

УДК 544.45

ГИБРИДНЫЕ СИСТЕМЫ. II. АДИАБАТИЧЕСКИЙ ПЕРИОД ИНДУКЦИИ**Я.И. Вовчук, О.С. Рогульская, О.В. Симулина**

Институт горения и нетрадиционных технологий

Одесского национального университета им. И.И. Мечникова

ул. Дворянская, 2, г.Одесса, 65082 Украина, e-mail: incomb@ukr.net, incomb@onu.edu.ua

Аннотация

В работе с использованием теоретической модели, основанной на двухтемпературном приближении, рассмотрено влияние параметров гибридной газозвеси частиц твердого горючего на величину адиабатического периода индукции. В первом приближении без учета выгорания твердого и газообразного горючих, а также окислителя, проведено численное решение нестационарной задачи с целью определения зависимостей времени задержки воспламенения гибридной газозвеси от основных параметров дисперсной системы. В результате компьютерного эксперимента выявлены основные механизмы и физические закономерности процессов, которые определяют воспламенение такой гибридной смеси. Получена и проанализирована теоретическая зависимость периода индукции гибридной газозвеси от массовой концентрации пыли в ней для условий, которые отвечают методике проведения экспериментального определения времен задержки воспламенению газозвеси частиц. Расчет, проведенные в широком диапазоне изменения параметров взвеси, показал, что присутствие во взвеси газообразного горючего не изменяет характер зависимости адиабатического периода индукции от массовой концентрации твердого горючего для гибридной смеси. При этом, адиабатический период индукции смеси твердого и газообразного горючих всегда значительно меньше, чем для однокомпонентной взвеси частиц горючего. Вариация соотношения характерных времён тепловыделения поверхностной и газофазной химических реакций приводит к значительному изменению количественных значений времени задержки воспламенения τ_{ad}^{hd} . Обнаружено, что при разных значениях отношения энергий активации гомогенной и гетерогенной реакций ($\varepsilon_{21} < 1$ или $\varepsilon_{21} > 1$), зависимости индукционного периода от содержания твердого горючего гибридной и однокомпонентной взвесей не только сильно отличаются количественно, но могут быть противоположными друг другу.

Ключевые слова: гибридная газозвесь, твердое горючее, окислитель, реакция

Список принятых обозначений

r_p - радиус частицы;
 c_p - удельная теплоемкость;
 ρ - плотность;
 m - масса;
 k_0 - предэкспоненциальный множитель;
 E - энергия активации;
 Q - тепловой эффект, реакции;
 R - универсальная газовая постоянная;
 T - температура;
 α - коэффициент теплообмена;
 λ - коэффициент теплопроводности;
 S - площадь поверхности;
 V - объем;
 N_0 - число частиц в единице объема;
 ox - окислитель;
 gf - газообразное горючее;
 sf - твердое горючее;
 p - частица твердого горючего;
 d - взвесь частиц;

g - газ;
 w - стенка;
 hd - гибридная газозвесь;
 0 - начальные условия;
 1 - гетерогенная реакция;
 2 - гомогенная реакция.

Введение

Критические условия воспламенения гибридной газозвеси частиц - смеси диспергированного твердого и газообразного горючих с газообразным окислителем - как условия, при которых исчезает возможность стационарного теплового режима, были получены в работе [1] решением стационарной задачи методом диаграммы Н.Н. Семенова. Анализ зависимостей максимального докритического стационарного разогрева газозвеси и критического значения критерия Семенова показал, что в присутствии газообразного горючего тепловой взрыв в гибридной дисперсной сис-

теме может происходить даже в таких условиях, когда каждый отдельный горючий компонент воспламениться не может. Этот анализ позволил также выявить область параметров системы, где параллельные гомогенная и гетерогенная реакции определяют ее воспламенение. При этом наиболее удобным параметром для определения границ этой области может служить соотношение характерных времен тепловыделения гетерогенной и гомогенной реакций в объеме газозвеси.

Настоящая работа посвящена результатам численного решения нестационарной задачи с целью определения зависимостей времени задержки воспламенения гибридной газозвеси от ее основных параметров.

