УДК 621.45:034.3

ЧИСЛЕННАЯ ТРЁХМЕРНАЯ МОДЕЛЬ ПОЛНОГО ЦИКЛА ПРОЦЕССА ПЕЧНОГО ПРОИЗВОДСТВА ТЕХНИЧЕСКОГО УГЛЕРОДА

© 2026 А. П. Почуев[1], С. Г. Черный[2a]

[1] *Новосибирский государственный университет, ул. Пирогова, 2, г. Новосибирск 630090, Россия,*
[2] *Институт теплофизики им. С. С. Кутателадзе СО РАН, просп. Акад. Лаврентьева, 1, г. Новосибирск 630090, Россия*

E-mail: sgcherny2023@yandex.ru

Поступила в редакцию 08.09.2025 г.; после доработки 03.12.2025 г.; принята к публикации 13.05.2026 г.

Настоящая работа посвящена разработке и анализу обобщённой численной модели процесса образования технического углерода (ТУ) в промышленных печных реакторах. Актуальность исследования обусловлена необходимостью повышения качества продукции, снижения производственных затрат и оптимизации технологических процессов на предприятиях, таких как ООО «ОмскТехУглерод». Модель базируется на фундаментальных уравнениях гидродинамики (RANS) и включает современные подходы к описанию ключевых физико-химических явлений. Для учёта сложных вихревых и анизотропных течений используется модель напряжений Рейнольдса (RSM). Турбулентное горение описывается с помощью PDF-модели фракции смеси (Non-Premixed Combustion), а кинетика сажеобразования (нуклеация, рост и окисление частиц) моделируется на основе двухстадийной модели Теснера с модификациями Магнуссена и Хертагера. Численное моделирование было проведено в программном комплексе ANSYS Fluent для двух различных конфигураций реакторов: 1) с предкамерой сжигания топлива и интенсивным перемешиванием; 2) с осевым сплошным потоком теплоносителя и радиальным впрыском сырья. В результате получены и проанализированы поля распределения ключевых параметров: температуры, концентраций компонентов, концентрации зародышей сажи и её массовой доли. Результаты показали, что разработанная модель адекватно воспроизводит основные стадии процесса: генерацию высокотемпературного теплоносителя, пиролиз сырья, образование зародышей в зонах с оптимальными температурами, последующий рост частиц и их частичное окисление. Сравнение конфигураций выявило влияние гидродинамики на локализацию зон сажеобразования, подтвердив при этом общность фундаментальных стадий процесса. Разработанная численная модель представляет собой ценный инструмент для качественного анализа сложных взаимосвязанных процессов в реакторах ТУ и закладывает основу для дальнейшей верификации, калибровки и оптимизации промышленных установок.

Ключевые слова: Carbon Black, Ansys Fluent, CFD, Tesner soot model, mixture fraction model.

DOI: 10.33048/SIBJIM.2026.29.308

ВВЕДЕНИЕ

Печной синтез технического углерода представляет собой высокотемпературный термохимический процесс глубокой переработки углеводородного сырья в проточном тракте. В рабочем объеме аппарата одновременно протекает совокупность взаимосвязанных явлений: турбулентное смешение высокоскоростных струй, окисление топлива, пиролиз углеводородных компонентов, а также фазовый переход с зарождением и последующим гетерогенным ростом

твердых дисперсных частиц. Протекание данных стадий в условиях короткого времени пребывания смеси и локальных температур свыше 1400–1900 K делает контактные экспериментальные измерения внутри реакционной зоны затруднительными.

В этой связи методы вычислительной гидродинамики (CFD) становятся инструментом исследования локальной структуры потока и распределения химических компонентов. Традиционные расчетные схемы, не способны описать влияние геометрии проточной части и способов ввода реагентов на формирование конечного продукта. Пространственная неравномерность смешения сырьевых струй с высокотемпературным теплоносителем определяет положение зон максимальной скорости нуклеации и интенсивность окисления сажи. Построение адекватной трехмерной модели требует совместного решения задач турбулентного переноса в условиях выраженной анизотропии, горения предварительно неперемешанных сред и кинетики сажеобразования.

