



ISSN 2071-2898 (Print)  
ISSN 2071-2901 (Online)

**Галанин М.П., Исаев А.В.,  
Конев С.А.**

О моделировании  
образования сажи при  
диффузионном горении  
углеводородных топлив

**Рекомендуемая форма библиографической ссылки:** Галанин М.П., Исаев А.В., Конев С.А. О моделировании образования сажи при диффузионном горении углеводородных топлив // Препринты ИПМ им. М.В.Келдыша. 2019. № 110. 32 с. doi:[10.20948/prepr-2019-110](https://doi.org/10.20948/prepr-2019-110)  
URL: <http://library.keldysh.ru/preprint.asp?id=2019-110>

Ордена Ленина  
ИНСТИТУТ ПРИКЛАДНОЙ МАТЕМАТИКИ  
им. М.В. Келдыша  
Российской академии наук

М.П. Галанин, А.В. Исаев, С.А. Конев

О моделировании образования сажи  
при диффузионном горении углеводородных топлив

Москва — 2019

**Галанин М.П., Исаев А.В., Конев С.А.**

О моделировании образования сажи при диффузионном горении углеводородных топлив

Изложен подход к математическому моделированию процесса зарождения и роста частиц сажи при диффузионном горении углеводородных топлив. Процесс описывается цепочкой переходов углерода между различными выделенными состояниями. Для описания использована жёсткая система обыкновенных дифференциальных уравнений Колмогорова. Решение системы представляет собой совокупность функций, соответствующих вероятностям пребывания углерода в выделенных состояниях.

**Ключевые слова:** углеводородное топливо, диффузионное пламя, дисперсный углерод (сажа), сажеобразование, уравнения Колмогорова, жёсткие системы, методы Розенброка

**Mikhail Pavlovich Galanin, Alexander Vasilievich Isaev,  
Stanislav Andreevich Konev**

On a simulation of soot formation under diffusion combustion of hydrocarbon fuels

An approach to mathematical modeling of soot particles formation and particles growth under diffusion combustion of hydrocarbon fuel is presented. The process is described with a chain of carbon transitions between different selected states. The stiff system of Kolmogorov ordinary differential equations (ODEs) is used to simulate the process. The solution of the system represents the probability of carbon presence in the selected states.

**Key words:** hydrocarbon fuels, diffusion flame, dispersed carbon (soot), soot formation, Kolmogorov equations, stiff systems, Rosenbrock methods

Работа выполнена при частичной финансовой поддержке РФФИ (проект № 18-01-00252).

# Введение

Работа посвящена построению и применению математической модели образования сажи в процессе горения углеводородных топлив.

В разделе 1 приведены общие представления о физико-химических процессах образования частиц сажи при диффузионном горении углеводородов. В разделе 2 сформулирована физико-химическая модель процесса образования сажи при горении углеводородных топлив и представлена постановка задачи. В разделе 3 описана математическая модель процесса образования сажи при горении углеводородных топлив. В разделе 4 предложен метод решения задачи и приведены результаты численного моделирования. В заключении подведены итоги работы.

## 1. Общие представления о процессах, протекающих при образовании сажи в ходе горения углеводородных топлив

Сажа, или дисперсный углерод (ДУ), — одна из форм твердофазного состояния углерода, через которую он проходит в условиях диффузионного горения углеводородных топлив (УВТ), когда скорость горения лимитируется диффузией паров топлива и кислорода воздуха [1–3].

Непосредственно в пламени форма частиц сажи близка к сферической с диаметром в диапазоне от 5 до 100 нм [4–7]. При этом распределение частиц по размерам может быть удовлетворительно описано рядом известных распределений: логарифмически нормальным, рэлеевским, Розина–Раммлера, значения параметров которых зависят от склонности УВТ к сажеобразованию и термодинамических параметров среды в зоне горения [8, 9].

Сажа, как правило, является нежелательным продуктом горения. При этом, несмотря на то что природу и механизмы её образования изучают уже около 200 лет, многое остается невыясненным, и для многих областей техники пока нет достаточно эффективных способов управления процессами образования и последующей газификации сажи. К числу основных направлений исследований в областях, связанных с сажеобразованием при горении УВТ, относятся:

- исследование процессов в камерах сгорания (КС) газотурбинных двигателей (ГТД) с целью выработки технических решений по улучшению теплового состояния «горячей» части двигателя;
- разработка технических решений по снижению выбросов вредных компонентов отработавших газов (ОГ) поршневых двигателей внутреннего сгорания (ДВС);

- исследование влияния свойств УВТ и параметров рабочего процесса на старение моторных масел в дизельных двигателях (ДД) и др.

**Известные результаты.** В результате проведенных исследований установлено, что проявление основных закономерностей процессов, связанных с образованием и газификацией сажи при горении УВТ, не зависит от режима диффузионного горения — ламинарного или турбулентного. В связи с этим детальное исследование механизмов отдельных стадий сажеобразования целесообразно выполнять в условиях ламинарного диффузионного пламени (ЛДП), а полученные результаты в дальнейшем использовать для описания процессов горения в более сложных условиях камер сгорания ДВС и различных топочных устройств [9, 10].

По результатам выполненных исследований процесс образования сажи в диффузионном пламени может быть представлен в виде части цепочки отдельных стадий превращения УВТ и состояний углерода топлива [2, 9, 10]:

- 1) образование радикалов, а затем бирадикалов карбенного типа при пиролизе УВТ;
- 2) образование полициклических ароматических углеводородов (ПЦАУ);
- 3) образование димеров ПЦАУ;
- 4) образование кристаллитов сажи;
- 5) образование и рост частиц сажи.

Представленная цепочка превращений частиц сажи пояснена на схеме, представленной на рис. 1.

Происходящие превращения очень сложны и многостадийны, в них участвует огромное число различных соединений — в основном короткоживущих, — многие из которых невозможно зарегистрировать известными физическими методами. Поэтому в настоящее время рассматриваемые процессы не могут быть полностью описаны с помощью классического аппарата химической кинетики.

## **2. Физико-химическая модель процесса образования сажи при горении углеводородных топлив и постановка задачи**

Учитывая отсутствие поперечного конвективного переноса вещества в ЛДП, можно считать, что во всех элементарных трубках тока цепочка превращений углерода топлива реализуется одинаковым образом (таким же, как и в осевой трубке тока, проходящей через точки F, P, S, N, G и H на рис. 1). В

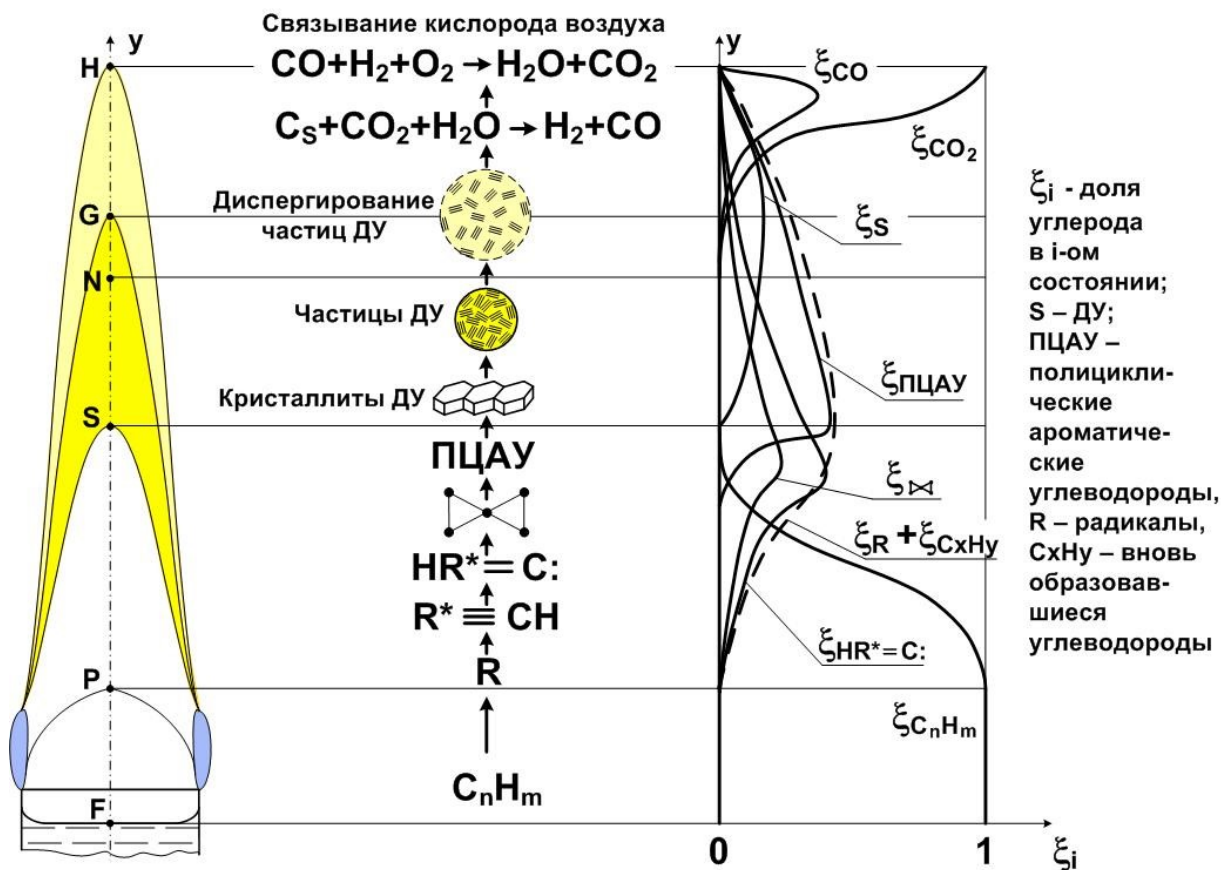


Рис. 1. Схема процесса образования сажи в ламинарном диффузионном пламени

дальнейшем для определенности будем рассматривать моделируемые превращения применительно к осевой трубке тока, считая, что в остальных трубках тока процессы протекают подобным образом.

Упрощённо эту цепочку можно представить в виде марковского процесса [11], описывающего серию превращений углеводородов топлива в результате пиролиза. При этих превращениях углерод топлива последовательно переходит из исходного состояния в состояние сажи через ряд промежуточных состояний. В таком случае каждому состоянию углерода  $i$  будет соответствовать своя вероятность  $y_i$  пребывания в нём отдельно взятого атома углерода. В рассматриваемом нами приближении вероятность  $y_i$  численно равна доле углерода топлива, находящегося в состоянии  $i$ .

Чтобы получить функцию распределения частиц ДУ по размерам (массам), разобьём состояние «Сажа» на  $M$  отдельных состояний, соответствующих различным диапазонам размеров частиц. Сумма вероятностей нахождения углерода во всех рассматриваемых состояниях равна

$$\sum_{i=0}^{M-1} y_i = 1.$$

Величины вероятностей  $y_i$  пребывания углерода в отдельном  $i$ -ом состоянии входят в систему обыкновенных дифференциальных уравнений Колмогорова

общего вида, описывающую любой марковский процесс, независимо от его физической природы [12, с. 132]:

$$\frac{dy_i}{dt} = \sum_j y_j \lambda_{j,i} - y_i \sum_j \lambda_{i,j}, \quad i = \overline{0, M-1}, \quad (2.1)$$

здесь  $\lambda_{j,i}$  — частоты переходов из состояния  $j$  в состояние  $i$ , а  $\lambda_{i,j}$  — частоты переходов из состояния  $i$  в состояние  $j$ .

Условимся здесь и далее с помощью  $[\cdot]$  обозначать размерности физических величин, поэтому  $[y_i] = 1$ ,  $[\lambda_{i,j}] = \text{с}^{-1}$ .

**Сорта частиц по состояниям.** Для моделирования конкретного физического процесса необходимо задать частоты переходов  $\lambda_{i,j}$  в явном виде. Опишем, каким сортам частиц ДУ соответствуют вероятности  $y_i$  и как необходимо задать частоты  $\lambda_{i,j}$  для них.

От выбора количества подвидов  $M$  состояния «Сажа» зависят точность и качество результатов, получаемых с помощью представленной модели. В рамках данной работы примем  $M = 15$ .

Состоянию «0» соответствуют исходные углеводороды топлива, а также промежуточные продукты их пиролиза вплоть до состояния «1», исключая его.

Состоянию «1» соответствуют бирадикалы карбенного типа — конечный продукт т.н. «досажевого» пиролиза УВТ.

Состояниям «2» и «3» соответствуют полициклические ароматические углеводороды (ПЦАУ) и их димеры соответственно.

Состояние «4» соответствует кристаллитам сажи. Все последующие состояния, начиная с «5», соответствуют крупным частицам сажи, упорядоченным в порядке возрастания размера.

Заметим, что процесс сажеобразования в рамках данной работы считается необратимым, поэтому  $\lambda_{j,i} = 0$  при  $j > i$ .

**Переход из состояния «0».** Будем считать, что пиролиз топлива начинается с мономолекулярного распада молекул исходных углеводородов (состояние «0»), обусловленного их возбуждением в результате многоквантового поглощения излучения трёхатомных газов и частиц ДУ из «горячих» областей пламени. Таким образом, зададим частоту  $\lambda_{0,1}$  (обратную времени уменьшения его массовой доли в состояниях, предшествующих состоянию «1», в  $e \approx 2.71828$  раз) равной

$$\lambda_{0,1} = \frac{1}{\tau_R} y_0^{\nu-1}, \quad (2.2a)$$

где

- $\tau_R$  — время релаксации досажевого углерода в процессе сажеобразования; является функцией склонности УВТ к сажеобразованию,  $[\tau_R] = \text{с}$ ;

- $\nu$  — порядок кинетики процесса перехода из состояния «0» в состояние «1», который определяется механизмом пиролиза УВТ. О выборе значения параметра — см. раздел 3.

