



УДК 536.31

Барышева О.Б. – кандидат технических наук, доцент

E-mail: obbars@mail.ru

Садьков Р.А. – доктор технических наук, профессор

E-mail: sadykov_r_a@mail.ru

Хабибуллин Ю.Х. – кандидат технических наук, доцент

E-mail: a0an@mail.ru

Казанский государственный архитектурно-строительный университет

Адрес организации: 420043, Россия, г. Казань, ул. Зелёная, д. 1

Математическая модель сажеобразования в пламени гомогенной углеводородовоздушной смеси

Аннотация

Постановка задачи. Цель исследования – выявить влияние коагуляции частиц сажи и начальной температуры воздуха на массовый выход сажи, найти зависимость среднего диаметра частиц сажи от времени пребывания, определить воздействие теплоотвода на зависимость массового выхода сажи от состава топливовоздушной смеси.

Результаты. Основные результаты исследования состоят в разработке математической модели сажеобразования в пламени гомогенной углеводородовоздушной смеси. На основании этой модели авторами получена роль коагуляции частиц сажи в процессе сажеобразования, путем анализа расчета с учетом и без учета коагуляции.

Выводы. Значимость полученных результатов для строительной отрасли состоит в том, что на основе численного моделирования прогнозируется и учитывается влияние процессов газификации частиц сажи по реакциям на изменение массового выхода сажи при сжигании топлива, например, при утилизации твердых бытовых и строительных отходов, поскольку игнорирование этих процессов приводит к существенным ошибкам, и как следствие, к загрязнению окружающей среды. Созданная расчетная модель позволяет изучить на основе численных экспериментов, влияния режимов параметров процесса горения на порог сажеобразования.

Ключевые слова: потери тепловой энергии, математическая модель сажеобразования, коагуляция, состав, температура.

Для математического описания процесса сажеобразования в пламени приведем математическую модель этого процесса. Процесс сажеобразования происходит с образованием углеводородных радикалов, которые называются радикалами-зародышами.

Уравнение для определения скорости образования радикалов-зародышей можно записать:

$$\frac{dn}{dt} = n_0 + (f - g)n - g_0 N_s n, \quad (1)$$

где n – штучная концентрация радикалов-зародышей, n_0 – скорость самопроизвольного их зарождения, f – коэффициент линейного разветвления, g – коэффициент линейного обрыва цепи, g_0 – коэффициент захвата радикалов-зародышей частицами сажи, N_s – число частиц сажи в единице объема.

Скорость образования частиц сажи определяется процессом взаимодействия радикалов-зародышей с исходными молекулами углеводорода и процессом их захвата частицами сажи, который тормозит образование новых частиц.

Поэтому брутто скорость образования частиц сажи можно выразить в виде:

$$\frac{dN_s}{dt} = (a - vN_s)n, \quad (2)$$

где a и v – некоторые коэффициенты. Решая совместно уравнения (1) и (2), можно получить зависимость $N_s = f(\tau)$, т.к. зависимость имеет максимум для некоторого периода времени, что взаимосвязь коэффициентов, a и v выражают в виде:

$$a = vN_{max}.$$

Величина $1/a$ имеет смысл периода индукции процесса сажеобразования. Пологая, что первичные радикалы-зародыши образуются в результате мономолекулярной реакции распада водородов, можно записать:

$$n_0 = 10^{13} N e^{-E/RT}, \quad (3)$$

где 10^{13} – частота колебания атомов в молекуле по разрываемой связи; N – число молекул углеводорода в единице объема (штучная концентрация), м^{-3} .

Система уравнений (1)-(3) содержит неизвестные коэффициенты $(f-g)$, g_0 , a , которые зависят от конкретных условий горения.

Модуль турбулентного горения построения на основе подхода, связанного с понятием скорости диссипации турбулентных вихрей. Скорость выгорания топлива в этой модели:

$$\frac{dC_T}{dt} = A \bar{C}_T \frac{E}{K}, \quad (4)$$

где A – константа, зависящая от структуры пламени и кинетики химической реакции описание топлива; \bar{C}_T – локальная осредненная по времени массовая концентрация топлива; E – скорость диссипации турбулентной кинетической энергии; k – турбулентная кинетическая энергия.

Для областей с очень богатым составом смеси, где концентрация кислорода низкая:

$$\frac{dC_T}{dt} = A \frac{\bar{C}_{O_2} E}{L_0 K}, \quad (5)$$

где \bar{C}_{O_2} – локальная осредненная по времени массовая концентрация кислорода.

