

## NUMERYCZNE MODELOWANIA ZAPŁONU CZĄSTKI PALIWA STAŁEGO

WŁODZIMIERZ KORDYLEWSKI, HALINA KRUCZEK (WROCLAW)

W pracy przedstawiono metodę modelowania numerycznego procesu zapłonu pojedynczej, kulistej cząstki paliwa stałego. Wychodząc z ciepłno-dyfuzyjnej teorii zapłonu, zagadnienie rozwiązano metodą różnic skończonych, stosując metodę niejawną. Dokonując zamiany liniowej zmiennej  $\eta = \frac{1}{\xi}$ , przekształcono otaczającą cząstkę przestrzeń w kulę jednostkową, dzięki czemu uniknięto trudności związanych z oceną grubości warstwy granicznej. Występujące w zagadnieniu nieliniowe warunki brzegowe czwartego rodzaju prowadzą do nieliniowych równań algebraicznych, które rozwiązywano metodą bisekcji. Metodę zilustrowano przykładami obliczeń.

### Spis oznaczeń

- $a$  — współczynnik wyrównania temperatury
- A, B — współczynniki przegania
- $c_0$  — stała Boltzmannna
- $c_p$  — ciepłna pojemność właściwa
- $D$  — współczynnik dyfuzji
- CO<sub>2</sub> — masowa koncentracja dwutlenku węgla
- $E$  — energia aktywacji
- $h$  — krok przestrzenny
- $k$  — współczynnik przedeksponencjalny
- O<sub>2</sub> — masowa koncentracja tlenu
- $Q$  — ciepło spalania
- $r$  — promień
- $R$  — uniwersalna stała gazowa
- $t$  — czas
- $T$  — temperatura
- $\gamma$  — bezwymiarowa koncentracja tlenu
- $\varepsilon_0$  — współczynnik emisji pozostałości koksowej
- $\lambda$  — współczynnik przewodzenia ciepła
- $\xi$  — bezwymiarowa zmienna liniowa
- $\eta$  — bezwymiarowa zmienna liniowa ( $\eta = 1/\xi$ )
- $\Theta$  — bezwymiarowa temperatura
- $\tau$  — bezwymiarowy czas
- $\varrho$  — gęstość

## Indeksy

- 0 — odnosi się do warunków początkowych  
 1 — odnosi się do cząstki paliwa stałego  
 2 — odnosi się do gazowego otoczenia.

## 1. Wstęp

Wyznaczanie czynników determinujących czas i temperaturę zapłonu należy do klasycznych problemów teorii spalania. W przypadku płomienia pyłowego bądź olejowego parametry zapłonu i gaśnięcia ziarna węglowego lub kropli oleju decydują o stateczności i niedopale płomienia [1].

W pracy przedstawiono metodę numerycznego modelowania procesu zapłonu kulistej cząstki paliwa stałego, umieszczonej nagle w nieruchomym, gorącym powietrzu. Przyjęto przy tym, że zapłon ma charakter heterogeniczny, czyli zachodzi na powierzchni cząstki.

Model matematyczny zjawiska zapłonu dla cząstki paliwa stałego formułuje się w oparciu o ciepłno-dyfuzyjną teorię zapłonu [1 - 3]. Tworzą go równania transportu ciepła wewnątrz cząstki i w jej otoczeniu oraz równanie dyfuzji tlenu

— cząstka

$$(1) \quad \frac{\partial T_1}{\partial t} - a_1 \left( \frac{\partial^2 T_1}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial T_1}{\partial r} \right) = 0,$$

— otoczenie

$$(2) \quad \frac{\partial T_2}{\partial t} - a_2 \left( \frac{\partial^2 T_2}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial T_2}{\partial r} \right) = 0,$$

$$(3) \quad \frac{\partial O_2}{\partial t} - D \left( \frac{\partial^2 O_2}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial O_2}{\partial r} \right) = 0,$$

Powyższe równania uzupełnione są warunkami początkowymi

$$(4) \quad T_1(0, r) = T_{01}, \quad 0 \leq r \leq r_0$$

$$(5a) \quad T_2(0, r) = T_{o2},$$

$$(5b) \quad O_2(0, r) = O_{2,o}, \quad \left. \begin{array}{l} T_2(0, r) = T_{o2}, \\ O_2(0, r) = O_{2,o}, \end{array} \right\} r_0 \leq r \leq \infty$$

i następującymi warunkami brzegowymi

$$(6) \quad \frac{\partial T_1}{\partial r} = 0, \quad r = 0,$$

$$(7) \quad \lambda_1 \frac{\partial T_1}{\partial r} = \lambda_2 \frac{\partial T_2}{\partial r} + c_o \varepsilon_o (T_{o2}^4 - T_1^4) + O_2 \varrho Q k \exp(-E/RT_1), \quad T_1 = T_2 \text{ dla } r = r_o,$$

$$(8) \quad D \frac{\partial O_2}{\partial r} = O_2 k \exp(-E/RT_1), \quad r = r_o,$$

$$(9) \quad \left. \begin{array}{l} T_2 = T_{o2}, \\ O_2 = O_{2,o}, \end{array} \right\} r \rightarrow \infty.$$

