

УДК 544.45

Вовчук Я.И., Роговская О.С., Сторчак И.В.

*Институт горения и нетрадиционных технологий
Одесского национального университета им. И.И. Мечникова*

О воспламенении гибридной газозвеси частиц

В работе в рамках двухтемпературного подхода рассмотрено воспламенение газозвеси частиц твердого горючего в смеси газообразных горючего и окислителя - гибридной газозвеси. Получены аналитически условия самовоспламенения этой системы. Исследованы зависимости критического значения параметра Семенова α_{kr}^{hd} от основных параметров гибридной газозвеси. Показано, что присутствие горючего газа в гибридной газозвеси приводит к существенному уменьшению α_{kr}^{hd} по сравнению с однокомпонентной газозвесью, т.е. к "облегчению" условий воспламенения. Предложена аппроксимационная формула для определения максимального докритического разогрева системы, которая позволяет с приемлемой для практических расчетов точностью, рассчитывать значение α_{kr}^{hd} в широком диапазоне вариации ее параметров.

Известно [1], что опасность воспламенения и взрыва пыли твердых горючих материалов становится намного выше, если в воздухе содержится даже небольшие количества горючего газа. Эти условия возникают, например, в атмосфере шахт, где угольная пыль взвешена в воздухе, в котором содержатся и шахтный метан. Такая смесь представляет собой дисперсную систему, называемую гибридной газозвесью.

Моделирование процессов происходящих при воспламенении таких сложных систем необходимо, прежде всего, с практической точки зрения для создания возможности предсказания условий воспламенения, зажигания и распространения пламени в гибридных газозвесах и научно обоснованного выбора критериев пожаро-взрывобезопасности таких дисперсных систем. Не менее интересна указанная проблема и с научной точки зрения, поскольку, в отличие от имеющихся достаточно подробных теоретических и экспериментальных исследований воспламенения и горения газозвесей твердых горючих, изучение режимов воспламенения гибридных газозвесей только начинается.

Целью настоящей работы является теоретический анализ зависимостей критических условий самовоспламенения гибридной газозвеси частиц твердого горючего от макроскопических и кинетических параметров дисперсной системы, накопление тепла в которой обусловлено одновременно протекающими

химическими реакциями на поверхности частиц твердого горючего и в газовой фазе.

1. Теоретическая модель.

Предлагаемая модель основывается на подходе, использованном в классических работах по воспламенению газозвесей частиц твердых горючих, реагирующих по чисто гетерогенному механизму [2-4]. Гибридная газозвесь монодисперсных сферических частиц равномерно распределена в объеме, стенки которого находятся при постоянной температуре T_w . Предполагается, что выгорание твердого и газообразного горючих, теплообмен излучением между частицами горючего и стенками сосуда, а также изменение величины присоединенного объема в предвоспламенительный период пренебрежимо малы. На поверхности частиц горючего происходит одна стехиометрическая реакция первого порядка по окислителю, скорость гомогенной реакции газообразного горючего с окислителем имеет второй порядок. Реагирование на внутренней поверхности частиц отсутствует.

С учетом принятых упрощений система уравнений теплового баланса для частицы и газа в гибридной газозвеси, имеет вид:

$$\frac{1}{3} r_p c_p^p \rho_p \frac{dT_p}{dt} = k_{01} e^{\frac{-E_1}{RT_p}} C_{ox} Q_1 - \alpha_p (T_p - T_g); \quad (1)$$

$$c_p^g \rho_g \frac{dT_g}{dt} = k_{02} e^{\frac{-E_2}{RT_p}} C_{ox} C_f Q_2 + N_0 \alpha_p S_p (T_p - T_g) - \frac{S_w}{V_w} \alpha_w (T_g - T_w); \quad (2)$$

с начальными условиями:

$$t = 0; \quad T_p = T_p^0, \quad T_g = T_g^0. \quad (3)$$

Здесь r_p – радиус частицы, c_p^p , c_p^g , ρ_p , ρ_g – удельные теплоемкости и плотности частицы и газа, k_{01} и k_{02} , E_1 и E_2 , Q_1 и Q_2 – предэкспоненциальные множители, энергии активации и тепловые эффекты гетерогенной и гомогенной реакций, соответственно, R – универсальная газовая постоянная, T_p , T_g – температуры частицы и газа, C_{ox} и C_f – концентрации окислителя и горючего, α_p и α_w – коэффициенты теплоотдачи частица-газ и газ-стенка, соответственно, N_0 – число частиц в единице объема, S_p и S_w – поверхности частицы и стенки, V_w – объем сосуда.