Теоретическая модель

Подробное описание теоретической модели и принятых в ней допущений было при-

ведено в работе [1]. Здесь отметим лишь, что наиболее существенными из них было использование двухтемпературного приближения для описания газозвеси и пренебрежение выгоранием твердого и газообразного горючих, а также окислителя, на стадии предвоспламенительного разогрева. В безразмерной форме система уравнений этой модели имеет вид

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

$$\frac{1-B}{B} \frac{d\theta_g}{d\tau} = \tau_{21} e^{\frac{\varepsilon_{21}\theta_g}{1+\beta\theta_g}} - \frac{\theta_g - \theta_w}{A\varepsilon} + \frac{\theta_p - \theta_g}{\varepsilon}$$

с начальными условиями

$$\tau = 0 : \theta_p = \theta_p^0 ; \theta_g = \theta_g^0 ; \theta_w = \theta_w^0 = const. \quad (2)$$

Здесь безразмерные переменные:

$$\theta_p = \frac{E_1}{RT_*^2} (T_p - T_*); \theta_g = \frac{E_1}{RT_*^2} (T_g - T_*); \theta_w = \frac{E_1}{RT_*^2} (T_w - T_*); \tau = \frac{t}{t_*},$$

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

и безразмерные параметры:

$$\varepsilon = \frac{E_1}{RT_*^2} \frac{Q_1 k_{01} e^{-\frac{E_1}{RT_*}}}{\alpha_p}; \beta = \frac{RT_*}{E_1}; A = N_0 V_w \frac{\alpha_p S_p}{\alpha_w S_w}; B = \frac{c_p^p m_p N_0}{c_p^p m_p N_0 + c_p^g \rho_g};$$

$$\varepsilon_{21} = \frac{E_2}{E_1}; \tau_{21} = \frac{r_p}{3} \frac{\rho_p}{N_0 m_p} \frac{Q_2}{Q_1} \frac{k_{02} e^{-\frac{E_2}{RT_*}}}{k_{01} e^{-\frac{E_1}{RT_*}}};$$

где: ε - критерий Семенова для частицы горючего,

β - число Аррениуса,

A - коллективный параметр, который определяет степень взаимного теплового влияния частиц взвеси в процессе ее саморазогрева [2],

B - относительная массовая теплоемкость частиц твердого горючего в газозвеси,

ε_{21} - отношение энергий активации гомогенной и гетерогенной реакций,

τ_{21} - отношение характерных времен тепловыделения этих реакций в объеме газозвеси.

Очевидно, что при стремлении параметра τ_{21} к нулю система (1) идентична системе уравнений, описывающей предложенную Л.А. Клячко [3] теоретическую модель воспламенения газозвеси, с использованием без-

размерных параметров [4]. Легко показать, что при $B = 0$, т.е. в случае, когда в горючей смеси отсутствует твердое горючее, система уравнений (1) сводится к классическому уравнению нестационарной модели теплового взрыва Н.Н. Семенова [5].

Результаты численного расчета и аналитического анализа критических условий воспламенения гибридной газозвеси [6,7] показали, что для смесей твердого и газообразного горючих с газообразным окислителем между двумя предельными условиями, когда воспламенение определяется либо гетерогенной, либо гомогенной реакциями, можно выделить область значений параметра τ_{21} , где в ходе предвзрывного разогрева наиболее отчетливо проявляются вклады обеих параллельных реакций $0,1 \leq \tau_{21} \leq 1,0$. Ниже представлены данные, полученные именно в этой области вариации τ_{21} .

Система уравнений (1) решалась численно¹ при начальных условиях: $\theta_p^0 = \theta_g^0 = \theta_w = 0$, что отвечает самовоспламенению гибридной смеси. В теории теплового взрыва известно (см. например, [9,10]), что для сильно активированных реакций влияние параметра β как на критические условия, так и на значения индукционного периода, весьма слабое. Это справедливо и для гибридных дисперсных систем – количественные данные приведены в работе [7]. Поэтому расчеты проводились в приближении Франк-Каменецкого для разложения экспоненты ($\beta = 0$).