Для турбулентных пламен гомогенных однородных смесей, когда скорость выгорания топлива связана со скоростью диссипации горячих вихрей продуктов сгорания:

$$\frac{dC_T}{dt} = A B \frac{\bar{C}_{np} E}{(1 + L_0) K}, \quad (6)$$

где B – константа; \bar{C}_{np} – локальная осредненная массовая концентрация продуктов сгорания.

В расчетной модели турбулентного горения одно из приведенных 3-х уравнений, которое дает наименьшую скорость реакции, является определяющей для локальной скорости выгорания топлива:

$$\begin{aligned} \frac{dC_v}{dt} &= n_0 + (f - g_0)n - g_0 N_s n, \\ n_0 &= a_0 C_T e^{-E/RT}, \\ \frac{dN_s}{dt} &= m_s (a - \nu N_s) n, \end{aligned} \quad (7)$$

где m_s – масса частицы сажи; a_0 – константа.

Скорость выгорания сажи для локальных областей со сравнительно низким и высоким соотношением концентрации сажи и кислорода по аналогии со скоростью выгорания топлив:

$$\frac{dC_v}{dt} = A \bar{C}_T \frac{E}{K}, \quad (8)$$

$$\frac{dC_v}{dt} = A \frac{C_{O_2} E \bar{C}_v L_0}{L_s K (\bar{C}_v L_s + C_T L_0)}, \quad (9)$$

где \bar{C}_v – локальная осредненная массовая концентрация сажи; L_s – стехиометрический коэффициент сажи.

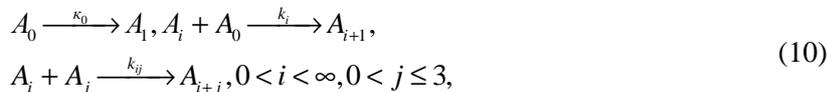
Уравнения (4)-(9) дополненные уравнениями движения и тепломассообмена в турбулентном потоке, образуют систему уравнений для расчета выхода сажи в турбулентном диффузионном факеле ацетиленового пламени.

Система уравнений (1)-(2) описывает суммарную кинетику процесса сажеобразования и позволяет рассчитать выход сажи в процессе горения.

Однако при решении некоторых задач (расчет излучения, расчет термического периода углеводородов с целью получения специальных сортов сажи и др.) возникает как необходимость в установлении более детальных закономерностей развития процесса сажеобразования, в частности, учета изменения функции распределения частиц сажи по размерам.

В связи с чем, рассмотрим другой подход к моделированию процесса сажеобразования, когда анализируется с позиции химической кинетики каждый отдельный акт присоединения молекул углерода к радикалам-зародышам и частицам новой фазы. При этом источником молекул углерода могут являться как активные частицы, так и исходные и промежуточные углеводороды.

Детальная кинетическая модель сажеобразования как цепного процесса:



где A_0 – молекула исходного углеводорода; A_i – частица, содержащие $2i$ атомов углерода; k_i и k_j – константы скоростей реакции.

Эта модель учитывает мономолекулярный распад исходного углеводорода с образованием активных частиц, бимолекулярной реакции их взаимодействия с углеводородом и ростом частиц, а также гибель активных центров при столкновении с частицами сажи. Реакции записаны в общем виде, отражая лишь изменения состояния атомов углерода. В модели не используются в явной форме понятия радикал-зародыш, зародыш и принимается, что при $j=1, 2, 3, \dots, A_j$ – представляет собой активную частицу, из которой при $i \geq 8$ образуется растущая частица сажи с числом $2i$ атомов углерода. Первая стадия распада исходного углеводорода выражена по существу суммарной кинетикой. Кинетическая модель должна включать в себя возникновение сажеобразования некоторых промежуточных углеводородов, таких как C_2, H_2, CH_4 , и др.

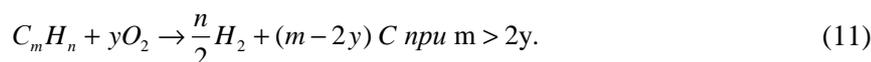
Приведенная модель (10) описывается системой уравнений:

$$\begin{cases} \frac{dN_0}{dt} = -k_0 N_0 - \sum_{j=1}^{\infty} k_j \\ \frac{dN_1}{dt} = k_0 N_0 - k_1 N_1 N_0 - k_{11} N_1^2 - \sum_{j=1}^{\infty} k_{j1} N_1 N_j \\ \frac{dN_2}{dt} = k_1 N_0 N_1 - k_2 N_0 N_2 - k_{11} N_1^2 - k_{22} N_2^2 - \sum_{j=1}^{\infty} k_{2j} N_2 N_j \\ \frac{dN_3}{dt} = k_2 N_0 N_2 - k_3 N_0 N_3 - k_{12} N_1 N_2 - k_{33} N_3^2 - \sum_{j=1}^3 k_{ij} N_3 N_j \\ \frac{dN_i}{dt} = k_{i-1} N_0 N_{i-1} - k_i N_0 N_i + \sum_{j=1}^3 k_{i-j} N_{i-j} N_j - \sum_{j=1}^3 k_{ij} N_i N_j \end{cases}$$