W powyższym układzie równań podstawowe problemy wynikają z nieliniowych warunków brzegowych czwartego rodzaju (7) [4] oraz z konieczności wyboru skończonej

grubości warstwy gazu w otaczającej cząstkę nieskończonej przestrzeni, w której zachodzi przekazywanie ciepła i dyfuzja tlenu. W celu uniknięcia trudności związanych z aprioryną oceną grubością warstwy prześciennej, dokonuje się zamiany zmiennej  $\eta = \frac{1}{\xi}$  ( $\xi = \frac{r}{r_o}$ ) dla otaczającego cząstkę obszaru zawierającego tlen.

W wyniku transformacji obszar ten ulega przekształceniu w kulę jednostkową. Powołała to zachować w przedstawionej metodzie obliczeniowej warunki brzegowe w nieskończoności, co byłoby niemożliwe w przypadku metody warstwy granicznej.

### 2. Zamiana zmiennych

Równania (1) — (3) przekształca się do postaci bezwymiarowej, odnosząc zmienną liniową  $r$  do promienia cząstki paliwa  $r_o$  ( $\xi = \frac{r}{r_o}$ ), a następnie dla równań (2), (3) dokonuje się zamiany zmiennej  $\eta = \frac{1}{\xi}$ .

$$(10) \quad \frac{\partial \theta(1)}{\partial \tau} - \left( \frac{\partial^2 \theta(1)}{\partial \xi^2} + \frac{2}{\xi} \frac{\partial \theta(1)}{\partial \xi} \right) = 0,$$

$$(11) \quad \frac{\partial \theta(2)}{\partial \tau} - \frac{a_2}{a_1} \eta^4 \frac{\partial^2 \theta(2)}{\partial \eta^2} = 0,$$

$$(12) \quad \frac{\partial \gamma}{\partial \tau} - \frac{D}{a_1} \eta^4 \frac{\partial^2 \gamma}{\partial \eta^2} = 0,$$

gdzie:

$$\theta(1) = \frac{T_1}{T_{o1}}, \quad \theta(2) = \frac{T_2}{T_{o1}}, \quad \gamma = \frac{O_2}{O_{2,o}}, \quad \tau = \frac{a_1 t}{r_o^2}.$$

Warunki brzegowe w postaci bezwymiarowej przedstawiają się następująco:

$$(13) \quad \frac{\partial \theta(1)}{\partial \xi} = 0, \quad \xi = 0,$$

$$(14) \quad \frac{\partial \theta(1)}{\partial \xi} = -\frac{\lambda_2}{\lambda_1} \frac{\partial \theta(2)}{\partial \eta} + \frac{c_o \epsilon_o r_o T_{o1}^3}{\lambda_1} \left[ \left( \frac{T_{o2}}{T_{o1}} \right)^4 - \theta(1)^4 \right] + \frac{\gamma Q k r_o O_{2,o}}{\lambda_1 T_{o1}} \exp(-E/R T_{o1} \cdot 1/\theta(1)), \quad \theta(1) = \theta(2) \quad \eta = \xi = 1$$

$$(15) \quad \frac{\partial \gamma}{\partial \eta} = \frac{\gamma k r_o}{D} \exp(-E/R T_{o1} \cdot 1/\theta(1)),$$

$$(16) \quad \theta(2) = \frac{T_{o2}}{T_{o1}}, \quad \gamma = 1 \quad \text{dla} \quad \eta = 0.$$

Warunki początkowe (4), (5) przyjmują natomiast postać

$$(17) \quad \theta(1) = 1, \quad 0 \leq \xi \leq 1,$$

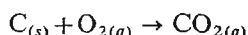
$$(18) \quad \theta(2) = \frac{T_{o2}}{T_{o1}}, \quad \gamma = 1 \quad \text{dla} \quad 0 \leq \eta \leq 1.$$

W ten sposób problem modelowania zjawiska zapłonu kulistej cząstki paliwa stałego w nieograniczonej przestrzeni został sprowadzony do rozwiązania układu trzech równań parabolicznych (10), (11), (12) w kuli jednostkowej odpowiednio z warunkami brzegowymi (13) - (16) i początkowymi (17), (18). Zmienne liniowe  $\zeta$ ,  $\eta$  będzie się dalej traktować jako jedną zmienną liniową.

