

Гетерогенное горение пары взаимодействующих частиц с произвольной формой поверхности

© Е.Р. Щукин, Г.Ю. Яламов

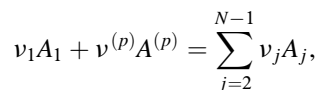
Московский педагогический университет,
107005 Москва, Россия
e-mail: in.info@g23.relcom.ru

(Поступило в Редакцию 30 января 2002 г. В окончательной редакции 6 мая 2002 г.)

Проведено теоретическое описание гетерогенного горения двух неподвижных взаимодействующих частиц с произвольной формой поверхности при быстром протекании химической реакции, когда концентрацию молекул окислителя у поверхности частицы можно считать равной нулю. Задача решена при произвольной зависимости коэффициентов молекулярного переноса от температуры в случае диффузионного режима переноса молекул в окрестности частиц. Найденные аналитические формулы в частных случаях позволяют непосредственно оценивать процесс горения одиночных сфероидальных частиц и взаимодействующих сферических частиц. Показано, что при одинаковых объемах заметно быстрее сгорают сильно вытянутые и сплюснутые частицы. Сближение частиц значительно сказывается на времени сгорания меньшей частицы, когда ее размеры много меньше размеров более крупной частицы.

Гетерогенное горение происходит в тех случаях, когда молекулы газообразной среды вступают в химическую реакцию с молекулами твердой частицы. Гетерогенное горение может происходить, например в топках теплоэнергетических установок [1,2], в зонах просветления аэродисперсных систем лазерным излучением [3–6]. Аэрозольные частицы могут иметь произвольную форму поверхности и находиться на произвольных расстояниях друг от друга. Поэтому значительный интерес представляет рассмотрение вопросов, связанных с изучением влияния формы поверхности частиц и их сближения на скорость и время горения. В одной из последних работ [7] получена скорость высокотемпературного горения одиночной сфероидальной частицы углерода, когда коэффициенты переноса принимаются не зависящими от температуры. Поэтому возникла необходимость рассмотреть теорию горения частиц произвольной формы при значительных перепадах температуры в их окрестности, когда коэффициенты молекулярного переноса зависят от температуры. Также представляет интерес влияние взаимодействия пары частиц с произвольной формой поверхности на их гетерогенное горение.

Рассмотрим сначала свободное горение двух частиц, при котором внутри частиц не происходит внутреннее тепловыделение и можно пренебречь влиянием лучистого теплообмена на процесс горения. Горение двух взаимодействующих частиц с произвольной формой поверхности происходит в N -компонентной газовой смеси. Химическая реакция протекает в соответствии со схемой



где коэффициенты ν_j равны по абсолютной величине стехиометрическим коэффициентам реакции ($\nu_1 > 0$, $\nu^{(p)} > 0$; $\nu_j < 0$, $j = 2, \dots, N-1$); индексом p обозначен стехиометрический коэффициент вещества частицы.

При окислении атомов углеродной частицы молекулами кислорода до окиси углерода ($O_2 + 2C = 2CO$) символы A_1 , A_2 и $A^{(p)}$ обозначают молекулы кислорода O_2 , CO и C соответственно. На поверхности частицы относительная концентрация окислителя $C_1|_S = C_1^{(s)} = 0$. Перепады температуры в окрестности частицы могут быть значительными. Размеры частиц и расстояние между ними достаточно малы, чтобы можно было пренебречь влиянием гравитационной конвекции на процесс тепло- и массообмена. Горение частицы протекает в квазистационарном режиме. В их окрестности

$$\sum_{j=1}^{N-1} C_j \ll 1,$$

где $C_j = n_j/n$, $n = \sum_{j=1}^N n_j$, n_j — концентрации молекул газообразных компонентов.

При этом основным механизмом переноса молекул является молекулярная диффузия. Следует отметить, что при $C_1^{(s)} = 0$ сближение частиц и форма их поверхности оказывают наибольшее влияние на скорость горения.

