экология

УДК 621.43.068

АНАЛІЗ УМОВ РЕГЕНЕРАЦІЇ ДИЗЕЛЬНОГО САЖОВОГО ФІЛЬТРА ДЛЯ ОБҐРУНТУВАННЯ ХІМІЗМУ ВИГОРЯННЯ САЖІ

А.П. Полив'янчук, доц., д.т.н., Ю.І. Шеховцов, асист., Л.С. Заіграєв, доц., к.т.н., Східноукраїнський національний університет ім. Володимира Даля, м. Луганськ

Анотація. Наведено результати розрахунків та теоретичного аналізу умов регенерації дизельного сажового фільтра для обґрунтування хімізму вигоряння сажі. Використано критерій Семенова для визначення впливу газофазової реакції поглинання кисню біля поверхні реакції та дифузійно-хімічний критерій подібності для визначення області протікання процесу вигоряння.

Ключові слова: сажовий фільтр, регенерація, сажа, критерій Семенова, дифузійно-хімічний критерій.

АНАЛИЗ УСЛОВИЙ РЕГЕНЕРАЦИИ ДИЗЕЛЬНОГО САЖЕВОГО ФИЛЬТРА ДЛЯ ОБОСНОВАНИЯ ХИМИЗМА ВЫГОРАНИЯ САЖИ

А.П. Поливянчук, доц., д.т.н., Ю.И. Шеховцов, ассист., Л.С. Заиграев, доц., к.т.н., Восточноукраинский национальный университет им. В. Даля, г. Луганск

Аннотация. Представлены результаты расчетов и теоретического анализа условий регенерации дизельного сажевого фильтра для обоснования химизма выгорания сажи. Использован критерий Семенова для определения влияния газофазной реакции поглощения кислорода у поверхности реакции и диффузионно-химический критерий подобия для определения области протекания процесса выгорания.

Ключевые слова: сажевый фильтр, регенерация, сажа, критерий Семенова, диффузионнохимический критерий.

ANALYSIS OF REGENERATION OF DIESEL ENGINE PARTICULATE FILTER TO SUPPORT THE CHEMISTRY OF SOOT BURN

A. Polivianchuk, Assoc. Prof., D. Sc. (Eng.), Y. Shekhovtsov, T. Asst., L. Zaigrayev, Assoc. Prof., Cand. Sc. (Eng.), East Ukrainian after Volodymyr Dahl National University, Luhansk

Abstract. The results of calculations and theoretical analysis of conditions of the diesel engine particulate filter regeneration to support the chemistry of soot burn are presented. The criteria of semionov for determining the influence of the gas phase reaction of oxygen uptake at the surface of the reaction and the diffusion-chemical similarity criterion to determine the area of the burnout process is used. It was revealed that modeling of the soot burn process is only possible by the simplified algorithm that comprises two surface soot oxidation reactions, taking into account the thermal and catalytic burnout.

Key words: particulate filter, regeneration, soot, criterion of Semenov, diffusion-chemical criterion.

Вступ

Сьогодні надзвичайно гостро стоїть проблема забруднення навколишнього середовища шкідливими і токсичними речовинами, що викидаються з відпрацьованими газами (ВГ) двигунів внутрішнього згоряння. Важливим завданням є зниження кількості шкідливих викидів із ВГ двигунів автомобілів. Відпрацьовані гази містять велику кількість шкідливих речовин, найбільш суттєвими з яких є оксиди азоту, тверді частинки, оксид вуглецю, вуглеводні, сполуки сірки. Тверді частинки (ТЧ) є одним з основних компонентів викидів дизельних автомобілів. Аналіз складу ВГ, виконаний за методикою визначення приведеної маси шкідливого викиду, показав, що частка ТЧ становить більше 40 % від сумарної токсичності ВГ дизельних автомобілів, що експлуатуються в Україні [1]. ТЧ мають широкий спектр негативного впливу на навколишнє середовище та людину, у тому числі сприяють виникненню онкологічних захворювань [2]. Виконання діючих, і тим більше перспективних норм, на викиди ТЧ дизельними автомобілями тільки шляхом дії на робочий процес двигуна практично неможливе. Для цього потрібне вловлювання ТЧ за допомогою сажових фільтрів (СФ), що встановлюються у випускній системі двигуна. Найбільш простими, досить ефективними і надійними є механічні СФ, в яких вловлювання ТЧ здійснюється пористим шаром фільтруючого матеріалу. Проте при експлуатації СФ виникає проблема, пов'язана із заповненням фільтруючого матеріалу уловленими ТЧ, що різко скорочує час роботи фільтра і погіршує ефективні показники дизеля. Вирішення цієї проблеми можливе за рахунок регулярного чищення фільтруючого елемента (ФЕ) від накопиченої сажі, тобто його регенерації. Тому забезпечення регенерації СФ є актуальним завданням.