Powyższe rozważania od strony fizycznej ważne są dla następujących założeń:

— wartości parametrów fizyko-chemicznych  $\lambda_1, \varrho_1, c_{p1}, \lambda_2, \varrho_2, c_{p2}, \varepsilon_0, Q, k, E, D$  przyjmuje się stałe w trakcie trwania zjawiska zapłonu [1], [2]

— reakcja chemiczna rządząca zapłonem jest reakcją heterogeniczną typu Arrheniusowskiego i pierwszego rzędu względem tlenu, przebiega wg schematu [5], [6]



gdzie indeksy  $s$  i  $g$  odnoszą się do fazy stałej i gazowej odpowiednio.

### 3. Aproksymacja różnicowa równań (10)–(12)

Układ równań parabolicznych (10) - (12) rozwiązuje się przy pomocy niejawnej metody różnic skończonych [7], stąd schemat różnicowy przedstawia się następująco:

$$(10a) \quad \frac{\theta(1)_{k+1}^j - \theta(1)_k^j}{\Delta\tau} - \frac{\theta(1)_{k+1}^{j+1} - 2\theta(1)_k^{j+1} + \theta(1)_{k+1}^{j+1}}{h^2} - \frac{2}{\eta_k} \frac{\theta(1)_{k+1}^{j+1} - \theta(1)_k^{j+1}}{2h} = 0,$$

$$(11a) \quad \frac{\theta(2)_{k+1}^{j+1} - \theta(2)_k^j}{\Delta\tau} - \frac{a_2}{a_1} \eta_k^4 \frac{\theta(2)_{k+1}^{j+1} - 2\theta(2)_k^{j+1} + \theta(2)_{k+1}^{j+1}}{h^2} = 0,$$

$$(12a) \quad \frac{\gamma_{k+1}^{j+1} - \gamma_k^j}{\Delta\tau} - \frac{D}{a_{1j}} \eta_k^4 \frac{\gamma_{k+1}^{j+1} - 2\gamma_k^{j+1} + \gamma_{k+1}^{j+1}}{h^2} = 0,$$

$k = 1, 2, \dots, K$ .

Rząd aproksymacji wynosi  $O(\Delta\tau) + O(h^2)$ .

Równania (10a) - (12a) można zapisać w ogólnej postaci następująco:

$$(19) \quad \alpha_k \Phi_{k-1}^{j+1} + \beta_k \Phi_k^{j+1} + \omega_k \Phi_{k+1}^{j+1} = \Phi_k^j,$$

gdzie wektor  $\Phi$  posiada trzy składowe

$$\Phi = \begin{pmatrix} \theta(1) \\ \theta(2) \\ \gamma \end{pmatrix}.$$

Wybór niejawnego schematu obliczeniowego, który wymaga bardziej złożonego algorytmu obliczeń niż schemat jawny, wynika z konieczności stosowania bardzo małego kroku czasowego w tym ostatnim. Zastosowanie metody niejawnej pozwoliło zmniejszyć ilość iteracji o dwa rzędy.

Liniowy układ równań (19) rozwiązuje się w każdym kroku czasowym  $(j+1) \Delta\tau$  używając trójdzielnej metody THOMASA [7]. Rozwiązania na danym poziomie czasowym otrzymuje się z formuły

$$(20) \quad \Phi_k = A_k \Phi_{k+1} + B_k, \quad k = 1, 2, \dots, K-1,$$

gdzie  $A_k, B_k$  są współczynnikami przegania.

Ponieważ wyznaczanie rozwiązań zaczyna się od przedostatniego wyrazu  $\Phi_{K-1}$ , więc w pierwszym kroku obliczeniowym rozwiązuje się równania warunków brzegowych (14), (15) dla  $\Theta(1)_K$ ,  $\Theta(2)_K$  i  $\gamma_K$  określonych w punkcie  $\xi = \eta = 1$  na brzegu kuli.

#### 4. Aproksymacja różnicowa warunków brzegowych

Warunki brzegowe (14), (15) w postaci różnicowej przedstawiają się następująco:

$$(21) \quad \frac{r_o c_o \varepsilon_o T_{o1}^3 h}{\lambda_1} \theta_K^4 + \theta_K \left( 1 + \frac{\lambda_2}{\lambda_1} \right) - \frac{\gamma_K Q Q k r_o O_{2,o} h}{\lambda_1 T_{o1}} \cdot \\ \exp(-E/R T_{o1} \cdot 1/\theta_K) - \theta(1)_{K-1} - \frac{\lambda_2}{\lambda_1} \theta(2)_{K-1} - \frac{c_o \varepsilon_o r_o T_{o1}^3 h}{\lambda_1} \left( \frac{T_{o2}}{T_{o1}} \right)^4 = 0,$$

$$(22) \quad \gamma_K - \gamma_{K-1} = -\gamma_K \frac{k r_o h}{D} \exp(-E/R T_{o1} \cdot 1/\theta_K)$$

gdzie  $\theta_K = \theta(1)_K = \theta(2)_K$ .