При рассмотренных ограничениях в системе частицы–газообразная среда распределения C_j и температур газа T_e и частиц $T_i^{(f)}$ описываются системой уравнений (1) с граничными условиями (2), (3)

$$\operatorname{div} \mathbf{q}_j = 0, \quad \operatorname{div} \mathbf{q}_T^{(e)} = 0, \quad \operatorname{div} \mathbf{q}_T^{(f)} = 0, \quad (1)$$

$$C_1|_{S_f} = 0, \quad T_e|_{S_f} = T_i^{(f)}|_{S_f}, \quad \mathbf{q}_{\perp j}|_{S_f} = (\nu_j/\nu_1) \mathbf{q}_{\perp 1}|_{S_f}, \quad (2)$$

$$[L_p m_p (\nu^{(p)}/\nu_1) \mathbf{q}_{\perp 1}^{(e)} + \mathbf{q}_{\perp T}^{(e)}]|_{S_f} = \mathbf{q}_{\perp T}^{(f)}|_{S_f}, \\ C_j|_{\infty} = C_{j\infty}, \quad T_e|_{\infty} = T_{e\infty}, \quad (3)$$

где \mathbf{q}_j и $\mathbf{q}_T^{(e)}$, $\mathbf{q}_T^{(f)}$ — плотности потоков молекул и тепла; χ_e и $\chi_i^{(f)}$ — коэффициенты теплопроводности соответственно газа и частиц; индексом \perp обозначены проекции

векторов на нормали к поверхностям частиц; L_P — тепловой эффект химической реакции; m_P — масса молекул вещества частицы; верхний индекс $f = 1, 2$ обозначает номер частицы;

$$\mathbf{q}_j = -D_{jN} \nabla C_j, \quad \mathbf{q}_T^{(e)} = -\chi_e \nabla T_e, \\ \mathbf{q}_T^{(f)} = -\chi_i^{(f)} \nabla T_i^{(f)}. \quad (4)$$

Коэффициенты бинарной диффузии D_{jN} и теплопроводности χ_e зависят от T_e . Третье из граничных условий (2) и первое из граничных условий (3) учитывают соответственно стехиометрическую связь между плотностями потоков молекул и непрерывностью потока тепла. Решение граничной задачи (1)–(3) равно

$$C_j = \{C_{j\infty} - C_{1\infty} [v_j \psi_j(T_e) / v_1 \psi_1(T_{i0})]\},$$

$$\psi_T(T_e) = \psi_T(T_{i0}) U(x_k), \quad T_i^{(1)} = T_i^{(2)} = T_{i0} = \text{const}, \quad (5)$$

где x_k — координаты точек пространства;

$$\psi_j(T_e) = \int_{T_{e\infty}}^{T_e} (\chi_e / n D_{jN}) dT_e; \quad j = 1, \dots, N-1;$$

$$\psi_T(T_e) = \int_{T_{e\infty}}^{T_e} \chi_e dT_e. \quad (6)$$

Значения T_{i0} находятся в ходе решения алгебраического уравнения

$$\psi_1(T_{i0}) = L_P m_P (v^{(p)} / v_1) C_{1\infty}. \quad (7)$$

Таким образом, протекающее при $C_1^{(s)} = 0$ квазистационарное свободное горение рассматриваемых частиц вне зависимости от формы их поверхности, размеров и расстояния между поверхностями происходит при одной и той же температуре частиц.

Значения $U(x_k)$ определяются в ходе решения граничной задачи

$$\Delta U = 0, \quad U|_{S_f} = 1, \quad U|_{\infty} = 0, \quad (8)$$

где Δ — оператор Лапласа.

Определив величину T_{i0} , значения плотностей потоков \mathbf{q}_j , \mathbf{q}_T и полных потоков молекул $Q_j^{(f)}$ и тепла $Q_T^{(f)}$, отводимых от поверхности частиц, можно определить с помощью формул

$$\mathbf{q}_j = \frac{v_j}{v_1} \mathbf{q}_1, \quad \mathbf{q}_1 = -C_{1\infty} F_1(T_{i0}) \mathbf{q}_U, \\ \mathbf{q}_T = \Psi_T(T_{i0}) \mathbf{q}_U, \quad \mathbf{q}_U = -\nabla U, \quad (9)$$

$$Q_j^{(f)} = \frac{v_j}{v_1} Q_1^{(f)}, \quad Q_1^{(f)} = -C_{1\infty} F_1(T_{i0}) Q_U^{(f)},$$

$$Q_T^{(f)} = \Psi_T(T_{i0}) Q_U^{(f)}, \quad Q_U^{(f)} = - \oint_{S_f} \nabla U ds, \quad (10)$$

в которых ds_f — дифференциальный векторный элемент поверхности; $F_1(T_{i0}) = \Psi_T(T_{i0}) / \Psi_1(T_{i0})$.