Аналіз публікацій

Математичні моделі процесу вигоряння сажі за схемою $C + O_2$ в шарі ФЕ зарубіжних дослідників основані на припущенні про кінетичний режим перебігу процесу вигоряння сажі за законом Арреніуса [3–13]. Кінетичні рівняння є основою матеріального балансу потоків реагуючих компонентів і, залежно від наявності експериментальних або розрахункових даних щодо кінетичних констант, їх можна подати за класичною (1) або модифікованою формою (2)

$$k(T) = k_0 e^{-Ea/(RT)},$$
 (1)

$$k(T) = kT e^{a}, \qquad (2)$$

де k(T) – константа швидкості реакції, м/с або с⁻¹ (для газофазових реакцій); k_0 – передекспоненційний множник Арреніуса, м/с або с⁻¹ (для газофазових реакцій); k'_0 – передекспоненційний множник Арреніуса, м/(с·K^b) або 1/(с·K^b) (для газофазових реакцій); T – термодинамічна температура, K; b – показник степеня при T, зазвичай береться 0,5 або мінус 0,5; E_a – енергія активації, кДж/моль; R – універсальна газова стала, кДж/(моль·K).

При цьому розрахункові оцінки або експериментальне обґрунтування кінетичного режиму вигоряння сажі у ФЕ відсутні.

У поданій роботі досліджується механізм окислення сажі в шарі зернистого ФЕ сажового фільтра. З позиції загальноприйнятих уявлень про процес горіння твердих палив розглянемо процеси, що протікають при окисленні вуглецю сажі.

Вигоряння сажі в шарі ФЕ можна представити як вигоряння у шарі пилоподібного твердого палива. Головними чинниками, що впливають на склад ТЧ при накопиченні їх у шарі ФЕ, є режим роботи дизеля і температура ВГ. Адсорбовані на поверхні ТЧ легкі вуглеводні за температур вище 130-190 °С через десорбцію потрапляють у ВГ. Підвищення температури ВГ до 250-600 °С забезпечує умови виникнення каталітичної регенерації СФ. На займання вуглецевої фракції ТЧ легкі вуглеводні істотно впливають за умови їхньої відносно високої концентрації, через що вивільнена теплота при окисленні вуглеводнів на каталізаторі з платино - іридієвого сплаву сприяє підвищенню температури. На момент займання ТЧ складаються, головним чином, із сажі і зольних компонентів, що підтверджено експериментальними даними в роботі [14]. Наявність органічної фракції при займанні сажі залежить від властивостей каталізатора, на поверхні якого вуглеводні можуть окислюватися. За таких умов, цілком обґрунтовано, провідну роль при регенерації СФ віддають сажі [13-18].

Відмінність вигоряння сажі в шарі ФЕ від пилоподібних твердих палив полягає в наступному.

По-перше, режим вигоряння дизельної сажі, за даними досліджень у зарубіжних публікаціях, є кінетичним, проте горіння твердих палив у шарі протікає, як правило, в дифузійній області, а факельне горіння охоплює дифузійну і кінетичну області [19].

По-друге, при аналізі горіння твердих палив враховують вигоряння внутрішньої поверхні палива, що збільшує сумарну швидкість вигоряння. В механізмі вигорянні сажі в потоці ВГ при спалюванні вуглеводневих палив внутрішнє реагування не враховується через малий розмір частинок сажі (до 1 мкм) [19], що повною мірою можна віднести до вигоряння сажі у шарі ФЕ.

По-третє, середній температурний режим горіння у шарі й факельного горіння палива становить 1400–2000 К та залежить від умов горіння і виду вуглецевого матеріалу [19]; в такому ж режимі відбувається вигоряння сажі в потоці ВГ при спалюванні вуглеводневих палив [16]. При регенерації СФ такий температурний режим не допускається, через руйнування фільтруючого матеріалу і каталітичного покриття. За літературними даними верхня межа температури при регенерації становить 1200–1350 К залежно від методу регенерації [6, 14, 20–24]; так, при термічному вигорянні сажі в шарі спостерігаються більші температури, ніж при каталітичному.

Мета і постановка завдання

У поданій роботі здійснено розрахунковотеоретичне дослідження умов регенерації дизельного СФ для обґрунтування хімізму вигоряння сажі. Як критерії, що визначають умови її вигоряння в шарі зернистого ФЕ, застосовано критерій Семенова для визначення впливу газофазової реакції витрачання кисню біля поверхні реакції та дифузійнохімічний критерій подібності для визначення області протікання процесу вигоряння. Очевидно, що на перебіг процесу регенерації СФ впливає режим вигоряння сажі та сукупність реакцій, що протікають за цих умов.

