9 —  $d = 0.6 \cdot 10^{-3}$  м; 8, 11 —  $d = 0.5 \cdot 10^{-3}$  м; 10, 12 —  $d = 0.4 \cdot 10^{-3}$  м

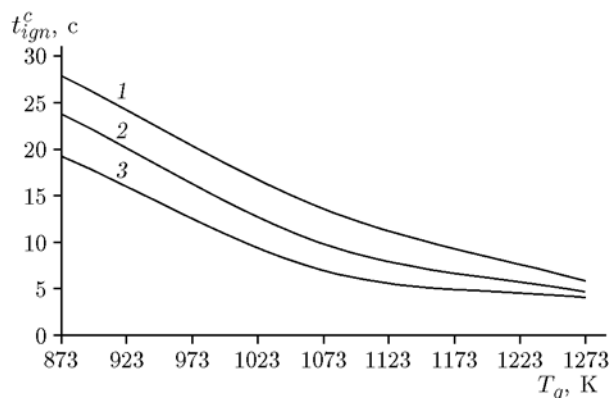


Рис. 7. Время задержки воспламенения коксового остатка в зависимости от температуры внешней среды:

1 —  $d = 3 \cdot 10^{-3}$  м, 2 —  $d = 2.5 \cdot 10^{-3}$  м, 3 —  $d = 2 \cdot 10^{-3}$  м

цы ВУТ и на поверхности составляет около 600 К. Можно сказать, что коксовый остаток загорается после прогрева основного слоя топлива выше температуры парообразования. При этом стоит отметить высокий градиент температуры. Соответственно, можно обоснованно предположить, что при зажигании в структу-

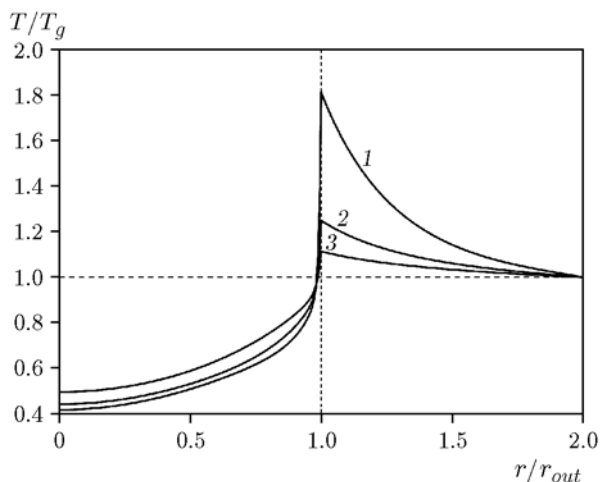


Рис. 8. Распределение температуры в системе водоугольная частица — газовая среда в момент зажигания кокса при температуре внешней среды  $T_g = 1200$  К:

1 —  $d = 2 \cdot 10^{-3}$  м; 2 —  $d = 2.5 \cdot 10^{-3}$  м; 3 —  $d = 3 \cdot 10^{-3}$  м

ре частицы возможно формирование температурных напряжений, которые могут привести к диспергированию угольного каркаса.

## ВЫВОДЫ

Впервые сформулирована математическая модель термической подготовки и зажигания частицы водоугольного топлива, учитывающая, кроме комплекса физических процессов, протекающих совместно при газофазном воспламенении водоугольных капель, диффузию газообразных продуктов термического разложения угольного компонента ВУТ в тонком слое газа вокруг частицы топлива. Верификация математической модели проведена методом сравнительного анализа основных интегральных характеристик процесса зажигания (время задержки воспламенения), полученных численно (решение системы уравнений (1)–(21)) и экспериментально [14]. Результаты сравнения показали их удовлетворительное соответствие. Установлено, что воспламенение летучих происходит на некотором расстоянии (примерно в половину диаметра капли ВУТ) от поверхности частицы топлива. Соответственно, можно сказать, что применение метода приведенной тонкой пленки [10] при моделировании процесса воспламенения капель ВУТ не всегда обосновано.