где N_0 – массовая концентрация исходного углеводорода в единице объема продуктов сгорания, кг/м^3 . На практике число уравнений в бесконечной системе (10) ограничивают числом атомов углерода в частице.

Рассмотренные два подхода к математическому моделированию сажеобразования как целого радикального процесса должно не полностью описывать физико-химическую модель, описанную выше, в частности, они не учитывают неизотермичности процесса, коагуляции, поверхностные явления на частицах сажи. Побочные недостатки имеют и другие математические модели сажеобразования.

Гомогенная однородная смесь углеводородного топлива с воздухом представляет собой объект для экспериментальных и теоретических исследований при горении. Термодинамические расчеты равновесного состава продуктов сгорания свидетельствуют о возможности появления твердого углерода при соотношении атомов $C/O > 1$ при согласно уравнению:



Для смесей при горении в адиабатических условиях это справедливо для $d < 0,33$. предельное значения коэффициента избытка воздуха гомогенной смеси, выше которого в пламени не происходит сажеобразования α_s . Для термодинамического равновесия численной значения α_s практически не зависит от давления и начальной температуры смеси.

Массовая концентрация сажи как неравновесного промежуточного продукта химических реакций определяется двумя процессами: сажеобразованием и газификацией сажи двуокисью углерода и водным паром.

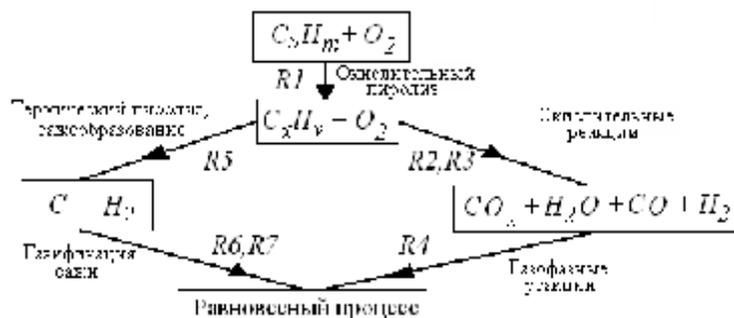
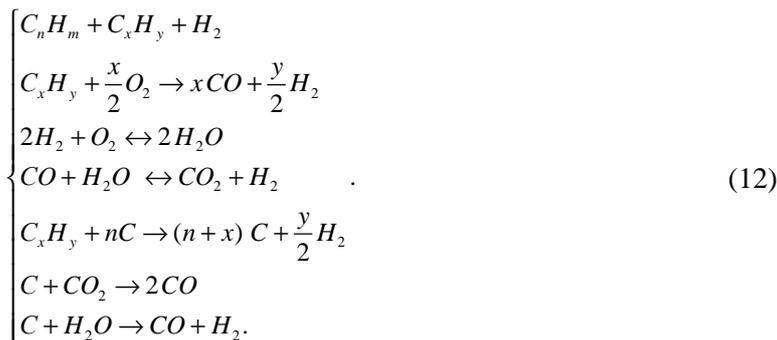


Рис. 1. Схема физико-химической модели горения богатой углеводородовоздушной смеси

На рис. 1 показана схема физико-химической модели горения богатой углеводородовоздушной смеси. Здесь $C_n H_m$ – исходное углеводородное топливо, $C_x H_y$ – гипотетическое промежуточный углеводород, посредством которого протекают окисленные реакции и термический пиролиз. Такие схемы применяются и при моделировании горения, так как детальные схемы окисления для большинства углеводородов неизвестны.

Принята брутто-кинетическая модель горения смеси со значительным избытком углеводородного топлива учитывающая окислительные реакции, образования и газификацию сажи:



Реакция пиролиза R_1 и газификации углерода R_6 и R_7 явления эндотермическим, окисления R_2 и R_1 образуют систему последовательных реакций, причем ведущей стадией процесса является окислительная, которая энергетически обеспечивает протекания остальных. Реакция R_5 описывает образование и рост конденсированной фазы из углеводородов, находящихся в газовой фазе. В ее основе лежит физико-химическая модель сажеобразования по ценному радикальному процессу, предложенная П.А. Тестером.