Значения остальных частот  $\lambda_{0,j}$ ,  $j = \overline{2, 14}$  полагаются равными нулю.

**Переход из состояния «1».** Для состояний «1»–«14» интенсивности  $\lambda_{i,j}$  перехода углерода из состояния « $i$ » в состояние « $j$ » определяются частотами столкновений соответствующих частиц. При этом переходы углерода в состояния «2» (ПЦАУ) и «3» (димеры ПЦАУ) происходят в результате тройных столкновений частиц предыдущего для них состояния, а в остальные — в результате парных столкновений частиц различных состояний.

**О тройных столкновениях.** Заметим, что при переходе частиц углерода из состояния «1» в состояние «2» (в результате тройных столкновений частиц состояния «1») образуется химическое соединение с более высокой молекулярной массой — ПЦАУ. Отскока частиц при столкновении не происходит в силу высокой химической активности бирадикалов карбеного типа.

В то же время переход частиц углерода состояния «2» в состояние «3» в результате тройного столкновения сопровождается отскоком одной из сталкивающихся частиц. Роль третьей частицы при тройных столкновениях заключается в отведении части энергии от пары других частиц из тройки столкнувшихся. Благодаря этому происходит стабилизация комплекса из остальных двух частиц и обеспечиваются условия для дальнейшего роста его массы и размеров за счёт захвата сталкивающихся с ним частиц меньшей массы. Описанный процесс фактически является фазовым переходом ПЦАУ в состояние димеров ПЦАУ.

Частота тройных столкновений существенно ниже частоты парных столкновений, поэтому на ранних стадиях процесса накопление молекул-предшественников сажи (на рис. 1 обозначены как ПЦАУ) в ходе досажевого пиролиза УВТ не происходит. Причина этого в том, что молекулы ПЦАУ (мономеры), образующиеся в зоне пиролиза, нестабильны в условиях высоких температур и быстро распадаются, т.е. образование ПЦАУ имеет обратимый характер.

Следовательно, частоту  $\lambda_{1,2}$  необходимо задать следующим образом:

$$\lambda_{1,2} = k_{1,2}y_1^2, \quad (2.2b)$$

где  $k_{1,2}$  — размерная константа ( $[k_{1,2}] = \text{с}^{-1}$ ), описывающая переход частицы из состояния «1» в «2»,  $y_1^2$  — вероятность существования чрезвычайно короткоживущего комплекса из двух частиц типа «1» в момент столкновения этого комплекса с третьей частицей типа «1».

Остальные частоты  $\lambda_{1,j}$  определим по формулам

$$\lambda_{1,j} = k_{1,j}y_1, \quad j = \overline{3, 14}, \quad (2.2c)$$



что соответствует парным столкновениям частицы типа «1» с частицами других типов ( $k_{1,j}$ ,  $j = \overline{3, 14}$  — размерные константы того же типа, что и  $k_{1,2}$ ).

**Переход из состояния «2».** Зададим частоту перехода из состояния «2» в состояние «3» следующим образом:

$$\lambda_{2,3} = \lambda_{2,3}^0 + \lambda_{2,3}^{\text{pht}}, \quad (2.2d)$$

где

$$\lambda_{2,3}^0 = k_{2,3}y_2$$

— частота перехода частицы из состояния «2» в состояние «3» за счёт столкновения с частицами типа «3»,  $k_{2,3}$  — размерная константа.

В то же время

$$\lambda_{2,3}^{\text{pht}} = k_{2,3}^{\text{pht}}y_2^2,$$

— частота перехода частиц состояния «2» в состояние «3» в результате тройного столкновения (фазового перехода),  $k_{2,3}^{\text{pht}}$  — размерная константа.

Остальные частоты соответствуют парным столкновениям с частицами соответствующих состояний:

$$\lambda_{2,j} = k_{2,j}y_2, \quad j = \overline{4, 14}. \quad (2.2e)$$

**Переход из состояния «3».** На более поздних стадиях описываемого процесса происходит накопление химически активных бирадикалов карбеного типа [13], в результате чего интенсивность образования молекул ПЦАУ начинает превосходить интенсивность их термической деструкции. Благодаря этому становится возможным образование устойчивых димеров ПЦАУ (состояние «3»), переходящих затем в результате графитизации и «захвата» частиц состояний «1» и «2» в кристаллиты сажи (состояние «4»).

С этого момента дальнейший процесс сажеобразования приобретает лавинообразный характер. Именно этим можно объяснить наличие чёткой экспериментально наблюдаемой нижней границы зоны яркого желтого свечения ЛДП, обусловленного излучением раскалённых частиц сажи (точка S на рис. 1 находится в месте пересечения этой границы с осью ЛДП) [9, 10].

С учётом данных замечаний определим

$$\lambda_{3,4} = \lambda_{3,4}^0 + \lambda_{3,4}^{\text{gr}}, \quad (2.2f)$$

где

$$\lambda_{3,4}^0 = k_{3,4}y_3$$

— отвечает за столкновения частиц типа «3» с частицами типа «4», а  $\lambda_{3,4}^{\text{gr}}$  — описывает переход частицы типа «3» в состояние «4» за счёт её роста.

Отметим, что процессы роста наблюдаются не только в случае частиц типа «4», но и в случае частиц типов «5»–«13», поэтому для корректного описания процесса роста частиц всех упомянутых типов необходимо ввести следующие величины:

- $m_i$ ,  $i = \overline{1,4}$  — эффективное значение массы частиц состояния « $i$ »,  $[m_i] = \text{кг}$ ;
- $m_{i,\min}$ ,  $i = \overline{4,14}$  — минимальное значение массы частицы сажи в состоянии « $i$ », соответствующее минимальному количеству атомов углерода С в ней,  $[m_{i,\min}] = \text{кг}$ .

С помощью введённых величин определим

$$\lambda_{3,4}^{\text{gr}} = \frac{m_1 k_{1,3} y_1 + m_2 k_{2,3} y_2}{m_{4,\min} - m_3},$$

что явно соответствует процессу поглощения частиц типов «1» и «2» и переходу в состояние «4» при превышении размеров частиц состояния «3».

Остальные частоты  $\lambda_{3,j}$  определим по правилу

$$\lambda_{3,j} = k_{3,j} y_3, \quad j = \overline{5,14}, \quad (2.2g)$$

что соответствует парным столкновениям с частицами типов «5»–«14».

**Переход из состояния «4».** Для частиц данного типа ситуация аналогична ситуации для частиц типа «3»:

$$\begin{aligned} \lambda_{4,5} &= \lambda_{4,5}^0 + \lambda_{4,5}^{\text{gr}}, \\ \lambda_{4,5}^0 &= k_{4,5} y_4, \end{aligned} \quad (2.2h)$$

но теперь рост происходит благодаря захвату частиц типов «1», «2» и «3»:

$$\lambda_{4,5}^{\text{gr}} = \frac{m_1 k_{1,4} y_1 + m_2 k_{2,4} y_2 + m_3 k_{3,4} y_3}{m_{5,\min} - m_{4,\min}}.$$

Остальные частоты

$$\lambda_{4,j} = k_{4,j} y_4, \quad j = \overline{6,14}. \quad (2.2i)$$

**Переход из состояний «5»–«13».** Начиная с состояния «5» (что соответствует достаточно крупным частицам) вводится запрет на их столкновения между собой ввиду наличия у них одноимённого (положительного) электрического заряда, появившегося в результате термоэлектронной эмиссии с поверхности частиц сажи [9, 10, 14].

Это приводит к следующим выражениям для частот:

$$\lambda_{i,i+1} = \lambda_{i,i+1}^{\text{gr}} = \frac{1}{m_{i+1,\min} - m_{i,\min}} \sum_{j=1}^4 m_j k_{j,i} y_j, \quad i = \overline{5,13}, \quad (2.2j)$$

остальные частоты полагаются равными нулю. Т.е. для частиц состояний «5»–«13» переход в следующие состояния осуществляется только за счёт роста с помощью поглощения (захвата) частиц состояний «1»–«4».

**Схематическое представление.** На рис. 2 представлена схема (граф), наглядно описывающая процесс превращений для случая  $M = 15$ : круги с номерами  $i = \overline{0, 14}$  обозначают состояния, в которых может оказаться углерод УВТ в процессе пиролиза, стрелки соответствуют переходу углерода из каждого отдельного состояния в последующее.

При этом величины  $\lambda_{i,j}$  описывают интенсивности этих переходов, обусловленных захватом частиц  $i$ -го состояния частицами  $j$ -го состояния; величины  $\lambda_{i,i+1}^{\text{gr}}$  описывают интенсивности переходов, обусловленных постепенным ростом частиц  $i$ -го состояния за счёт поглощения частиц малых размеров и переходом в состояние  $i + 1$  при превышении максимального для  $i$ -го состояния размера.

### 3. Математическая модель процесса образования сажи при горении углеводородных топлив

С учётом выражений (2.2) для частот  $\lambda_{i,j}$  система уравнений (2.1) для случая  $M = 15$  приобретает вид

$$\dot{y}_0 = -\frac{1}{\tau_R} y_0', \quad (3.1a)$$

$$\dot{y}_1 = \frac{1}{\tau_R} y_0' - k_{1,2} y_1^3 - \sum_{j=3}^{14} k_{1,j} y_1^2 \quad (3.1b)$$

$$\dot{y}_2 = k_{1,2} y_1^3 - k_{2,3}^{\text{pht}} y_2^3 - \sum_{j=3}^{14} k_{2,j} y_2^2, \quad (3.1c)$$

$$\dot{y}_3 = \sum_{j=1}^2 k_{j,3} y_j^2 + k_{2,3}^{\text{pht}} y_2^3 - \sum_{j=4}^{14} k_{3,j} y_3^2 - \lambda_{3,4}^{\text{gr}} y_3, \quad (3.1d)$$

$$\dot{y}_4 = \sum_{j=1}^3 k_{j,4} y_j^2 - \sum_{j=5}^{14} k_{4,j} y_4^2 + \lambda_{3,4}^{\text{gr}} y_3 - \lambda_{4,5}^{\text{gr}} y_4, \quad (3.1e)$$

$$\dot{y}_i = \sum_{j=1}^4 k_{j,i} y_j^2 + \lambda_{i-1,i}^{\text{gr}} y_{i-1} - \lambda_{i,i+1}^{\text{gr}} y_i, \quad i = \overline{5, 13}, \quad (3.1f)$$

$$\dot{y}_{14} = \sum_{j=1}^4 k_{j,14} y_j^2 + \lambda_{13,14}^{\text{gr}} y_{13}, \quad (3.1g)$$

где

- $y_i$ ,  $i = \overline{0, 14}$  — вероятность нахождения углерода в состоянии « $i$ »,  $[y_i] = 1$ ;
- $\dot{y}_i$  — производная вероятности  $y_i$  по времени,  $[y_i] = \text{с}^{-1}$ ;

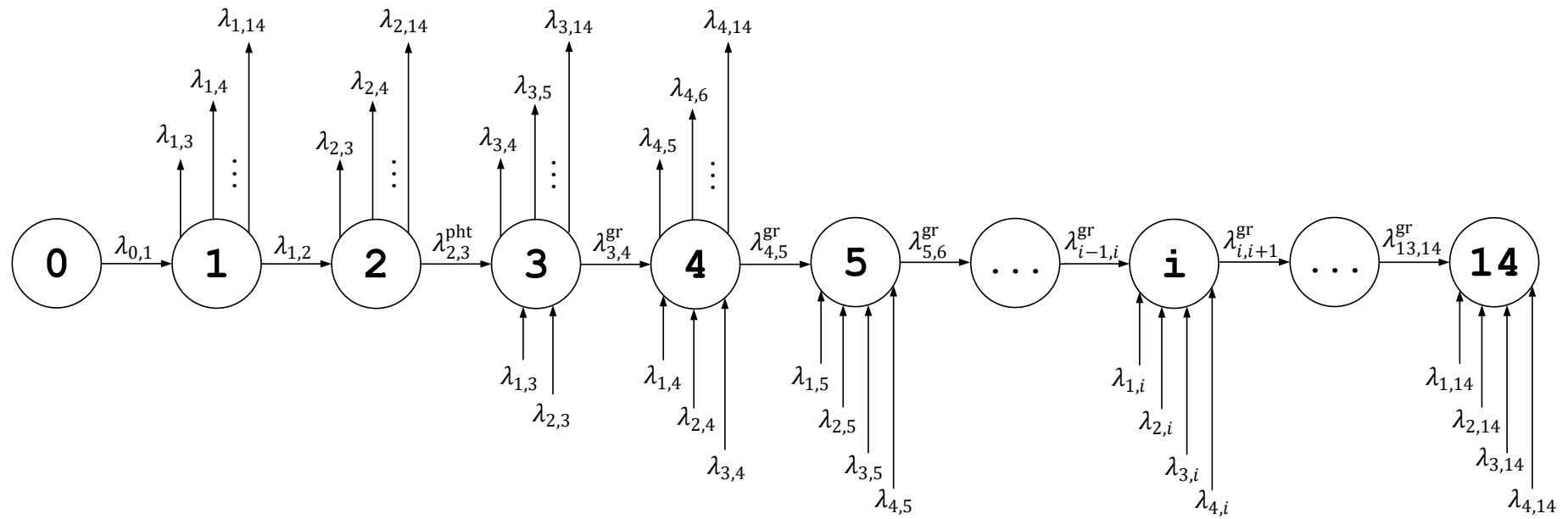


Рис. 2. Граф состояний углерода в зоне сажеобразования диффузионного пламени углеводородного топлива

- $k_{j,i}$  — константы частот перехода частицы из состояния « $j$ » в состояние « $i$ »,  $[k_{j,i}] = \text{с}^{-1}$ ;
- $\nu$  — порядок кинетики процесса перехода из состояния «0» в состояние «1», определяемый механизмом пиролиза УВТ.