Метою дослідження було створення спрощеної математичної моделі процесу вигоряння сажі в шарі зернистого ФЕ дизельного сажового фільтра, в якій поєднуються термічний та каталітичний механізми окислення сажових частинок.

Матеріали та результати досліджень

Проаналізуємо можливість спрощення хімізму вигоряння сажі, що включає як термічний, так і каталітичний механізми її вигоряння

$$C + O_2 \rightarrow CO_2, \tag{3}$$

$$2C + O_2 \rightarrow 2CO, \tag{4}$$

$$C + CO_2 \rightarrow 2CO, \tag{5}$$

$$C + H_2O \rightarrow CO + H_2, \tag{6}$$

$$2CO + O_2 \rightarrow 2CO_2, \tag{7}$$

$$2H_2 + O_2 \rightarrow 2H_2O. \tag{8}$$

Розглянемо вплив поверхневих реакцій (3)– (6) на загальну швидкість вигоряння вуглецю на прикладі термічного вигоряння сажі (табл. 1).

<u>Таблиця 1 Кінетичні константи для реакцій</u> (3)–(8) за термічним механізмом

| Реак- | $-\Delta H$, | $k' T^b$ | E _a , | Лжерело |
|-------|---------------|-----------------------------------|------------------|----------|
| ція | кДж/моль | K 01 | кДж/моль | джерело |
| (3) | 395,0 | $2,82 \times 10^2 \times T^{0,5}$ | 164,5 | [25] |
| (3) | 395,0 | 5,96×10 ² ×T | 168,0 | [26, 27] |
| (3) | 395,0 | 2,43×10 ⁴ | 168,0 | [19], p |
| (3) | 395,0 | $2,01 \times 10^4$ | 164,5 | [19], p |
| (4) | 219,0 | $6,10 \times 10^4$ | 184,8 | [19], p |
| (5) | -175,5 | $1,17 \times 10^{3}$ | 259,5 | [16] |
| (6) | -130,5 | $6,02 \times 10^{6}$ | 268,8 | [19], p |
| (7) | 571,0 | $7,05 \times 10^{6}$ | 96,3 | [19] |
| (8) | 231,0 | $2,14 \times 10^{14}$ | 129,0 | [19] |

Примітка. р – позначення для констант, що розраховано за [19].

Припускаємо, що при вигорянні сажі речовини, що взаємодіють із вуглецем, не витрачаються та їх концентрація у ВГ є сталою, а продукти реакції миттєво відводяться із СФ таким чином, щоб склад ВГ не змінювався. Це припущення суттєво спрощує картину вигоряння сажі, але за великої витрати відпрацьованих газів можливе. Для поверхневих реакцій (3)–(6) при визначенні швидкості вигоряння вуглецю застосовується таке рівняння

$$\frac{dm}{dt} = -mS_{m,s}(k_3[O_2] + k_4[O_2]^{0,73} + k_5[CO_2] + k_6[H_2O]),$$
(9)

де m – маса сажі, кг; t – час, с; $S_{m,s}$ – питома поверхня сажі для частинок розміром 1 мкм, $M^2/кг$; k_3 , k_4 , k_5 , k_6 – константи швидкості вигоряння сажі за табл. 1, м/с; [O₂], [CO₂], [H₂O] – масова концентрація окислювача, кг/M³.

За постійної температури можливе розв'язання рівняння (9) його інтегруванням

$$m = m_0 \exp(-S_{m,s}(k_3[O_2] + k_4[O_2]^{0,73} + k_5[CO_2] + k_6[H_2O])\tau),$$
(10)

де m_0 – початкова маса сажі; τ – час вигоряння, с.

Розрахунки за формулою (10) показали, що вплив поверхневих реакцій (5) і (6) на термічне вигоряння сажі в діапазоні температури 600–1000 °С та складу ВГ, який визначено розрахунками за складом дизельного палива (С = 87 %, H = 12,6 %, O = 0,4 %) при варіюванні коефіцієнта надлишку повітря (α) від 1 до 10, незначний (рис. 1, 2).

За розрахунками для 99 % маси вигорілої сажі значення m/m_0 , що визначені за рівнянням (10), відрізняються на величину відносного відхилення (ε) від значень m/m_0 , що враховують тільки поверхневі реакції (3) і (4), не більше 1,5 % (рис. 1, б) за температури 1000 °C в усьому діапазоні коефіцієнта α . За температури 600 °C відносні відхилення становлять $\varepsilon \ll 1$ % (рис. 2, б), що відповідає загальним відомостям щодо процесів горіння органічних твердих палив.