Результаты и обсуждение

В области выше предела воспламенения, когда скорость накопления тепла в системе намного превышает скорость теплоотвода, можно пренебречь теплоотдачей. В этих условиях время задержки воспламенения стремится к предельному значению, которое называется адиабатическим периодом индукции.

Из теоретического анализа нестационарной задачи теплового взрыва гомогенной смеси для реакции нулевого порядка в пренебре-

жении распределением температур по объему [9-10] следует, что размерное значение адиабатического периода индукции такой смеси "зависит только от кинетических, но не тепловых характеристик" [9] такой системы. Безразмерное значение адиабатического периода индукции есть константа. С использованием обозначений, принятых в настоящей работе, выражение для этой константы имеет вид:

$$\tau_{ad}^g = \frac{t_{ad}^g}{t_{ad}^*} = 1,$$

где $t_{ad}^* = \frac{c_p^g \rho_g}{Q_2} \frac{RT_w^2}{E_2} k_0 2e^{-\frac{E_2}{RT_w}}$ - адиабатический масштаб времени [10].

Анализ воспламенения однокомпонентной взвеси частиц твердого горючего [2,4,8] свидетельствует, что саморазогрев такой дисперсной системы в предвоспламенительный период, обусловленный коллективным эффектом, проявляется отчетливо только тогда, когда поверхность тепловыделения, равная суммарной поверхности гетерогенно реагирующих частиц, много больше поверхности теплоотвода для газозвеси, т.е. поверхности стенок сосуда содержащего взвесь (значение коллективного параметра $A \gg 1$). В этом случае внешний теплоотвод оказывает очень слабое влияние на самовоспламенение газозвеси и процесс можно рассматривать как адиабатический. Тогда величина безразмерного адиабатического периода индукции взвеси обратно пропорциональна относительной массовой теплоемкости твердого горючего $\tau_{ad}^d = \frac{1}{B}$ и ли-

бо не зависит от параметра α , если $\alpha \ll \frac{B}{1-B}$, либо эта зависимость весьма слаба, когда величина значения B малы².

Обратимся теперь к данным компьютерного эксперимента по влиянию параметров

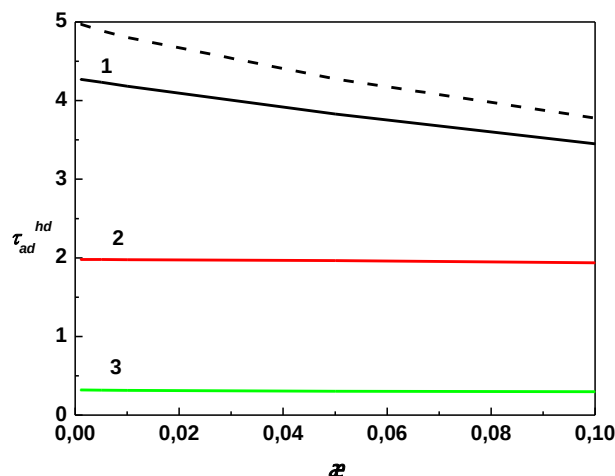
¹ Для решения системы уравнений (1) использовался метод Рунге-Кутты 4-го порядка с автоматическим подбором шага интегрирования [1].

² Для малых значения параметра B приближенная зависимость адиабатического периода индукции однокомпонентной взвеси от параметра α предложена в работе [4]:

$$\tau_{ad}^d = \frac{1}{B} (1 + \alpha \ln \alpha - 2\alpha) - \alpha \ln \alpha.$$

гибридной газовой смеси на величину адиабатического периода индукции τ_{ad}^{hd} при ее самовоспламенении.

Рассмотрим прежде всего функциональную зависимость $\tau_{ad}^{hd} = f(\alpha)$ - рис. 1.



1 - $\tau_{21} = 0,1$; 2 - $\tau_{21} = 1,0$; 3 - $\tau_{21} = 10,0$.

Рис. 1 – Зависимость безразмерного адиабатического периода индукции гибридной газовой смеси от критерия Семёнова α . $A \rightarrow \infty$. $B = 0,2$. $\varepsilon_{21} = 1,45$.