Из описанных выше представлений видно, что этот механизм многостадийный, однако многие его детали недостаточно изучены. Ввиду того, что для многостадийных механизмов химических реакций значения порядка кинетики находятся в интервале от 1.0 до 1.3, а также учитывая, что процесс пиролиза углеводородов начинается с мономолекулярного распада, можно принять значение  $\nu = 1.0$ .

Коэффициенты  $\lambda_{i,i+1}^{\text{gr}}$ ,  $i = \overline{3, 13}$  равны

$$\lambda_{3,4}^{\text{gr}} = \frac{m_1 k_{1,3} y_1 + m_2 k_{2,3} y_2}{m_{4,\text{min}} - m_3}, \quad (3.2a)$$

$$\lambda_{4,5}^{\text{gr}} = \frac{m_1 k_{1,4} y_1 + m_2 k_{2,4} y_2 + m_3 k_{3,4} y_3}{m_{5,\text{min}} - m_{4,\text{min}}}, \quad (3.2b)$$

$$\lambda_{i,i+1}^{\text{gr}} = \frac{1}{m_{i+1,\text{min}} - m_{i,\text{min}}} \sum_{j=1}^4 m_j k_{j,i} y_j, \quad i = \overline{5, 13}, \quad (3.2c)$$

где

- $m_i$ ,  $i = \overline{1, 4}$  — эффективное значение массы частиц состояния « $i$ »,  $[m_i] = \text{кг}$ ;
- $m_{i,\text{min}}$ ,  $i = \overline{4, 14}$  — минимальное значение массы частицы сажи в состоянии « $i$ », соответствующее минимальному количеству атомов углерода С в ней,  $[m_{i,\text{min}}] = \text{кг}$ .

Система (3.1)–(3.2) дополняется начальными условиями

$$y_0(0) = 1, \quad y_i(0) = 0, \quad i = \overline{1, 14}. \quad (3.3)$$

Исходя из постановки задачи очевидно, что сумма вероятностей даёт единицу:

$$\sum_{i=0}^{14} y_i = 1,$$

а сумма вероятностей для состояний с «3» по «14» является функцией времени, значения которой растут от 0 в точке S (см. рис. 1) до максимально достижимого в условиях ЛДП значения  $\xi_S < 1$  к точке G, что соответствует физике процесса.

В результате экспериментальных исследований ЛДП установлено, что при атмосферном давлении на пороге дымления открытых ЛДП  $\xi_S \approx 0.21$ . При

этом время процесса роста частиц сажи от зародыша в точке S до частиц максимальных размеров в области SG, в зависимости от склонности УВТ к сажеобразованию, составляет от 4 до 15 мс [10].

**Количества атомов углерода в частицах.** Для вычисления значений коэффициентов  $k_{j,i}$ , эффективных значений масс  $m_i$  и величин  $m_{i,\min}$  необходимо обладать информацией о количестве атомов углерода в частице (для состояний «сажа») или в «средней» углеводородной молекуле (для досажевых состояний углерода), соответствующих состоянию « $i$ ».

*Состояние «0».* В рамках модели примем, что состояние «0» соответствует пребыванию углерода в составе «средней» молекулы исходных углеводородов и промежуточных продуктов их пиролиза, которая в настоящей работе условно принята за молекулу  $C_8H_{18}$ . В этом состоянии число атомов углерода в составе молекулы равно  $N_0 = 8$ .

*Состояние «1».* В состоянии «1» примем число атомов углерода C равным  $N_1 = 6$ , учитывая, что бирадикал карбеного типа является продуктом термического распада исходных молекул УВТ и большая часть таких соединений должна иметь массу (и количество атомов углерода C), меньшую, чем масса исходных молекул.

*Состояние «2».* Ранее сделано допущение о том, что переход из состояния «1» в состояние «2» происходит в результате тройных столкновений и не сопровождается отскоком ни одной из сталкивающихся частиц. Поэтому число атомов углерода C в состоянии «2» полагается равным  $N_2 = 3 \cdot N_1 = 18$ .

*Состояние «3».* Переход из состояния «2» в состояние «3» также происходит в результате тройных столкновений, но он сопровождается отскоком третьей частицы, поэтому число атомов в состоянии «3» полагается равным  $N_3 = 2 \cdot N_2 = 36$ .

*Состояния «4»–«14».* Переход углерода из состояния «3» в состояние «4» (зародыши частиц сажи) происходит за счёт поглощения частицей состояния «3» одной частицы состояния «1» или «2»; в дальнейшем частица состояния «4» растёт только путём поглощения частиц состояний «1», «2» и «3».

Для всех состояний, относящихся к частицам сажи (состояния «4»–«14»), диапазоны значений количества атомов C, находящихся в этих состояниях, определяются в соответствии со следующим правилом:

$$N_{4,\min} = N_3 + N_1, \quad N_{4,\max} = 4 \cdot N_3, \quad (3.4a)$$

$$N_{i,\min} = N_{i-1,\max} + N_1, \quad N_{i,\max} = 4 \cdot N_{i-1,\max}, \quad i = \overline{5, 14}. \quad (3.4b)$$

Для расчётов масс, размеров частиц и кинетики их столкновений необходимо использовать значения  $N_i$  среднего количества атомов углерода C в состоянии « $i$ ». Для случаев  $i = 0, 1, 2, 3$  величины  $N_i$  получены ранее. Для состояний  $i = \overline{4, 14}$  средние количества частиц определим по правилу

$$N_i = \frac{1}{2}(N_{i,\min} + N_{i,\max}), \quad i = \overline{4, 14}. \quad (3.5)$$

**Эффективные значения массы частиц.** Для дальнейшего расчёта необходимо определить среднее число  $L_i$  атомов водорода Н в составе молекулы сажи на стадии « $i$ ». В работах [15, 16] установлены следующие соотношения между  $N_i$  и  $L_i$ :

$$L_0 = 18, \quad (3.6a)$$

$$L_i = \frac{2}{3}N_i, \quad i = 1, 2, \quad (3.6b)$$

$$L_i = \frac{1}{8}N_i, \quad i = \overline{3, 14}. \quad (3.6c)$$

На основе полученных соотношений по общей формуле выводятся эффективные значения  $m_i$  масс частиц состояния « $i$ »:

$$m_i = u(N_i m_C + L_i m_H), \quad (3.7)$$

где  $u = 1.660541 \cdot 10^{-27}$  — атомная единица массы,  $[u] = \text{кг/а.е.м.}$ ,  $m_C = 12.011$  и  $m_H = 1.00794$  — относительные массы атомов углерода и водорода соответственно,  $[m_C] = [m_H] = \text{а.е.м.}$

Величины  $m_{i,\min}$  вычисляются по формуле, получаемой из (3.7) с помощью замен  $N_i \mapsto N_{i,\min}$ ,  $L_i \mapsto L_{i,\min}$ ,  $i = \overline{4, 14}$ . Выражения для  $L_{i,\min}$ ,  $i = \overline{4, 14}$  получаются из (3.6) с помощью той же замены  $N_i \mapsto N_{i,\min}$ .

**Эффективные значения диаметров частиц.** Эффективные значения диаметров частиц  $d_i$  в состояниях «0», «1» и «2» определяются исходя из структурных формул соответствующих химических соединений и справочных данных [17] о длинах химических связей, что позволяет получить:

$$d_0 = 6.16 \cdot 10^{-10} \text{ м},$$

$$d_1 = 4.50 \cdot 10^{-10} \text{ м},$$

$$d_2 = 8.00 \cdot 10^{-10} \text{ м}.$$

Для остальных состояний эффективные значения диаметров частиц рассчитываются исходя из предположения о сферической форме и однородности структуры материала частиц по формулам вида:

$$d_i = \left( \frac{6m_i}{\pi \rho_S} \right)^{1/3}, \quad i = \overline{3, 14}, \quad (3.8)$$

где  $m_i$  — эффективные значения масс, полученные по формуле (3.7),  $\rho_S$  — плотность материала частиц, принимаемая равной плотности материала частиц сажи,  $[\rho_S] = \text{кг/м}^3$ . Принимаем  $\rho_S = 1850 \text{ кг/м}^3$ .

**Константы перехода.** Для расчёта констант частот  $k_{j,i}$  перехода углерода С из состояния « $j$ » в состояние « $i$ » необходимо определить максимально

возможные значения  $r_i$  мольных долей соответствующих состояний углерода. Для простоты будем рассматривать частицы сажи каждого состояния в аэрозоле как большие «молекулы», что приводит к формулам

$$r_i = \frac{x/N_i}{x/N_i + (y - L_i x/N_i)/2}, \quad i = \overline{0, 14},$$

или

$$r_i = \frac{1}{1 + (N_i \cdot (y/x) - L_i)/2}, \quad i = \overline{0, 14}, \quad (3.9)$$

где  $x$  и  $y$  — количества атомов углерода С и водорода Н соответственно в составе частиц состояния «0», а  $N_i$  и  $L_i$  — количества атомов углерода С и водорода Н в составе молекул частиц состояния « $i$ », определяемые по формулам (3.5) и (3.6) соответственно.

Определим приведённые массы  $\mu_{i,j}$  и диаметры  $d_{i,j}$  частиц, участвующих в парных столкновениях, так же, как это принято в молекулярной кинетике

$$\mu_{i,j} = \frac{m_i m_j}{m_i + m_j}, \quad d_{i,j} = \frac{d_i + d_j}{2}, \quad i < j, \quad i = 1, 2, 3, 4, \quad j = \overline{3, 14}.$$

Константы частот переходов углерода из состояния «1» в состояние «2», а также из состояния «2» в состояние «3», происходящих в результате тройных столкновений частиц, которые относятся к состояниями «1» и «2» соответственно, равны

$$k_{1,2} = 48\pi^{3/2} (Zr_1)^2 d_1^5 \left( \frac{kT_S}{m_1} \right)^{1/2} \cdot N_1, \quad (3.10a)$$

$$k_{2,3}^{\text{pht}} = 48\pi^{3/2} (Zr_2)^2 d_2^5 \left( \frac{kT_S}{m_2} \right)^{1/2} \cdot N_2, \quad (3.10b)$$

где  $k = 1.38 \cdot 10^{-23}$  Дж/К — постоянная Больцмана,  $T_S$  — абсолютная температура в зоне генезиса сажи,  $[T_S] = \text{К}$  (в настоящей работе для простоты принимается постоянной; в более сложной постановке она зависит от склонности УВТ к сажеобразованию и от положения на линии SG на рис. 1),  $Z$  — константа условий процесса (число молекул газа в  $1 \text{ м}^3$  при данных значениях давления и температуры), определяемая соотношением

$$Z = N_A \frac{p}{RT_S},$$

где  $p$  — давление в зоне сажеобразования (в условиях открытого ЛДП равно атмосферному давлению  $1.013 \cdot 10^5$  Па),  $R = 8.314$  Дж/(моль · К) — универсальная газовая постоянная,  $N_A = 6.023 \times 10^{23}$  моль<sup>-1</sup> — число Авогадро.



Константы частот переходов углерода, происходящих в результате парных столкновений частиц состояний « $i$ » и « $j$ » (при  $m_i < m_j$ ) и сопровождающихся поглощением частиц состояния « $i$ » частицами состояний « $j$ », определяются следующим образом:

$$k_{i,j} = Zr_i d_{i,j}^2 \left( \frac{8\pi k T_S}{\mu_{i,j}} \right)^{1/2} \cdot N_i, \quad i < j, i = 1, 2, 3, 4, j = \overline{3, 14}. \quad (3.10c)$$

**Время релаксации.** Время релаксации  $\tau_R$  в уравнениях (3.1) рассчитывается по следующей эмпирической формуле, полученной в работах [9, 10]:

$$\tau_R = 20.31 \cdot 10^{-3} \cdot \left( \frac{124/i_R + 1166}{1360} \right)^{3/2} \text{ с}, \quad (3.11)$$

где  $i_R = \text{ПЧДП}/100$  — безразмерная величина, характеризующая склонность УВТ к сажеобразованию, а ПЧДП — показатель черноты диффузионного пламени, определяемый экспериментально по методике, описанной в работах [18, 19].

## 4. Результаты численного моделирования

Полученная система уравнений (3.1) является достаточно общей, что позволяет моделировать с её помощью горение различных видов углеводородных топлив. Согласно рассуждениям, изложенным в разделе 3, для моделирования процесса горения топлива отдельного вида достаточно пересчитать коэффициенты  $k_{i,j}$  и  $\tau_R$  системы (3.1), опираясь на ограниченный набор физико-химических параметров.

**Параметры системы.** Проведём моделирование процессов горения следующих топлив:

- изооктана (химическая формула  $\text{C}_8\text{H}_{18}$ );
- толуола (химическая формула  $\text{C}_7\text{H}_8$ );
- смеси изооктана и толуола в соотношении 1 : 1.

В табл. 1 указаны физико-химические характеристики упомянутых топлив. Напомним, что  $N_0$  и  $L_0$  — соответственно количества атомов углерода С и водорода Н в молекуле топлива. Величина  $N_0$  для смеси изооктана и толуола в соотношении 1 : 1 получена по формуле

$$N_0^{\text{mix}} = N_0^{\text{iso}} \cdot x + N_0^{\text{tol}} \cdot y,$$

где  $N_0^{\text{iso}}$  и  $N_0^{\text{tol}}$  — количества атомов углерода в молекуле изооктана и толуола соответственно,  $x$  и  $y$  — относительные доли веществ в смеси (в случае смеси 1 : 1 доли  $x = y = 0.5$ ). Величина  $L_0^{\text{mix}}$  получается аналогично.