W równaniach powyższych opuszczono dla jasności indeksy dotyczące czasu ( $j$ ).

Określenie wielkości  $\theta_K$ ,  $\gamma_K$  bezpośrednio z równań (21), (22) jest niemożliwe w metodzie niejawnej, ponieważ nieznanne są wartości  $\theta(1)_{K-1}$ ,  $\theta(2)_{K-1}$  i  $\gamma_{K-1}$ . Zmienne z indeksem  $K-1$  eliminuje się, wychodząc z formuły „przegania” (20)

$$\Phi_{K-1} = A_{K-1} \Phi_K + B_{K-1}.$$

Korzystając dalej z liniowości równania (22) względem koncentracji  $\gamma_K$ , otrzymuje się równanie algebraiczne, pozwalające wyznaczyć temperaturę na brzegu cząstki  $\theta_K$

$$(23) \quad \frac{c_o \varepsilon_o r_o T_{o1}^3 h}{\lambda_1} \theta_K^4 + \theta_K \left[ 1 - A_{K-1}(1) + \frac{\lambda_2}{\lambda_1} (1 - A_{K-1}(2)) \right] - \\ - \frac{Q k r_o O_{2,o} h_o B_{K-1}(3)}{\lambda_1 T_{o1} (1 - A_{K-1}(3)) \exp(E/R T_{o1} \cdot 1/\theta_K) + \frac{k r_o h}{D}} - B_{K-1}(1) - \\ - \frac{\lambda_2}{\lambda_1} B_{K-1}(2) - \frac{c_o \varepsilon_o r_o T_{o1}^3 h}{\lambda_1} \left( \frac{T_{o2}}{T_{o1}} \right)^4 = 0,$$

gdzie indeksy 1, 2, 3 współczynników przegania  $A$ ,  $B$  odnoszą się odpowiednio do  $\theta(1)$ ,  $\theta(2)$  i  $\gamma$ .

Powyższe równanie, które można przedstawić w ogólnej postaci

$$\Phi_K = F(\Phi_K),$$

jest silnie nieliniowe. Rozwiązywano je metodą bisekcji [8], która co prawda nie jest tak szybka, jak metoda Newtona, ale jest absolutnie stabilna.

#### 5. Rezultaty obliczeń

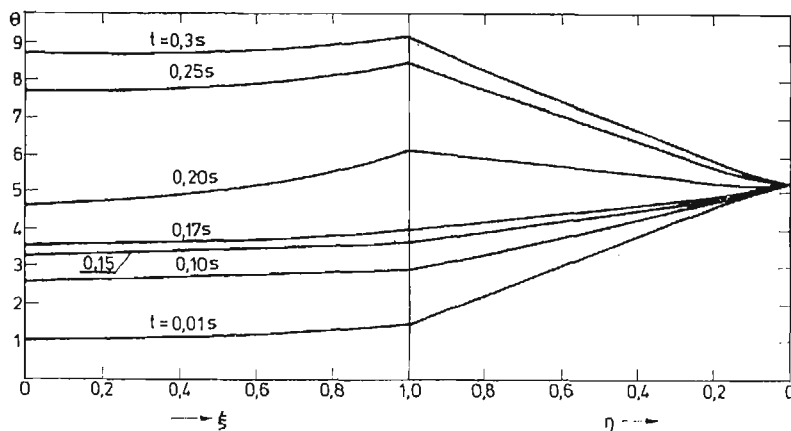
Przeprowadzono obliczenia dla modelu zapłonu, przedstawionego w punktach 1 i 2, metodą opisaną w punktach 3 i 4, dla cząstki pozostałości koksowej antracytu. Obliczenia wykonano dla promienia ziarna  $r_o = 2 \cdot 10^{-4}$  m, temperatury początkowej ziarna

293 °K i temperatury gorącego otaczającego powietrza 1523 °K. Wartość masowej koncentracji początkowej tlenu równa była 0,23. Stałe kinetyczne  $E = 140$  kJ/mol,  $k = 4,5 \cdot 10^5$  m/s i ciepło spalania  $Q = 7 \cdot 10^3$  kJ/kg pochodzą z pracy [9]. Wartość pozostałych parametrów fizycznych, przyjętych do obliczeń, wynosiła

$$\begin{aligned} \lambda_1 &= 6 \cdot 10^{-4} \frac{\text{kJ}}{\text{msdeg}}, & c_{p1} &= 1,2779 \frac{\text{kJ}}{\text{kgdeg}}, & \rho_1 &= 1389 \frac{\text{kg}}{\text{m}^3} \\ \lambda_2 &= 8,45 \cdot 10^{-5} \frac{\text{kJ}}{\text{msdeg}}, & c_{p2} &= 1,16 \frac{\text{kJ}}{\text{kgdeg}}, & \rho_2 &= 0,24 \frac{\text{kg}}{\text{m}^3} \\ \varepsilon_0 &= 0,82, & h &= 0,1, & D &= 3,6 \cdot 10^{-4} \frac{\text{m}^2}{\text{s}}. \end{aligned}$$

Wartość współczynnika emisji  $\varepsilon_0$  dla pozostałości koksowej antracytu wzięto z pracy [10].

