



УДК 536.46

Б. В. Кузьменко

Розвиток теорії та математичної моделі теплового самозаймання пиловугільних сумішей

(Представлено академіком НАН України І. Д. Войтовичем)

Наведено нові результати, які є розвитком класичної теорії теплового самозаймання пиловугільних сумішей, та розроблено нову математичну модель цього процесу з урахуванням радіаційного теплообміну.

Самозаймання — це явище швидкого наростання швидкості хімічної реакції, що приводить за певних зовнішніх умов до займання горючої суміші без зіткнення з полум'ям або розжареним тілом. Природа самозаймання може бути тепловою або ланцюговою. Уявлення про причини теплового самозаймання в якісній формі дані Я. Вант-Гоффом (1883). Теорію теплового самозаймання розробив М. М. Семенов (1928). Теплота, що виділяється при повільному протіканні екзотермічної реакції, розсіюється в навколишній простір. За деяких умов температури, тиску і тепловідводу теплота не встигає передатися в навколишній простір, внаслідок чого температура в зоні реакції прогресивно підвищується. Із зростанням температури швидкість реакції і швидкість теплоутворення збільшуються, збільшується також і швидкість тепловідводу, проте повільніше, ніж швидкість реакції. Температура, починаючи з якої теплота, що виділяється, більша за ту, що відводиться, називається температурою самозаймання; вона залежить, очевидно, як від хімічного складу суміші, так і від умов тепловіддачі. Починаючи з температури самозаймання, відбувається прогресивний саморозігрів суміші і самоприскорення реакції, що призводить до теплового самозаймання або вибуху. Теорія теплового самозаймання дозволяє визначити температуру самозаймання, якщо відомі теплові характеристики горючої суміші (тепловий ефект, теплопровідність) і кінетика реакцій горіння (константа швидкості, енергія активації). Теорія ланцюгового самозаймання також створена М. М. Семеновим (1928). За певних зовнішніх умов швидкість розгалуження ланцюгів стає більшою за швидкість обриву ланцюгів. Внаслідок цього реакція, що повільно йде, може перейти в ту, що самоприскорюється. При цьому температура суміші не має істотного значення і реакція йтиме самоприскорюючись внаслідок розгалуження ланцюгів, якщо навіть температура суміші підтримуватиметься постійною [1].

© Б. В. Кузьменко, 2014

Суть нестационарної теорії і відповідної математичної моделі теплового самозаймання [2] полягає у тому, що, як встановлено нами [3], математичний опис відповідного процесу зводиться до двох рівнянь балансу: теплового — звичайне нелінійне диференціальне рівняння першого порядку

$$\frac{d\bar{\theta}}{d\chi} = \bar{C}(\alpha\bar{C} + 1 - \alpha)\frac{1}{\theta^2}e^{-1/\theta} - \Omega(\bar{\theta} - \bar{\theta}_1), \quad \chi = \chi_0, \quad \bar{\theta} = \theta_0, \quad \bar{C} = \bar{C}_0, \quad (1)$$

де $\bar{\theta}$, \bar{C} — відносні величини температури та концентрації за киснем пиловугільної суміші; Ω , ς , α , θ_1 — відповідно безрозмірний коефіцієнт тепловіддачі в навколишнє середовище, коефіцієнт теплового випромінювання; стехіометрична стала та відносна величина відносної температури навколишнього середовища; χ , χ_0 , $\bar{\theta}_0$, \bar{C}_0 — відповідно відносна величина фактору часу та його початкових значень, початкові значення відносних, відповідно, температури та концентрації. Це рівняння виражає баланс витрати теплоти хімічної реакції окислювача (вуглецю) на нагрівання робочих середовищ та на відведення в навколишнє середовище. Друге рівняння показує матеріальний баланс процесу, це також нелінійне диференціальне рівняння і виражає баланс витрати окислювача (кисню) на реалізацію відповідної хімічної реакції окислення вуглецю. Воно має вигляд

$$\frac{d\bar{C}}{d\chi} = -\frac{1}{\bar{\theta}_{ад}}\bar{C}(\alpha\bar{C} + 1 - \alpha)\frac{1}{\theta^2}e^{-1/\bar{\theta}}, \quad \chi = \chi_0, \quad \bar{\theta} = \theta_0, \quad \bar{C} = \bar{C}_0, \quad (2)$$

де $\bar{\theta}_{ад}$ — відносна адіабатна температура процесу [2].