Значне відхилення спостерігається при $\alpha = 1$ через відсутність вигоряння сажі за кисневим механізмом (залишкова розрахункова концентрація [O₂] дорівнює нулю), а також для області із залишковою масою сажі, меншою за 1 % (рис. 1, б). Враховуючи, що дизелі працюють при $\alpha > 1$, можна спростити хімізм вигоряння сажі в шарі зернистого ФЕ, виключенням поверхневих реакцій (5) і (6), та вважати, що зазначена невизначеність знаходиться в межах розрахункових і експериментальних похибок кінетичних констант і не впливає на результати теоретичних розрахунків процесу регенерації СФ.



Рис. 1. Вплив поверхневих реакцій (5)–(6) на вигоряння сажі при 1000 °С: а – залежність m/m_0 від α та τ ; б – залежність є, %, від α та τ



Рис. 2. Вплив поверхневих реакцій (5)–(6) на вигоряння сажі при 600 °С: а – залежність m/m_0 від α та τ ; б – залежність є, %, від α та τ

При регенерації можливе витрачання кисню за газофазовими реакціями (7)–(8). В пограничному шарі за певних умов відбувається вигоряння CO і H₂, тому необхідно оцінити вплив газофазових реакцій на хімізм вигоряння сажі. За аналізом впливу поверхневих реакцій при регенерації CФ, наведеним у роботі [27], газифікація сажі водяними парами не впливає на сумарну швидкість вигоряння, а кількості водню, що є у ВГ та утворюється при газифікації, не достатньо для істотного впливу на витрачання O₂ в газовій фазі й на поверхні частинок сажі, тому газофазова реакція (8) із аналізу виключається.

Для оцінки впливу витрачання кисню за реакцією (7) біля поверхні реакції застосуємо критерій Семенова, що визначається як відношення потоку кисню, витраченого на реакцію вигоряння СО, до його дифузійного потоку [19]

$$Se = \sqrt{k_7 D_{O_2 - cymin}} / \alpha_{dif}, \qquad (11)$$

де k_7 – константа швидкості газофазової реакції (7) вигоряння СО, с⁻¹; $D_{O_2-суміш}$ – коефіцієнт дифузії, м²/с; α_{dif} – коефіцієнт дифузійного масообміну, м/с.

Область існування критерію Se становить від 0 до ∞ та розділена на три діапазони, залежно від схеми горіння вуглецю в пограничному шарі частинок палива. При Se \leq 0,4 швидкість вигоряння CO низька і пограничний шар вважається таким, що не горить. В разі малих значень Se вигоряння CO в межах пограничного шару можна не враховувати. Такий випадок має місце при горінні дрібних пилових частинок палива в умовах помірних температур (1200–1600 K), характерних для пиловугільних топок типів TЧ та ПМЗ [19].

При 0,4 < Se ≤ 2,0 пограничний шар біля частинок палива вважається одинарним і таким, що горить. Сумарна швидкість вигоряння вуглецю визначається з урахуванням реакції вигоряння CO.

При 2,0 < Se температура процесу вигоряння палива дуже висока, а швидкість окислення СО наближається до нескінченності. Пограничний шар розбивається на дві області: одна вважається такою, що горить, а друга – такою, що не горить і розташована біля поверхні частинки палива. За такої структури пограничного шару кисень не досягає поверхні частинки палива, що зазвичай має місце за високої температури або при вигорянні досить великих частинок палива [19].

Характер вимушеного руху потоку ВГ у шарі зернистого ФЕ з накопиченою сажею визначається критерієм Рейнольдса (Re) за рівнянням [28]

$$\operatorname{Re} = w_{1 \operatorname{cep}} \varphi_1 d\rho / \eta, \qquad (12)$$

де $w_{1,cep}$ – середня швидкість газового потоку в розрахунку на повний переріз шару ФЕ, м/с; φ_1 – коефіцієнт форми тіла; беремо для зерна з активованого глинозему $\varphi_1 = 0,49$ [28] та наближено для частинок сажі $\varphi_1 = 1$; d – характерний розмір, м; беремо для шару ФЕ за середнім розміром зерна d = 0,0046 м та шару сажі – за середнім розміром частинок сажі $d = 10^{-6}$ м; ρ – густина ВГ, кг/м³; за умов регенерації припускаємо, що тиск ВГ $P \approx P_0$, тоді

$$\rho = \rho_0 T_0 / T, \qquad (13)$$

 ρ_0 – густина ВГ при $T_0 = 273$ К, кг/м³; беремо для ВГ $\rho_0 = 1,2807$ кг/м³ в діапазоні $\alpha = 1-10$; η – коефіцієнт динамічної в'язкості, Па с.