Зная температуру T_{i0} и решив граничную задачу (8), скорость изменения массы частиц при известной форме их поверхности можно определить по формуле

$$\frac{dM_P^{(f)}}{dt} = m_P \frac{v^{(p)}}{v_1} Q_1^{(f)}, \quad (11)$$

где $M_P^{(f)} = \rho_P V_P^{(f)}$; ρ_P , $V_P^{(f)}$ — плотность и объем частицы; t — время.

Определяя изменение формы поверхности частиц и их объема, нужно учитывать выражение для нормальных проекций плотностей потоков молекул частиц, отводимых от поверхности частиц $\mathbf{q}_P^{(f)} = - (v^{(p)} / v_1) \mathbf{q}_{\perp 1}|_{S_f}$.

Решение граничной задачи (8) может быть в общем случае проведено численно и в ряде случаев аналитически (например, в случае одиночных частиц со сферической, сфероидальной и эллипсоидальной формой поверхности или двух взаимодействующих частиц). У сферической частицы радиуса R

$$U = R/r, \quad \nabla U = (-R/r^2) \mathbf{n}_r, \quad Q_U^{(1)} = 4\pi R, \quad (12)$$

где r — радиальная координата; \mathbf{n}_r — единичный вектор.

У вытянутых и сплюснутых одиночных сфероидальных частиц

$$U(\xi) = \ln \frac{\text{ch } \xi + 1}{\text{ch } \xi - 1} \Big/ \ln \frac{\text{ch } \xi_0 + 1}{\text{ch } \xi_0 - 1},$$

$$\nabla_{\xi} U = - \frac{2\mathbf{n}_{\xi}}{c \text{sh } \xi (\text{sh}^2 \xi + \sin^2 \eta)^{1/2} \ln((\text{ch } \xi_0 + 1)/(\text{ch } \xi_0 - 1))},$$

$$a > b;$$

$$U(\xi) = \frac{\text{arctg}(\text{sh } \xi)}{\text{arctg}(\text{sh } \xi_0)},$$

$$\nabla_{\xi} U = - \frac{2\mathbf{n}_{\xi}}{c \text{ch } \xi (\text{ch}^2 \xi - \sin^2 \eta)^{1/2} \text{arctg}(\text{sh } \xi_0)},$$

$$a < b;$$

$$Q_{U_0}^{(1)} = 4\pi c I(\xi_0);$$

$$I(\xi_0) = \frac{2}{\ln((\text{ch } \xi_0 + 1)/(\text{ch } \xi_0 - 1))}, \quad a > b;$$

$$I(\xi_0) = \frac{1}{\text{arctg}(\text{sh } \xi_0)}, \quad a < b. \quad (13)$$

Здесь a — длина полуоси, совпадающая с осью симметрии сфероид; b — длина второй полуоси; ξ , η , φ — сфероидальные координаты [8]; $c = \sqrt{|a^2 - b^2|}$; $a = c \text{ch } \xi_0$, $b = c \text{sh } \xi_0$, $a > b$; $a = c \text{sh } \xi_0$, $b = c \text{ch } \xi_0$, $a < b$.