Проте детальний аналіз процесу свідчить про необхідність врахувати теплове (радіаційне) випромінювання в процесі хімічного реагування при складанні рівняння теплового балансу. В результаті досліджень нами отримано таке рівняння теплового балансу для аналізу процесу теплового самозаймання:

$$\frac{d\bar{\theta}}{d\chi} = \bar{C}(\alpha\bar{C} + 1 - \alpha)\frac{1}{\theta^2}e^{-1/\theta} - \Omega(\bar{\theta} - \bar{\theta}_1) - \varsigma(\bar{\theta}^4 - \bar{\theta}_1^4), \quad \chi = \chi_0, \quad \bar{\theta} = \theta_0, \quad \bar{C} = \bar{C}_0, \quad (3)$$

де ς — стала величина, що містить теплофізичні та інші характеристики теплового випромінювання.

Для одержання рівняння фазової траєкторії процесу розділимо вираз (1) на (2), після нескладних перетворень отримуємо:

$$\frac{d\bar{\theta}}{d\bar{C}} = -\bar{\theta}_{ад} + \frac{\Omega(\bar{\theta} - \bar{\theta}_1) + \varsigma(\bar{\theta}^4 - \bar{\theta}_1^4)}{\bar{C}(\alpha\bar{C} + 1 - \alpha)}\bar{\theta}^2\bar{\theta}_{ад}e^{1/\theta}, \quad \bar{C} = \bar{C}_0, \quad \bar{\theta} = \bar{\theta}_1. \quad (4)$$

Диференціальне рівняння (4) дає змогу оцінити можливість розвитку процесу теплового самозаймання пиловугільних сумішей у напрямку хаотичності. Аналіз цього рівняння свідчить про відсутність дивних атракторів як фазових траєкторій відповідної динамічної системи. У випадку, що розглядається, можливі тільки звичайні атрактори.

У точці максимуму температурної кривої $d\bar{\theta}/d\chi = 0$, тобто

$$\bar{C}_{extr}(\alpha\bar{C}_{extr} + 1 - \alpha)\frac{1}{\theta_{extr}^2}e^{-1/\theta_{extr}} - \Omega(\bar{\theta}_{extr} - \bar{\theta}_1) - \varsigma(\bar{\theta}_{extr}^4 - \bar{\theta}_1^4) = 0, \quad (5)$$

далі диференціюємо цей вираз за χ , робимо заміну $d\bar{C}/d\chi$ з рівняння (2), після деяких перетворень маємо:

$$\frac{d\bar{\theta}_{\text{extr}}}{d\chi} = -\frac{1}{\theta_{\text{ад}}} \frac{\sqrt{(\alpha-1)^2 + [4\alpha\Omega(\bar{\theta}_{\text{extr}}^3 - \bar{\theta}_1\bar{\theta}_{\text{extr}}^2) + 4\alpha\varsigma(\bar{\theta}_{\text{extr}}^6 - \bar{\theta}_{\text{extr}}^2\bar{\theta}_1^4) \exp(1/\theta_{\text{extr}})]}}{\Omega(3\bar{\theta}_{\text{extr}}^2 - 3\bar{\theta}_1\bar{\theta}_{\text{extr}} - \bar{\theta} + \bar{\theta}_1) + \varsigma(6\bar{\theta}_{\text{extr}}^5 - 2\bar{\theta}_{\text{extr}}\bar{\theta}_1^4 - \bar{\theta}_{\text{extr}} + \bar{\theta}_1^4)} \times \\ \times [\Omega(\bar{\theta}_{\text{extr}} - \bar{\theta}_1^4) + \varsigma(\bar{\theta}_{\text{extr}}^4 - \bar{\theta}_1^4)], \quad (6)$$

де $\bar{\theta}_{\text{extr}}$ — екстремальне (максимальне) значення відносної температури процесу саморозігріву пиловугільної суміші; \bar{C}_{extr} — значення відносної концентрації окислювача в точці екстремуму (максимуму) функції $\bar{C}(\chi)$.

До диференціального рівняння (6) неможливо поставити початкову умову (при довільних значеннях параметрів, що входять до нього), тому на даному етапі досліджень це рівняння придатне тільки для загальних дослідницьких цілей та аналізування процесу.