Таблица 1. Виды топлив и значения параметров для них

Параметр	Топливо		
	Изооктан	Толуол	Изооктан + толуол (1 : 1)
$N_0$	8	7	7.5
$L_0$	18	8	13
$i_R$	0.57	1.00	0.80
$T_S$	1475	1390	1433

Показатели черноты  $i_R$  и величины абсолютных температур  $T_S$  в зоне генезиса сажи взяты из работ [9, 10]. Эффективные значения диаметров  $d_0$ ,  $d_1$  и  $d_2$  молекул полагаются одинаковыми для всех трёх видов топлив.

**Выбор численного метода.** Исследуемая система (3.1) относится к типу жёстких, поэтому для численного моделирования использован четырехстадийный  $L$ -устойчивый метод Розенброка порядка 4 с вложенным методом порядка 3 [20, §IV.7], [21].

Критериями точности являются следующие значения величин

$$\text{RelTol} = 10^{-15}, \text{AbsTol} = \text{RelTol},$$

определяемые стандартным образом [22, §II.4].

Выше отмечено, что время роста частиц сажи обычно находится в границах  $4 \div 15$  мс, поэтому во всех трёх случаях система интегрировалась на временном отрезке  $t \in [0, 0.015]$ . В результате численного моделирования процессов горения каждого из указанных топлив получены значения вероятностей  $y_i(t)$  пребывания углерода C в каждом из состояний в зависимости от времени  $t$ .

**Моделирование горения изооктана.** На рис. 3–11 представлены графики изменения величин вероятностей  $y_i$ ,  $i = \overline{1, 6}$  и  $y_i$ ,  $i = \overline{10, 14}$  в зависимости от времени  $t$  для случая изооктана.

Заметно существенное отличие (на несколько порядков) значений компонент  $y_1, y_2, y_3, y_4$  от значений компонент с большими индексами. Это можно объяснить следующим образом: рассмотрим систему (3.1) и просуммируем дифференциальные уравнения для соответствующих компонент, получим

$$\sum_{i=1}^4 \dot{y}_i = \frac{1}{\tau_R} y_0^\nu - \sum_{j=5}^{14} \sum_{i=1}^4 k_{i,j} y_i^2 - \lambda_{4,5}^{\text{gr}} y_4.$$

С помощью простейшего анализа получаем оценку порядка компонент в первые моменты жизни системы (т.е. при  $t \rightarrow 0$  и  $y_1 \approx y_2 \approx y_3 \approx y_4$ ,  $y_0 \approx 1$ ):

$$y_4 \approx [\tau_R(S + \Lambda)]^{-1/2} \approx 5.55 \cdot 10^{-7},$$

где

$$S = \sum_{j=5}^{14} \sum_{i=1}^4 k_{i,j}, \quad \Lambda = \frac{m_1 k_{1,4} + m_2 k_{2,4} + m_3 k_{3,4}}{m_{5,\min} - m_{4,\min}},$$

что примерно соответствует наблюдаемым в расчётах порядкам величин (наблюдаемое расхождение для компоненты  $y_2$  объясняется преобладанием тройных столкновений над двойными, что в данной оценке не учитывается).

На рис. 12 представлен график функции  $\xi_S(t)$ , определяемой по правилу

$$\xi_S(t) = \sum_{i=3}^{14} y_i(t), \quad (4.1)$$

что соответствует суммарному количеству углерода, находящегося в состоянии «сажа».

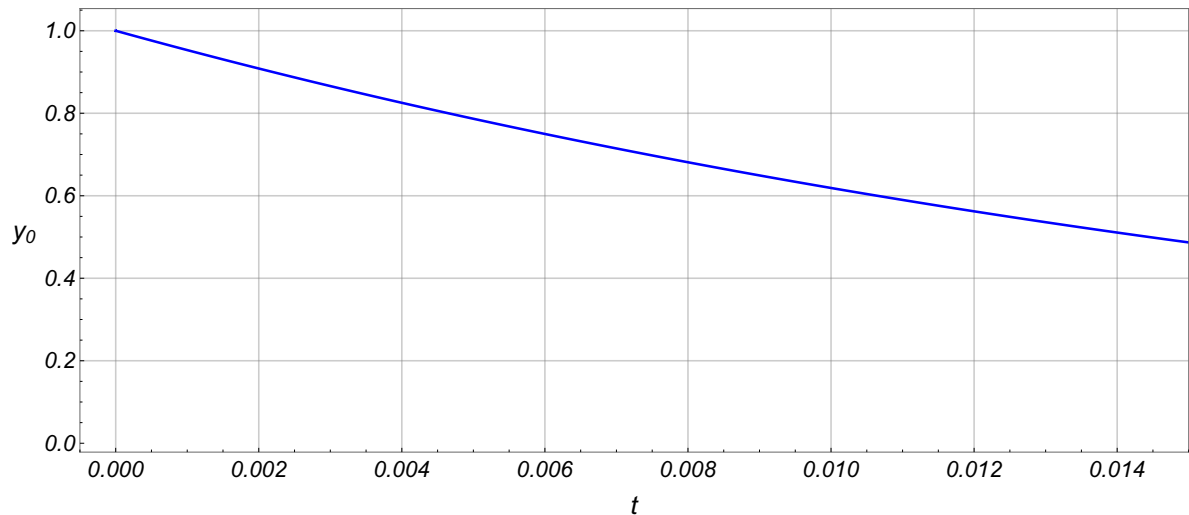


Рис. 3. Компонента решения  $y_0$  для изооктана.

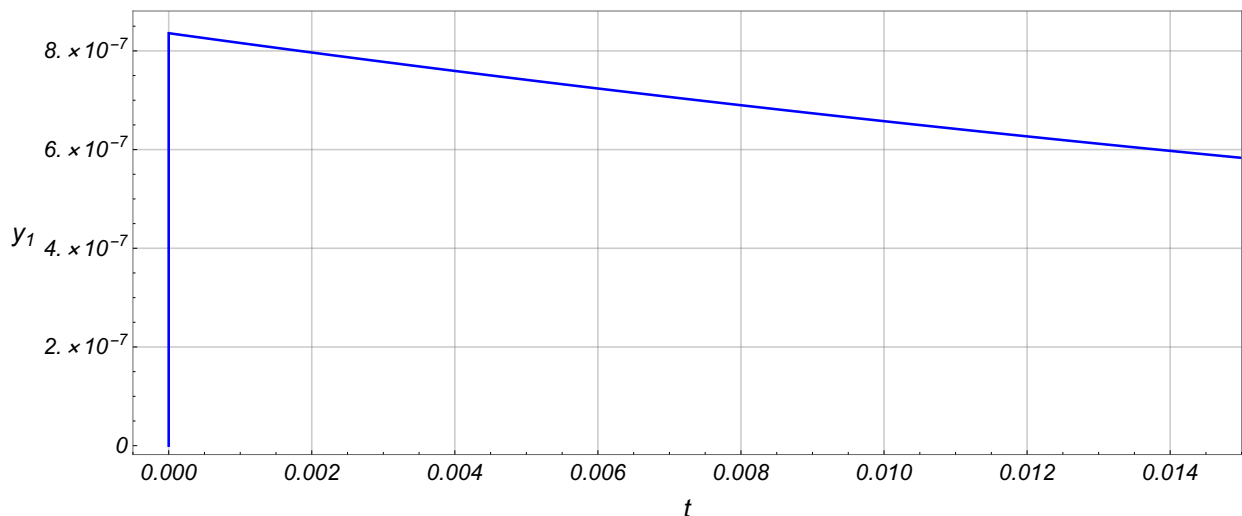


Рис. 4. Компонента решения  $y_1$  для изооктана.

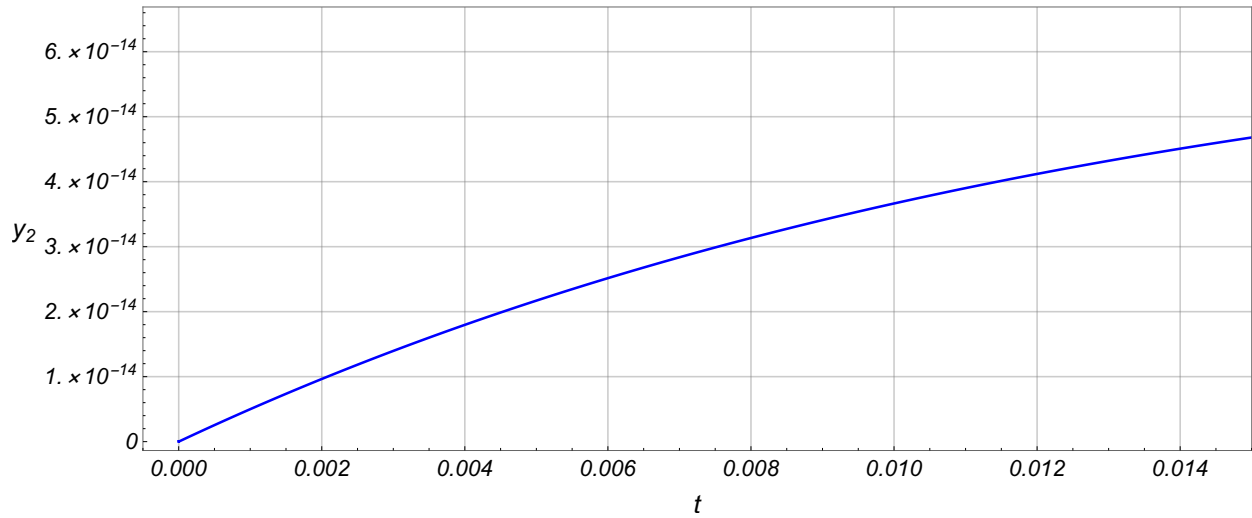


Рис. 5. Компонента решения  $y_2$  для изооктана.

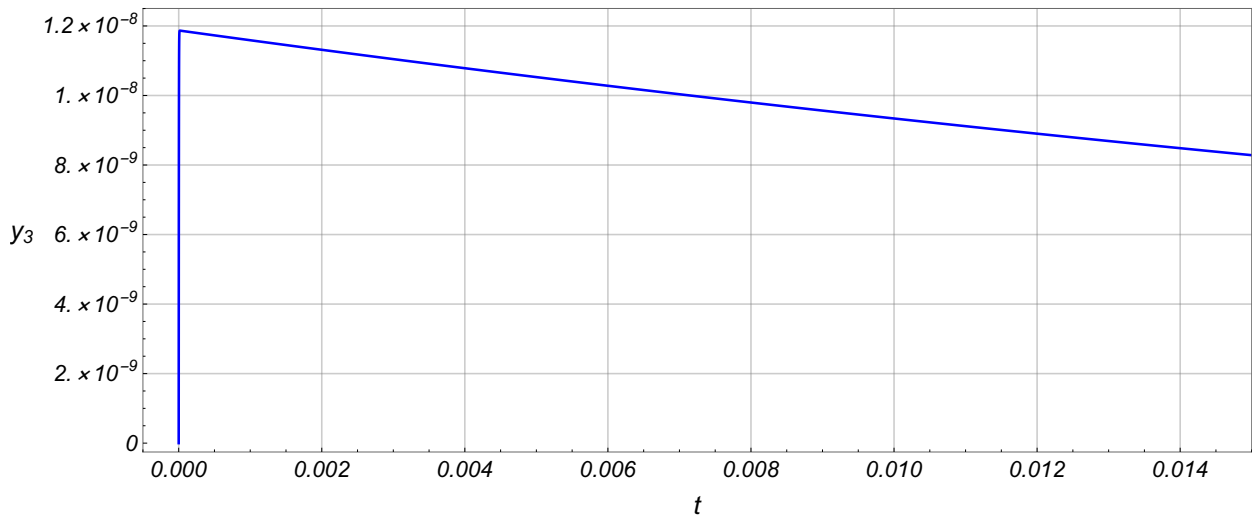


Рис. 6. Компонента решения  $y_3$  для изооктана.

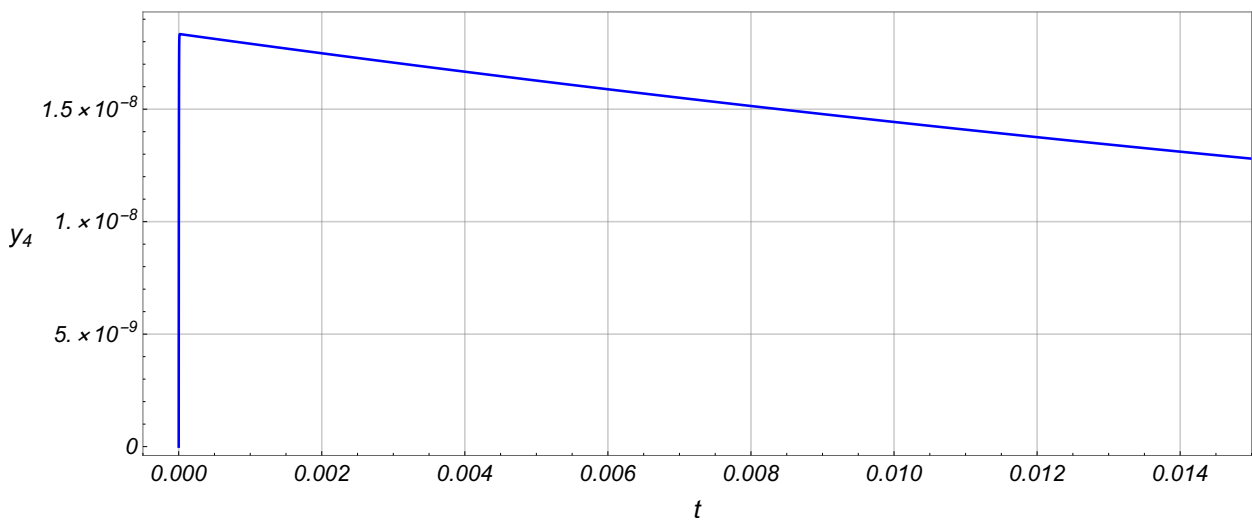


Рис. 7. Компонента решения  $y_4$  для изооктана.