Проведенное прогностическое моделирование зажигания кокса показало, что инициирование горения коксового остатка происходит практически сразу после воспламенения летучих. Интервал времени между воспламенением летучих и углерода кокса не превышает 0.5 с. Результаты сравнительного анализа временных характеристик процесса зажигания, полученных теоретически и экспериментально [14], в целом свидетельствуют о высоком прогностическом потенциале разработанной математической модели.

По результатам математического моделирования также установлено, что наиболее продолжительным процессом в термической подготовке топлива к началу горения вследствие высокого эндотермического эффекта (до 2.5 МДж/кг) является испарение воды. Соответственно, для стабильного воспламенения частиц ВУТ в топочном пространстве необходимо организовывать зоны постоянной рециркуляции факела по аналогии с топками А. А. Шершнева [35].

#### ЛИТЕРАТУРА

1. Longwell J. P., Rubin E. S., Wilson J. Coal: Energy for the future // Prog. Energy Combust. Sci. — 1995. — V. 21, N 4. — P. 269–360.
2. Miller B. G. Coal-water slurry fuel utilization in utility and industrial boilers // Chem. Eng. Prog. — 1989. — V. 85, N 3. — P. 29–38.
3. Papachristodoulou G., Trass O. Coal slurry fuel technology // Can. J. Chem. Eng. — 1987. — V. 65, N 2. — P. 177–201.
4. Kijo-Kleczkowska A. Combustion of coal-water suspensions // Fuel. — 2011. — V. 90. — P. 865–877.
5. Gajewski W., Kijo-Kleczkowska A., Leszczyn J. Analysis of cyclic combustion of solid fuels // Fuel. — 2009. — V. 88. — P. 221–234.
6. Essenhigh R. H., Mahendra K. M., Shaw D. W. Ignition of coal particles: A review // Combust. Flame. — 1989. — V. 77, N 1. — P. 3–30.
7. Huang Z. et al. Theoretical analysis on CWM drop combustion history // Proc. 8th Intern. Symp. Coal Slurry Fuels Preparation and Utilization. USA, Orlando. Pt 1. — 1986. — P. 343–358.
8. Matthews K. J., Jones A. R. The effect of coal composition on coal-water slurry combustion and ash deposition characteristics // Proc. 8th Intern. Symp. Coal Slurry Fuels Preparation and Utilization. USA, Orlando. Pt 1. — 1986. — P. 388–407.
9. Salomatov V. V., Syrodoj S. V., Gutareva N. Y. Modelling of heat and mass transfer to solve the problem of particle ignition water-coal fuel // IOP Conf. Series: Materials Science and Engineering. — 2014. — V. 66. — 012040.
10. Кузнецов Г. В., Саломатов В. В., Сыродой С. В. Численное моделирование зажигания частиц водоугольного топлива // Физика горения и взрыва. — 2015. — Т. 51, № 4. — С. 12–19.
11. Кузнецов Г. В., Саломатов В. В., Сыродой С. В. Влияние условий теплообмена на характеристики зажигания частиц водоугольного топлива // Теплоэнергетика. — 2015. — № 10. — С. 16–21.
12. Сыродой С. В., Кузнецов Г. В., Саломатов В. В. Влияние формы частиц на характеристики воспламенения водоугольного топлива // Химия твердого топлива. — 2015. — № 6. — С. 28–34.
13. Сыродой С. В., Саломатов В. В., Кузнецов Г. В. Теплоперенос в частице водоугольного топлива на стадии «термической» подготовки // Теплофизика и аэромеханика. — 2016. — Т. 23, № 4. — С. 627–636.
14. Syrodoj S. V., Kuznetsov G. V., Zhakharevicha A. V., Gutareva N. Y., Salomatov V. V. The influence of the structure heterogeneity on the characteristics and conditions of the coal-water fuel particles ignition in high temperature environment // Combust. Flame. — 2017. — V. 80. — P. 196–206.
15. Франк-Каменецкий Д. А. Диффузия и теплопередача в химической кинетике. — М.: Изд-во АН СССР, 1947.
16. Сполдинг Д. Б. Основы теории горения. — М.: Гос. энергет. изд-во, 1959.
17. Kook Y. A., Seung W. B., Chang E. C. Investigation of a coal-water slurry droplet exposed to hot gas stream // Combust. Sci. Technol. — V. 97, N 4. — P. 429–447.
18. Кнаке О., Странский И. Н. Механизм испарения // Успехи физ. наук. — 1959. — Т. 68, № 2. — С. 261–305.
19. Потапкин А. В., Москвичев Д. Ю. Расчет параметров ударных волн на больших расстояниях от места их возникновения с помощью комбинированных численно-аналитических методов // ПМТФ. — 2011. — Т. 52, № 2. — С. 15–26.
20. Хащенко А. А., Вечер О. В., Дискаева Е. И. Исследование температурной зависимости скорости испарения жидкостей со свободной поверхности и скорости кипения жидкости на твердой поверхности нагрева // Изв. Алт. гос. ун-та. — 2016. — Т. 89, № 1. — С. 84–87.
21. Энжаргал Х., Саломатов В. В. Математическое моделирование термодготовки и горения угольной частицы. V. Стадия выгорания // Инж.-физ. журн. — 2011. — Т. 84, № 4. — С. 836–841.
22. Maksimov V. I., Nagornova T. A. Influence of heatsink from upper boundary on the industrial premises thermal conditions at gas infrared