Одновременно с сажеобразованием протекают и реакции газификации R_6 и R_7 , однако лишь после уменьшения скорости реакции R_5 вследствие израсходования углеводородов реакции газификации начинают превалировать. При этом содержание сажи, CO_2 , H_2O и температура, и система приближается к термодинамическому равновесному состоянию.

Все реакции $R_1 \dots R_7$ является суммарными, и обобщают сложной многостадийный механизм реагирования. Для упрощения математического описания процесса сажеобразования принимают дополнительно следующие допущения:

- 1) течение газа, одновременное, адиабатическое;
- 2) окислительные реакции протекают в ламинарном фронте пламени;
- 3) сажеобразования начинается с момента полного расходования кислорода.

Задача разделяется на две:

- о структуре ламинарного фронта пламени;
- о сажеобразовании.

Первая задача заключается в построении математической модели ламинарного фронта пламени богатой углеводородной смеси. Структура ламинарного пламени описывается системой уравнений теплопроводности и диффузии. В обычных для теории горения допущениях о плоскости фронте пламени, пренебрегаем перекрестными эффектами молекулярного теплопереноса (термодиффузия, диффузионная теплопроводность и др.) система имеет вид:

$$\begin{aligned} C_p r \frac{\partial T}{\partial t} + B^* C_p \frac{\partial T}{\partial x} - \frac{\partial}{\partial x} I C_p \frac{\partial T}{\partial x} &= \Phi, \\ \frac{\partial r g_i}{\partial t} + B^* \frac{\partial g_i}{\partial x} - \frac{\partial}{\partial x} r D_i \frac{\partial g_i}{\partial x} &= \Phi_i, \end{aligned} \quad (13)$$

где $B^* = \rho_0 U_0$ – массовая скорость; Φ , Φ_i – источниковые члены. Предполагая, что число Льюиса:

$$L_e = \frac{C_p r D}{I} = 1, \quad (14)$$

а также допуская равенство коэффициентов диффузии для всех компонентов примет вид уравнения сохранения энтальпии:

$$d \sum_i h_i g_i = 0. \quad (15)$$

Уравнения сохранения массовой доли для химических элементов C , O , H и выражения закона действующих масс для реакции R_3 и R_4 , находящихся в равновесии, позволяют получить соотношения для концентрации реагирующих компонентов.

Учитывая, что искомыми элементами являются g компонентов и температура T , ламинарный фронт горения смеси углеводородного топлива и воздуха с кинетической схемы ($R_1 \dots R_7$) описывается системой из шести нелинейных алгебраических уравнений и краевой задачей для двух уравнений диффузии:

$$\Lambda(g_{cnHm}) = \rho v_1 w_1, \quad (16)$$

$$\Lambda(g_{coxH}) = \rho(v_1 w_1 - v_2 w_2), \quad (17)$$

где v_1 – стехиометрические коэффициенты; w_1 – скорость реакции R_1 ; w_2 – скорость реакции R_2 ; Λ – дифференциальный оператор, соответствующий уравнению диффузии:

$$\Lambda = \frac{\partial}{\partial t} r + r u \frac{\partial}{\partial x} - \frac{\partial}{\partial x} D \frac{\partial}{\partial x}. \quad (18)$$

Граничные условия краевой задачи (16)-(17) определяются на основе предположения о том, что исходная топливовоздушная смесь поступает в реакционную зону через левое граничное сечение ($x=0$), а в продуктах реакции ($R_1 \dots R_7$), проходящее через правое граничное сечение ($l=0$), следовательно, граничное условие примет вид:

- $x=0$:

$$g_i - \frac{r D}{B^*} \frac{d g_i}{d x} = g_i, \quad (19)$$

- $x=l$:

$$\frac{d g_i}{d x} = 0. \quad (20)$$

Использование нестандартной формы уравнений (16)-(17) позволяет, задав начальным значением $g_i(0, x_i)$ и производя расчет системы уравнений (15)-(20) до такого значения времени сажеобразования являются результаты приближенного расчета структуры ламинарного фронта пламени, то есть состава и температуры продуктов сгорания за фронтом горения.