Для розрахунків за експериментальними даними, які подано в [28], апроксимована залежність коефіцієнта динамічної в'язкості від T(від 253 до 1073 К) та α (від 1 до 10)

$$\eta = 3,132 \cdot 10^{-6} + (4,935 \cdot 10^{-8}T - -1.377 \cdot 10^{-11}T^2)\alpha.$$
(14)

Коефіцієнт кореляції для формули (14) становить R = 0,9994, а максимальні відхилення розрахункових значень від експериментальних у діапазоні температур 100–800 °С для $\alpha = 1$ не перевищують 4,2 %, а для $\alpha = 2$ та більше – не перевищують 1,9 %.

Процеси дифузії в шарі ФЕ і шарі сажі протікають із різною інтенсивністю через відмінність розмірів зерен ФЕ та частинок сажі. Інтенсивність дифузії визначається дифузійним критерієм Нуссельта (Nu_{dif}) за формулою

$$Nu_{dif} = \alpha_{dif} \varphi_1 d / D, \qquad (15)$$

де α_{dif} – коефіцієнт дифузійного обміну, м/с. Коефіцієнт взаємної дифузії визначається за ступеневою залежністю [19] при $P \approx P_0$

$$D = D_0 (T / T_0)^n,$$
(16)

де D_0 – коефіцієнт взаємної дифузії за нормальних умов ($T_0 = 273$ К, $P_0 = 101325$ Па), м²/с; n – показник ступеня, що залежить від коефіцієнта Сезерленда (табл. 2).

Таблиця 2 Експериментальні дані взаємної дифузії в газах

| Гази | D ₀ , см ² /с | п | Область температур, К | Джере- ло |
|----------------------------------|--|------|-----------------------------|--------------|
| O ₂ -CO ₂ | 0,138 | 1,80 | 273-1000 | [29] |
| O ₂ -H ₂ O | 0,240 | 1,73 | 298–1000 | [29] |
| O ₂ -N ₂ | 0,184 | 1,73 | - | [19] |
| O ₂ -CO | 0,188 | 1,68 | 273-1000 | [29] |

Коефіцієнт дифузії для O₂ в суміші з CO та іншими компонентами ВГ визначається за формулою

$$D_{O_2-\text{сумінн}} = (100 - r_1) \left(\sum_{i=2}^5 \frac{r_i}{D_{1-i}}\right)^{-1}, \qquad (17)$$

де r_1 – об'ємна частка кисню, %; r_i – об'ємні частки компонентів ВГ, %; D_{1-i} – коефіцієнти взаємної дифузії, м²/с.

Критерій Nu_{dif} визначається за аналогією з тепловими процесами [19, 30–32] у вигляді Nu_{dif} = f(Re):

- для малих значень Re < 20 [19]

$$Nu_{dif} = 2 + 0,16 \, Re;$$
 (18)

$$Nu_{dif} = 0,61 Re.$$
 (20)

– для 200 ≤ Re < 1700 [30]</p>

За швидкостей фільтрації, менших за 0,3 м/с, враховуються інтенсивність молекулярного переносу кількості руху та перенесення маси домішки дифузією із застосуванням дифузійного критерію Прандтля (Pr_{dif}) [19, 30].

Формула (18) задовільно узгоджується з аналогічними залежностями [30–32] і може бути застосована для оцінки Nu_{dif} при Re→0. Можливим недоліком формул (18)–(20) є їх одержання для ізотермічних умов, на відміну від процесу регенерації.

Склад ВГ корегувався з урахуванням вигоряння сажі (регенерації) шляхом осереднення значень концентрацій за період вигоряння 85–99 % маси накопиченої сажі. У розрахунках береться, що вміст сажі у фільтруючому шарі становив 20 г сажі на 1 л об'єму ФЕ, об'єм ФЕ – 5,4 л, товщина ФЕ – 155 мм.