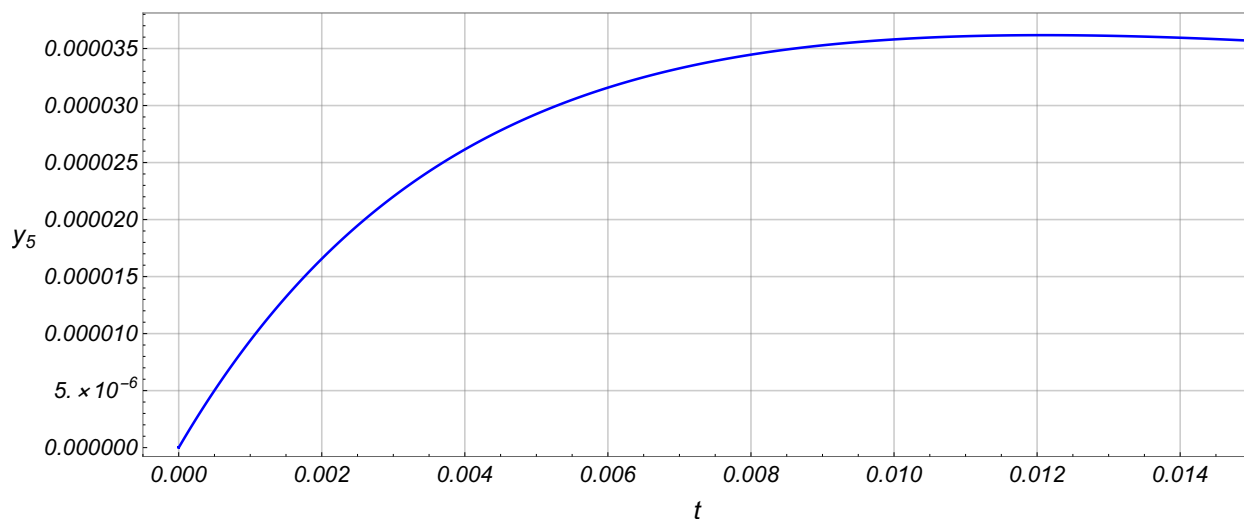


Рис. 8. Компонента решения  $y_5$  для изооктана.

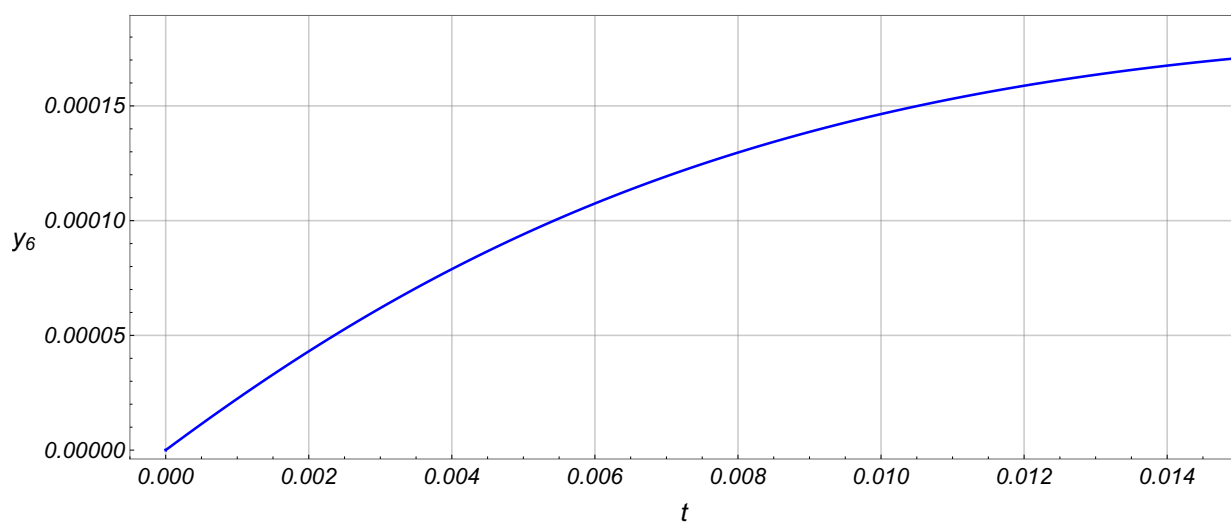


Рис. 9. Компонента решения  $y_6$  для изооктана.

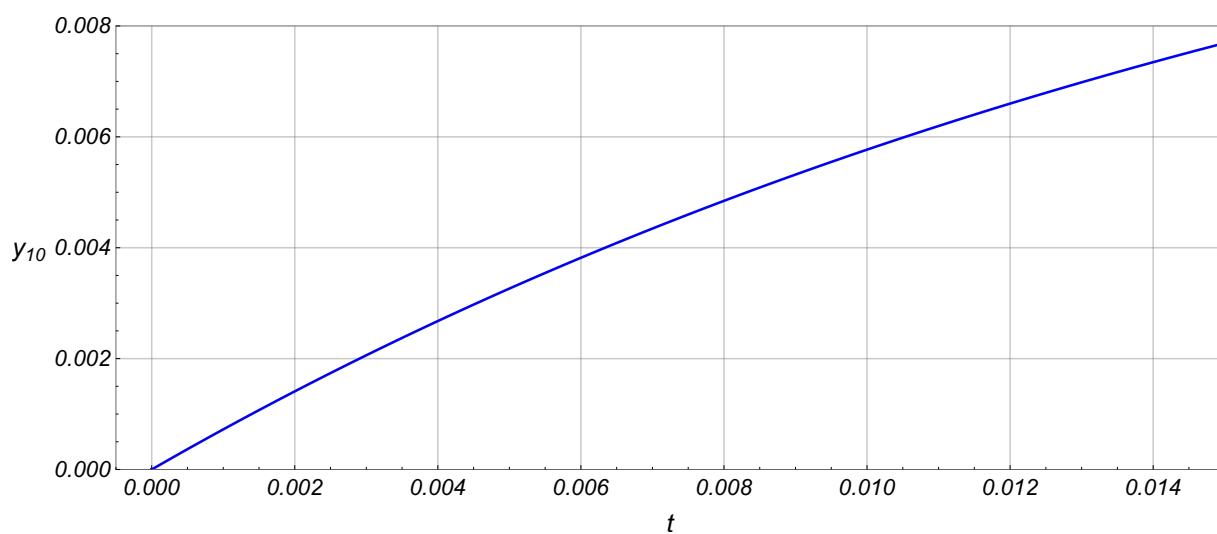


Рис. 10. Компонента решения  $y_{10}$  для изооктана.

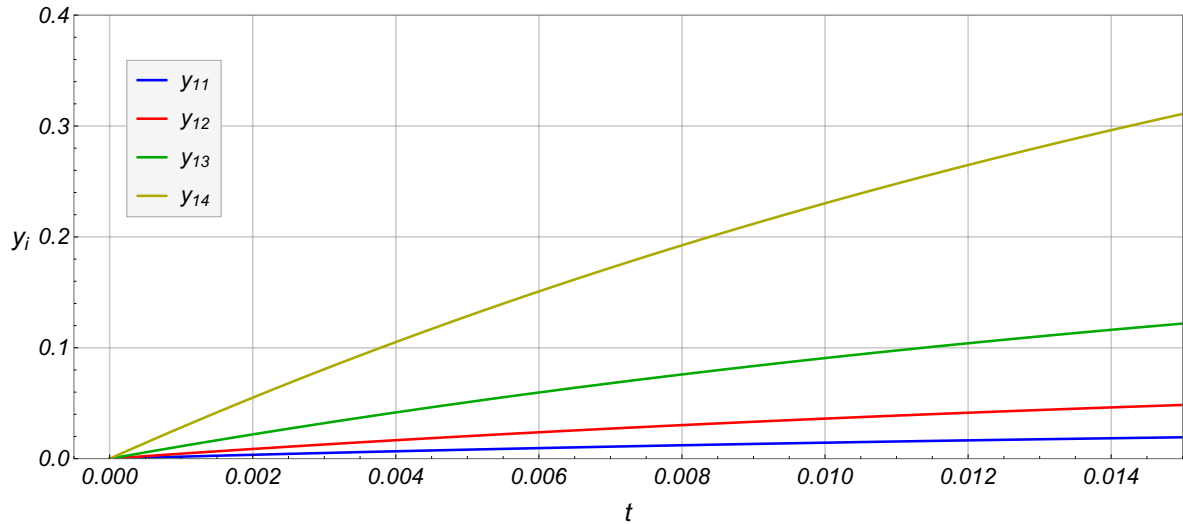


Рис. 11. Компоненты решения  $y_i$ ,  $i = \overline{11, 14}$  для изооктана.

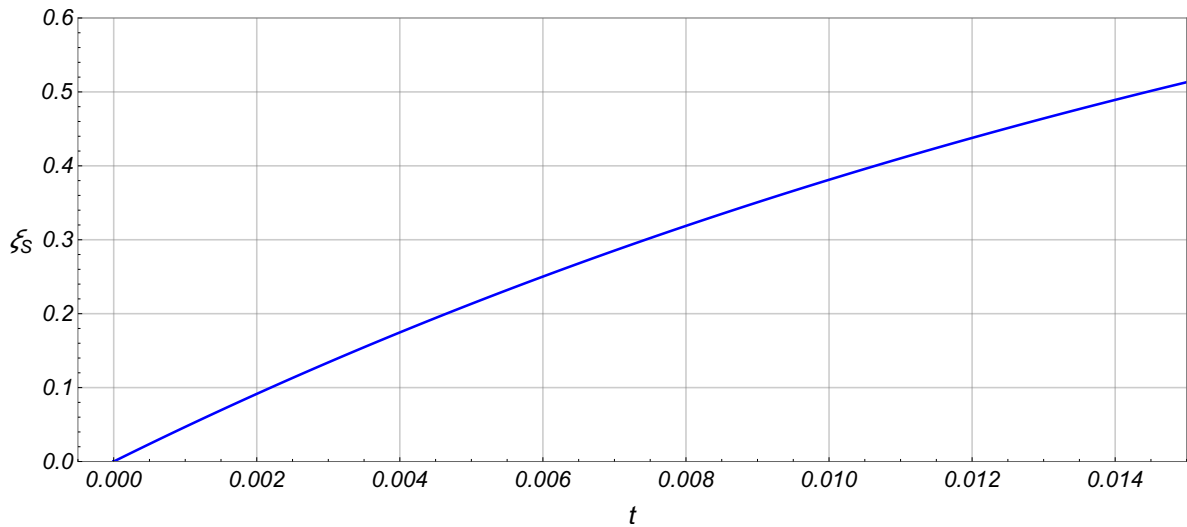


Рис. 12. Функция  $\xi_S(t)$  для изооктана.

**Моделирование горения других топлив.** С помощью системы (3.1) также проведено моделирование горения толуола и смеси толуола с изооктаном. Для расчёта коэффициентов системы (по алгоритму, указанному в разделе 2) использованы значения параметров из табл. 1.

Отметим, что во всех трёх случаях число  $N_1$  атомов углерода С в частице сажи состояния «1» полагалось одинаковым и равным  $N_1 = 6$ . Это связано с тем, что к настоящему времени процессы досажевого пиролиза топлив ещё недостаточно изучены, и поэтому для описания этого процесса используется допущение о примерном равенстве значений  $N_1$  для случаев горения трёх указанных углеводородных топлив, которое в дальнейшем может быть уточнено.

На рис. 13–22 представлены совместные графики компонент  $y_i$ ,  $i = \overline{1, 6}$ ,  $y_{12}$ ,  $y_{14}$  и функции  $\xi_S(t)$  для трёх видов топлива. Из сопоставления графиков

для каждого из топлив можно заключить, что графики компонент с младшими номерами достаточно хорошо различимы между собой; в то же время графики компонент со старшими номерами становятся уже близкими друг к другу (на рис. 20–22 они практически накладываются друг на друга).

Чтобы объяснить это, обратимся к табл. 1, указанные в таблице параметры влияют на коэффициенты системы следующим образом:

- показатель черноты  $i_R$  — на его основе по формуле (3.11) определяется время релаксации  $\tau_R$ . Таким образом, через формулу (3.11) параметр  $i_R$  задаёт скорость убывания компоненты  $y_0$  и, соответственно, рост значений компоненты  $y_1$ ;
- количества  $N_0$  и  $L_0$  атомов углерода и водорода соответственно в молекуле топлива — на их основе по формулам (3.9) получены значения мольных долей  $r_i$  состояний углерода. В дальнейшем  $r_i$  используются при расчёте значений коэффициентов  $k_{i,j}$  (и, соответственно,  $\lambda_{i,i+1}^{\text{gr}}$ );
- температура  $T_S$  в зоне генезиса сажи — на её основе по формулам (3.10) определяются значения коэффициентов  $k_{i,j}$  и  $\lambda_{i,i+1}^{\text{gr}}$ .

Введём оценки изменений коэффициентов  $k_{i,j}$  по формуле

$$g_{i,j}^{(1,2)} = \left| \frac{k_{i,j}^{(2)}}{k_{i,j}^{(1)}} \right|,$$

где верхние индексы 1 и 2 отвечают за тип топлива соответственно.

Непосредственный расчёт показал, что для коэффициентов  $k_{i,j}$ , определяемых по формулам (3.10с), когда индексу «1» соответствует изооктан, а индексу «2» — толуол, величина

$$g_{ij}^{(1,2)} \in [2.09, 2.98],$$

что говорит о почти трёхкратном отличии коэффициентов  $k_{i,j}$ , описывающих парные столкновения частиц.

