

В. М. ГРЕМЯЧКИН, Л. М. РОЩИНА

ДИФФУЗИОННО-ТЕПЛОВАЯ МОДЕЛЬ
ГОРЕНИЯ ЧАСТИЦЫ УГЛЕРОДА

Теоретические модели горения частиц углерода [1—5], как правило, учитывают кинетику взаимодействия С с O_2 , а диффузионно-тепловые основываются на модели горения жидких капель углеводородных топлив [6]. В последней предполагается существование над поверхностью капли узкого фронта пламени, где происходят все химические реакции взаимодействия паров капли с окислителем. В диффузионно-тепловых моделях горения частицы углерода дополнительно предполагается также, что СО, образующийся в узком фронте пламени, может диффундировать к частице и вступать на ее поверхности в реакцию с образованием CO_2 .

В теории горения капель углеводородных топлив существование узкого фронта пламени над поверхностью капли связано с резкой, арениусовского типа зависимостью скорости химических реакций от температуры, а также с низкими температурами кипения углеводородных топлив. В этом случае реакции идут только в области максимальной температуры, которая имеет место в газовой фазе, в узком фронте пламени, а в остальной области скорости химических реакций из-за низких температур предполагаются пренебрежимо малыми.

При высокотемпературном горении частиц углерода температура частиц, не ограниченная температурой кипения ($T_{кип} C \sim 4800$ К при $p = 1$ атм, естественно, не достигается), может быть достаточно высокой. Общий уровень температур в окрестности частицы углерода будет также существенно выше, чем вокруг горячей капли углеводородного топлива. В этом случае, по-видимому, следует полагать, что химические реакции будут идти не только в узком фронте пламени, но во всем пространстве вокруг частицы с большой скоростью, так что в каждой точке пространства будет осуществляться химическое равновесие между реагирующими веществами и продуктами реакций.

При постановке задачи используем предположения, которые обычно делаются в теории горения: процесс квазистационарный, бинарные коэффициенты диффузии в газе для всех веществ равны и число Льюиса $Le = 1$. Частицы углерода полагаются сплошными.

Для описания горения частицы углерода воспользуемся условиями сохранения атомов С, О и тепла:

$$\sum \frac{m_j I_j}{\mu_j} = \frac{W}{\mu_C}, \quad (1)$$

$$\sum \frac{n_j I_j}{\mu_j} = 0, \quad (2)$$

$$\sum H_j I_j + I_h = WH_C - I_r, \quad (3)$$

где m_j и n_j — числа атомов С и О в молекуле j -го вещества с молекулярной массой μ_j ; W — скорость горения частицы; μ_C — атомарная масса углерода;

$$I_j = \beta z_j - \xi^2 \frac{dz_j}{d\xi} \quad (4)$$

поток j -го вещества, записанный в сферической системе координат; $\beta = u_0 R / D$ — число Пекле; u_0 — скорость стефановского потока у поверхности частицы; $\xi = r / R$ — координата; z_j — относительная массовая кон-

центрация j -го вещества;

$$I_h = \beta c T - \xi^2 \frac{\partial \bar{c} T}{\partial \xi} \quad (5)$$

поток тепла за счет теплопроводности; H_j — полная энтальпия j -го вещества на единицу массы; H_C — полная энтальпия твердого углерода; \bar{c} — средняя по составу газа массовая теплоемкость; $I_R = \gamma (T_s^4 - T_w^4)$ — поток тепла излучением с поверхности частицы ($\gamma = \varepsilon \sigma R / \rho D$). Принимаем значения $\varepsilon = 1$, $\sigma = 5,67 \cdot 10^{-8}$ Вт/(м² · К⁴) и $\rho D = 4,13 \cdot 10^{-5}$ кг(м · с), можно оценить величину $\gamma = 1,37 \cdot 10^{-6} R$ кДж/(кг · К⁴).

Подставляя выражения для потоков веществ и тепла (4), (5) в условия сохранения (1)–(3) и интегрируя полученные уравнения по координате с учетом граничных условий на бесконечности ($z_j = z_{j\infty}$, $T = T_\infty$), получим

$$\sum \frac{m_j z_j}{\mu_j} = e^{-\beta/\xi} \sum \frac{m_j z_{j\infty}}{\mu_j} + \frac{(1 - e^{-\beta/\xi}) W}{\beta \mu_C}, \quad (6)$$

$$\sum \frac{n_j z_j}{\mu_j} = e^{-\beta/\xi} \sum \frac{n_j z_{j\infty}}{\mu_j}, \quad (7)$$

$$\sum z_j H_j + \bar{c} T = e^{-\beta/\xi} \left(\sum z_{j\infty} H_j + \bar{c} T_\infty \right) + \frac{(1 - e^{-\beta/\xi})}{\beta} (W H_C - I_R). \quad (8)$$

Кроме полученных уравнений из условия равенства нулю потока инертного газа, который может присутствовать в газовой фазе, получим соотношение

$$1 - \sum z_j = e^{-\beta/\xi} (1 - \sum z_{j\infty}). \quad (9)$$

Предположение о химическом равновесии в газовой фазе дает дополнительные соотношения для расчета концентраций:

$$p_j = p_C^{m_j} p_O^{n_j} / K_j, \quad (10)$$

где p_j — парциальные давления веществ; p_C , p_O — парциальные давления атомов С и О; K_j — константы равновесия [7].