W wyniku obliczeń otrzymano przestrzenno-czasowe rozkłady temperatur w ziarnie antracytu i otaczającym gazowym ośrodku (rys. 1). Jak wynika z rys. 1, czas relaksacji



Rys. 1. Przestrzenno-czasowy rozkład temperatury w ziarnie antracytu i w jego gazowym otoczeniu.

w fazie gazowej jest znacznie krótszy niż w fazie stałej. Świadczy o tym rozkład temperatury w otoczeniu ziarna, tj. w obszarze kuli jednostkowej  $0 \leq \eta \leq 1$ , w której rozwiązanie stacjonarne równania (11) ma charakter liniowy. Stacjonarne rozwiązanie równania (10) dla cząstki paliwa stałego ma wartość stałą, ale rozkłady temperatury wewnątrz ziarna pozostałości koksowej antracytu nie odpowiadają stanowi ustalonemu.

Rozkłady koncentracji tlenu przedstawiają rysunki 2 i 3. Koncentrację dwutlenku węgla wyznaczano w sposób przybliżony jako różnicę  $O_{2,o} - O_2$  wartości koncentracji początkowej tlenu i bieżącej. Uzasadnieniem może być mała różnica między współczynnikami dyfuzji  $O_2$  i  $CO_2$  w powietrzu, wynosząca w zależności od temperatury kilka procent [11].

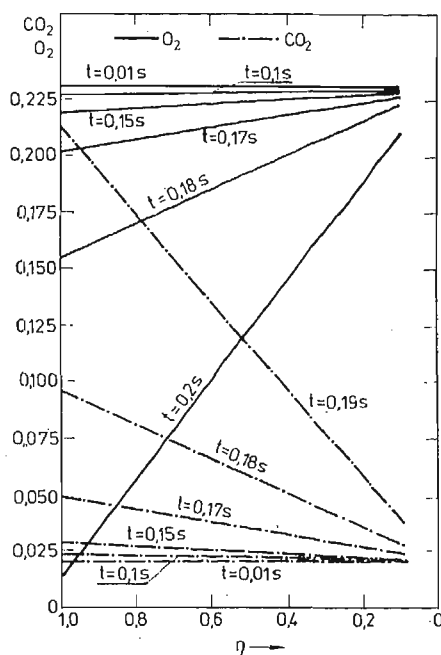
W krótkim początkowym okresie nagrzewu ( $10^{-7}$  s) zaobserwowano szybkie ustalenie się temperatury powierzchni ziarna, dalej jej malenie i po osiągnięciu pewnego minimum, ponowny wzrost (rys. 3a). Tłumaczyć to należy nieciągłością warunków początkowych (4), (5) oraz nieciągłością gradientów temperatury na granicy fazy stałej i gazowej.

Pomijając dla tego okresu czasu w równaniu (21) człon promieniowania i źródła ciepła, otrzymuje się po przyjęciu  $\theta(1)_{K-1} = 1$ ,  $\theta(2)_{K-1} = \theta_{o_2}$

$$\theta_K = \frac{1 + \frac{\lambda_2}{\lambda_1} \theta_{o_2}}{1 + \frac{\lambda_2}{\lambda_1}}$$

Dla przyjętych wyżej danych obliczeniowych wynika z powyższego wzoru  $\theta_K = 1,518$ .

Różnica między tym wynikiem, a rezultatem, uzyskanym z obliczeń numerycznych  $\theta_K = 1,6$  spowodowana jest przyjęciem skończonego kroku  $h = 0,1$  w tych ostatnich.



Rys. 2. Rozkłady koncentracji tlenu i dwutlenku węgla w gazowej przestrzeni otaczającej ziarno antracytu — O<sub>2</sub>, ..... CO<sub>2</sub>.

Dalszy gwałtowny wzrost temperatury powierzchni ziarna następuje w momencie zapłonu (rys. 3). Za kryterium zapłonu przyjęto w pracy znikanie drugiej pochodnej temperatury powierzchni ziarna względem czasu, analogicznie jak w pracy [14].