В то же время для  $k_{i,j}$ , определяемых по формулам (3.10а) и (3.10б), для той же пары топлив верно

$$g_{1,2}^{(1,2)} \approx 6.13, \quad g_{2,3}^{(1,2)} \approx 9.10,$$

т.е. отличия в коэффициентах  $k_{i,j}$ , описывающих тройные столкновения, значительно больше: почти в 6 и 9 раз соответственно. Это говорит о существенно большем влиянии нелинейных эффектов в системе, связанных с механизмом тройных столкновений частиц, по сравнению с механизмом двойных столкновений.

В случае индекса «1», соответствующего изооктану, а «2» — смеси изооктана с толуолом, для коэффициентов (3.10с) получено

$$g_{ij}^{(1,2)} \in [1.32, 1.46],$$

а для коэффициентов  $k_{ij}$  из (3.10а) и (3.10b):

$$g_{1,2}^{(1,2)} \approx 1.95, \quad g_{2,3}^{(1,2)} \approx 2.16,$$

что указывает на близость коэффициентов  $k_{i,j}$  для случаев изооктана и смеси изооктана с толуолом.

Опираясь на представленные рассуждения, можно заключить, что различия в значениях времён релаксации  $\tau_R$  для каждого из топлив приводят к заметному отличию графиков компоненты  $y_1$ .

Дальнейшие превращения в большей степени зависят от значений коэффициентов  $k_{i,j}$ , но, поскольку превращения частиц состояний «2» и «3» частично описываются механизмом тройных столкновений, это приводит к появлению нелинейностей вида  $ay_i^3$ , более чувствительных к изменениям коэффициентов  $k_{i,j}$ , чем нелинейности вида  $by_i^2$ , связанные с механизмом парных столкновений. Именно поэтому наблюдается заметное отличие в графиках для  $y_1$ ,  $y_2$   $y_3$ .

На графиках вероятностей компонент с последующими номерами это различие постепенно стирается, поскольку рост частиц сажи соответствующих состояний происходит только в результате парных столкновений и захвата частиц состояний «1»–«4» — всё это описывается нелинейностями вида  $by_i^2$  и  $cy_iy_j$ , менее чувствительными к изменениям в значениях коэффициентов  $k_{i,j}$ , и поэтому система как бы «забывает» все различия, что были заданы в уравнениях первых состояний.

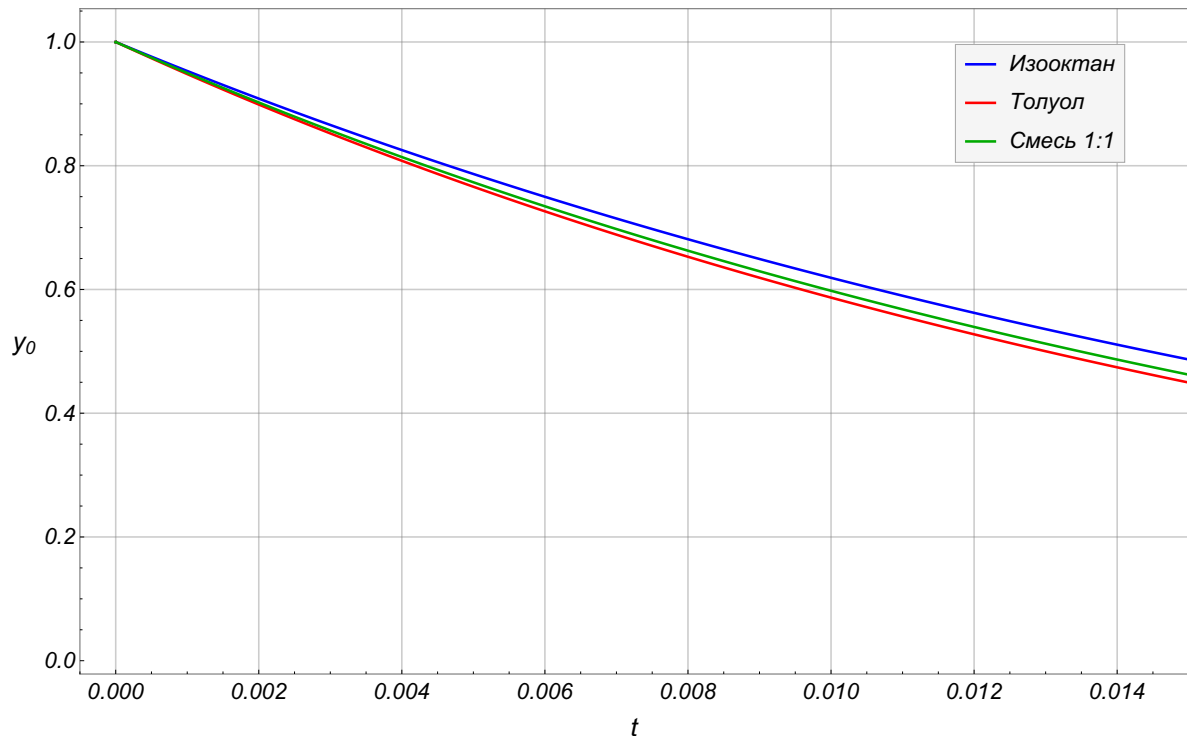


Рис. 13. Компонента решения  $y_0$  для трёх видов топлива.



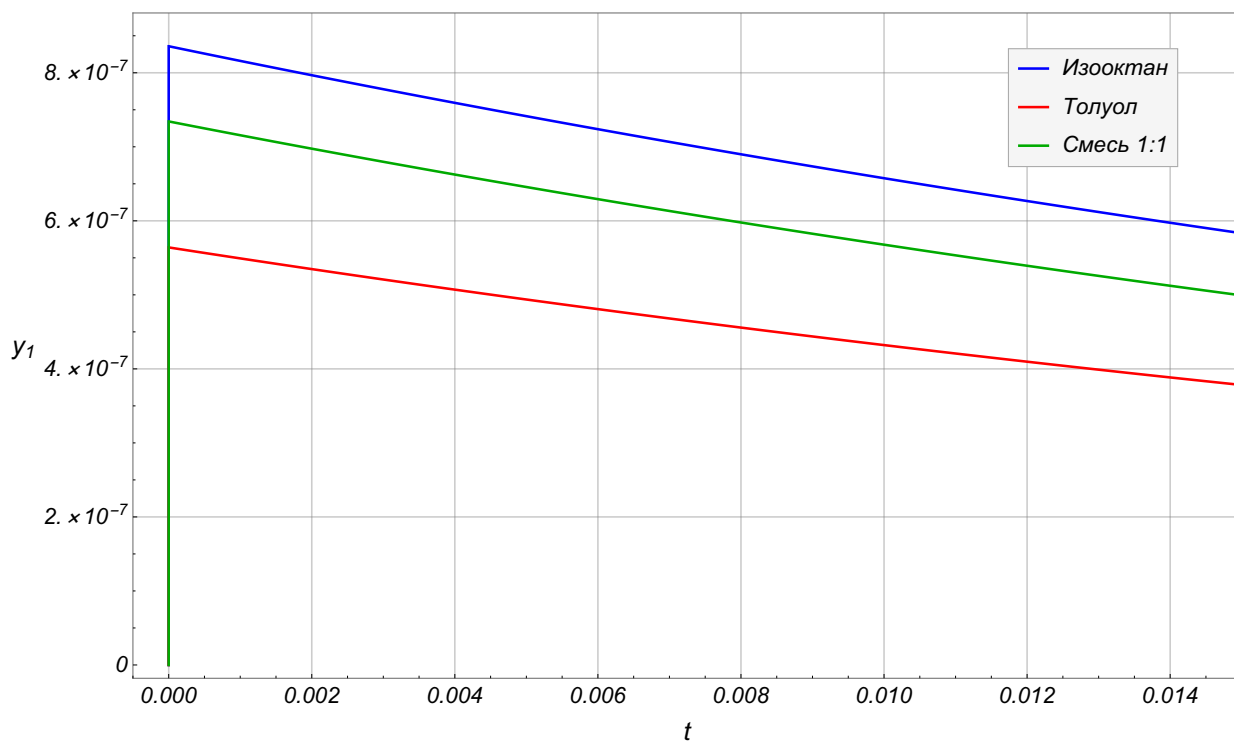


Рис. 14. Компонента решения  $y_1$  для трёх видов топлива.

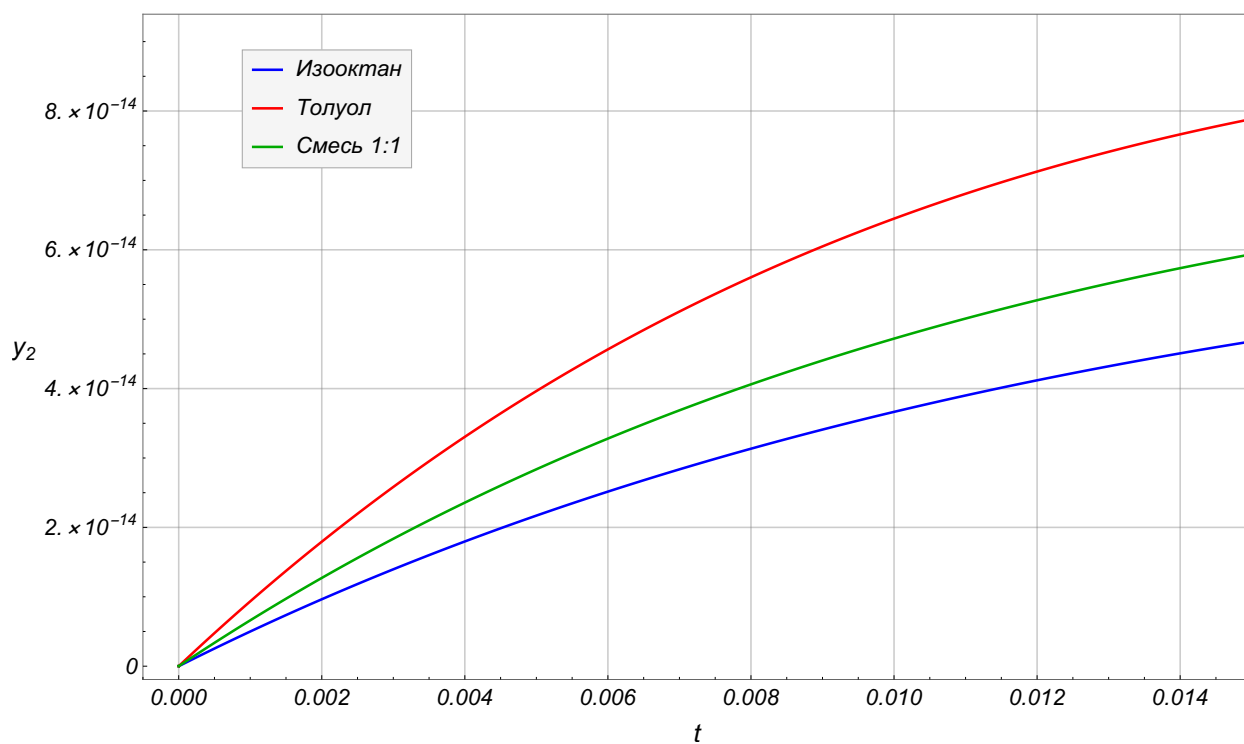


Рис. 15. Компонента решения  $y_2$  для трёх видов топлива.

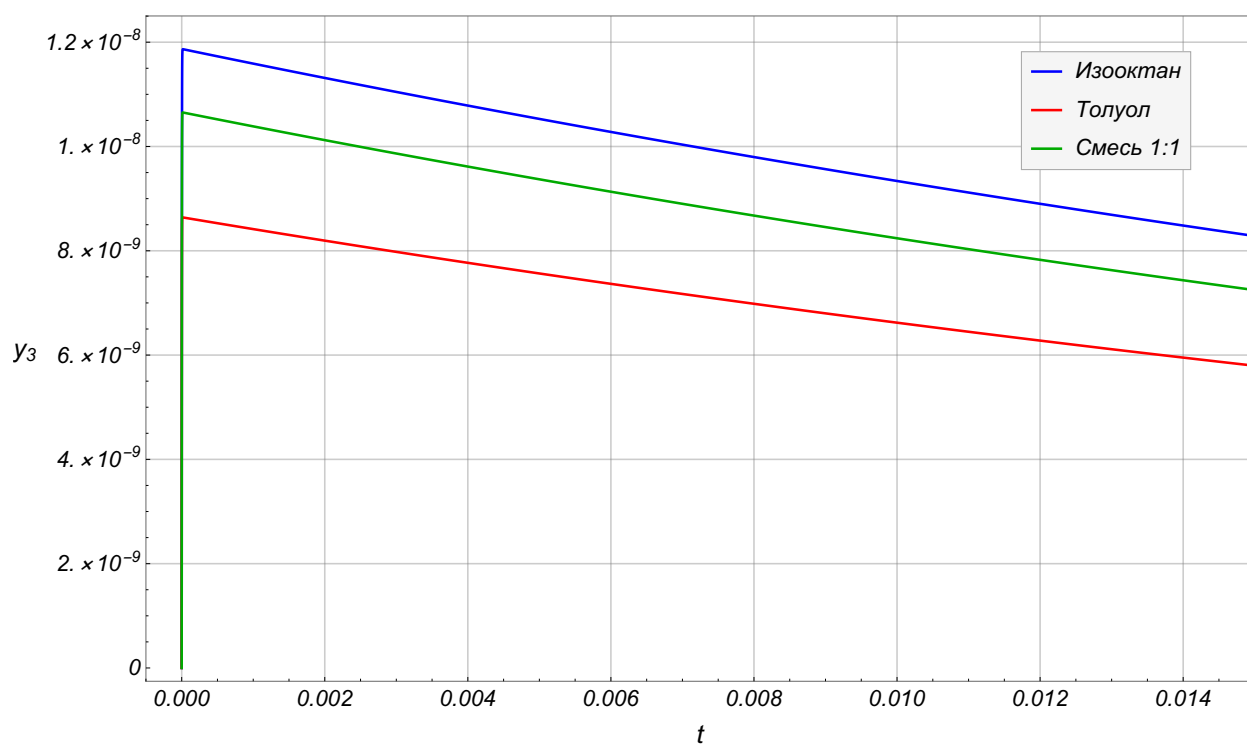


Рис. 16. Компонента решения  $y_3$  для трёх видов топлива.