Рассмотрим систему (6)–(10) у поверхности частицы ($\xi = 1$, $z_j = z_j^0$, $T = T_s$). Исключая в полученной системе уравнений величины W и β и переходя от массовых концентраций z_j к парциальным давлениям p_j по выражению

$$z_j = p_j \mu_j / [\sum p_j (\mu_j - \mu_i) + p_i \mu_i]$$

с учетом $\bar{c} = c_i + \sum z_j (c_j - c_i)$ (c_i и μ_i — теплоемкость и молекулярная масса инертного газа), получим

$$\sum p_j^0 \left[\mu_j H_j - m_j \mu_C H_C + \mu_j (c_j - c_i) T_s + \gamma (\mu_j - \mu_i) (T_s^4 - T_w^4) - n_j K \right] = - p_i \mu_i [c_i T_s + \gamma (T_s^4 - T_w^4)], \quad (11)$$

$$\sum p_j^0 (1 + n_j N) = p_t, \quad (12)$$

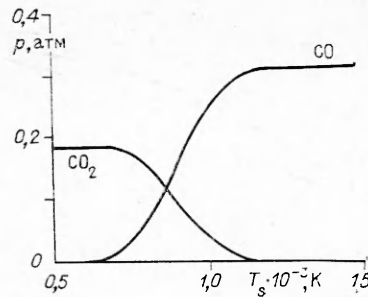
где $N = (1 - \sum z_{j\infty}) / \mu_i \sum \frac{n_j z_{j\infty}}{\mu_j}$; p_t — полное давление;

$$K = \left\{ \sum z_{j\infty} \left[H_j - m_j H_C \frac{\mu_C}{\mu_j} + (c_j - c_i) T_\infty \right] + c_i T_\infty \right\} / \sum \frac{n_j z_{j\infty}}{\mu_j}.$$

При записи (11), (12) для упрощения вида уравнений и процедуры расчетов предполагалось, что стоящая перед I_R величина $(1 - e^{-\beta/\xi})/\beta = 1$. Такое упрощение возможно, так как при $\beta \rightarrow 0$ данная функция стремится к единице, а зависимость ее от β существенно более слабая, чем зависимость $e^{-\beta}$.

Выражения (11), (12) с условиями равновесия (10) представляют собой систему уравнений для определения концентраций всех веществ

Рис. 1. Зависимость состава газовой фазы у поверхности частицы углерода при горении в воздухе от температуры частицы.



p_j^0 у поверхности частицы, а также температуру частицы T_s . При этом считается, что зависимость парциального давления атомов углерода у поверхности частицы задана, равна давлению насыщенных паров и определяется данными [7]. При расчетах также предполагаем, что в процессе горения частицы образуются только окислы углерода, а азот — инертный газ. Учет образования окислов азота может быть проведен в рамках рассматриваемой модели, однако это существенно усложнит методику расчетов и должно быть предметом отдельного рассмотрения.

На рис. 1 приведены зависимости рассчитанного из (10) и (12) состава газовой фазы у поверхности частицы углерода в процессе горения от температуры частицы. Можно видеть, что при $T_s \sim 1000$ К состав газовой фазы у поверхности частицы резко меняется: при более высоких T_s основной компонент в газе — CO_2 , а при более низких температурах — CO . Естественно, что такая перестройка состава газа должна оказывать существенное влияние на характеристики горения частицы, в частности на зависимость скорости горения от концентрации кислорода, температуры среды, давления и других параметров.

Из рис. 2 можно видеть, что значение T_s сильно зависит от интенсивности излучения с поверхности частицы, величина которого пропорциональна размеру частицы. При проведении расчетов предполагалось, что $T_w \ll T_s$, так что интенсивность излучения имеет максимальную величину.