Зміна складу ВГ (рис. 3) при регенерації визначалася за математичною моделлю [33] матеріального балансу для сажі за рівнянням (10) (без горіння CO₂, H₂O), а також для O₂, CO₂, CO за рівняннями

$$[O_2] = 2,67(1-0,5f_{CO})\eta C_{s,0}(1-\exp(-R\tau)), (21)$$

де $f_{\rm CO}$ – вибірковість вигоряння сажі за реакцією (4)

$$f_{\rm CO} = \left(1 + (k_3 / k_4) [O]_0^{0,27}\right), \qquad (22)$$

 η – частка поточної маси сажі; $C_{s,0}$ – початковий вміст сажі, г/л; $C_{s,0} = 20$ г/л; R – швидкість вигоряння сажі

$$R = S_{m,s}(k_3[O_2] + k_4[O_2]^{0,73}), \quad (23)$$

 $S_{m,s}$ – питома поверхня частинок сажі, м²/кг; для частинок сажі розміром 1 мкм $S_{m,s} = 3000 \text{ м}^2/\text{кг};$

$$[CO_2] = 3,67(1 - f_{co})\eta C_{s,0}(1 - \exp(-R\tau)), \quad (24)$$

$$[CO] = 2,33 f_{co} \eta C_{s,0} (1 - \exp(-R\tau)). \quad (25)$$



Рис. 3. Змінення складу відпрацьованих газів при регенерації (α = 3, *T* = 1000 °C)

Для шару сажі Se не залежить від швидкості газового потоку ($w_{1,cep} = 0, 1-2$ м/с при T = 1000 °C) та наближається до нуля (Se << 0,4) в усьому діапазоні температур. Це пояснюється малим середнім розміром частинок сажі (d = 1 мкм), через що Nu_{dif} вироджується. Дійсно, Nu_{dif} при Re \rightarrow 0 набуває свого граничного значення Nu_{dif} = 2; при цьому дифузійний опір є мінімальним ($1/\alpha_{dif} \rightarrow 0$).

Для ФЕ, починаючи з температур приблизно 680 °C (рис. 4) та 760 °C (рис. 5), розрахун-кові значення Se > 0,4 в заданому діапазоні $w_{1,cep}$.



Рис. 4. Залежність Se від α та *T* для фільтруючого шару (d = 0,0046 м, $w_{1,cep} = 0,1$ м/с при T = 1000 °C)



Рис. 5. Залежність Se від α та *T* для фільтруючого шару (d = 0,0046 м, $w_{1,cep} = 2$ м/с при T = 1000 °C)

Температури 600–800 °С є бажаними максимальними при каталітичній регенерації, що обумовлено вимогами термічної стійкості каталізатора та ФЕ. Тому за таких умов можна вважати, що догоряння СО відбувається тільки в об'ємі газового потоку.

За зменшення швидкості газового потоку спостерігається збільшення Se для одних і тих самих температур, що обумовлено зменшенням α_{dif} .

При регенерації іноді спостерігаються високі локальні температури в ΦE , що не відображають у цілому процес регенерації. Враховуючи можливості зниження температурного порогу займання сажі застосуванням каталізу та підбору оптимальних геометричних і теплофізичних характеристик фільтруючого матеріалу, Se в діапазоні експлуатаційних параметрів роботи С Φ не буде перевищувати 0,4. Наприклад, за зменшення середнього розміру зерен до 3 мм в діапазоні робочих температур та швидкостей газового потоку при регенерації Se $\leq 0,4$.

Швидкість вигоряння сажі в шарі ФЕ визначається підведенням окиснювача за рахунок дифузії до поверхні частинки та швидкістю хімічної реакції окислення або газифікації. Відповідно до швидкостей цих двох процесів встановлюється сумарна швидкість вигоряння частинки сажі за вказаного рівня концентрації окиснювача на її поверхні. Вигоряння частинок, залежно від їх розміру і властивостей газового середовища, визначається або загальним впливом дифузії окиснювача та кінетики хімічної реакції на поверхні частинки, або одним із чинників [16, 19]. Режим вигоряння можна прогнозувати, якщо визначити внесок кінетичного і дифузійного опорів для заданих умов, тоді сумарна швидкість вигоряння сажі визначається за рівнянням [16]

$$K_c = C_o / (R_{ch} + R_{dif}),$$
 (26)

де $K_{\rm C}$ – питома швидкість вигоряння C, кг/(м²·c); $C_{\rm o}$ – ефективна концентрація окиснювача в газовому середовищі, кг/м³; R_{ch} , R_{dif} – хімічний та дифузійний опори, с/м.

В теорії горіння кінетична область вигоряння вуглецю обмежується умовою для дифузійно-хімічного критерію подібності [19]

$$Nu_{ch} = (k_3 + k_4) / \alpha_{dif}.$$
 (27)

Роль поверхневих реакцій (5) і (6) проявляється при дифузійному горінні, де інтегральна швидкість окислення вуглецю за вказаними реакціями має приблизно перший порядок, як і для реакцій (3) і (4), але взаємодію сажі з CO₂ і H₂O можна не враховувати в кінетичній області вигоряння сажі (рис. 1, 2), яка обмежується Nu_{ch} \leq 0,1.

