

## МОДЕЛИРОВАНИЕ РАСПРОСТРАНЕНИЯ ПЛАМЕНИ В СМЕСИ ГОРЮЧИХ ГАЗОВ И ЧАСТИЦ

А. Ю. Крайнов

Томский государственный университет, 634050 Томск

Сформулирована физико-математическая модель распространения пламени по газовзвеси, состоящей из смеси газов (окислителя, горючего и инертного) и частиц конденсированного вещества, гетерогенно реагирующих с окислителем. На основе численного анализа получены зависимости скорости распространения пламени от параметров, характеризующих массовую концентрацию частиц, их размер, энергию активации гетерогенной реакции на поверхности частиц, тепловой эффект гетерогенной реакции и массообмен частиц. В зависимости от соотношения параметров дисперсной фазы скорость распространения пламени в такой среде может увеличиваться в несколько раз по сравнению со скоростью пламени в незапыленной газовой смеси либо уменьшаться, и тогда влияние частиц аналогично влиянию инертной дисперсной фазы.

В технологических процессах порошковой металлургии, в химической технологии, в производстве пищевых продуктов с использованием процесса сушки, в угледобывающих отраслях промышленности часто встречаются газовзвеси различной природы: взвеси инертных частиц в инертном газе; взвеси частиц, способных к экзотермическому либо эндотермическому химическому реагированию, в инертном газе; газовзвеси, в которых химическое тепловыделение может происходить в газовой фазе и на поверхности частиц. Наибольшую опасность представляют газовзвеси, способные к химическому тепловыделению. Экспериментальное исследование таких сред затруднено. Теоретическое моделирование макрокинетики реагирования позволяет выяснить основные закономерности процесса в различных условиях и опасные последствия воспламенения, проанализировать способы предупреждения возгорания и способы тушения очагов воспламенения и горения.

В настоящей работе исследовано распространение фронта горения по газовзвеси, в которой экзотермические химические реакции идут в газовой фазе и на поверхности частиц дисперсной фазы с одним из компонентов газовой фазы. Такие процессы, в частности, происходят при горении метановоздушной смеси со взвешенными в ней частицами угольной пыли.

Рассматривается полубесконечная газовзвесь, состоящая из смеси газов (окислителя, горючего и инертного), в которой равномерно взвешены мелкие частицы вещества, способно-

го гетерогенно реагировать с одним из компонентов газовой смеси. Предполагается, что реакция на поверхности частиц идет с окислителем; газодисперсная смесь неподвижна; частицы имеют одинаковый размер и сферическую форму; теплообмен между частицами и газом происходит по закону Ньютона; скорость химических реакций в газе и на поверхности частиц зависит от температуры по закону Аррениуса; продуктами гетерогенной реакции на частицах являются газы; все химические реакции идут без возрастания объема; термическим расширением газовой смеси пренебрегаем; на границе области  $x = 0$  расположен источник воспламенения (горячая стенка), а газовзвесь расположена на расстоянии  $l$  от горячей стенки.

Математическая модель горения такой смеси построена на основе теплодиффузионной модели горения газов [1], дополненной уравнениями энергии и выгорания дисперсной фазы с учетом межфазного теплового и массового взаимодействия. Подобные модели, учитывающие двухтемпературность среды, успешно применяли для моделирования самовоспламенения [2, 3] и зажигания газовзвесей [4–8], для исследования вопросов пожаротушения и огнепреграждения [9–13]. С учетом сделанных допущений уравнения, описывающие процессы в такой смеси, имеют следующий вид: уравнение энергии газовой фазы —

$$c_g \rho_g \frac{\partial T_g}{\partial t} = \lambda_g \frac{\partial^2 T_g}{\partial x^2} + Q \rho_{g,0}^2 Y_1 Y_2 k_0 \exp\left(-\frac{E_g}{RT_g}\right) - S \alpha N(T_g - T_k) + (c_g T_g - c_k T_k) N \frac{dm}{dt}; \quad (1)$$