На рис. 3 представлена зависимость квазистационарной скорости горения частицы углерода W в воздухе от температуры окружающей среды при разных размерах частиц. Здесь же проведены две дополнительные оси, ставящие в соответствие температуры окружающей среды

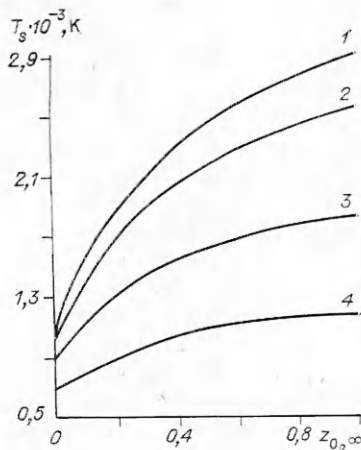


Рис. 2. Зависимость температуры частицы T_s от концентрации кислорода $z_{\text{O}_2}^{\infty}$ при $T_{\infty} = 1000$ К.

1 — при отсутствии тепловых потерь излучением; R , м: 2 — 10^{-5} , 3 — 10^{-4} , 4 — 10^{-3} .

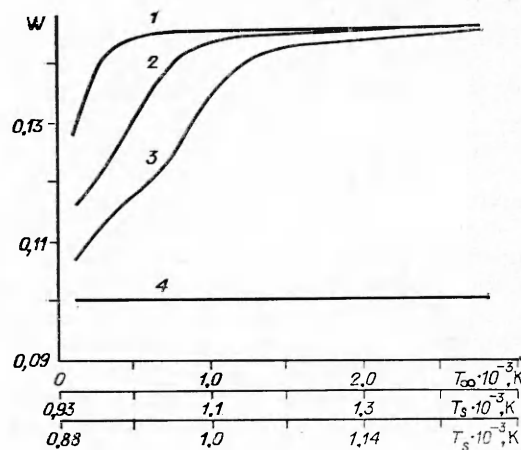


Рис. 3. Зависимости $W(T_{\infty})$ и $W(T_s)$ при горении в воздухе.

R , м: 1 — 10^{-4} , 2 — $5 \cdot 10^{-4}$, 3 — 10^{-3} , 4 — 10^{-2} .

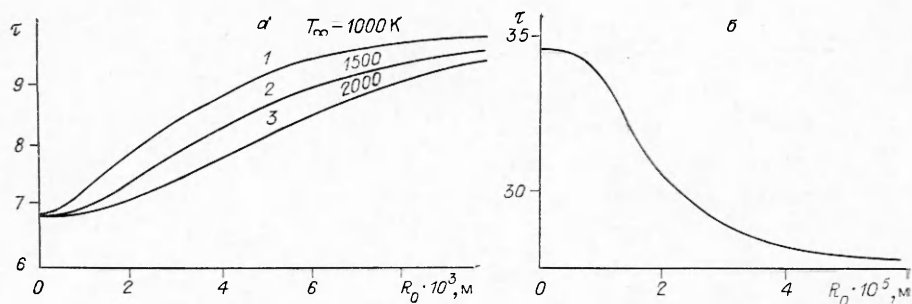


Рис. 4. Зависимость времени сгорания частицы углерода в воздухе (а) и в условиях подогрева частицы излучением (б).

и частицы для размеров частиц $R = 5 \cdot 10^{-4}$ и 10^{-3} м. Данная зависимость носит необычный для диффузионного режима горения характер. Как правило, величина W при возрастании T_∞ только слабо увеличивается, в то время как при горении частицы углерода W с ростом T_∞ возрастает быстро, что качественно согласуется с экспериментальными данными [8]. Это связано с изменением состава газовой фазы у поверхности частицы, а не с переходом от кинетического режима горения к диффузионному [9]. Следует отметить, что для разных размеров частиц углерода, в связи с разными потерями тепла излучением, пропорциональными размеру частиц, возрастание W происходит при разных T_∞ , но при $T_\infty \sim 1000$ К. Экспериментальные исследования [8] проводились в условиях обтекающего горящую частицу газового потока и дополнительного подогрева частицы индуктором, что, естественно, обуславливает более высокие скорости горения частицы, чем полученные в расчете.

Время сгорания частицы начального размера R_0 может быть рассчитано из уравнения

$$\tau = \frac{2\rho D}{\rho_C R_0^2} t = \frac{2}{R_0^2} \int_0^{R_0} \frac{r dr}{W(r)}. \quad (13)$$

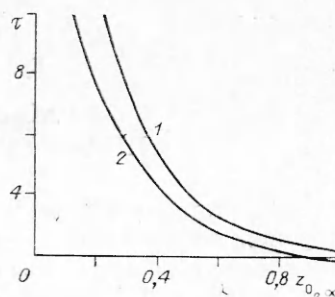
Так как квазистационарная скорость горения W зависит от размера частицы, то и зависимость времени сгорания от начального размера будет отличаться от квадратичной, характерной для диффузионного режима горения. Зависимость τ от начального размера частицы при разных температурах окружающей среды представлена на рис. 4. При малых ($\sim 10^{-4}$ м) и больших ($\sim 10^{-2}$ м) размерах частиц углерода зависимость $\tau(R_0)$ близка к квадратичной, а для средних размеров частиц она существенно отличается от квадратичной. При этом, как видно из рис. 4, а, для мелких частиц скорость горения оказывается выше, чем для крупных, что связано с большими потерями тепла излучением крупными частицами.