В индуктивном периоде сажеобразования происходит образования радикалов-зародышей:

$$\frac{\partial n}{\partial t} = n_0 + F n + g_0 n^2, \quad (21)$$

$$n_0 = N \cdot 10^{13} \exp(-E_1 / RT). \quad (22)$$

где N – концентрация молекул углеводорода; E_1 – энергия активации самопроизвольного образования радикалов-зародышей:

$$g_0 = p D_{p-3}^2 \sqrt{\frac{8RT}{p M_1^*}},$$

где D_{p-3} – диаметр радикала-зародыша; M_I^* – приведенная молекулярная масса сталкивающихся радикалов-зародышей.

Увеличение размеров радикалов-зародышей за счет столкновения их с молекулами углеводородов:

$$\frac{dD_{p-3}}{dt} = 2 \frac{m_c x}{r_{p-3}} \left(\frac{r_a + \frac{D_{p-3}}{2}}{D_{p-3}} \right)^2 N \sqrt{\frac{8RT}{TM_2^*}} \exp\left(-\frac{E_2}{RT}\right) \quad (23)$$

где $m_c = 1,992684 \cdot 10^{-26}$ кг – масса атома углерода; x – количество атомов углерода в молекуле C_xH_y ; r_a – эффективный радиус молекулы углеводорода; E_2 – энергия активации процесса роста радикалов-зародышей; M_2^* – приведенная молекулярная масса сталкивающихся радикалов-зародышей и углеводородной молекулы.

Уменьшение концентрации углеводородов N в индукционном периоде:

$$\frac{dN}{dt} = -p n N \sqrt{\frac{RT}{2pM_{CH}}} \left(r_a + \frac{D_{p-3}}{2} \right)^2 \exp\left(-\frac{E_2}{RT}\right), \quad (24)$$

где M_{CH} – приведенная молекулярная масса сталкивающихся углеводородных молекул.

По достижении первыми радикалами – зародышами критического диаметра D_{np} они превышаются в частицы сажи. В этот момент индукционный период заканчивается, и доли процессы, происходящие в термодинамической системе, моделируются системой дифференциальных уравнений. Это уравнение для скоростей изменения штучной концентрации N_0 углеводорода C_xH_y , концентрации частиц сажи N_s , массовой концентрации газовых компонентов g , массовой концентрации сажи g_s , температуры продуктов сгорания T и диаметра максимальной сферической частицы сажи D_s .

Скорость изменения штучной концентрации молекул углеводорода:

$$\frac{dN}{dt} = \left(\frac{\partial N}{\partial t} \right)_r - \frac{NdT}{Tdt}, \quad (25)$$

$$\left(\frac{\partial N}{\partial t} \right)_r = -p N N_s \exp\left(-\frac{E_3}{RT}\right) * 10^6 \sqrt{\frac{RT}{2pM_{CH}}} \left[\frac{D_{np} + D_s}{2} \right]^2 - \frac{\partial N_s}{\partial t} \frac{p D_{np}^3 r_s N_A}{6 m_s x}, \quad (26)$$

где E_3 – энергия активации при столкновении молекул углеводорода с частицами сажи; N_A – число Авогадро; $(\partial N / \partial t)_r$ – скорость изменения штучной концентрации при изотермических условиях.

В правой части выражения (26) первый член описывает скорость расходования молекул углеводорода на топахимический рост частиц сажи, а второй – образование из радикалов-зародышей D_{p-3} новых частиц сажи (зародышей) с диаметром D_{np} .

Скорость изменения массовой концентрации углеводорода определяется:

$$\frac{dg C_x H_y}{dt} = \frac{10^6 R M_{CH} T}{p N_A M} \left(\frac{\partial N}{\partial t} \right)_r, \quad (27)$$

где M – средняя молекулярная масса продуктов сгорания.

Скорость образования радикалов – зародышей с размером, равным критическому диаметру $D_{кр}$, описывается выражением, аналогичным (21) для индукционного периода сажеобразования:

$$-\frac{\partial n'}{\partial t} = n_0 + (f - g)n - g_0 (n')^2 - k N_s n, \quad (28)$$

где зависимость для n_0 и g_0 приведены выше, а k – коэффициент, учитывающий скорость гибели радикалов-зародышей при столкновении их с поверхностями частиц сажи.

Скорость изменения штучной концентрации частиц сажи:

$$\frac{dN_s}{dT} = \left(\frac{\partial N_s}{\partial t} \right)_r - \frac{N_s dT}{T dt}, \quad (29)$$

где

$$\left(\frac{\partial N_s}{\partial t} \right)_r = \frac{\partial n'}{\partial t} V - \frac{6}{5} K_{th} y^{1/6} N_s^{1/6}, \quad (30)$$

где V – коэффициент, учитывающий уменьшение скорости роста диаметра радикала-зародыша вследствие уменьшения концентрации углеводородов по отношению к скорости роста радикала-зародыша в индукционном периоде.