Вигоряння сажі у вільному об'ємі й на поверхні зерен протікає в кінетичній області в діапазоні робочих температур і швидкостей газового потоку при регенерації. У зоні підвищених температур (вище 800 °C Nu_{ch} є більшим за 0,1. Проте лише при Nu_{ch} > 100 не враховують кінетичний опір і вважають процес горіння дифузійним [19].

Висновки

Розроблено спрощену математичну модель процесу вигоряння сажі в шарі зернистого ФЕ сажового фільтра, яка враховує термічний та каталітичний механізми окислення сажових частинок і дозволяє ефективно оцінювати ступінь регенерації дизельних сажових фільтрів.

Встановлено, що математичне моделювання процесу регенерації сажового фільтра можливе за спрощеним хімізмом вигоряння сажі, що включає дві поверхневі реакції (3) і (4). При цьому доведено, що поверхневі реакції (5), (6) та газофазові реакції (7), (8) в умовах каталітичної регенерації ФЕ можна не враховувати, оскільки їх вплив на результати розрахунків ступеня регенерації є несуттєвим.

Оцінка Nu_{ch} показала практичну можливість використання кінетичних залежностей для

описання матеріального балансу процесу регенерації зернистого ΦE без урахування дифузії O₂. Тому можна вважати, що концентрація O₂ у газовій фазі та біля поверхні частинок сажі і зерен ΦE однакова.

Література

- 1. Звонов В.А. Проблемы экологической безопасности автотранспорта / В.А. Звонов, Л.С. Заиграев, А.П. Дядин // Вісник Східноукр. держ. ун-та. 1996. № 1. С. 62–69.
- Оценка и контроль выбросов дисперсных частиц отработавших газов дизелей / В.А. Звонов, Г.С. Корнилов, А.В. Козлов, Е.А. Симонова. М.: Прима-Пресс-М, 2005. 312 с.
- Mayer A. Particulate-Filter-Systems, Particle-Traps / A. Mayer // Encyclopedic article. 2003. 37 p.
- Konstandopoulos A.G. Periodically reversed flow regeneration of diesel particulate traps / A.G. Konstandopoulos, M. Kostoglou // SAE Techn. Pap. Ser. 1999. N 1999-01-0469. 14 p.
- Achour L. Original modeling approach of diesel particulate filter regeneration / L. Achour, J.-B. Dementhon, P. Rouchon // SAE Techn. Pap. Ser. – 2001. – Vol. 2001-01-1943. – P. 53-59.
- Romero A.F. Combustion processes of particulate matter and soot in ceramic filter traps for diesel engines and numerical modeling / A.F. Romero, R. Gutierrez, R. Garcia-Moreno // SAE Techn. Pap. Ser. - 1997. – Vol. 970475. – P. 175–181.
- Koltsakis G.C. Modes of catalytic regeneration in diesel particulate filters / G.C. Koltsakis, A.M. Stamatelos // Ind. Eng. Chem. Res. – 1997. – Vol. 36. – P. 4155–4165.
- Assessment of diesel particulate controldirect and catalytic oxidation / M.J. Murphy, L.J. Hillenbrand, D.A. Trayser, J.H. Wasser // SAE Tech. Pap. Ser. – 1981. – Vol. 810112.
- Opris C.N. A 2-D computational model describing the heat transfer, reaction kinetics and regeneration characteristics of a ceramic diesel particulate trap / C.N. Opris, J.H. Johnson // SAE Techn. Pap. Ser. – 1998. – Vol. 980546. – 21 p.
- 3-D catalytic regeneration and stress modeling of diesel particulate filters by ABAQUS FEM Software / G. Pontikakis, A. Stamatelos, K. Bakasis, N. Aravas //

SAE Techn. Pap. Ser. – 2002. – Vol. 2002-01-1017. – 15 p.