Скорость накопления тепла для частицы определяется соотношением между скоростью тепловыделения в результате гетерогенной реакции и скоростью теплообмена частицы с газом. Прогрев газа задается скоростями тепловыделения гомогенной газофазной реакции, теплообмена частицы - газ и газ - стенка сосуда, соответственно.

Учет гомогенной газофазной реакции приводит к значительному увеличению числа параметров в сравнении с моделью чисто гетерогенного воспламенения газозвесей. Для сокращения числа параметров задачи, а также для выявления наиболее существенных различий воспламенения однокомпонентной и гибридной газозвесей частиц, приведем систему (1) – (3) к безразмерному ви-

ду. С использованием тождества Франк-Каменецкого [5] для зависимости скоростей реакций от температуры: $k_0 e^{\frac{-E}{RT}} \equiv k_0 e^{\frac{-E}{RT_*}} e^{\frac{\theta}{1+\beta\theta}}$ и безразмерных переменных:

$$\theta_p = \frac{E}{RT_*^2}(T_p - T_*), \quad \theta_g = \frac{E}{RT_*^2}(T_g - T_*), \quad \theta_w = \frac{E}{RT_*^2}(T_w - T_*); \quad \tau = \frac{t}{t_*},$$

где $t_* = \frac{RT_*^2}{E_1} \frac{c_p^p r_p \rho_p}{3Q_1 k_{01} e^{\frac{-E_1}{RT_*}} C_{ox}}$ получим:

$$\frac{d\theta_p}{d\tau} = e^{\frac{\theta_p}{1+\beta\theta_p}} - \frac{\theta_p - \theta_g}{\varkappa}; \quad (4)$$

$$\frac{d\theta_g}{d\tau} = c \left(\frac{Q_{21}}{\tau_{21}} e^{\frac{\varepsilon_{21}\theta_p}{1+\beta\theta_p}} \eta_f^0 - \frac{B}{1-B} \frac{\theta_g - \theta_w}{A \cdot \varkappa} + \frac{B}{1-B} \frac{\theta_p - \theta_g}{\varkappa} \right), \quad (5)$$

с начальными условиями

$$\tau = 0: \quad \theta_p = \theta_p^0; \quad \theta_g = \theta_g^0; \quad \theta_w = \theta_w^0 = const. \quad (6)$$

Здесь:

$$\varkappa = \frac{E_1}{RT_*^2} \frac{Q_1 k_{01} e^{\frac{-E_1}{RT_*}} C_{ox}}{\alpha_p}; \quad \gamma = \frac{RT_*^2}{E_1} \frac{c_p^p \rho_g}{Q_1 C_{ox}}; \quad \beta = \frac{RT_*}{E_1}; \quad \tau_{21} = \frac{3 \rho_g}{r_p \rho_p} \frac{k_{01} e^{\frac{-E_1}{RT_*}}}{k_{02} e^{\frac{-E_2}{RT_*}} C_{ox}};$$

$$\eta_f^0 = \frac{C_f^0}{C_{ox}^0}; \quad \varepsilon_{21} = \frac{E_2}{E_1}; \quad A = N_0 V_w \frac{\alpha_p S_p}{\alpha_w S_w}; \quad B = \frac{m_p N_0}{m_p N_0 + \rho_g}; \quad c = \frac{c_p^p}{c_p^g}; \quad Q_{21} = \frac{Q_2}{Q_1};$$

\varkappa – параметр Семенова, задает отношение характерных времен теплоотвода и реакции на поверхности индивидуальной частицы взвеси [5]; β – параметр Аррениуса, описывает температурную чувствительность системы; B – относительная массовая концентрация частиц твердого горючего в газозвеси; A – "коллективный параметр", определяет степень взаимного влияния частиц взвеси в процессе ее саморазогрева. Наиболее важными параметрами, которые отличают предлагаемую в настоящей работе модель воспламенения гибридной газозвеси теории от модели воспламенения газозвесей частиц горючих, реагирующих гетерогенно [3], являются начальное содержание газообразного горючего в системе η_f^0 , соотношение энергий активации гомогенной и гетерогенной реакций – ε_{21} и безразмерное характерное время гомогенной реакции горючего газа – τ_{21} .