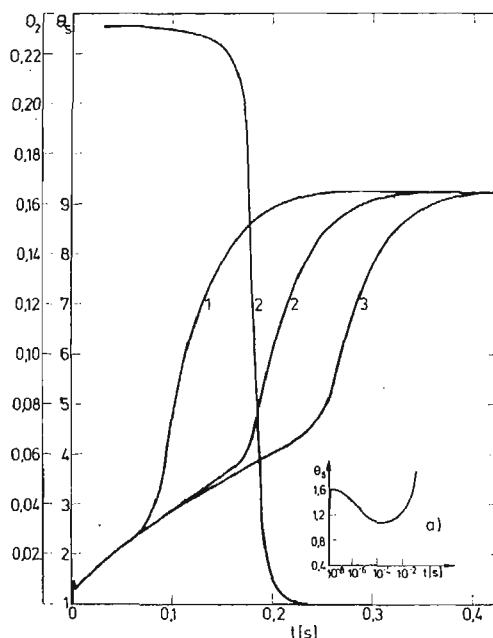
Do momentu zapłonu nie zauważa się istotnych zmian w rozkładzie koncentracji tlenu (rys. 2, 3) czyli zapłon następuje w reżimie kinetycznym. Sugeruje to, że do określenia charakterystyk zapłonu: czas i temperatura zapłonu, wystarczy użyć cieplnego przybliżenia procesu.

Przypuszczenie powyższe znalazło potwierdzenie w obliczeniach numerycznych w pracy [15], gdzie uzyskano rozkład temperatury wewnątrz ziarna rozwiązując równanie bilansu ciepła (1) przy stałej koncentracji tlenu na jego powierzchni.

Uzyskane z obliczeń wartości temperatury powierzchni ziarna pozostałości koksowej antracytu w funkcji czasu pozwalają, przy przyjęciu w.w. kryterium zapłonu, określić

wartość temperatury zapłonu i czasu zapłonu. Wartość temperatury powierzchniowej, uzyskanej w chwili zapłonu dla temperatury otoczenia 1523 °K, równa około 1000 °C ( $\theta = 4,35$ , rys. 3, krzywa 2), pokrywa się z wynikami, uzyskanymi w pracach [12], [13].

Aby ocenić ważność wpływu stałych kinetycznych na czas i temperaturę zapłonu przeprowadzono obliczenia dla różnych wartości energii aktywacji. Jak wynika z rys. 3 (krzywe 1, 2, 3) ze wzrostem energii aktywacji znacznie wydłuża się czas zapłonu i rośnie



Rys. 3. Rozkład temperatury powierzchniowej  $\theta_s = T_1(r_o)/T_{o1} = T_2(r_o)/T_{o1}$  i koncentracji tlenu  $O_2(r_o)$  przy powierzchni ziarna antracytu w zależności od czasu dla  $K_o = 0.45 \cdot 10^6$  m/s,  $Q = 7 \cdot 10^3$  kJ/kg oraz dla krzywych: 1 —  $E = 100$  kJ/mol, 2 —  $E = 140$  kJ/mol, 3 —  $E = 160$  kJ/mol. (a) początkowe stadium nagrzewu.

temperatura zapłonu. Problem ten jest jednakże znacznie szerszy. Jest oczywiste, że znajomość stałych kinetycznych ( $E$ ,  $k$ ) ma zasadnicze znaczenie dla ilościowej oceny temperatury i czasu zapłonu, a także dla określenia czasu i prędkości spalania.

Czy zatem możliwa jest weryfikacja stałych  $E$  i  $k$  przy pomocy przedstawionych modeli numerycznych. Należy przede wszystkim zaznaczyć, że stałe kinetyczne mogą być różne dla różnych modeli matematycznych. I tak, nie należy oczekiwać, że rezultaty uzyskane przy pomocy modelu opisanego układem równań zwyczajnych i modelu opisanego układem równań cząstkowych będą identyczne. Oba modele wymagają różnych stałych kinetycznych. Wyznaczanie stałych kinetycznych dla danego modelu matematycznego jest trudnym problemem matematycznym, zwanym odwrotnym zadaniem aerotermodemii. Obecnie istnieją próby określenia stałych prędkości reakcji homogenicznych przy założeniu znajomości pełnego schematu kinetycznego [16].



## 6. Podsumowanie

Przedstawiony przykład obliczeniowy dotyczył zapłonu pozostałości koksowej antracytu, gdy nie występuje wydobywanie się części lotnych, które mogłyby zmienić charakter zapłonu. Czy zatem przedstawiony model numeryczny może być wykorzystany dla analizy zapłonu innych paliw stałych.

W przypadku węgla zasadniczym problemem jest wpływ części lotnych na mechanizm zapłonu. ESSENHIGH [17] podaje, że powyżej prędkości nagrzewania ziarna węglowego  $10^4$  deg/s procesy pirolizy dla zapłonu praktycznie nie mają znaczenia, zapłon wyprzedza pirolizę.