Вторичный член в выражении (30) определяет уменьшение количества частиц сажи вследствие коагуляции.

$$K_{th} = \frac{5}{12} \left(\frac{3}{4p} \right)^{1/16} \sqrt{\frac{6RT}{r_s}} G \alpha_f, \quad (31)$$

$$f = \frac{10^6}{48} p (D_{sp} + D_s)^3 N_s, \quad (32)$$

где $R=1,380662 \cdot 10^{-23}$ Дж/к – постоянная Больцмана, G – коэффициент, учитывающий дисперсионные силы, для сферических частиц G , α_f – параметр, учитывающий вид функции распределения частиц по размерам; для самосохраняющегося распределения $\alpha_f=6,55$.

Из закона сохранения энергии получим уравнения для температуры:

$$\frac{dT}{dt} = \frac{\sum \frac{dg_i h_i}{dt}}{\sum C_{p_i} g_i}, \quad (33)$$

где g_i , h_i , C_{p_i} – соответственно массовая доля, удельная энтальпии и удельная теплоемкость при постоянном давлении компонентов продуктов сгорания.

Выражение для массовой концентрации:

$$\begin{aligned} \frac{dgC_s}{dt} &= W_5 - W_6 - W_7, \\ W_5 &= \frac{M_c}{M_{cH}} \frac{dgC_s H_y}{dt}, \end{aligned} \quad (34)$$

где W_5 – скорость образования частиц сажи; W_6 – скорость газификации частиц сажи по реакции R_6 ; W_7 – скорость газификации частиц сажи по реакции R_7 . Уравнение для размера частиц сажи, основанное на допущении о сферической их форме:

$$\frac{dD_0}{dt} = \frac{16 \cdot 10^{-6} p M}{p r_s R N_s T (D_{sp} + D_s)^2} \frac{dgC_s}{dt} - \frac{D_{sp} + D_s}{3 N_s} \left(\frac{\partial N_s}{\partial t} \right)_T. \quad (35)$$

Второй член в правой части выражения (35) определяет скорость изменения диаметра частиц сажи в процессе их коагуляции.

Рассмотренные две задачи о ламинарном фронте пламени и сажеобразовании составляют в совокупность математическую модель сажеобразования в пламени богатой гомогенной углеводородовоздушной смеси. Предложенная кинетическая модель химических реакций $R_1 \dots R_7$ и система уравнений (13)-(35) приближенно описывают процесс сажеобразования при горении богатой смеси, и в частности, можно определить сверхравновесные концентрации промежуточных углеводородов, сажи, водяного пара, двуокиси углерода, а также температуру продуктов сгорания.

Важное преимущество использования расчетной модели заключается в возможности детального изучения свойств рассматриваемого процесса на основе результатов численного эксперимента.

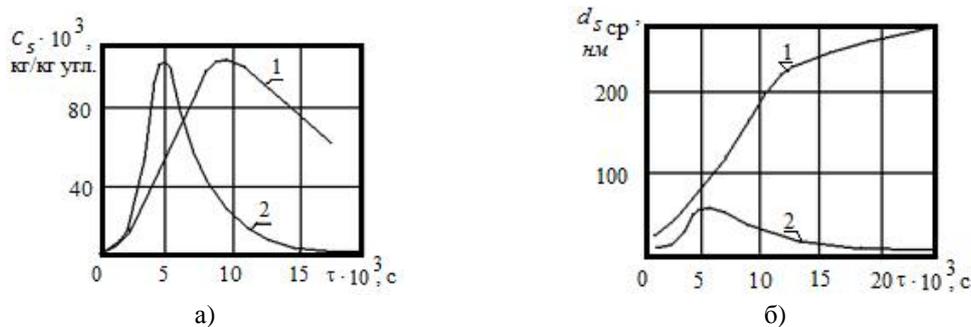


Рис. 2. Влияние коагуляции частиц сажи на массовый выход сажи (а) и зависимость среднего диаметра частиц сажи от времени пребывания (б):

$\alpha=0,4$; $\rho=2,5$ МПа; $T_0=573$ К, топливо – керосин ТС-1;

1 – с учетом коагуляции; 2 – без учета коагуляции

Для примера рассмотрим, роль коагуляции частиц сажи в процессе сажеобразования, путем анализа расчета с учетом (рис. 2а) и без учета коагуляции (рис. 2б). Действие коагуляции заключается в уменьшении реакционной поверхности сажевого аэрозоля вследствие слипания частиц сажи и снижения эффективной скорости поверхностных реакций роста R_5 и газификации R_6 , R_7 частиц сажи. Это ведет к снижению массовой скорости сажеобразования в пламени и существенному возрастанию времени полного выгорания образовавшихся частиц сажи. Последнее усиливается увеличением размеров частиц сажи (массы отдельной частицы; вследствие коагуляции (рис. 2б)).