Легко видеть, что при $\eta_f^0 = 0$ модель, описываемая системой уравнений (4) – (6), отвечает случаю, рассмотренному в работе [3], где были определены критические условия воспламенения газозвеси частиц твердого горючего в газообразном окислителе, реагирующих по гетерогенному механизму.

Система уравнений (4) – (6) решалась численно методом Рунге-Кутты 4-го порядка с автоматическим подбором шага интегрирования. Метод был протес-

тирован сопоставлением результатов расчетов с данными по воспламенению газозвеси частиц, которые были получены в работах [3, 4].

2. Критические условия самовоспламенения.

Большое количество проведенных параметрических расчетов показало, что вблизи предела воспламенения гибридной газозвеси температуры газа и частиц во взвеси близки, а скорости их изменения достаточно малы до тех пор, пока в системе не накапливается количество тела, достаточное для теплового взрыва. Такой, как бы стационарный, характер реагирования наблюдали для однокомпонентной газозвеси Б.И. Хайкин и Э.Н. Руманов и назвали его "квазистационарным режимом" [3]. Это позволяет воспользоваться методом диаграммы Н.Н. Семенова для нахождения критических условий воспламенения гибридной газозвеси.

Для упрощения получаемых соотношений будем полагать, что температурная зависимость скорости реакции описывается приближением Д.А. Франк-Каменецкого ($\beta \rightarrow 0$), а в качестве температуры T_* выберем T_w , т.е. $\theta_w = 0$. Тогда исходная динамическая система (4) – (5) сводится к системе уравнений

$$\frac{d\theta_p}{d\tau} = e^{\theta_p} - \frac{\theta_p - \theta_g}{\alpha}; \quad (6)$$

$$\frac{d\theta_g}{d\tau} = c \left(\frac{Q_{21}}{\tau_{21}} \eta_f^0 e^{\varepsilon_{21}\theta_p} - \frac{B}{1-B} \frac{\theta_g}{A \cdot \alpha} + \frac{B}{1-B} \frac{\theta_p - \theta_g}{\alpha} \right); \quad (7)$$

и координаты стационарного состояния θ_g^{st} и θ_p^{st} динамической системы (6) – (7) задаются уравнениями:

$$e^{\theta_p^{st}} - \frac{\theta_p^{st} - \theta_g^{st}}{\alpha} = 0; \quad (8)$$

$$\frac{Q_{21}}{\tau_{21}} e^{\varepsilon_{21}\theta_p^{st}} \eta_f^0 - \frac{B}{1-B} \frac{\theta_g^{st}}{A \cdot \alpha} + \frac{B}{1-B} \frac{\theta_p^{st} - \theta_g^{st}}{\alpha} = 0. \quad (9)$$

Исключая из системы (8) – (9) θ_g^{st} , получим уравнение, которое связывает стационарную безразмерную температуру частицы θ_p^{st} и значения параметров задачи

$$\frac{A}{(1+A)} \frac{1-B}{B} \frac{Q_{21}}{\tau_{21}} \eta_f^0 e^{\varepsilon_{21}\theta_p^{st}} + e^{\theta_p^{st}} = \frac{\theta_p^{st}}{(1+A)\alpha}. \quad (10)$$

Очевидно, что левая часть уравнения (10) описывает скорость тепловыделения в единице объема гибридной газозвеси – q^+ , а правая – скорость теплоотвода – q^- . Критическому условию воспламенения отвечает касание кривых

q^+ и q^- на диаграмме Семенова $q^+ = q^-$, $\frac{dq^+}{d\theta} = \frac{dq^-}{d\theta}$, т.е. уравнение (10)

должно быть дополнено соотношением

$$\frac{A}{1+A} \frac{1-B}{B} \frac{Q_{21}}{\tau_{21}} \varepsilon_{21} \eta_f^0 e^{\varepsilon_{21} \theta_p^{st}} + e^{\theta_p^{st}} = \frac{1}{(1+A) \alpha}. \quad (11)$$