Целью настоящей работы является формулировка и реализация трехмерной численной модели полного цикла печного процесса синтеза углерода, сочетающей модель напряжений Рейнольдса (RSM) для описания сложных вихревых течений, вероятностный подход к диффузионному горению на базе фракции смеси (PDF) и двухстадийную кинетическую модель нуклеации и роста дисперсной фазы. В рамках исследования проводится сравнительный анализ гидродинамической структуры и распределения термохимических полей в двух конструктивных компоновках реакторного узла: с закрученной предкамерой сгорания и с непрерывной осевой подачей теплоносителя при радиальном дискретном впрыске сырья.

1. ТЕХНИЧЕСКИЙ УГЛЕРОД: ОСНОВНАЯ ИНФОРМАЦИЯ И МЕТОДЫ МОДЕЛИРОВАНИЯ

1.1. Описание, свойства, получение и применение

Технический углерод (ТУ), часто называемый также сажей в более широком смысле, представляет собой высокодисперсный углеродный материал, получаемый в строго контролируемых промышленных условиях. Принципиальное отличие технического углерода от сажи, образующейся как побочный продукт неконтролируемого горения, заключается именно в целенаправленном производстве ТУ для получения продукта с заданными физико-химическими свойствами, отвечающими конкретным стандартам и ожиданиям потребителей. Основным компонентом технического углерода является углерод, содержание которого составляет не менее 90% [1].

На микроскопическом уровне технический углерод обладает сложной структурой. Его элементами являются плоские графитоподобные решётки, состоящие из шестичленных углеродных циклов [2]. Несколько таких решёток (обычно от 3 до 7), расположенных не строго одна над другой, а со смещением, образуют так называемый элементарный кристаллит [2]. Первичная частица технического углерода формируется из беспорядочно, но компактно расположенных элементарных кристаллитов. В процессе роста частиц происходит их столкновение и сращивание, приводящее к образованию прочных агрегатов, также называемых первичными структурными единицами. Размер и форма этих агрегатов определяют структурные свойства технического углерода. Первичные агрегаты могут далее объединяться в более крупные, но менее прочные вторичные структуры (цепочки), связанные межмолекулярными силами (от слабых Ван-дер-Ваальсовых до относительно сильных водородных связей).

Важнейшими физико-химическими свойствами технического углерода, определяющими его потребительские качества, являются следующие свойства.

Степень дисперсности: характеризуется средним размером первичных частиц, удельной поверхностью и удельным числом частиц в единице массы. Чем меньше размер частиц,

тем выше дисперсность и больше удельная поверхность. Это свойство напрямую влияет, например, на усиливающий эффект ТУ в резинах, так как от размера удельной поверхности зависит величина адсорбционных сил, связывающих ТУ с каучуком.

Структурность: определяется степенью разветвлённости и размером агрегатов частиц. Высокоструктурный ТУ характеризуется более развитыми и сложными агрегатами.

Химические свойства поверхности: Наличие на поверхности частиц различных функциональных групп (например, кислородсодержащих) влияет на взаимодействие ТУ с другими компонентами в композиционных материалах.

Существует несколько промышленных способов получения технического углерода, среди которых наиболее распространённым является печной процесс. В этом методе углеводородное сырьё (например, природный газ, жидкие нефтепродукты или каменноугольные масла) подвергается неполному сгоранию и/или термическому разложению в специальных реакторах при высоких температурах, обычно в диапазоне 1100–1900° С. Высокая температура достигается за счёт сжигания топлива (часто природного газа) в камере сгорания реактора. Полученный реакционный газ, содержащий частицы технического углерода, затем охлаждается (в том числе водой), и ТУ выделяется из потока, после чего гранулируется.

Другие методы получения включают ламповый, термический и канальный процессы, каждый из которых позволяет получать ТУ с различными характеристиками.

Благодаря своим уникальным свойствам технический углерод находит широкое применение в различных отраслях промышленности.