Штучная концентрация частиц сажи незначительно зависит от давления и состава смеси. Число частиц сажи в давлении и состава смеси.

Число частиц сажи в продуктах сгорания определяется в основном физическими процессами коагуляции, т.е. свойствами самих частиц, а его различия в начальный период развития процесса сажеобразования быстро сглаживаются.

Аналогично на основе численного моделирования оценивается влияние процессов газификации частиц сажи по реакциям R_6 и R_7 на изменение массового выхода сажи при сжигании топлива, т.к. не учет этих процессов приводит к значительным ошибкам.

Расчетная модель позволяет изучить на основе численных экспериментов, где влияния режимов параметров процесса горения на порог сажеобразования.

Величиной α_s – предельным значением коэффициента избытка воздуха, выше которого сажеобразования в богатой гомогенной газовой смеси не регистрируется, оценивают склонность различных углеводородов к образованию сажи при сжигании.

Порог сажеобразования не является величиной постоянной даже для одного вида топлива.

На рис. 3-4, значения α_s возрастает с увеличением теплотерь в пламени или с уменьшением начальной температуры гомогенной углеводородоздушной смеси. Таким образом, α_s , принадлежащий порогу сажеобразования, нельзя использовать в качестве параметра, характеризующего склонность углеводородных топлив к сажеобразованию при горении.

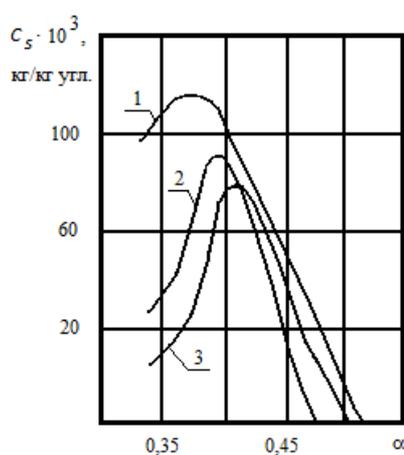


Рис. 3. Влияние теплотерь на зависимость массового выхода сажи от состава топливовоздушной смеси по расчетным данным:
 $P=2,45$ МПа, $T=573$ К;
 1 – адиабатные условия, $dQ = 0\%$,
 2 – $dQ = 15\%$, 3 – $dQ = 24\%$

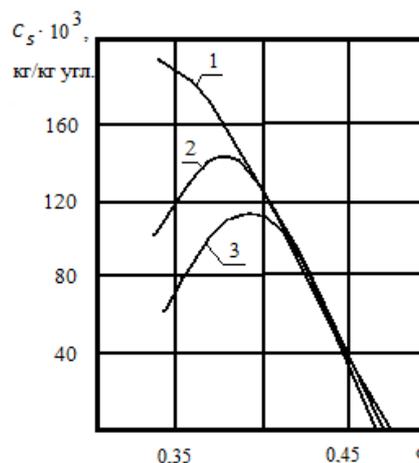


Рис. 4. Влияние начальной температуры воздуха на зависимость выхода сажи от состава топливовоздушной смеси по расчетным данным:
 $P=2,45$ МПа, $\tau=13 \cdot 10^{-3}$ с;
 1 – при $T = 573$ К, 2 – при $T = 537$ К,
 3 – при $T = 523$ К

При значениях коэффициента избытка воздуха, незначительно превышающих α_s , отличается возникновением радикалов-зародышей, которые не достигали критического размера и не превращались в частицы сажи вследствие того, что скорость газификации при соответствующих температурах превышает скорость их роста.

Авторами доказано, что действие коагуляции заключается в уменьшении реакционной поверхности сажевого аэрозоля вследствие слипания частиц сажи и снижения эффективной скорости поверхностных реакций роста и газификации некоторых частиц сажи – это ведет к снижению массовой скорости сажеобразования в пламени и существенному возрастанию времени полного выгорания образовавшихся частиц сажи.

Предложенная кинетическая модель химических реакций и система уравнений приближенно описывают процесс сажеобразования при горении богатой смеси, позволяет определить сверхравновесные концентрации промежуточных углеводородов, сажи, водяного пара, двуокиси углерода, а также температуру продуктов сгорания, а также более детально изучить свойства рассматриваемого процесса на основе результатов численного эксперимента.