Как видим, и для гибридной газовой смеси влияние изменения значения критерия Семёнова α на величину периода индукции пренебрежимо мало.

Сколько-нибудь заметно оно проявляется только на границе исследованной области вариации параметра τ_{21} , где во время предвоспламенительного разогрева преобладает вклад гетерогенной реакции. (Результаты численного расчета адиабатического времени индукции при самовоспламенении однокомпонентной газовой смеси τ_{ad}^d на этом и всех последующих рисунках приведены для сравнения пунктирной линией).

Как и следовало ожидать, тепловой вклад гомогенной реакции при воспламенении смеси горючей пыли с горючим газом оказывается весьма существенным.

Представленная на рис. 2 зависимость периода индукции гибридной газовой смеси от параметра τ_{21} демонстрирует, что даже в том случае, когда гомогенная реакция активирована слабее, чем гетерогенная $\varepsilon_{21} < 1$ (кривая 1), она заметно ускоряет разогрев системы (расчетное значение адиабатического периода ин-

дукции для однокомпонентной газовой смеси частиц τ_{ad}^d отмечено на рисунке пунктиром).

Если же параметр $\varepsilon_{21} > 1$ (кривая 2), времена задержки воспламенения гибридной и однокомпонентной взвесей могут отличаться практически на порядок.

Как отмечено выше, безразмерный адиабатический период индукции однокомпонентной взвеси обратно пропорционален относительной массовой теплоемкости твердого горючего $\tau_{ad}^d = \frac{1}{B}$ [4].

Компьютерный эксперимент, проведенный в достаточно широком диапазоне изменения параметров гибридной газовой смеси ($\varepsilon_{21} = 0,2 \div 4,0$; $\tau_{21} = 10^{-3} \div 10^3$), показал, что присутствие во взвеси частиц газообразного горючего не изменяет характер этой зависимости - рис. 3 - и для гибридной смеси адиабатический период индукции обратно пропорционален относительному содержанию твердого горючего.

Вариация параметров τ_{21} и ε_{21} приводит только к изменению количественных значений τ_{ad}^{hd} .

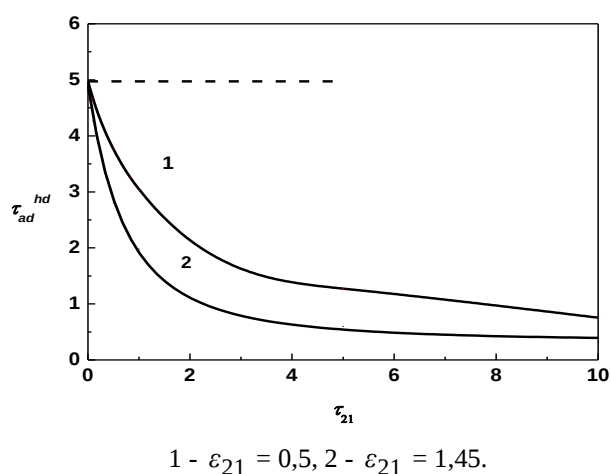
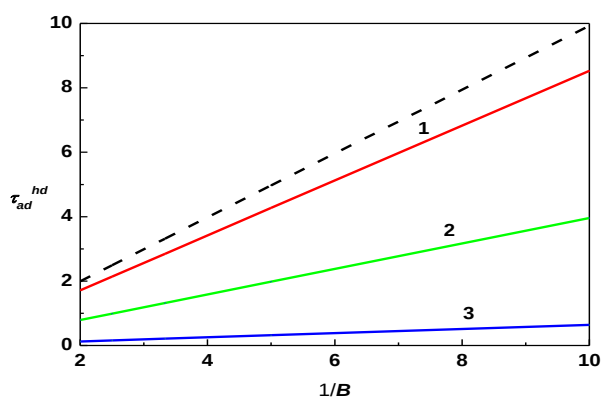
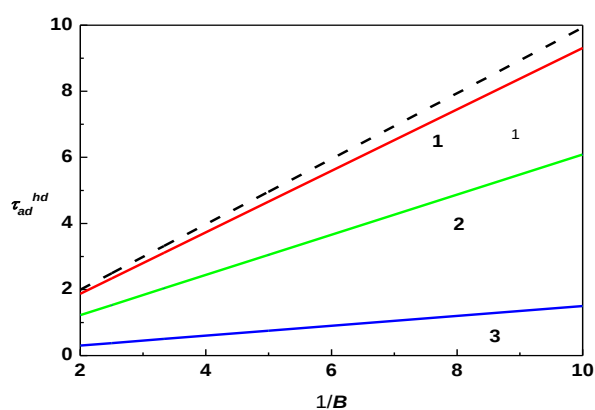