Резинотехническая промышленность: является основной областью применения ТУ, где он используется в качестве усиливающего наполнителя для каучуков, значительно улучшая их прочность, износостойкость, эластичность и другие эксплуатационные характеристики. Различные марки ТУ применяются в производстве шин, резиновых уплотнений, конвейерных лент и других изделий.

Производство пластмасс: используется для придания пластмассам электропроводности, защиты от ультрафиолетового излучения, а также в качестве чёрного пигмента.

Лакокрасочная промышленность: применяется как чёрный пигмент в красках, эмалях и покрытиях.

Полиграфическая промышленность: используется в производстве печатных красок.

Другие области: находит применение в производстве электродов, сорбентов, катализаторов и других материалов.

Исследования в области технического углерода продолжаются, направленные на улучшение его свойств, разработку новых марок и оптимизацию процессов его получения. Как уже упоминалось, работы П. А. Теснера [3, 4] и модель Брукса — Мосса [5–8] являются фундаментальными для понимания кинетики и механизмов образования ТУ. Современные исследования активно используют методы вычислительной гидродинамики (CFD) для детального моделирования процессов в реакторах технического углерода, что позволяет глубже понять взаимосвязь между технологическими параметрами и свойствами конечного продукта.

1.2. Разработанность

Разработка моделей образования сажи, которые могут быть адаптированы для описания процессов получения технического углерода, имеет длительную историю и прошла несколько этапов усложнения и детализации. Понимание этих моделей критически важно для оптимизации промышленных процессов и улучшения качества целевого продукта.

Первоначально понимание механизмов сажеобразования носило в основном качественный характер. Исследователи, такие как Палмер и Куллис [9], Хайнс и Вагнер [10], а также Глазман [11], заложили основу для понимания сложных путей превращения углеводородов в твёрдые частицы сажи. Грубо говоря, этот процесс описывался как образование ароматических

углеводородов из неароматического топлива в газовой среде с последующим усложнением их структуры путём присоединения алкильных групп и «конденсацией» до частиц сажи.

Значительным шагом вперёд стала двухступенчатая модель, предложенная П. А. Теснером в 1971 году [3, 4, 12]. Эта модель разделяет процесс образования сажи на два ключевых этапа.

1. Образование активных радикалов (зародышей): на этой стадии из молекул исходного углеводородного сырья (в первоначальной модели Теснера это часто ацетилен) в результате высокотемпературных реакций образуются активные центры или радикалы, которые служат первичными зародышами для будущих частиц сажи. Этот процесс часто описывается как разветвлённо-цепной. Скорость образования зародышей $\frac{dN}{dt}$ (где N — концентрация зародышей) зависит от концентрации исходного углеводорода и температуры.

2. Рост частиц сажи: Образовавшиеся зародыши начинают расти за счёт гетерогенного присоединения углерода из газовой фазы (например, молекул ацетилена или других углеводородных фрагментов) к их поверхности. Скорость роста частиц $\frac{dm}{dt}$ (где m — масса сажи) зависит от концентрации зародышей, концентрации углеводородов, доступных для роста, и температуры.

Константы скоростей для этих процессов в модели Теснера обычно определяются экспериментально. Важной особенностью модели является учёт того, что образование новых зародышей может тормозиться уже существующими частицами сажи, которые конкурируют за активные молекулы углеводородов [13].

В 1977 году Магнуссен и Хертагер расширили модель Теснера, применив «модель диссипации вихря» («Eddy Dissipation Model» – EDM) для учёта влияния турбулентности на процессы горения и сажеобразования [3]. Эта модификация стала важной, поскольку промышленные процессы получения технического углерода, как правило, протекают в условиях интенсивного турбулентного перемешивания. Подход Теснера — Магнуссена часто считается оптимальным с точки зрения баланса между детализацией процессов и сложностью реализации в численных моделях. В рамках этого подхода скорость химических реакций, включая реакции, ведущие к образованию и выгоранию сажи, лимитируется не только кинетикой самих химических превращений, но и скоростью турбулентного смешения реагентов. Это особенно актуально для диффузионных пламен, где топливо и окислитель подаются раздельно. Модель Магнуссена и Хертагера связывает скорость реакции со скоростью диссипации турбулентных вихрей, которая характеризует интенсивность перемешивания на микроуровне.