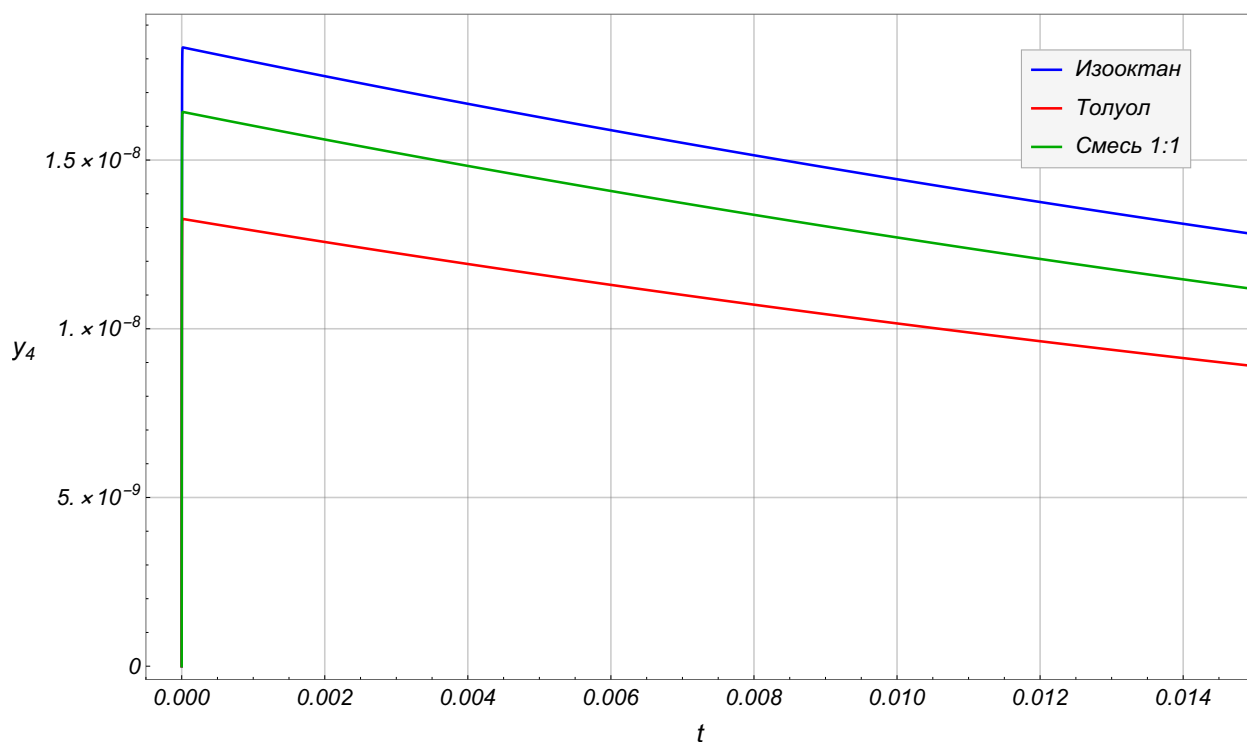


Рис. 17. Компонента решения  $y_4$  для трёх видов топлива.

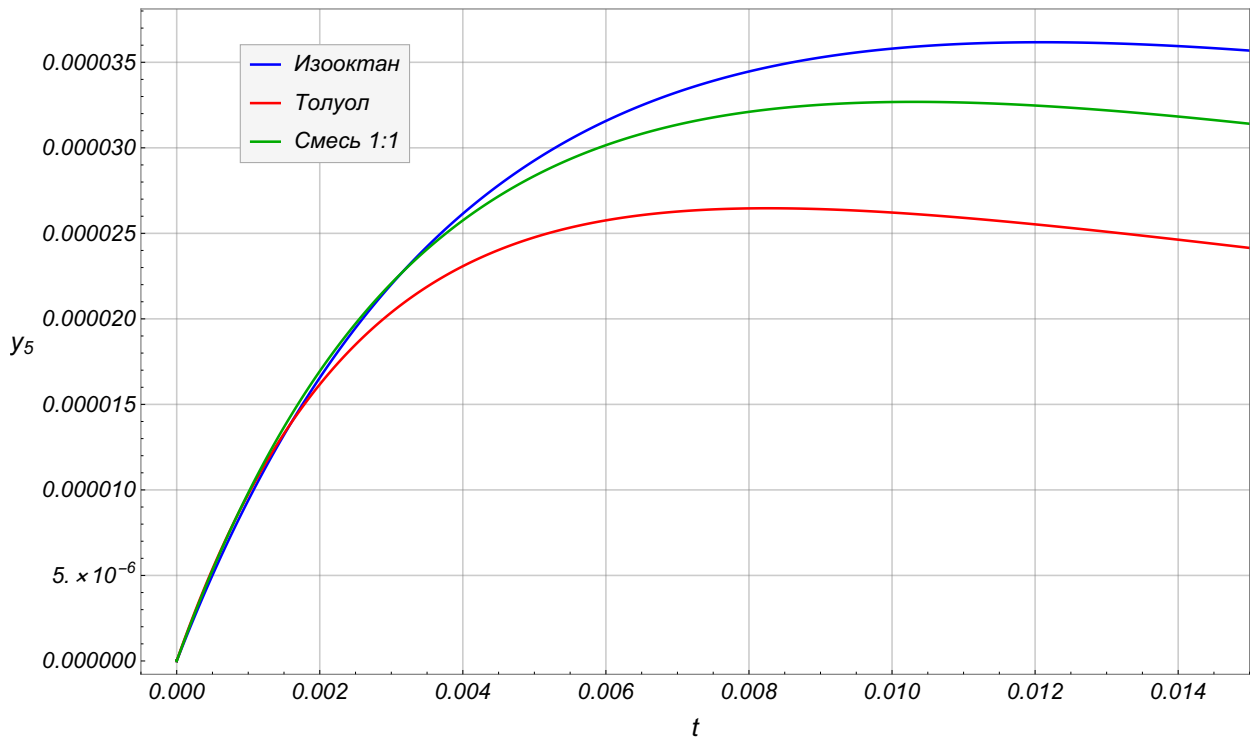


Рис. 18. Компонента решения  $y_5$  для трёх видов топлива.

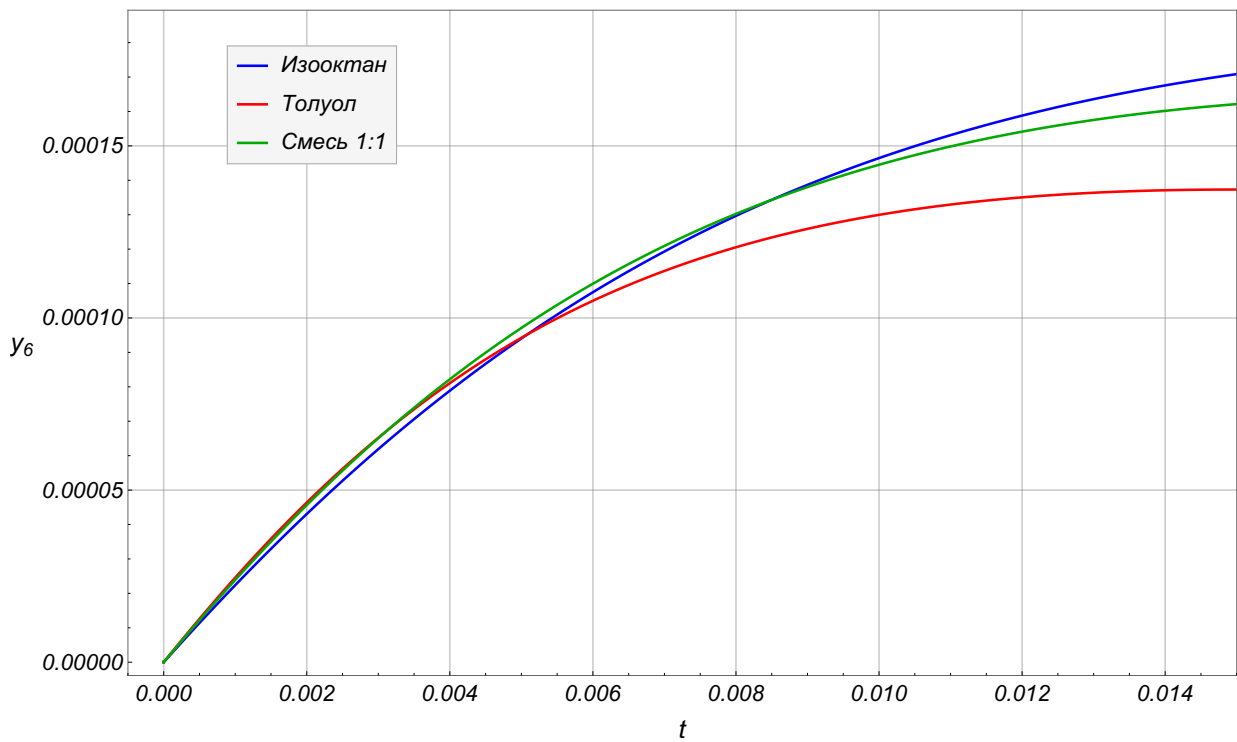


Рис. 19. Компонента решения  $y_6$  для трёх видов топлива.

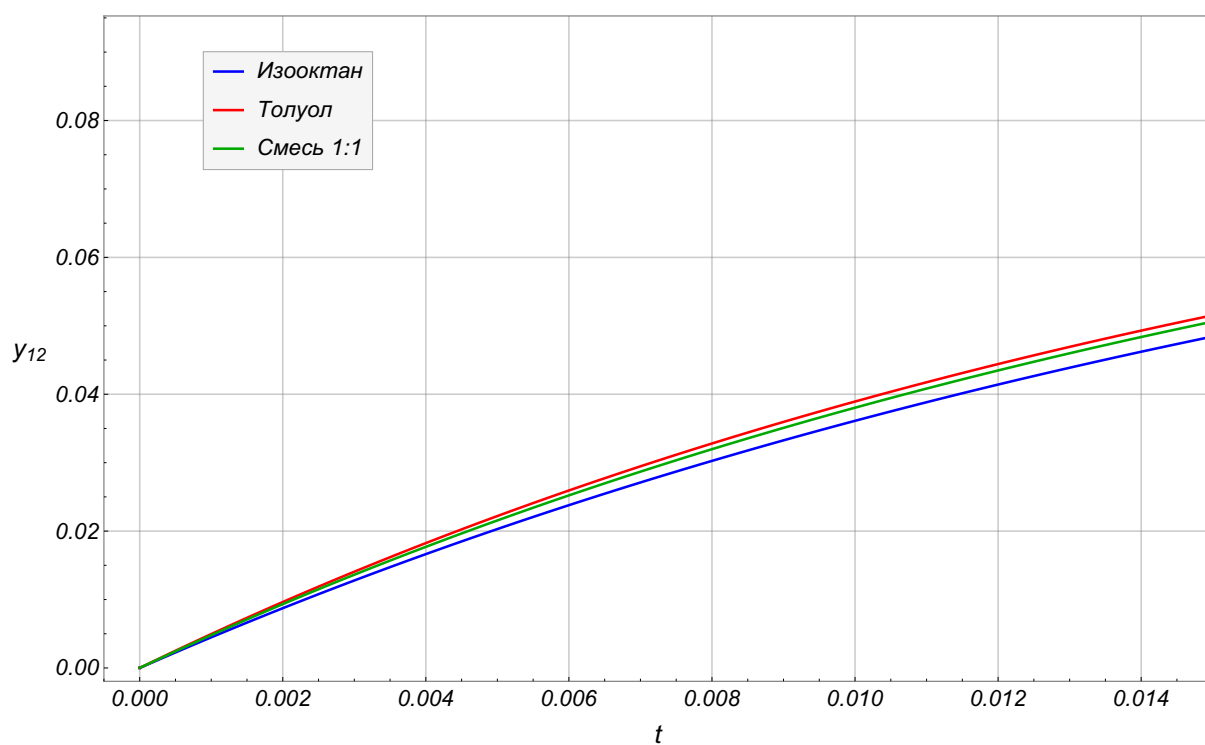


Рис. 20. Компонента решения  $y_{12}$  для трёх видов топлива.