Рис. 2 – Зависимость безразмерного адиабатического периода индукции гибридной газозвеси от соотношения характерных времен тепловыделений газовой и гетерогенной реакций τ_{21} .

$$A \rightarrow \infty, B = 0,2, \alpha = 1,07 \cdot 10^3.$$



$$1 - \tau_{21} = 0,1; 2 - \tau_{21} = 1,0; 3 - \tau_{21} = 10.$$

Рис. 3 – Зависимость безразмерного адиабатического периода индукции гибридной газозвеси от относительной теплоемкости твердого горючего. $A \rightarrow \infty$.

Нагляднее всего зависимость индукционного периода гибридной газозвеси от соотношения энергий активации гомогенной и гетерогенной реакций в широком диапазоне изменения относительной теплоемкости твердого горючего B , с учетом описанной выше связи $\tau_{ad}^{hd} \sim 1/B$, можно продемонстрировать, если

представить ее в координатах $\tau_{ad}^{hd} * B = f(\varepsilon_{21})$ - рис. 4. Своеобразная, S-образная форма этой зависимости отражает изменения динамики предвзрывного разогрева системы из-за перераспределения тепловых вкладов гомогенной и гетерогенной реакций, обусловленного вариацией соотношения их энергий активации при фиксированных значениях параметра τ_{21} .

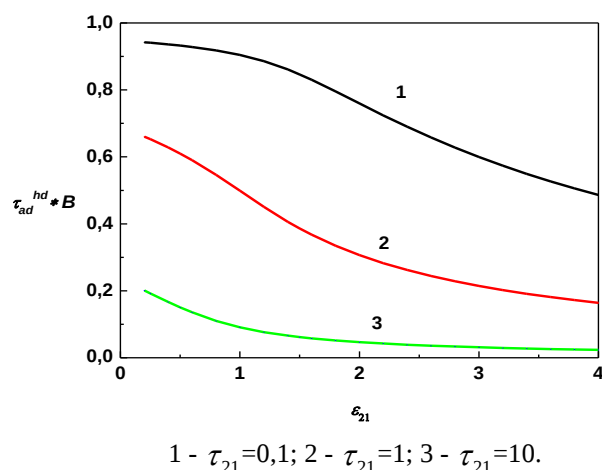


Рис. 4 – Зависимость безразмерного адиабатического периода индукции гибридной газозвеси от соотношения энергий активации гомогенной и гетерогенной реакций. $A \rightarrow \infty$.

В заключение остановимся на анализе зависимости адиабатического периода индукции гибридной взвеси от массовой концентрации горючей пыли в ней $C_{sf} = m_p N_0$. Представленные выше зависимости времен задержки самовоспламенения были получены общепринятым методом компьютерного эксперимента, в котором вариация одного из безразмерных параметров системы выполнялась при фиксированных значениях остальных параметров. В то же время известно (см. например, [11,12]), что при экспериментальном исследовании характеристик теплового взрыва газозвесей частиц конкретного горючего их массовая концентрация является одним из наиболее удобных для варьирования в опыте параметров системы. Из числа принятых в настоящей работе безразмерных параметров величина C_{sf} входит в параметры B и τ_{21} . Поэтому расчет, выполненный при сохранении постоянных значений размерных параметров системы таких как размер и форма сосуда, размер частиц взвеси, концентрация горючего газа в ней, полное давление в системе, теплофизические и кинетические характеристики компо-

нент горючей смеси, проведен для значений $B = var$, $\tau_{21} = var$, соответствующих изменению C_{sf} . Из рис. 5 видно, что адиабатические времена индукции самовоспламенения гибридной (кривые 1,2) и однокомпонентной газозвесей (пунктирная кривая) не только сильно отличаются количественно.