THOMAS i in. [6] w swoich badaniach nad zapłonem cząstek wrzucanych do przepływającego strumienia powietrza wykazali, że nawet dla cząstek węgla brunatnego o średnicy  $1000 \mu\text{m}$  zachodzi zapłon heterogeniczny. Tego ostatniego wyniku nie należy uogólniać na wszystkie typy węgla brunatnych. Prawdopodobnie zapłon heterogeniczny może zachodzić jedynie dla pewnych odmian petrograficznych węgla brunatnych.

Drugim problemem jest wpływ homogenicznej reakcji dopalania tlenu węgla w otoczeniu ziarna na warunki zapłonu. W pracy przyjęto, że reakcją decydującą o zapłonie węgla jest pierwotna reakcja przebiegająca do  $\text{CO}_2$ , pominięto więc drugą reakcję do CO i homogeniczną reakcję dopalania tlenu węgla. Obszerne uzasadnienie tego założenia można znaleźć u ŁAWROVA [18]. W poprzedniej pracy autorów [19] analizowano numerycznie zapłon cząstki węgla uwzględniając cztery reakcje reagowania węgla z tlenem. Wyniki, jakie uzyskano w porównaniu z wynikami w tej pracy, różnią się tylko o około 1%, natomiast czas obliczeń dla modelu w pracy [19] był dziesięciokrotnie dłuższy. Natomiast problem zawartości części mineralnych w węglu dla zjawiska zapłonu jest nieistotny, a to z powodu małego stopnia wypalenia (konsumpcji paliwa) do momentu zapłonu [20].

Czy przedstawiony model może opisywać zapłon cząstek metalu. To zależy jakich, bowiem pod względem sposobu niskotemperaturowego utleniania metale dzieli się na posiadające porowatą, przepuszczalną dla tlenu, warstwę tlenu na powierzchni metalu oraz na takie, które pokrywają się krystaliczną, trudno przepuszczalną warstwą tlenu [21]. Typowym przedstawicielem pierwszych jest magnez, drugich natomiast glin.

Cząstka magnezu ulega zapłonowi w pobliżu temperatury topnienia magnezu, można więc pominąć parowanie metalu w trakcie zapłonu i uznać go za heterogeniczny [22, 23, 24]. Mimo, że cząstka przyjmuje w trakcie topnienia dość nieregularne kształty [23], autorzy sądzą, że przedstawiony model można użyć do analizy jej zapłonu.

Cząstka glinu zapala się dopiero w temperaturze topnienia tlenu glinu [25]. Dzieje się tak, gdyż w trakcie zapłonu narastająca warstwa tlenu utrudnia dostęp tlenu do metalu, więc zapłon nastąpi jedynie wówczas, gdy temperatura cząstki zdąży wzrosnąć w wyniku samopodgrzewu do temperatury topnienia tlenu glinu [25, 26]. W takim przypadku proponowany model zapłonu należy uzupełnić opisem wzrostu warstwy tlenu na powierzchni metalu. Z matematycznego punktu widzenia problem ten nie przedstawia większych trudności i stanowi uogólnienie modelu zerowymiarowego [26].