В случае двух сферических частиц с радиусами R_1 и R_2

$$U(\xi, \eta) = U_1(\xi, \eta) + U_2(\xi, \eta),$$

$$\begin{aligned}
 U_{k=1,2}(\xi, \eta) &= \sqrt{2(\operatorname{ch} \xi - \cos \eta)} \\
 &\times \sum_{n=0}^{\infty} d_n^{-1} \left[\left(\operatorname{sh}(-1)^k (\xi_{2^{2-k}} - \xi) \left(n + \frac{1}{2} \right) \right) \right. \\
 &\times \left. \exp - \left(n + \frac{1}{2} \right) |\xi_k| \right] P_n(\cos \eta), \\
 Q_U^{(f)} &= 4\pi R_f \Theta_f, \quad \Theta_f = \Theta_{f,1} - \Theta_{f,2}, \quad \Theta_{f,1} = \Psi_f \operatorname{sh} |\xi_f|, \\
 \Theta_{f,2} &= \psi_3 \operatorname{sh} |\xi_f|, \quad d_n = \operatorname{sh} \left(n + \frac{1}{2} \right) (\xi_1 + |\xi_2|), \\
 \Psi_f &= \sum_{h=0}^{\infty} \frac{1}{d} \exp \left[\left(|\xi_{2^{2-f}}| - |\xi_f| \right) \left(n + \frac{1}{2} \right) \right], \\
 \Psi_3 &= \sum_{h=0}^{\infty} \frac{1}{d_n} \exp \left[- \left(n + \frac{1}{2} \right) (\xi_1 + |\xi_2|) \right], \quad (14)
 \end{aligned}$$

где ξ, η, φ — бисферические координаты [8]; h — расстояние между центрами частиц; $\operatorname{ch} \xi_f = (h^2 + R_f^2 - R_{2^{2-f}}^2) / 2hR_f$, $\xi_1 > 0$, $\xi_2 < 0$; $P_n = P_n(\cos \eta)$ — полиномы Лежандра.

Проведенны с помощью найденных формул оценки показали, что при одинаковых объемах заметно быстрее сгорают сильно вытянутые и сплюснутые частицы. Это достаточно хорошо показывает ход приведенной на рис. 1 кривой зависимости коэффициента $\beta = Q_U^{(1)} / Q_{U_0}^{(1)}$ одиночных сфероидальных частиц от отношения a/R , в котором a — длина полуоси сфероидальной частицы, R — радиус сферической частицы одинакового со сфероидальной объема. При расчетах значения $Q_U^{(1)}$ и $Q_{U_0}^{(1)}$ находились по формулам (13) и (12) соответственно. Сближение частиц приводит к уменьшению скорости их сгорания (рис. 2). Это обстоятельство объясняется тем, что при сближении частиц уменьшается поток молекул

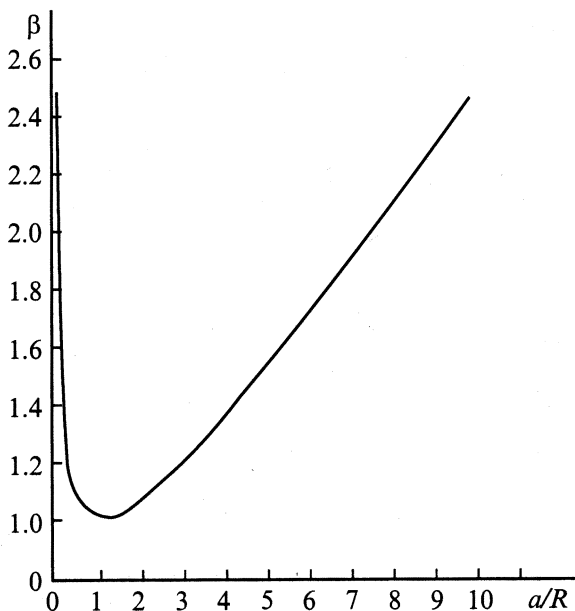


Рис. 1. Зависимость коэффициента β от a/R для сфероидальных частиц.

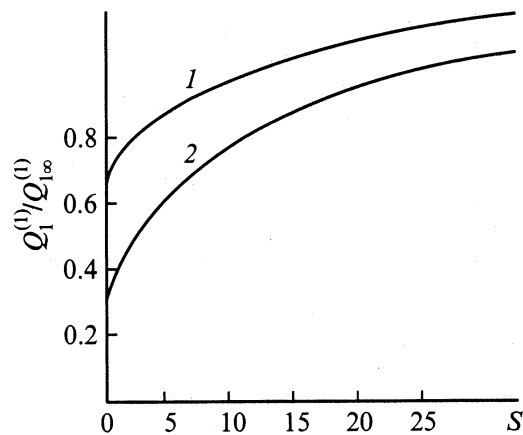


Рис. 2. Зависимость отношения потоков $Q_1^{(1)} / Q_{1\infty}^{(1)}$ от переменной S .