- emitter operation // EPJ Web of Conf. — 2014. — V. 76. — 01006.
23. **Агроскин А. А., Глейбман В. Б.** Теплофизика твердого топлива. — М.: Недра, 1980.
  24. **Вукалович М. П., Ривкин С. Л., Александров А. А.** Таблицы теплофизических свойств воды и водяного пара. — М.: Изд-во стандартов, 1969.
  25. **Липович В. Г.** Химия и переработка угля. — М.: Химия, 1988.
  26. **Померанцев В. В.** Основы практической теории горения. — Л.: Энергоатомиздат, 1986.
  27. **Watanabe H., Ashizawa M., Otaka M., Hara S., Inumaru A.** Development on numerical simulation technology of heavy oil gasifier // CRIEPI Rep. W01023. — 2002. — [in Japanese].
  28. **Mantzaras J.** Catalytic combustion of syngas // Combust. Sci. Technol. — 2008. — V. 180. — P. 1137–1168.
  29. **Jian W. C., Wen J., Lu S., Guo J.** Single-step chemistry model and transport coefficient model for hydrogen combustion // Sci. Chin. Technol. Sci. — 2012. — V. 55. — P. 2163–2168.
  30. **Zhang X., Wang T., Xu J., Zheng S., Hou X.** Study on flame-vortex interaction in a spark ignition engine fueled with methane/carbon dioxide gases // J. Energy Inst. — 2018. — V. 91. — P. 133–144.
  31. **Roache P. J.** Computational Fluid Dynamics. — Albuquerque: Hermosa Publ., 1976.
  32. **Самарский А. А.** Схемы повышенного порядка точности для многомерного уравнения теплопроводности // Журн. вычисл. математики и мат. физики. — 1963. — Т. 5, № 3. — С. 812–840.
  33. **Самарский А. А.** Локально-одномерные разностные схемы на неравномерных сетках // Журн. вычисл. математики и мат. физики. — 1963. — Т. 3, № 3. — С. 431–466.
  34. **Самарский А. А., Моисеенко Б. Д.** Экономичная схема сквозного счета для многомерной задачи Стефана // Журн. вычисл. математики и мат. физики. — 1965 — Т. 5, № 5. — С. 816–827.
  35. **Шершнев А. А.** Пневматические топки: производственное издание. — Л.; М.: Госэнергоиздат, 1949.

*Поступила в редакцию 29/VI 2017 г.*

---