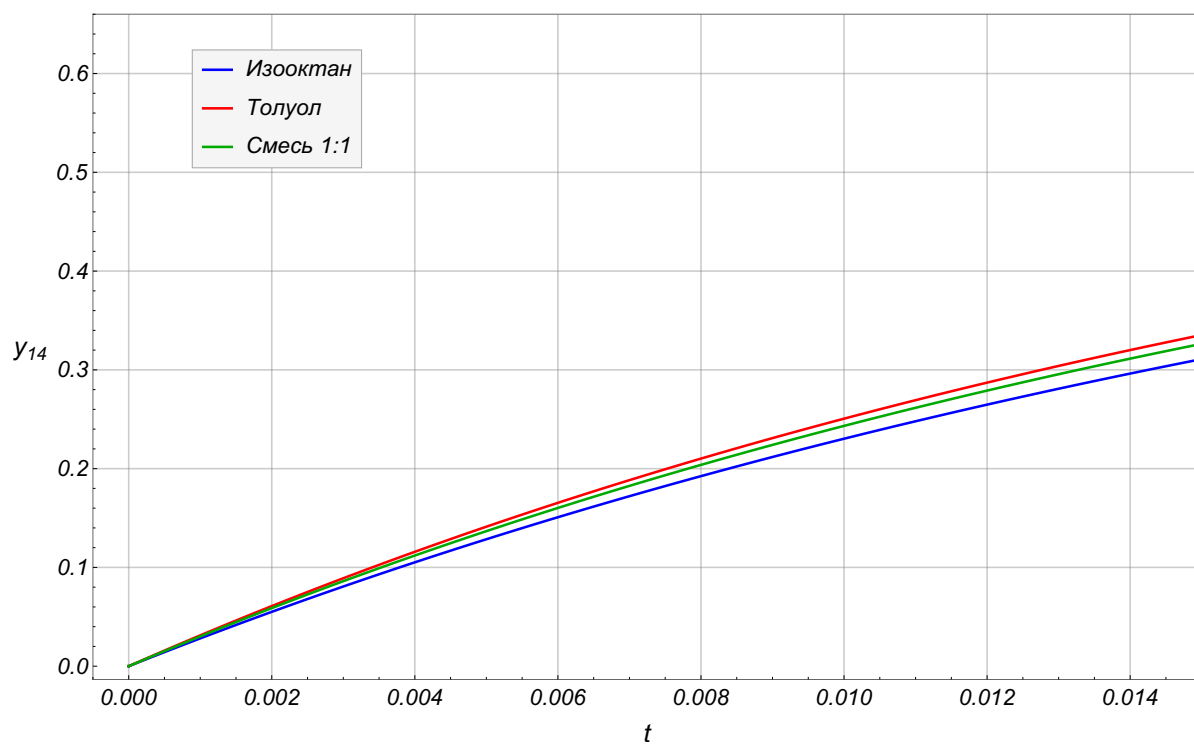


Рис. 21. Компонента решения  $y_{14}$  для трёх видов топлива.

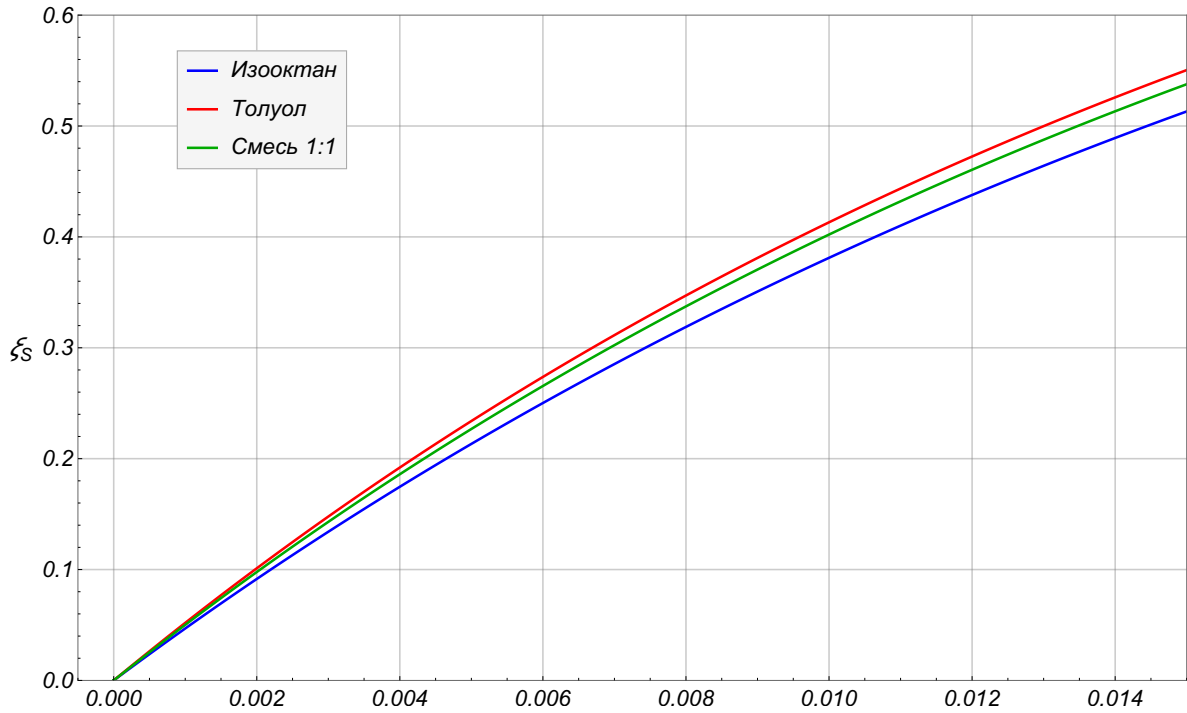


Рис. 22. Функция  $\xi_S(t)$  для трёх видов топлива.

**Сравнение с результатами экспериментов.** Ранее отмечено (см. раздел 3), что для открытых ЛДП на пороге дымления  $\xi_S \approx 0.21$ . Время, за которое достигается указанное равенство, называют временем роста  $\tau_{\text{роста}}$ . Будем считать, что

$$\xi_S(\tau_{\text{роста}}) = 0.21, \quad (4.2)$$

где  $\xi_S$  — функция, определяемая (4.1).

В табл. 2 представлены значения времён роста для исследуемых топлив, полученные в результате натуральных экспериментов [9, 10].

Таблица 2. Экспериментально наблюдаемые времена роста

Параметр	Топливо		
	Изооктан	Толуол	Изооктан + толуол (1 : 1)
$\tau_{\text{рост}}, \text{ мс}$	11.5	4.8	6

На основе результатов выполненных расчётов возможно оценить времена роста, наблюдаемые в численных экспериментах для каждого из топлив. Для этого проведём интерполяцию полученных сеточных функций  $\xi_S(t)$  для различных видов топлива и численно решим (4.2) относительно  $\tau_{\text{рост}}$ .

Результаты представлены в табл. 3: видно, что время роста  $\tau_{\text{рост}}$  для толуола, наблюдаемое в результате расчёта, достаточно близко к экспериментальному значению. В случае изооктана и смеси изооктана с толуолом получено соответствие худшего качества.

Таблица 3. Времена роста, наблюдаемые в расчёте

Параметр	Топливо		
	Изооктан	Толуол	Изооктан + толуол (1 : 1)
$\tau_{\text{рост}}$ , мс	4.9	4.4	4.6

Объяснить это можно следующим образом: из графиков, представленных на рис. 19–22, следует, что наибольшее влияние на значения функции  $\xi_S(t)$  оказывают компоненты решения  $y_i$  со старшими индексами ( $i > 4$ ). Выше отмечено, что именно эти компоненты меньше всего зависят от величины параметра  $\tau_R$  и больше — от значений соответствующих коэффициентов  $k_{i,j}$ . Поэтому значения времён роста в табл. 3 оказались близки.

## Заключение

В работе показано, что зарождение и рост частиц сажи при диффузионном горении углеводородных топлив могут быть представлены в виде марковского процесса и описаны системой обыкновенных дифференциальных уравнений (ОДУ) Колмогорова, решением которой является совокупность функций, представляющих собой вероятности нахождения углерода топлива в выделенных состояниях. При выводе соотношений для частот переходов углерода между выделенными состояниями использованы подходы, принятые в молекулярной кинетике, а также представления о механизме процессов образования и роста частиц сажи, полученные при анализе результатов экспериментальных исследований в условиях ламинарных диффузионных пламён (ЛДП). Полученная система относится к типу жёстких, для её решения применён четырехстадийный  $L$ -устойчивый метод Розенброка порядка 4 с вложенным методом порядка 3.

С помощью полученной системы ОДУ проведено численное моделирование указанных процессов в ЛДП изооктана, толуола и смеси изооктана и толуола в соотношении 1:1 на режиме горения, близком к порогу дымления. Получено хорошее соответствие результатов расчёта экспериментальным данным для ЛДП толуола. Однако, в отличие от экспериментально установленного существенного различия значений  $\tau_{\text{роста}}$  (времени роста) частиц сажи в ЛДП указанных топлив вблизи порога дымления, результаты расчёта показали лишь незначительное отличие значений  $\tau_{\text{роста}}$  в случаях ЛДП изооктана и смеси изооктана с толуолом от ЛДП толуола. Это может быть обусловлено принятыми в настоящей работе допущениями. При этом полученные результаты качественно соответствуют экспериментальным данным.

Полученные результаты свидетельствуют о правомерности использованного подхода к математическому моделированию процессов образования и роста частиц сажи, а также о необходимости снятия упрощающих допущений и продолжения исследований сажеобразования с помощью системы ОДУ

с целью уточнения механизмов сажеобразования при диффузионном горении углеводородов.

## Список литературы

- [1] *Фарадей М.* История свечи. М.: Наука. 1980. 128 с.
- [2] *Кокурин А.Д., Виноградов В.Н.* Диффузионное пламя в технологических процессах. Л.: ЛДНТП. 1984. 19 с.
- [3] *Гейдон А.Г., Вольфгард Х.Г.* Пламя, его структура, излучение и температура. М.: Металлургиздат. 1959. 333 с.
- [4] *Wagner H.* Soot formation — an overview // *Diegla D.C., Smith G.W. (eds.)* Particulate Carbon. Boston, MA: Springer. 1981. pp. 1–29. DOI:10.1007/978-1-4757-6137-5\_1
- [5] *Prado G., Lahaye J.* Physical Aspects of Nucleation and Growth of Soot Particles // *Diegla D.C., Smith G.W. (eds.)* Particulate Carbon. Boston, MA: Springer. 1981. pp. 143–175. DOI:10.1007/978-1-4757-6137-5\_6
- [6] *Ban L., Hess W.* Microstructure and Morphology of Carbon Blacks // *Deviney M.L., O'Grady T.M. (eds.)* Petroleum Derived Carbons. Washington.: ACS Symp. Ser. 1976. V. 21. pp. 358–377. DOI:10.1021/bk-1976-0021.ch026
- [7] *Lahaye J., Prado G.* Morphology and Internal Structure of Soot and Carbon Blacks // *Diegla D.C., Smith G.W. (eds.)* Particulate Carbon. Boston, MA: Springer. 1981. pp. 33–55. DOI:10.1007/978-1-4757-6137-5\_2
- [8] *Страдомский М.В.* Динамика образования сажевых частиц в пламени при сжигании распылённого топлива // Промышленная теплотехника. 1985. Т. 7. №. 3. С. 95–97.
- [9] *Исаев А.В.* Выявление закономерностей образования и газификации дисперсного углерода путём исследования процессов горения углеводородных топлив в различных условиях // II Международная научно-техническая конференция «Авиадвигатели XXI века». М.: ЦИАМ. 2005.
- [10] *Исаев А.В.* Выявление закономерностей процессов горения углеводородных топлив путём комплексного исследования ламинарных диффузионных пламен // Нефтепереработка и нефтехимия. 1995. № 4. С. 14–18.
- [11] *Кирпичников А.П.* Методы прикладной теории массового обслуживания. М.: Едиториал УРСС. 2017. 224 с.

- [12] *Вентцель Е.С., Овчаров Л.А.* Теория случайных процессов и ее инженерные приложения. М.: Высш. шк. 2000. 383 с.
- [13] *Кирмсе В.* Химия карбенов. М.: Мир. 1966. 324 с.
- [14] *Исаев А.В.* Механизм внутрипламенной газификации дисперсного углерода при диффузионном трении углеводородов //Химия и технология топлив и масел. 2004. № 4.
- [15] *Идинов Н.А., Полак Л.С., Попов В.Т.* Плазмохимическое получение дисперсного углерода. Методика эксперимента и основные зависимости //Химия высоких температур. Т. 18. № 3. 1984. С. 265–268.
- [16] *Меркулов А.А., Овсянников А.А., Полак Л.С., Попов В.Т., Пустильников В.Ю.* Моделирование образования технического углерода при пиролизе углеводородов. // *Мирохин Ю.А. (сост.)* Механизмы плазмохимических реакций углеводородов и углеродосодержащих молекул. Ч. 1. М.: ИНХС АН СССР. 1987. 142 с.
- [17] Органическая химия : учеб. пособие / *Котов А.Д., Миронов Г.С., Орлов В.Ю., Русков А.И.* Ярославль: ЯрГУ. 2007. 216 с.
- [18] Способ оценки склонности углеводородного топлива к сажеобразованию при горении / *Завьялов В.А., Исаев А.В., Резников М.Е., Шишаев С.В.* (РФ). — Патент на изобретение № 2199737 от 27 февраля 2003 г.
- [19] *Шишаев С.В.* Оценка склонности топлив к сажеобразованию и дымлению при горении. Новый лабораторный метод //Химия и технология топлив и масел. 2002. № 3. С. 50–52.
- [20] *Hairer E., Wanner G.* Solving Ordinary Differential Equations II. Stiff and Differential-Algebraic Problems. Berlin. Springer. 2010. 614 p. DOI:10.1007/978-3-642-05221-7  
[Имеется перевод: *Хайрер Э., Ваннер Г.* Решение обыкновенных дифференциальных уравнений. Жёсткие и дифференциально-алгебраические задачи. М.: Мир. 1999. 685 с.]
- [21] *Гужев Д.С., Калиткин Н.Н.* Оптимальная схема для пакета ROS4 //Матем. моделирование. 1994. Т. 6. № 11. С. 128–138.
- [22] *Hairer E., Nørsett S.P., Wanner G.* Solving Ordinary Differential Equations I. Nonstiff Problems. Berlin. Springer. 1993. 528 p. DOI:10.1007/978-3-540-78862-1  
[Имеется перевод: *Хайрер Э., Нёрсетт С., Ваннер Г.* Решение обыкновенных дифференциальных уравнений. Нежёсткие задачи. М.: Мир. 1990. 512 с.]



## Содержание

Введение	3
1. Общие представления о процессах, протекающих при образовании сажи в ходе горения углеводородных топлив	3
2. Физико-химическая модель процесса образования сажи при горении углеводородных топлив и постановка задачи	4
3. Математическая модель процесса образования сажи при горении углеводородных топлив	10
4. Результаты численного моделирования	16
Заключение	29