На пределе воспламенения значение параметра Семенова α_{kr}^{hd} и максимально возможное значение стационарного разогрева частицы в гибридной газозвеси θ_p^{kr} определяются из решения системы (10) – (11). Несложные алгебраические преобразования системы (10) – (11) дают:

$$\alpha_{kr}^{hd} = \frac{1}{(1+A) \left(1 + \varepsilon_{21} \frac{A}{1+A} \cdot \frac{1-B}{B} \cdot \frac{Q_{21} \eta_f^0}{\tau_{21}} \cdot e^{(\varepsilon_{21}-1) \theta_p^{kr}} \right) e^{\theta_p^{kr}}}. \quad (12)$$

В предельном случае, когда $\eta_f^0 = 0$, решение (10) – (11) совпадает с критическими условиями воспламенения однокомпонентной газозвеси частиц, окисляющихся по линейному закону [3]:

$$\theta_p^{kr} = 1; \quad \alpha_{kr}^d = \frac{1}{(1+A) \cdot e}. \quad (13)$$

3. Результаты расчета.

Известно [3], что для однокомпонентной газозвеси максимальная безразмерная температура на верхней границе существования стационарного режима $\theta_p^{kr} = 1$ и не зависит от параметров дисперсной системы. Из анализа решения трансцендентных уравнений (10) - (11) следует, что для гибридной газозвеси значение θ_p^{kr} зависит как от параметров частиц и гетерогенной реакции, так и от концентрации горючего газа, теплоты и скорости гомогенной реакции. Для гибридных смесей θ_p^{kr} лежит в интервале $1 \leq \theta_p^{kr} \leq 1/\varepsilon_{21}$, когда $\varepsilon_{21} \leq 1$, и $1/\varepsilon_{21} \leq \theta_p^{kr} \leq 1$ при $\varepsilon_{21} \geq 1$ и с уменьшением параметра τ_{21} стремится к величине $\theta_p^{kr} = 1/\varepsilon_{21}$. Если $\varepsilon_{21} = 1$, тогда $\theta_p^{kr} = 1$ и, как для однокомпонентной газозвеси, не зависит от всех остальных параметров.

Расчеты показали, что связь максимального разогрева θ_p^{kr} на пределе воспламенения гибридной газозвеси и значений коллективного параметра газозвеси A , относительных массовых концентраций частиц горючего B и горючего газа η_f^0 , а также соотношений энергий активации ε_{21} , тепловых эффектов Q_{21} и характерных времен гомогенной и гетерогенной реакций τ_{21} может быть аппроксимирована в виде:

$$\theta_p^{kr} = \frac{1 + \frac{A}{1+A} \psi \cdot e^{\frac{\varepsilon_{21}-1}{\varepsilon_{21}}}}{1 + \varepsilon_{21} \frac{A}{1+A} \psi \cdot e^{\frac{\varepsilon_{21}-1}{\varepsilon_{21}}}}, \quad (14)$$

где

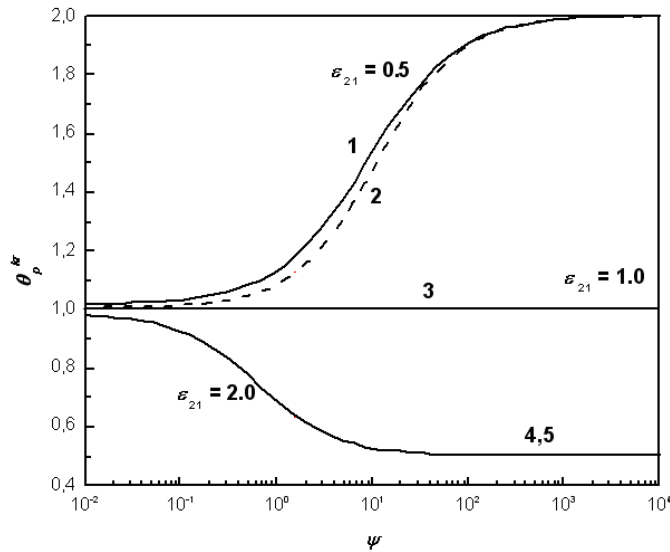


Рис. 1 Зависимость максимального разогрева на пределе воспламенения гибридной газовой смеси θ_p^{kr} от параметра ψ .

$\epsilon_{21} = 0.5$: 1 - графическое решение (10) - (11), 2 - формула (14).