- Integrated 1D and 3D modeling of exhaust gas aftertreatment devices / R. Wanker, J.C. Wurzenberger, B. Peters, R. Tatschl // International Multidimensional Engine Modeling User's Group Meeting. – Austria: AVL List GmbH, 2004. – 7 p.
- Atmakidis Th. Modeling complex exhaust gas aftertreatment by Star-CD/axisuite coupling / Th. Atmakidis, O. Haralampous, G.C. Koltsakis // STAR European Conference, March 2011. – 2011. – 34 p.
- Konstandopoulos A.G. Update on the science and technology of diesel particulate filters / A.G. Konstandopoulos, E. Papaioannou1 // KONA Powder and Particle J. 2008. Vol. 26. P. 36-65.
- Kishi Y. Characteristic and combustibility of particulate matter / Y. Kishi, H. Tohno, M. Ara // SAE Techn. Pap. Ser. – 1992. – Vol. 920687. – P. 139-146.
- Particulate traps for heavy duty vehicles / A. Mayer, R. Evéquoz, Th. Schweizer et al. – Swiss Agency for the Environment, Forests and Landscape (SAEFL) 3003. – Berne, 2000. – 146 p.
- 16. Образование и выгорание сажи при сжигании углеводородных топлив / Ф.Г. Бакиров, В.М. Захаров, И.З. Полещук, З.Г. Шайхутдинов. – М.: Машиностроение, 1989. – 128 с.
- Звонов В.А. Физико-химические и токсикологические характеристики частиц, выбрасываемых дизельными двигателями в окружающую среду (Обзор) / В.А. Звонов, Е.А. Симонова, Ю.И. Шеховцов // Экотехнологии и ресурсосбережение. – 2005. – № 2. – С. 37–47.
- Particulate filter installation (retrofit only) for the series 50[®] and series 60[®] engine : 18SP576 // Detroit Diesel Corporation. – Detroit, 2003. – 8 p.
- 19. Основы практической теории горения : учебное пособие для вузов / В.В. Померанцев, К.М. Арефьев, Д.Б. Ахмедов и др.; под ред. В.В. Померанцева. – 2-е изд., перераб. и доп. – Л.: Энергоатомиздат, Ленингр. отд-ние, 1986. – 312 с.
- 20. The Cu cure for particulates // Transp. Eng. - 1992. - Vol. Nov. - P. 21-22.
- Hillenbrand L.J. A concept for catalyzed ignition of diesel soot / L.J. Hillenbrand, D.A. Trayser // SAE Techn. Pap. Ser. – 1981. – Vol. 811236. – 11 p.

- Mayer A. VERT : Curtailing emissions of diesel engines in tunnel sites / A. Mayer // Technical reports, April 1998. – 13 p.
- McCabe R.W. Regeneration characteristics of platinum, lithium, and platinum-lithium catalyzed filters / R.W. McCabe, R.M. Sinkevitch // SAE Techn. Pap. Ser. – 1987. – Vol. 872137. – P. 1–9.
- 24. John S. Howitt. Cellular ceramic diesel particulate filter / John S. Howitt, Max R. Montierth // SAE Techn. Pap. Ser. 1981. Vol. 810114. 9 p.
- Lee K. On the rate of combustion of soot in a laminar soot flame / K. Lee, M. Thring, J. Beer // Combustion and flame. - 1962. -Vol. 6. - P. 137-145.
- Bissett E.J. Mathematical model of the thermal regeneration of a wall-flow monolith diesel particulate filter / E.J. Bissett // Chem. Eng. Sciences. – 1984. – Vol. 39. – P. 1232–1244.
- Kinetics of the oxidation of diesel soot / J.P.A. Neeft, T.X. Nijhuis, E. Smakman et al. // Fuel. – 1997. – Vol. 76(12). – P. 1129–1136.
- Идельчик И.Е. Справочник по гидравлическим сопротивлениям / И.Е. Идельчик; под ред. М.О. Штейнберга. – 3-е изд., перераб. и доп. – М.: Машиностроение, 1992. – 672 с.
- Справочник химика: химическое равновесие и кинетика: свойства растворов: электродные процессы. Т. 3 / ред. кол.:

чл.-корр. АН СССР Никольский Б.П. (глав. ред.) и др. – 2-е изд., пераб. и доп. – М.: Химия: Ленинград. отд-ние, 1965. – 1008 с.

- Кутателадзе С.С. Справочник по теплопередаче / С.С. Кутателадзе, В.М. Боришанский. – М.: Госэнергоиздат, 1958. – 414 с.
- Бажан П.И. Справочник по теплообменным аппаратам / П.И. Бажан, Г.Е. Каневец, В.М. Селиверстов. – М.: Машиностроение, 1989. – 366 с.
- 32. Полетавкин П.Г. Нагрев воздуха и газов до 1500 °С и выше в высокотемпературных теплообменниках с неподвижной шариковой насадкой / П.Г. Полетавкин // Теплообмен в высокотемпературном потоке газа, 1972. – С. 192–209.
- 33. Шеховцов Ю.И. Математическая модель выгорания твердых частиц в структуре дизельного сажевого фильтра / Ю.И. Шеховцов, Л.С. Заиграев // Авиационно-космическая техника и технология. – 2003. – Вып. 7(42). – С. 16–19.

Рецензент: Н.В. Внукова, професор, к.геогр.н., XHAДУ.

Стаття надійшла до редакції 17 серпня 2014 р.