Список библиографических ссылок

1. Муравьев А. Г. Экспресс-анализ экологических проб. М. : Бинوم. Лаборатория знаний, 2010. 424 с.
2. Mill R. S., Morrison A. M. Nature and Ecology. Boston : Prentice-Hall, 2009. 230 p.
3. Odum Yu. Ecology. Cambridge : Second Edition, 2010. 338 p.
4. Odum Yu. Ecology. Cambridge : Second Edition, 2008. 256 p.
5. Савельева В. А., Попова М. Н., Андропова М. М. Экологическая безопасность учреждений УИС в сфере обращения с отходами. М. : ВИПЭ ФСИН России, 2010. 250 с.
6. Подавалов Ю. А. Экология нефтегазового производства. М. : Инфра-Инженерия, 2010. 416 с.
7. Chapman J. L. Ecology. Cambridge : Second Edition, 2009. 336 p.
8. Porter M. What is strategy? Harvard : Business Review, 2009. 108 p.
9. Бычкова В. А., Коробко В. И. Твердые бытовые отходы. Экономика. Экология. Предпринимательство. М. : Юнити-Дана, 2014. 132 с.
10. Почекаева Е. И. Экология и безопасность жизнедеятельности. М. : Феникс, 2010. 560 с.
11. Акинин Н. И. Техносферная безопасность. М. : ИД, 2016. 248 с.
12. Федоров Л. А. Химическое разоружение по-русски. М. : НЛЮ, 2011. 984 с.

Barysheva O.B. – candidate of technical sciences, associate professor

E-mail: obbars@mail.ru

Sadykov R.A. – doctor of technical sciences, professor

E-mail: sadykov_r_a@mail.ru

Khabibullin Iu.Kh. – candidate of technical sciences, associate professor

E-mail: a0an@mail.ru

Kazan State University of Architecture and Engineering

The organization address: 420043, Russia, Kazan, Zelenaya st., 1

Mathematical model of soot formation in the flame of a homogeneous hydrocarbon-air mixture

Abstract

Problem statement. The aim of the study was to determine the effect of coagulation of soot particles and the initial air temperature on the mass yield of soot, to determine the dependence of the average diameter of soot particles on residence time, and to determine the effect of the heat sink on the dependence of the mass yield of soot on the composition of the air-fuel mixture.

Results. The main results of the study consist in the development of a mathematical model for soot formation in the flame of a homogeneous hydrocarbon-air mixture. On the basis of this model, the authors have obtained the role of coagulation of soot particles in the soot formation process, by analyzing the calculation with and without coagulation.

Conclusions. The significance of the obtained results for the construction industry is that on the basis of numerical modeling, the effect of gasification processes of soot particles on the reactions to the change in mass yield of soot during fuel combustion is predicted and taken into account, for example, in the utilization of solid household and construction waste, since ignoring these processes leads to Significant errors, and as a result, pollution of the environment. The calculated model allows us to study, on the basis of numerical experiments, the effect of the combustion parameters on the soot formation threshold.

Keywords: loss of thermal energy, mathematical model of soot formation, coagulation, composition, temperature.

References

1. Muravev A. G. Rapid analysis of environmental samples. M. : Binom. Laboratory znaniy, 2010. 424 p.
2. Mill R. S., Morrison A. M. Nature and Ecology. Boston : Prentice-Hall, 2009. 230 p.
3. Odum Yu. Ecology. Cambridge : Second Edition, 2008. 256 p.
4. Odum Yu. Ecology. Cambridge : Second Edition, 2010. 338 p.
5. Saveleva V. A., Popova M. N., Andronova M. M. Environmental security penal institutions in the field of waste management. M. : VIPE FSIN of Russia, 2010. 250 p.
6. Podavalov Ju. A. Oil and gas production ecology. M. : Infra-Engineering, 2010. 416 p.
7. Chapman J. L. Ecology. Cambridge : Second Edition, 2009. 336 p.
8. Porter M. What is strategy? Harvard : Business Review, 2009. 108 p.
9. Bychkova V. A., Korobko V. I. Municipal solid waste. Economy. Ecology. Entrepreneurship. M. : Unity-Dana, 2014. 132 p.
10. Pochekaeva E. I. Ecology and life safety. M. : Phoenix, 2010. 560 p.
11. Akinin N. I. Technosphere safety. M. : ID, 2016. 248 p.
12. Fedorov L. A. Chemical disarmament in Russian. M. : NLO, 2011. 984 p.