В зависимости от соотношения энергий активации газовой и поверхностной реакций, их качественное поведение может либо совпадать, либо быть прямо противоположным.

Когда гетерогенная реакция активирована сильнее $\varepsilon_{21} < 1$, а потому ускоряется быстрее при разогреве гибридной системы, адиабатический период индукции с ростом концентрации частиц уменьшается, как и для однокомпонентной газозвеси, так как с увеличением концентрации частиц возрастает поверхность тепловыделения взвеси.

При обратном соотношении $\varepsilon_{21} > 1$, когда саморазогрев системы инициируется реакцией газового компонента гибридной смеси, затраты тепла на разогрев конденсированной

составляющей с ростом ее содержания увеличиваются настолько, что не могут быть ком-

пенсированы интенсификацией тепловыделения, и задержка воспламенения растет.

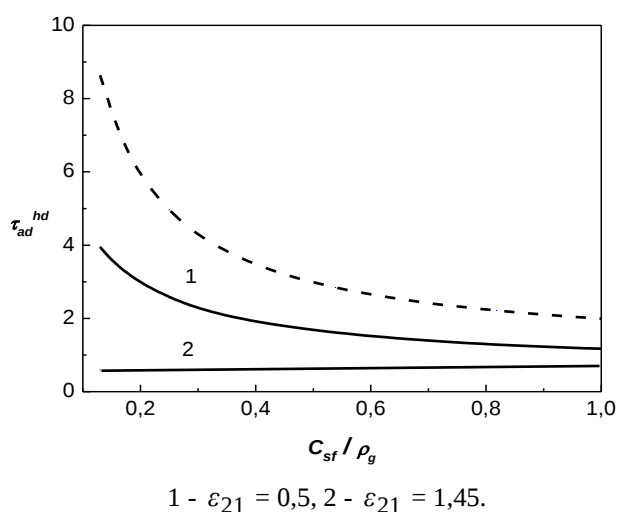


Рис. 5 – Зависимость безразмерного адиабатического ($A \rightarrow \infty$) периода индукции гибридной газозвеси от относительной массовой концентрации твердого горючего C_{sf} .

Выводы

Адиабатический период индукции смеси твердого и газообразного горючих существенно меньше, чем для взвеси частиц индивидуального горючего. Такое снижение времени индукции обеспечивается дополнительным вкладом в саморазогрев взвеси в результате гомогенной реакции. При этом, чем более активирована гомогенная реакция, тем раньше проявляется ее тепловой вклад в накопление тепла в гибридной газозвеси, а потому время индукции сокращается.

Принципиально возможно, что в опытах по самовоспламенению гибридной газозвеси в адиабатических условиях, в отличие от однокомпонентной газозвеси, может наблюдаться слабое увеличение периода индукции с ростом концентрации твердого горючего. Это может происходить, если время индукции определяется тепловыделением газообразного горючего.

Литература

1. Вовчук В.Я., Рогульская О.С., Симулина О.В. Воспламенение гибридной системы. I. Критические условия. // Горение и плазмохимия. – 2013. Том 11. № 2. – С. 121-128.
2. Руманов Э.Н., Хайкин Б.И. Критические условия самовоспламенения совокупности частиц. // ФГВ. – 1969. – Том 5.

№ 1. – С. 129-136.