Несмотря на широкое применение моделей типа Теснера — Магнуссена, научное сообщество продолжало работать над более глубоким пониманием и детализацией процессов сажеобразования.

Модели, основанные на двух транспортных уравнениях: развитие получили модели, описывающие эволюцию не только общей массы сажи, но и концентрации сажевых частиц. Примером является модель Брукса и Мосса (1999) [5–8], которая учитывает нуклеацию, рост частиц за счёт присоединения элементарных частиц (часто ацетилена), коагуляцию (слипание мелких частиц в более крупные) и окисление. Этот подход позволяет получить информацию о распределении частиц по размерам, что крайне важно для прогнозирования свойств технического углерода.

Детальные кинетические механизмы: с развитием вычислительных мощностей стали появляться модели, основанные на детальном описании химической кинетики пиролиза и окисления углеводородов, включая образование полициклических ароматических углеводородов (ПАУ) как предшественников сажи [14]. Эти механизмы могут включать сотни химических компонентов и тысячи элементарных реакций. Хотя такие модели обеспечивают наиболее

полное описание химических превращений, их сложность и вычислительная стоимость ограничивают применение в инженерных расчётах крупномасштабных промышленных установок. Проблема адекватного описания перехода от газофазных молекул ПАУ к образованию зародышей и росту частиц конденсированной фазы остаётся одной из ключевых в этих моделях.

Марковские процессы и уравнения Колмогорова: для описания цепочки превращений углеводородного топлива и образования различных фракций сажи предлагались подходы, основанные на моделировании этих процессов как марковских процессов с конечным числом состояний, описываемых системами обыкновенных дифференциальных уравнений Колмогорова [15, 16].

Несмотря на значительный прогресс, полное понимание механизмов образования сажи, особенно критического перехода от молекул к первичным наночастицам, всё ещё не достигнуто. Современные исследования активно используют как экспериментальные методы, так и передовые вычислительные подходы, включая классическую молекулярную динамику, для изучения атомистической структуры сажи и механизмов её образования и распада. Для практических задач моделирования производства технического углерода, где важен баланс между точностью и вычислительными затратами, полуэмпирические модели, подобные модели Теснера с модификациями Магнуссена и Хертагера или модели Брукс — Мосса, продолжают оставаться востребованными. Они позволяют учесть основные физико-химические процессы и влияние условий в реакторе на выход и свойства продукта, что делает их ценным инструментом для инженеров и исследователей. Важно отметить, что при адаптации этих моделей к конкретным условиям производства технического углерода необходимо учитывать специфику используемого сырья и конструкцию реактора.

1.3. Актуальность

Актуальность исследований в области моделирования производства технического углерода (ТУ) в настоящее время чрезвычайно высока и обусловлена комплексом экономических, технологических и экологических факторов. Несмотря на длительную историю изучения процессов сажеобразования и промышленного производства ТУ, потребность в более глубоком понимании и точном количественном описании этих сложных явлений не только не снижается, а, наоборот, возрастает.

Технический углерод остаётся незаменимым компонентом во многих отраслях, в первую очередь в производстве шин и резинотехнических изделий, где он выполняет функцию усиливающего наполнителя, а также в производстве пластмасс, красок и покрытий. Промышленные предприятия, такие как ООО «ОмскТехУглерод», напрямую заинтересованы в разработке и внедрении достоверных математических моделей процесса производства ТУ. Это связано со следующими целями.

Повышение качества продукции: моделирование позволяет глубже понять, как параметры процесса (температура, состав сырья, гидродинамика потоков в реакторе, время пребывания) влияют на ключевые характеристики ТУ, такие как дисперсность, структурность, удельная поверхность и химический состав поверхности частиц. Точное прогнозирование этих свойств необходимо для производства ТУ, полностью соответствующего требованиям конкретных потребителей.