уравнение энергии частицы —

$$c_k m \frac{dT_k}{dt} = S\alpha(T_g - T_k) - q \frac{dm}{dt}; \quad (2)$$

уравнения сохранения массы горючего и окислителя в газовой фазе —

$$\rho_{g,0} \frac{\partial Y_1}{\partial t} = D\rho_{g,0} \frac{\partial^2 Y_1}{\partial x^2} - \rho_{g,0}^2 Y_1 Y_2 k_0 \exp\left(-\frac{E_g}{RT_g}\right), \quad (3)$$

$$\rho_{g,0} \frac{\partial Y_2}{\partial t} = D\rho_{g,0} \frac{\partial^2 Y_2}{\partial x^2} - \alpha_f \rho_{g,0}^2 Y_1 Y_2 k_0 \exp\left(-\frac{E_g}{RT_g}\right) + N \frac{dm}{dt}; \quad (4)$$

уравнение изменения массы частицы —

$$\frac{dm}{dt} = -Sj\rho_{g,0}Y_{2,0}, \quad j = \frac{k(T_k)\beta_m}{k(T_k) + \beta_m} \frac{Y_2}{Y_{2,0}}, \quad (5)$$

$$k(T_k) = k_{0,k} \exp\left(-\frac{E_k}{RT_k}\right), \quad \beta_m = \frac{\text{Nu}_D D}{d};$$

уравнение сохранения массы среды —

$$\frac{d}{dt}(\rho_g + mN) = 0, \quad (6)$$

$$\rho_g = \rho_{g,0}Y_1 + \rho_{g,0}Y_2 + \rho_{in}.$$

Начальные условия:

$$T_k(x, 0) = T_g(x, 0) = T_0; \quad \rho_g(x, 0) = \rho_{g,0}; \quad (7)$$

$$Y_1(x, 0) = Y_{1,0}; \quad Y_2(x, 0) = Y_{2,0}; \quad m(x, 0) = m_0;$$

граничные условия:

$$x = 0: \quad T_g = T_a; \quad \frac{\partial Y_1}{\partial x} = \frac{\partial Y_2}{\partial x} = 0; \quad (8)$$

$$x = \infty: \quad \frac{\partial T_g}{\partial x} = \frac{\partial Y_1}{\partial x} = \frac{\partial Y_2}{\partial x} = 0.$$

Здесь  $t$  — время;  $x$  — координата;  $T$  — температура;  $\rho$  — плотность;  $c$  — удельная теплоемкость;  $Q\rho_{g,0}$  — теплота химической реакции в газе,  $q$  — на поверхности частиц;  $E$  — энергия активации химической реакции;  $k_0$ ,  $k_{0,k}$  — предэкспоненциальные множители в законе Аррениуса для гомогенной и гетерогенной реакций;  $m$  — масса частицы;  $d$ ,  $S$  — диаметр и площадь поверхности частицы;  $N$  — число частиц в единице объема;  $\lambda$ ,  $\alpha$ ,  $D$ ,  $\beta_m$  — коэффициенты теплопроводности, теплообмена, диффузии, массообмена;  $R$  — универсальная газовая постоянная;  $Y_1$ ,  $Y_2$  — концентрации горючего и окислителя в газовой фазе;  $\text{Nu}_D$  —

диффузионное число Нуссельта;  $\alpha_f$  — стехиометрический коэффициент. Индексы: 1 — горючий газ, 2 — окислитель,  $in$  — инертная часть исходной газовой смеси и продукты горения,  $g$  — газовая фаза,  $k$  — дисперсная фаза, 0 — начальные условия.