З рівняння (5) маємо таке співвідношення між відносною концентрацією окислювача та екстремальною відносною температурою:

$$\bar{C}_{\text{extr}}(\bar{\theta}_{\text{extr}}) = \frac{\alpha-1}{2\alpha\bar{\theta}_{\text{extr}}^2} e^{-1/\bar{\theta}_{\text{extr}}} + \sqrt{\left(\frac{\alpha-1}{\alpha\bar{\theta}_{\text{extr}}^2}\right)^3 e^{-2/\bar{\theta}} + \frac{\Omega}{\alpha}(\bar{\theta}_{\text{extr}} - \bar{\theta}_1) + \frac{\varsigma}{\alpha}(\bar{\theta}_{\text{extr}}^4 - \bar{\theta}_1^4)}. \quad (7)$$

Отримані результати з урахуванням загальної теорії теплового самозаймання М. М. Семенова визначають інтервал часу (геометричний інтервал), в якому знаходиться момент часу (геометрична точка інтервалу), коли відбувається процес теплового самозаймання пиловугільної суміші. Ліва точка цього інтервалу $\bar{\theta}_C$ визначається оцінкою, згідно з теоретичними положеннями, розробленими М. М. Семеновим [1], а права точка $\bar{\theta}_{\text{extr}}$ — величиною максимуму температурної кривої, її координату (ординату) можна визначити згідно з даними розробленої в цій роботі математичної моделі. Очевидно, що теплове самозаймання можливе, коли, крім всього іншого, $\bar{\theta}_C < \bar{\theta}_{\text{extr}}$, якщо ж $\bar{\theta}_C \geq \bar{\theta}_{\text{extr}}$, то теплове самозаймання неможливе. Тобто для відносної температури теплового самозаймання $\bar{\theta}_{C3}$ має місце співвідношення $\bar{\theta}_C < \bar{\theta}_{C3} \leq \bar{\theta}_{\text{extr}}$, або

$$\bar{\theta}_{C3} \in (\bar{\theta}_C, \bar{\theta}_{\text{extr}}], \bar{\theta}_{\text{extr}} \bar{\theta}_C, \quad (8)$$

якщо ж $\bar{\theta}_{\text{extr}} \leq \bar{\theta}_C$, то $\bar{\theta}_{C3} = \emptyset$ і самозаймання, за відповідних умов, неможливе.

Так для параметрів математичної моделі у вигляді автономної системи диференціальних рівнянь (2), (3), коли $\alpha = 0,1$, $\bar{\theta}_{\text{ад}} = 0,03$, $\bar{\theta}_0 = 0,07$, $\bar{C}_0 = 1$, $\varsigma = 0 \div 2,0$, шляхом обробки експериментальних даних [4–6], отримані результати, що наведені в табл. 1.

Таблиця 1. Результати розрахунків динаміки процесу теплового самозаймання пиловугільної суміші

Випадок	σ	$100\bar{\theta}_{\text{extr}}$	χ_{extr}	$100\bar{\theta}_C$	Наявність (+) або відсутність (-) теплового самозаймання
1	0	107,8	1,47	103,9	+
2	0,5	100,3	0,80	102,1	-
3	1,0	102,0	0,70	100,6	+
4	1,5	104,1	0,65	102,3	+
5	2,0	100,6	0,62	101,8	-

Дані таблиці ілюструють наявність теплового самозаймання для випадків 1, 3, 4 і відсутність такого — для випадків 2, 5.

Таким чином, в роботі наведено результати, які є розвитком класичної теорії теплового самозаймання пиловугільних сумішей.

1. Семенов Н. Н. Развитие теории цепных реакций и теплового самовоспламенения. – Москва: Знание, 1969. – 94 с.
2. Хзмяян Д. М. Теория топочных процессов. – Москва: Энергоатомиздат, 1990. – 352 с.
3. Кузьменко Б. В., Мальчевський І. А. Теплове самозаймання пиловугільних сумішей. – Київ: Наук. думка, 2011. – 278 с.
4. Кузьменко Б. В., Мальчевський І. А. Математична модель процесу самозаймання пиловугільних сумішей з врахуванням радіаційної складової // Conference “Dynamical system modeling and stability investigation”. Abstracts of reports. – Kyiv, 2011. – P. 189–190.
5. Мальчевський І. А., Кузьменко Б. В. Гауссовы приближения в стохастической теории самовоспламенения угольных частиц // Нелінійні коливання. – 2004. – 7, № 1. – С. 111–114.
6. Мальчевський І. А., Кузьменко Б. В. Самозаймання і горіння часток твердого палива в умовах випадкових впливів // Доп. НАН України. – 2006. – № 4. – С. 86–90.

*Інститут вугільних енерготехнологій
НАН України, Київ*

Надійшло до редакції 25.03.2014

Б. В. Кузьменко

Развитие теории и математической модели теплового самовоспламенения пылеугольных смесей

Представлены новые результаты, которые являются развитием классической теории теплового самовоспламенения пылеугольных смесей, и разработана новая математическая модель этого процесса с учетом радиационного теплообмена.

B. V. Kuzmenko

Development of the theory and the mathematical model of heat self-ignition of a coal-dust mixture

The new results generalizing the classical theory of thermal spontaneous combustion of coal-dust mixtures are presented, and a new mathematical model of this process is developed with regard for the radiation heat exchange.