Снижение производственных затрат: оптимизация технологических режимов на основе моделей может привести к снижению энергопотребления (например, за счёт более эффективного использования тепла от сжигания топлива), уменьшению расхода сырья и увеличению выхода целевого продукта.

Повышение стабильности и надёжности процесса: модели могут помочь выявить критические параметры, влияющие на стабильность работы реактора, и разработать стратегии для предотвращения нежелательных явлений, таких как образование отложений (кокса) или выход параметров процесса за допустимые пределы.

Процесс образования технического углерода в печи включает в себя множество взаимосвязанных и конкурирующих физико-химических явлений: турбулентное течение многокомпонентной газовой смеси, распыление и испарение жидкого сырья, горение топлива, пиролиз углеводородного сырья, нуклеацию (образование первичных зародышей сажи), рост частиц за счёт поверхностных реакций и присоединения газофазных предшественников (таких как ацетилен и ПАУ), коагуляцию частиц (слипание), агломерацию и окисление (выгорание) сажи. Математическое описание такой сложной системы требует применения современных подходов вычислительной гидродинамики (CFD) и детальных моделей химической кинетики. Разработка и верификация таких комплексных моделей является актуальной научной задачей.

Производство технического углерода, как и любой высокотемпературный процесс, связанный с переработкой углеводородного сырья, потенциально может оказывать воздействие на окружающую среду. Актуальность моделирования здесь проявляется в возможности проведения операций.

Прогнозирования и минимизации выбросов вредных веществ: модели могут помочь оценить образование побочных продуктов, таких как оксиды углерода, оксиды азота, полициклические ароматические углеводороды (ПАУ), и разработать технологические решения для снижения их выбросов.

Повышения эффективности утилизации отходящих газов: оптимизация процессов может способствовать более полному использованию энергетического потенциала отходящих газов.

Помимо традиционных областей применения, технический углерод всё чаще рассматривается как перспективный материал для новых высокотехнологичных приложений, например, в производстве электропроводящих композитов, компонентов литий-ионных аккумуляторов, суперконденсаторов, катализаторов и сорбентов. Для направленного синтеза ТУ с заданными уникальными свойствами (например, с определённой пористостью, электропроводностью, морфологией частиц) необходимы предиктивные модели, связывающие условия синтеза со структурой и свойствами продукта.

Несмотря на значительный прогресс, некоторые фундаментальные аспекты образования сажи, особенно механизм нуклеации и ранние стадии роста частиц, до сих пор остаются предметом научных дискуссий. Моделирование, в сочетании с современными экспериментальными методами, играет ключевую роль в проверке гипотез и углублении фундаментальных знаний в этой области. Актуальность заключается в необходимости создания моделей, которые не только корректно описывают макроскопические параметры процесса, но и основаны на глубоком понимании микроскопических механизмов. В условиях глобального рынка и растущей конкуренции, внедрение передовых методов моделирования и оптимизации является важным фактором повышения конкурентоспособности предприятий-производителей технического углерода. Способность быстро адаптироваться к изменяющимся требованиям рынка, разрабатывать новые марки продукции и повышать эффективность производства напрямую зависит от уровня научно-технического развития, неотъемлемой частью которого является математическое моделирование.

Таким образом, актуальность исследований в области моделирования производства технического углерода определяется насущными потребностями промышленности в повышении эффективности и качества, сложностью самого процесса, требующего применения современных научных методов, возрастающими экологическими требованиями, а также перспективами создания новых материалов и технологий. Работа, направленная на адаптацию и применение моделей для прогнозирования полного цикла производства ТУ, находится в русле этих актуальных научных и инженерных задач.