$\epsilon_{21} = 2.0$: 4 - графическое решение (10) - (11), 5 - формула (14).

$$\psi = \frac{1 - B}{B} \cdot \frac{Q_{21} \eta_f^0}{\tau_{21}}.$$

Погрешность при использовании (14) для определения θ_p^{kr} в сравнении с данными графического решения системы трансцендентных уравнений (10) – (11) в диапазонах изменения параметров: $\epsilon_{21} = 0.5 \div 2.0$, $A = 1 \div 50$, $\psi = 10^{-2} \div 10^4$ не превышает 5.5%.

Примеры зависимости $\theta_p^{kr} = f(\psi)$ при различных ϵ_{21} для $A = 1$ приведены на рис. 1. Заметим, что с ростом величины параметра A характер этих зависимостей сохраняется, а численные значения θ_p^{kr} меняются достаточно слабо. Расчет показал, что для $\psi < 10^{-1}$ значение $\theta_p^{kr} \rightarrow 1$, для $\psi > 10^2$ $\theta_p^{kr} \rightarrow 1/\epsilon_{21}$.

На рис. 2 сопоставление расчетные данные, полученные численным интегрированием исходной системы уравнений модели (4) – (6), графическим решением системы уравнений (10) и (11), а также расчетом по (12) в приближении (14). Как видим, влияние параметра β на результаты расчета достаточно слабое в полном соответствии с предсказаниями классической теории теплового взрыва [5]. В случае, когда численное решение системы (4) – (6) проводилось с использованием приближенного разложения экспоненты по Франк-Каменецкому ($\beta = 0$), расчетные критические значения параметра Семенова и значения, определяемые из графического решения уравнений (10) и (11) совпадали с большой точностью (отличия не превышали 0.1%).

С использованием параметра ψ выражение (12) можно представить в виде:

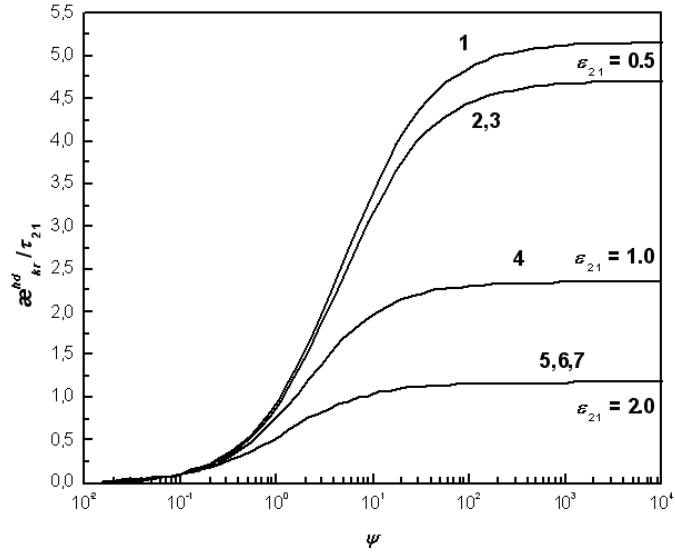


Рис. 2 Зависимость α_{kr}^{hd} от параметра ψ . $A = 1$

$\epsilon_{21} = 0.5$: 1 - численное решение ($\beta = 0.042$), 2 - графическое решение ($\beta = 0$),
3 - формула (12) в приближении (14).
 $\epsilon_{21} = 2.0$: 5 - численное решение ($\beta = 0.042$), 6 - графическое решение ($\beta = 0$),
7 - формула (12) в приближении (14).

$$\alpha_{kr}^{hd} = \frac{1}{(1+A)e^{\theta_p^{kr}} + \epsilon_{21}A \cdot \psi \cdot e^{\epsilon_{21}\theta_p^{kr}}}, \quad (15)$$

который наглядно демонстрирует характер зависимостей критического значения параметра Семенова α_{kr}^{hd} от параметров задачи. Из (15) легко видеть, что в области значений $\psi \ll 1$, где $\theta_p^{kr} \rightarrow 1$, условия воспламенения гибридной и однокомпонентной газовзвесей практически совпадают (см. выражение (13)). Второй асимптотой рассматриваемой зависимости в области $\psi \gg 1$, когда $\theta_p^{kr} \rightarrow 1/\epsilon_{21}$, служит критическое условие теплового взрыва газовой компоненты

дисперсной системы [5] $\alpha_{kr}^g = \frac{1}{e}$ ($\alpha_{kr}^g \equiv \epsilon_{21}A \cdot \psi \cdot \alpha_{kr}^{hd}$). Очевидно, что при $\psi \ll 1$

$\alpha_{kr}^{hd} \sim \frac{1}{1+A}$ и практически не зависит от соотношения энергий активации гетерогенной и газофазной реакций, тогда как для $\psi \gg 1$ α_{kr}^{hd} обратно пропорционально A и ϵ_{21} .