3. Клячко Л.А. Воспламенение совокупности частиц при гетерогенной реакции. // Теплотехника. – 1966. – №8. – С. 65-68.
4. Лисицын В.И., Руманов Э.Н., Хайкин Б.И. О периоде индукции при воспламенении совокупности частиц. // Физика горения и взрыва. – 1971. – Том 7. №1. – С. 3-9.
5. Семенов Н.Н. Тепловая теория горения и взрывов. // УФН. – 1940. – Том 5. 23, вып. 3. – С. 251-292.
6. Вовчук Я.И., Рогульская О.С. Критические условия воспламенения гибридных газозвесей. // Труды V Российской национальной конференции по теплообмену. Москва, МЭИ. – 2010. – Том 3. – С. 157-160.
7. Вовчук В.Я., Рогульская О.С., Сторчак И.В. О воспламенении гибридной газозвеси частиц. // Физика аэродисперсных систем. – 2010. – №47. – С. 81-91.
8. Золотко А.Н., Вовчук Я.И., Шевчук В.Г., Полетаев Н.И. Воспламенение и горение газозвесей. // Физика горения и взрыва. – 2005. – Том 41. №3. – С.3-14.
9. Франк-Каменецкий Д.А. Диффузия и теплопередача в химической кинетике. – М.: Наука, 1987. – 491 с.
10. Мержанов А.Г., Барзыкин В.В., Абрамов В.Г. Теория теплового взрыва: от Н.Н. Семенова до наших дней // Химическая физика. – 1996. – Том 15. № 6. – С. 3 - 44.
11. Недин В.В., Нейков О.Д., Алексеев

А.Г., Кривцов В.А. Взрывоопасность металлических порошков. – Киев: Наукова Думка, 1971. – 140 с.

12. Золотко А.Н., Клячко Л.А., Копейка

К.М. и др. Воспламенение газовзвесей частиц. //Физика горения и взрыва. – 1977. –Том 13. №1. – С. 38-44.

HYBRID SYSTEMS. II. ADIABATIC DELAY TIME

Ya.I. Vovchuk, O.S. Rogulskaya, O.V. Simulina

Mechnikov Odessa National University
Institute of Combustion and Advanced Technologies
Ukraine, Dvoryanskaya str., 2, Odessa, 65082

Abstract

The influence of hybrid gas suspension parameters on the value of the adiabatic induction period was considered. In a first approximation without taking into account burnup of solid and gaseous fuels and oxidizer the numerical solution of the nonstationary problem was provided. The purpose of research was to define an ignition delay time dependency from the basic parameters of hybrid gas suspension. As a result of the computer experiment basic governing physical mechanisms of such disperse system ignition were identified. Theoretical dependence of hybrid dust delay time from solid fuel concentration was obtained and analyzed. Such calculations are the most compatible with commonly used experimental technique in dust ignition investigations. The calculation showed that the presence of gaseous fuel in a dust does not change the dependence of the adiabatic induction period from the mass concentration of the solid fuel. It is shown that the adiabatic induction period for hybrid mixtures is significantly less than for single-component dust. It is found that for different values of the activation energies ratio for parallel homogeneous and heterogeneous reactions ($\varepsilon_{21} < 1$ or $\varepsilon_{21} > 1$), the dependences of induction period from the solid fuel content for hybrid and single-component dusts may be different not only quantitatively, but may be opposite.

ГИБРИДТІК ЖҮЙЕ. II. ИНДУКЦИЈНЫҢ АДИАБАТИКАЛЫҚ ПЕРИОДЫ

Я. В. Вовчук, О. С. Рогульская, О. В. Симулина

Жану институты және дәстүрлі емес технология
Мечников атындағы Одесса Ұлттық университеті, Украина, г. Одесса, 65082 Дворянская көш. 2
e-mail: incomb@ukr.net, incomb@onu.edu.ua

Аннотация

Қатты отынды индукцияның адиабатикалық периоды кезіндегі шамасына гибридік газдың шамаларын екі температураға жуықтау негізінде теориялық моделдер қарастырылады. Бірінші жуықтауда жанған қатты отын мен газдың, оттегінің жануын ескермей, газды гибридік жүйеде тұтанудың уақытын стационарлы емес сандық жүйеде есептелінді. Нәтижесінде компьютерлік эксперименттер кезінде процестердің физикалық заңдылығы мен негізгі механизмдері анықталды. Гибридік жүйенің құрамы, сапасы, мөлшеріне және тағы басқа шамаларға тәуелді екендігі теория жүзінде табылды және анықталды.