Для уменьшения количества параметров задачи систему уравнений (1)–(8) записали в безразмерной форме. В качестве масштабов выбраны следующие величины:

времени —

$$t_* = \frac{c_g R T_a^2 / E_g}{Q\rho_{g,0}k_0 \exp(-E_g/RT_a)Y_{1,0}Y_{2,0}}$$

(характерное время химической реакции в газе);

координаты —

$$x_* = \sqrt{\frac{\lambda_g}{c_g \rho_{g,0}}} t_*$$

(толщина зоны химической реакции);

температуры —

$$\Delta T_* = \frac{R T_a^2}{E_g},$$

где  $T_a$  — адиабатическая температура горения газовой смеси. В безразмерной форме система уравнений (1)–(8) принимает вид

$$\bar{\rho}_g \frac{\partial \theta_g}{\partial \tau} = \frac{\partial^2 \theta_g}{\partial \xi^2} + C_1 C_2 \exp \frac{\theta_g}{1 + \beta \theta_g} - \frac{B}{\chi} \bar{r}^2 (\theta_g - \theta_k) + \left( \theta_g - C \theta_k + \frac{1 - C}{\beta} \right) \frac{B}{C} \frac{d\bar{r}^3}{d\tau}, \quad (9)$$

$$\bar{r}^3 \frac{d\theta_k}{d\tau} = \frac{\bar{r}^2}{\chi} (\theta_g - \theta_k) - \frac{\bar{r}^2}{\chi} \bar{j}, \quad (10)$$

$$\frac{\partial C_1}{\partial \tau} = \text{Le} \frac{\partial^2 C_1}{\partial \xi^2} - \gamma C_1 C_2 \exp \frac{\theta_g}{1 + \beta \theta_g}, \quad (11)$$

$$\frac{\partial C_2}{\partial \tau} = \text{Le} \frac{\partial^2 C_2}{\partial \xi^2} - \alpha_{f,1} \gamma C_1 C_2 \exp \frac{\theta_g}{1 + \beta \theta_g} + \alpha_{f,2} \frac{B}{C} \frac{d\bar{r}^3}{d\tau}, \quad (12)$$

$$\frac{d\bar{r}^3}{d\tau} = -\frac{\bar{r}^2}{\chi} \bar{j} \mu \text{Le} C \frac{\text{Nu}_D}{\text{Nu}_T} Y_{2,0},$$

$$\bar{j} = C_2 \frac{\exp(E\theta_k/(1 + \beta\theta_k))}{1 + \mu \bar{r} \exp(E\theta_k/(1 + \beta\theta_k))}, \quad (13)$$

$$\frac{d}{d\tau} \left( \bar{\rho}_g + \frac{B}{C} \bar{r}^3 \right) = 0. \quad (14)$$

Начальные условия:

$$\begin{aligned} \theta_k(\xi, 0) = \theta_g(\xi, 0) = -1/\gamma; \quad \bar{\rho}_g(\xi, 0) = 1; \\ C_1(\xi, 0) = 1; \quad C_2(\xi, 0) = 1; \quad \bar{r}(\xi, 0) = 1; \end{aligned} \quad (15)$$

граничные условия:

$$\begin{aligned} \xi = 0: \quad \theta_g = 0; \quad \frac{\partial C_1}{\partial \xi} = \frac{\partial C_2}{\partial \xi} = 0; \\ \xi = \infty: \quad \frac{\partial \theta_g}{\partial \xi} = \frac{\partial C_1}{\partial \xi} = \frac{\partial C_2}{\partial \xi} = 0. \end{aligned} \quad (16)$$

Здесь

$$\begin{aligned} \theta = \frac{E_g}{RT_a^2}(T - T_a), \quad C = \frac{c_k}{c_g}, \\ C_1 = \frac{Y_1}{Y_{1,0}}, \quad C_2 = \frac{Y_2}{Y_{2,0}}, \\ \tau = \frac{t}{t_*}, \quad \xi = \frac{x}{x_*}, \quad \bar{r} = \frac{r}{r_0}, \\ \alpha_{f,1} = \alpha_f \frac{Y_{1,0}}{Y_{2,0}}, \quad \alpha_{f,2} = \frac{1}{Y_{2,0}}; \quad E = \frac{E_k}{E_g}; \end{aligned}$$

$Nu_T$  — тепловое число Нуссельта,  $Le$  — число Льюиса.