Наибольший интерес с точки зрения предмета настоящей работы представляет переходная область по параметру ψ : $10^{-1} < \psi < 10^2$, где вклады обеих параллельных реакций в накопление тепла в ходе предвзрывного разогрева гибридной газовзвеси проявляются наиболее отчетливо. Влияние степени активированности этих реакций ϵ_{21} на условия самовоспламенения гибридной газовзвеси в переходной области иллюстрирует рис. 3.

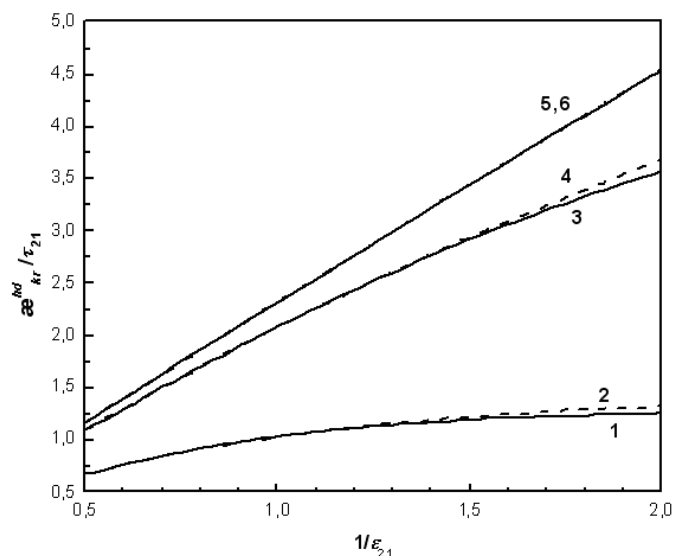


Рис. 3 Зависимость α_{kr}^{hd} от параметра ε_{21} . $A = 1$
 Кривые 1, 3, 5 - графическое решение системы уравнений (10) и (11).
 Кривые 2, 5 - формула (12) в приближении (14).
 1, 2 - $\psi = 1.57$; 3, 4 - $\psi = 15.7$.

По мере роста тепловой гомогенизации гибридной газозвеси, т.е с увеличением значения коллективного параметра A , влияние теплоотвода в стенку на критические значения параметра Семенова так же, как и для однокомпонентной газозвеси, постепенно снижается (см. рис 4). Но в рассматриваемой переходной области воспламенение гибридной системы существенно облегчено в сравнении с однокомпонентной.