В ряде экспериментальных исследований, где процесс горения осуществляется в печах с нагретыми стенками, была возможна ситуация, когда частица не теряла тепло излучением, а получала его от стенок печи. В этой ситуации крупные частицы получали больше тепла излучением и скорость их горения должна была быть соответственно больше. Такой характер изменения τ от R_0 отмечен в [10], где для частиц размером около 100 мкм наблюдалось резкое уменьшение τ с увеличением R_0 , что связывалось с переходом от кинетического режима горения к диффузионному. Действительно, подобный переход может иметь место, однако он должен, по-видимому, осуществляться при значительно меньших размерах частиц. Например, для капель углеводородного топлива он имеет место при $r \approx 1$ мкм [41].

Наблюдаемое явление может быть объяснено в рамках сформулированной модели горения без привлечения соображений о переходе к

Рис. 5. Зависимость $\tau(z_{O_2\infty})$.

R , м: 1 — 10^{-2} , 2 — 10^{-3} .



кинетическому режиму горения. На рис. 4, б представлена зависимость $\tau(R_0)$ при $z_{O_2\infty} = 0,05$, $T_w = 2000$ К, $T_\infty = 500$ К, т. е. в условиях, когда частица при горении получает тепло от нагретых стенок камеры сгорания. Можно видеть, что характер изменения $\tau(R_0)$ соответствует наблюдаемому в эксперименте. Низкие температуры окружающей среды при расчетах взяты для того, чтобы теплоотвод от частицы обеспечивал $T_s \approx 1000$ К, когда изменяется состав газовой фазы у поверхности частицы. Несоответствие по температуре окружающей среды в эксперименте и принятой при расчетах указывает, по-видимому, на то, что в эксперименте теплоотвод идет через державку частицы или в результате нестационарного прогрева частицы в процессе горения. При увеличении T_∞ температура частицы углерода становится выше 1000 К для всех R_0 и эффект резкого роста W с увеличением R_0 исчезает. Следует отметить также, что в эксперименте наблюдается более интенсивное повышение W , чем в расчете, что связано, по-видимому, с более интенсивными процессами подогрева частицы за счет излучения и тепла окружающей среды и соответственно более сильным теплоотводом через державку частицы.

Зависимость времени горения частицы углерода разного начального размера от концентрации кислорода в окружающей среде при температуре 1000 К и максимальном излучении с поверхности частицы представлена на рис. 5. Как видно, время τ примерно обратно пропорционально $z_{O_2\infty}$, что характерно для диффузионного режима горения и согласуется с экспериментальными данными [10].

Таким образом, сформулированная теоретическая модель горения частиц углерода, основанная на рассмотрении равновесного протекания химических реакций в газовой фазе и на поверхности частиц, позволяет обнаружить, что при $T_s \approx 1000$ К довольно резко меняется состав газовой фазы у поверхности частицы, что приводит к ряду аномальных (для диффузионного режима горения частицы) зависимостей, в частности — быстрому возрастанию скорости горения при увеличении температуры окружающей среды и размера частиц. Сформулированная модель позволяет дать качественное описание наблюдаемым экспериментальным зависимостям без привлечения соображений о переходе от диффузионного режима горения к кинетическому.

ЛИТЕРАТУРА

1. Предводителев А. С., Хитрин Л. П., Цуханова О. А. Горение углерода.— М.: Изд-во АН СССР, 1949.
2. Хитрин Л. П. Физика горения и взрыва.— М.: Изд-во МГУ, 1957.
3. Франк-Каменецкий Д. А. Диффузия и теплопередача в химической кинетике.— М.: Наука, 1967.
4. Канторович Б. В. Основы теории горения и газификации твердого топлива.— М.: Изд-во АН СССР, 1958.
5. Головин А. М., Песочин В. Р., Толмачев П. Я. ФГВ, 1982, 18, 2, 23.
6. Варшавский Г. А. Горение капли жидкого топлива (диффузионная теория).— М.: Изд-во АН СССР, 1945.
7. Термодинамические свойства индивидуальных веществ: Справочник/Под ред. В. П. Глушко.— М.: Наука, 1978.
8. Головина Е. С., Хаустович Г. П. ИФЖ, 1960, III, 3, 13.
9. Химические вещества из угля/Под ред. Ю. Фальке.— М.: Химия, 1980.
10. Бабий В. И., Попова П. Ф. ИФЖ, 1971, XXI, 3, 411.
11. Spalding D. V. Fuel, 1950, 29, 1, 2.

г. Москва

Поступила в редакцию 14/VI 1989