В результате обезразмеривания в системе уравнений (9)–(16) появились безразмерные параметры, имеющие конкретный физический смысл: параметр

$$\chi = \frac{c_k \rho_k r_0}{3\alpha t_*}$$

характеризует размер частиц в газовзвеси,

$$B = N \frac{c_k \rho_k}{c_g \rho_g} \frac{4\pi r_0^3}{3}$$

— массовую концентрацию дисперсной фазы; параметры

$$\gamma = \frac{c_g}{Q} \frac{RT_a^2}{E_g} \frac{1}{Y_{1,0}}, \quad \beta = \frac{RT_a}{E_g}, \quad Le = \frac{D}{\lambda_g/(c_g \rho_g)}$$

традиционные для теории горения газов [1];

$$\mu = \frac{k_{0,k} \exp(-E_k/RT_a)}{Nu_D D} 2r_0$$

характеризует массообмен частицы (отношение скорости химической реакции к скорости массообмена [14]),

$$\delta = \frac{q \rho_k E_g k_{0,k} \exp(-E_k/RT_a) Y_{1,0}}{\alpha RT_a^2}$$

— теплообмен частицы (отношение скорости тепловыделения в химической реакции к скорости теплообмена [14]). Параметры  $\delta$  и  $\mu$  определяют режим протекания гетерогенной химической реакции на поверхности частиц (диффузионный или кинетический режимы реагирования [14]).

Систему уравнений (9)–(16) решали численно по неявной разностной схеме методом прогонки на сетке, сгущающейся в зоне интенсивных химических реакций. В расчетах физико-химические параметры газовой фазы взяты близкими к параметрам метановоздушной смеси [1], а параметры вещества дисперсной фазы — к параметрам древесного угля [15, 16]. Смесь газов предполагалась трех видов: с избытком окислителя ( $Y_{1,0} = 0,0349$ ,  $Y_{2,0} = 0,15504$ ), стехиометрическая смесь ( $Y_{1,0} = 0,0402$ ,  $Y_{2,0} = 0,15504$ ), с недостатком окислителя ( $Y_{1,0} = 0,045$ ,  $Y_{2,0} = 0,15504$ ). Определяющие безразмерные параметры, вычисленные на основе этих данных, имеют следующие значения:  $\gamma = 0,1$ ,  $\beta = 0,05$ ,  $Le = 1$ ,  $Nu_D/Nu_T = 1$ ,  $E = 0,33$ ,  $C = 2,5$ . В расчетах варьировались параметры дисперсной фазы (массовая концентрация, размер частиц, энергия активации химической реакции).

Для исключения влияния способа иницирования на горение газовзвеси в численных экспериментах горение газовзвеси инициировали волной горения газа. Предполагалось, что граница газовзвеси находится на расстоянии  $l$  от источника воспламенения и участок  $0 < x < l$  заполнен горючей газовой смесью без примеси частиц (это задавалось ступенчатым изменением  $N$ :  $N(x) = 0$  при  $0 < x < l$ ,  $N(x) = N$  при  $x > l$ ). Расстояние  $l$  выбирали так, чтобы после зажигания газовой смеси волна горения вышла на стационарный режим распространения в газовой смеси, свободной от частиц горючего. Затем стационарно распространяющийся фронт горения встречает на своем пути запыленную область, взаимодействует с ней, при этом происходит перестройка структуры фронта горения, и фронт, пройдя некоторое расстояние, выходит на стационарный режим распространения пламени по газовзвеси.

Перед фронтом реакции в зоне прогрева идет разогрев частиц и газа. В зависимости от размера частиц их температура либо близка к температуре газа (при малых значениях  $\chi$ ), либо отстает от нее (при больших  $\chi$ ). По мере прогрева газа и частиц перед фронтом горения в смеси начинается химическая реакция. В зависимости от соотношения параметров дисперсной и газовой фаз, опережающей будет либо реакция в газе, либо реакция на поверхности частиц. На рис. 1 представлена структура фронта горения газовзвеси для двух