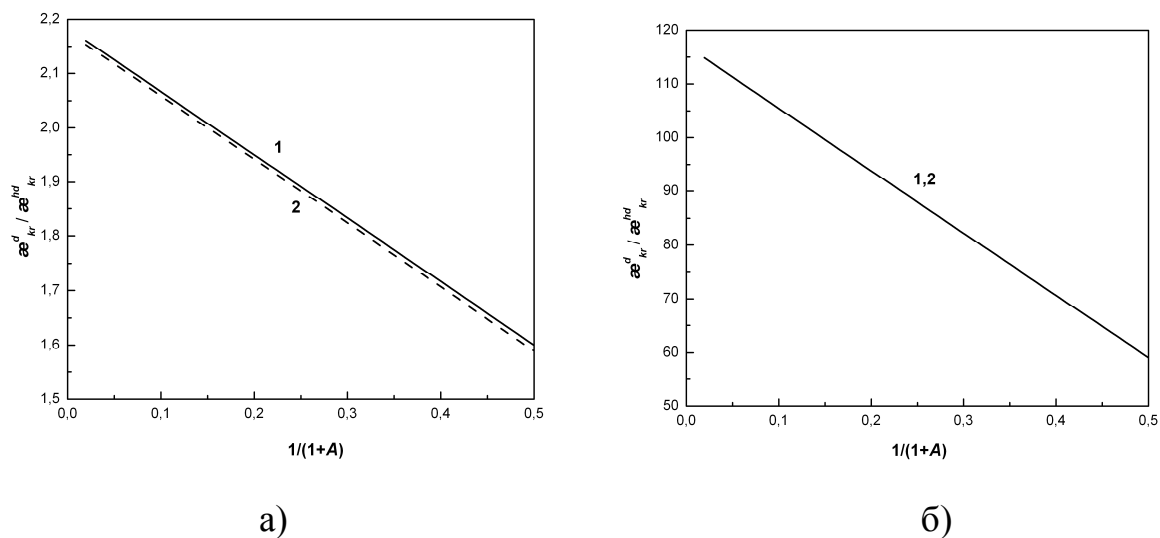


Рис. 4 Зависимость α_{kr}^{hd} от параметра A . $\varepsilon_{21} = 0.74$
 1 - графическое решение системы уравнений (10) и (11),
 2 - формула (12) в приближении (14).
 а - $\psi = 1.57$; б - $\psi = 157.0$.

В заключение отметим, что подстановка аппроксимационной формулы (14) в выражение (15) дает возможность относительно просто, с вполне приемлемой для практических расчетов точностью, рассчитывать значение α_{kr}^{hd} на пределе самовоспламенения гибридной газозавеси в широком диапазоне вариации ее параметров. (Результаты расчетов, выполненных с использованием аппроксимационной формулы (14) нанесены на рис. 1 – 4 пунктирными кривыми.) Проверка на большом количестве вариантов (более 250) показала, что ошибка при этом не превышает 6%.

Работа выполнена при поддержке МОН Украины, проект 437/2009-2011.

Литература:

1. *Hertzberg, M., & Cashdollar K. L.* Introduction to dust explosions // *Industrial Dust Explosions: Proc. Symposium on Industrial Dust Explosions*. Ballimore: ASTM STP 958, 1987. – P. 5-32.
2. *Клячко Л. А.* Воспламенение совокупности частиц при гетерогенной реакции // *Теплотехника*. – 1966. – № 8. – С. 65 - 68.
3. *Руманов Э. Н., Хайкин Б. И.* Критические условия самовоспламенения совокупности частиц // *Физика горения и взрыва*. – 1969. – № 1. – С. 129-136.
4. *Лисицын В. И., Руманов Э. Н., Хайкин Б. И.* О периоде индукции при воспламенении совокупности частиц // *Физика горения и взрыва*. – 1971. – № 1. – С. 3 - 9.
5. *Франк-Каменецкий Д. А.* Диффузия и теплопередача в химической кинетике. – М.: Наука, 1987. – 491 с.

Вовчук Я.І., Рогульська О.С., Сторчак І.В.

Про запалення гібридного газозавесу часток

АНОТАЦІЯ

У роботі в рамках двохтемпературного підходу розглянуте запалення газозавесу часток твердого пального в суміші газоподібних пального й окислювача – гібридного газозавесу. Отримані аналітичні умови samozapalювання цієї системи. Досліджено залежності критичного значення параметра Семенова α_{kr}^{hd} від основних параметрів гібридного газозавесу. Показано, що присутність горючого газу в гібридному газозавесу приводить до істотного зменшення α_{kr}^{hd} в порівнянні з однокомпонентним газозавесом, тобто до "полегшення" умов запалення. Запропонована апроксимована формула для визначення максимального докритичного розігріву системи, що дозволяє із прийнятною для практичних розрахунків точністю, розраховувати значення α_{kr}^{hd} в широкому діапазоні варіації її параметрів.

Vovchyk Ya.I., Rogylskaya O.S., Storchak I.V.

On the ignition of the particle hybrid gas-suspension

SUMMARY

In the framework of the two-temperature approach the ignition of gas-suspended particles of solid fuel in a mixture of gaseous fuel and oxidizer - the hybrid gas suspension is considered. Analytical conditions of spontaneous ignition of the system are received. The dependences of the critical value of the Semenov parameter α_{kr}^{hd} versus main parameters of hybrid gas suspension are explored. It is shown that the presence of combustible gas in a hybrid gas mixture leads to a significant decrease of α_{kr}^{hd} compared to the one-component gas suspension, i.e. to "facilitation" of the ignition conditions. Approximation formula for determining of the maximum subcritical heating of the system is proposed. This formula allows at acceptable accuracy for practical calculations to estimate the value of α_{kr}^{hd} at the wide range of parameters variation.