окислителя, подводимых к поверхности частицы. На рис. 2 приведены зависимости отношения $Q_1^{(1)} / Q_{1\infty}^{(1)}$ от параметра $S = (h - R_1 - R_2) / R_1$ ($Q_{1\infty}^{(1)} = Q_1^{(1)}$ при $h = \infty$). Кривая 1 показывает характер спадания $Q_1^{(1)}$ частиц при $R_1 = R_2$, а кривая 2 — при $R_2 = 4R_1$.

Влияние внутренних источников и лучистого теплообмена на скорость горения взаимодействующих частиц рассмотрим на примере горения двух сферических частиц с коэффициентом теплопроводности χ_i , много бóльшим коэффициента теплопроводности газообразной среды χ_e . При этом горение частиц происходит при фиксированных, не зависящих от углов η и φ температурах поверхностей $T_i^{(1)}$ и $T_i^{(2)}$. Описание горения частиц проведем в квазистационарном приближении, считая концентрации участвующих в химической реакции компонентов малыми. В этом случае так же, как и в случае свободного горения, распределения в окрестности частиц температуры T_e и относительных концентраций C_j описываются граничной задачей (15), (16)

$$\operatorname{div} \mathbf{q}_j = 0, \quad \operatorname{div} \mathbf{q}_T^{(e)} = 0, \quad (15)$$

$$\begin{aligned}
 C_1|_{S_f} &= 0, \quad T_e|_{S_f} = T_i^{(f)}, \quad \mathbf{q}_{\perp j}|_{S_f} = (v_j/v_1) \mathbf{q}_{\perp 1}|_{S_f}, \\
 C_j|_{\infty} &= C_{j\infty}, \quad T_e|_{\infty} = T_{e\infty}. \quad (16)
 \end{aligned}$$

Решение системы (15), (16) в случае малых перепадов T_e (когда можно пренебречь зависимостью χ_e от T_e) равно

$$C_j = C_{j\infty} - (v_j D_{1N} / v_1 D_{1N}) C_{1\infty} U(\xi, \eta),$$

$$T_e = T_{e\infty} + (T_i^{(1)} - T_{e\infty}) U_1(\xi, \eta) + (T_i^{(2)} - T_{e\infty}) U_2(\xi, \eta).$$

При этом

$$Q_j^{(f)} = -(v_j/v_1) n D_{1N} C_{1\infty} Q_U^{(f)},$$

$$Q_T^{(1)} = 4\pi R_1 \chi_e [(T_i^{(1)} - T_{e\infty}) \Theta_{1,1} - (T_i^{(2)} - T_{e\infty}) \Theta_{1,2}],$$

$$Q_T^{(2)} = 4\pi R_2 \chi_e [(T_i^{(2)} - T_{e\infty}) \Theta_{2,1} - (T_i^{(1)} - T_{e\infty}) \Theta_{2,2}].$$

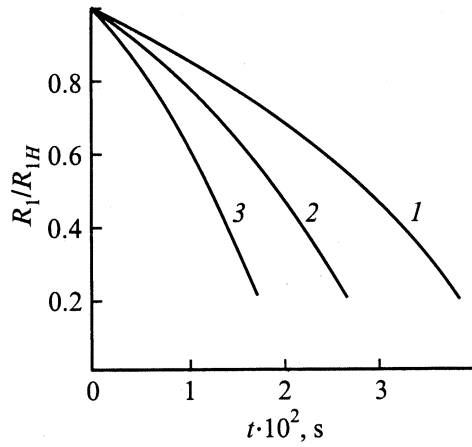


Рис. 3. Зависимость от времени безразмерного радиуса меньшей частицы.

Зависимость $T_i^{(f)}$ и R_f от времени t можно оценить в ходе решения следующей системы дифференциальных уравнений, включающей уравнения сохранения тепла и массы

$$\gamma_P M_P^{(f)} \frac{dT_i^{(f)}}{dt} = \Delta_f - Q_T^{(f)} - L_P m_P (v^{(p)}/v_1) Q_1^{(f)} - Q_L^{(f)},$$

$$\frac{dM_P^{(f)}}{dt} = (v^{(p)}/v_1) m_P Q_1^{(f)}, \quad (17)$$

где Δ_f — тепло, выделяющееся в объемах частиц в единицу времени; $Q_L^{(f)}$ — тепло, отводимое от поверхности частиц за счет лучистого теплообмена; γ_P — удельная теплоемкость частиц.