## Literatura cytowana w tekście

1. D. A. FRANK-KAMIENIECKIJ; *Diffusion and Heat Transfer in Chemical Kinetics*. New York 1969.
2. A. G. MERZHANOV, and A. E. AVERSON; *The Present State of the Thermal Ignition*. Combustion and Flame 16, 1, 1971.
3. KIM CHOONG SE, N. PAUL CHUNG; *An Asymptotic Thermo-Diffusive Ignition Theory of Porous Solid Fuels*. Journal of Heat Transfer 5, 1976
4. A. V. LYKOV; *Teoria teploprovodnosti*, Izd. „Nauka” Moskwa 1967.
5. R. K. AHLUWALIA, P. M. CHUNG; *Surface Ignition of Coal and other Fuel Particles in Radiative and Diffusive Environment*, Combust. Sci. Technology 17, 169 - 181, 1978
6. G. R. THOMAS, J. J. HARRIS, D. G. EVANS; *The Ignition of Pulverized Brown Coal*, Combustion and Flame, 12, 391 - 393, 1968.
7. K. N. MORTON, R. D. RICHTMAYER; *Difference methods for initial-value problems*. Interscience, New York 1967.
8. B. P. DEMIDOVICZ, I. A. MARON; *Metody numeryczne*, WNT, Warszawa 1965.
9. C. N. SATLERFIELD; *Mass Transfer in Heterogeneous Catalysis M.I.T.*, Press Cambridge, 1970.
10. M. ZEMBRZUSKI, H. KARCZ; *Kinetyczne własności odmian petrograficznych antracytu*, Archiwum Procesów Spalania, vol. 4, nr 3, 235 - 245, 1973.
11. SHERWOOD, PIGFORD; *Absorption and Extraction*, Mc Graw Hill Book, New York, 1952.
12. A. B. AYLING, J. W. SMITH; *Measured Temperatures of Burning Pulverized — Fuel Particles, and the Nature of the Primary Reaction Product*. Combust. Flame 18, 173 - 184, 1972.
13. S. BANDYOPADHYAY, D. B. BHADURI, *Prediction of Ignition Temperature of a Single Coal Particle*, Combust. Flame 18, 411 - 415, 1972.
14. F. A. WILLIAMS; *Theory of propellant ignition by heterogeneous reaction*. AIAA Journal, 4, 1966.
15. H. KRUCZEK; *Teoretyczne i doświadczalne badania zaplonu ziarna węglowego*. Praca doktorska ITCiMP, Politechnika Wroclawska 1977.
16. *Исследование горения газообразных топлив*, сб., Новосибирск, 1977, стр. 52—79.
17. R. H. ESSENHIGH; *Combustion and Flame Propagation in Coal Systems: A Review XVI-th Symposium on Combustion*, Pittsburgh, 1976.
18. И. В. ЛАВРОВ; *Физико-химические основы процесса горения топлива*, „Наука”, Москва, 1971.
19. W. KORDYLEWSKI, H. KRUCZEK; *Modelowanie zaplonu ziarna węglowego*, Inżynieria Chemiczna, nr 3, 1978.
20. M. M. BAUM and P. J. STREET; *Predicting the Combustion Behavior of Coal Particles*, Combust. Sci. Technol. 3, 231 - 243, 1971.
21. P. KOESTAD; *High-temperature Oxidation of Metals*, John Wiley and Sons, INC. New York 1966 (w języku rosyjskim).
22. H. M. CASSEL and I. LIEBMAN; *The cooperative mechanism in the ignition of dust dispersions*. Combust. Flame 1958, Nr 8.
23. М. Е. ДЕРЕВЯГА, Л. Н. СЛЕСИК, А. Е. ФЕБОРИН; *Режимы горения магнезита*, „Физика горения и взрыва”, № 6, 1978.
24. Г. К. ЕЖОВСКИЙ, Е. С. ОЗЕРОВ; *Воспламенение порошкообразного магнезита*, „Физика горения и взрыва”, № 6, 1977.
25. М. А. ГУРЕВИЧ, Е. С. ОЗЕРОВ, А. А. ЮРИНОВ; *О влиянии пленки окисла на характеристики воспламенения алюминия*, „Физика горения и взрыва”, № 4, 1978.
26. М. А. ГУРЕВИЧ, Г. В. ОЗЕРОВА, А. М. СТЕПАНОВ; *Гетерогенное воспламенение алюминиевой частицы в кислороде и водном паре*, „Физика горения и взрыва”, № 3, 1970.

## Резюме

ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССА ВОСПЛАМЕНЕНИЯ ЧАСТИЦЫ  
ТВЕРДОГО ТОПЛИВА

В статье показан метод математического моделирования процесса воспламенения одиночных сферических частиц твердого топлива на электронно-вычислительных машинах. Исходя из теплодиффузионной теории воспламенения, эта проблема была решена при помощи конечно-разностного метода с применением неявноразностной схемы. Пространство, окружающее частицу, было преобразовано в сферу путем преобразования линейной переменной  $\varrho = \frac{1}{\xi}$ , благодаря чему удалось избежать затруднений связанных с оценкой пограничного слоя, а также было обеспечено сохранение краевых условий в бесконечности. Рассматриваемые в данном вопросе нелинейные краевые условия четвертого рода, ведут к нелинейным алгебраическим уравнениям, которые решались методом биссекции. Метод иллюстрируется примерами вычислений.

## Summary

## SINGLE PARTICLE OF SOLID FUEL IGNITION MODELLING

A numerical method of the modelling ignition process, for a single spherical particle of a solid fuel is presented. The problems has been solved by an implicit finite-difference technique based on the thermal-diffusion ignition theory. The surrounding space of a particle has been transformed into the unit sphere by conversion of the linear variable  $\varrho = \frac{1}{\xi}$ . In this way the difficulty connected with the estimate of the thickness of boundary layer has been avoided and the boundary conditions at the infinity assured. The ourth kind of nonlinear boundary conditions which appear in the problem lead to nonlinear algebraic equation which have been solved by the method of false position. The numerical examples illustrate the method of modelling.

POLITECHNIKA WROCLAWSKA

*Praca została złożona w Redakcji dnia 10 lutego 1979 roku.*

---