При больших перепадах T_e система уравнений (15), (16) допускает решение в аналитическом виде при малом расстоянии между поверхностями частиц, когда $(h - R_1 - R_2) \ll R_f$. При этом температуры $T_i^{(f)}$ можно считать равными ($T_i^{(f)} = T_{i0}$) и распределения T_e и C_j находить по формулам (5). Температуру T_{i0} можно найти, проинтегрировав систему уравнений (18),

$$\sum_{f=1}^2 \Delta_f = \sum_{f=1}^2 \left[\gamma_P M_P^{(f)} \frac{dT_{i0}}{dt} + Q_T^{(f)} + L_P m_P (v^{(p)}/v_1) Q_1^{(f)} + Q_L^{(f)} \right],$$

$$\frac{dM_P^{(f)}}{dt} = (v^{(p)}/v_1) m_P Q_1^{(f)}. \quad (18)$$

В случае установившегося горения температуры T_{i0} и $T_i^{(f)}$ можно определить, полагая в (17) и (18) производные $dT_i^{(f)}/dt$ и dT_{i0}/dt равными нулю.

Проведенные с помощью уравнений (18) оценки показали, что сближение двух частиц с сильно отличающимися по величине радиусами может привести к значительному уменьшению времени сгорания меньшей из них. Это хорошо видно из приведенных на

рис. 3 кривых зависимости от времени t относительного радиуса R_1/R_{1b} углеродных частиц с плотностью $\rho = 2 \text{ g/cm}^3$. Время сгорания взвешенных в воздухе частиц оценивалось в поле излучения с интенсивностью $I = 4 \cdot 10^7 \text{ W/m}^2$ при факторах поглощения, равных единице. Кривые построены при начальном радиусе частиц $R_{1b} = 15 \mu\text{m}$, $R_{2b} = 50 \mu\text{m}$ и $h = R_{1b} + R_{2b}$ (кривая 1), $h = 2R_{2b}$ (кривая 2), $h = \infty$ (кривая 3).

Таким образом, в квазистационарном приближении проведено решение задач о свободном и осложненном внутренним тепловыделением горении одиночных и двух взаимодействующих неподвижных частиц с произвольной формой поверхности в случае быстрого протекания химической реакции на поверхности частицы. При этом установлено, что при рассмотренных условиях свободное горение протекает при постоянной, не зависящей от формы частиц и расстояния между ними температуре. Форма поверхности может оказать заметное влияние на скорость горения в случае сильно вытянутых и сплюснутых частиц. При сближении частиц может значительно уменьшиться скорость сгорания меньшей частицы, если ее радиус намного меньше радиуса большей частицы.

Список литературы

- [1] Основы практической теории горения / Под ред. В.В. Померанцева. Л.: Энергия, 1973. 263 с.
- [2] Вулс Л.А. Тепловой режим горения. М.: Госэнергоиздат, 1958.
- [3] Щукин Е.Р., Шулиманова З.Л., Яламов Ю.И. // ФГВ. 1982. № 4. С. 42–44.
- [4] Букатый В.И., Суторихин И.А., Шайдук А.М. // Тез. докл. II Всесоюз. совещания по распространению лазерного излучения в дисперсной среде. Обнинск, 1982. Ч. II. С. 141–144.
- [5] Букатый В.И., Косых О.А., Свердлов М.Ю. // ФГВ. 1985. № 4. С. 51–53.
- [6] Франк-Каменецкий Д.А. Диффузия и теплопередача в химической кинетике. М.: Наука, 1967. 492 с.
- [7] Головин А.М., Дегтев Ю.Г., Курятников В.В., Песочин В.Р. // ФГВ. 1994. Т. 30. № 1. С. 20–30.
- [8] Тихонов А.Н., Самарский А.А. Уравнения математической физики. М.: Наука, 1977. 736 с.