1.4. Связка процессов образования сажи и процессов сгорания в потоке газа теплоносителя

Процесс образования технического углерода в промышленных печах неразрывно связан с высокотемпературными процессами горения, которые обеспечивают необходимый температурный режим и создают химическую среду для пиролиза и последующих превращений углеводородного сырья. Поэтому любая адекватная модель образования ТУ должна учитывать эту связь. Существуют различные подходы к моделированию этой связки, отличающиеся степенью детализации и вычислительной сложностью.

1.4.1. Однофазовое моделирование с PDF моделью фракции смеси (Unpremixed Combustion).

Этот подход рассматривает реагирующую систему как единую газовую фазу, в которой происходят процессы горения и сажеобразования. Ключевым элементом для моделирования горения в таком подходе часто выступает модель функции плотности вероятности (PDF) фракции смеси. Этот метод хорошо зарекомендовал себя для описания турбулентного диффузионного горения, которое характерно для многих промышленных печей, где топливо и окислитель подаются раздельно [17].

Суть PDF модели фракции смеси: вместо решения полного набора уравнений для всех химических компонентов, этот подход основывается на концепции фракции смеси (mixture fraction, f). Фракция смеси — это скалярная переменная, которая характеризует локальный состав смеси, изменяясь от 0 (чистый окислитель) до 1 (чистое топливо). Предполагается, что все термохимические свойства (температура, плотность, концентрации основных продуктов горения) являются уникальными функциями от фракции смеси и степени протекания реакции (прогресс-переменной). Влияние турбулентности на горение учитывается через PDF для фракции смеси, которая описывает вероятностное распределение значений f в данной точке из-за турбулентных флуктуаций. Химические реакции часто предполагаются находящимися в равновесии или описываются с помощью таблиц предварительно рассчитанных состояний (flamelet-модели).

Интеграция модели сажеобразования: модель образования сажи (например, двухступенчатая модель Теснера [4, 12] с модификациями Магнуссена и Хертагера для учёта влияния турбулентности [3]) встраивается в эту газофазную модель. Уравнения для концентрации зародышей сажи и массовой концентрации сажи решаются параллельно с уравнениями течения и горения. Источниковые члены в этих уравнениях (скорости нуклеации, роста, коагуляции, окисления) зависят от локальных параметров газовой фазы (температуры, концентраций углеводородов-предшественников сажи, концентраций окислителей), которые, в свою очередь, определяются PDF моделью фракции смеси. Таким образом, модель горения предоставляет необходимые локальные условия для модели сажеобразования.

Преимущества однофазового подхода с PDF:

1. Относительная вычислительная эффективность: по сравнению с многофазными моделями, решение уравнений только для одной (газовой) фазы значительно снижает вычислительные затраты. Это особенно важно при моделировании промышленных установок большого масштаба.

2. Адекватное описание диффузионного горения: PDF модель фракции смеси хорошо справляется с описанием процессов смешения и горения в диффузионном пламени, которое являются типичным для печей технического углерода, где сырьё и горячие газы (продукты сгорания топлива) смешиваются в реакционной зоне.

3. Упрощённое задание граничных условий: граничные условия задаются для единой газовой фазы, что может быть проще, чем определение параметров для нескольких фаз на входе в расчётную область.

4. Меньшее количество эмпирических моделей: хотя сама модель сажеобразования содержит эмпирические константы, описание горения через PDF и равновесные или flamelet-таблицы может потребовать меньше настроечных параметров, чем детальное моделирование многофазных взаимодействий.

1.4.2. Многофазовое моделирование (дисперсионная модель).

Этот подход явным образом разделяет систему на несколько фаз, таких как непрерывную газовую фазу (газ-теплоноситель, продукты горения, пары сырья) и одну или несколько дисперсных фаз (капли жидкого сырья, твёрдые частицы сырья, частицы сажи). В статье [18] представлен пример такого подхода для газификации биомассы, где сажеобразование также играет важную роль.

Суть многофазного подхода: для газовой фазы решаются уравнения Навье-Стокса, энергии и переноса компонентов. Для дисперсных фаз могут использоваться эйлерово-эйлеровы (каждая фаза рассматривается как континуум) или эйлерово-лагранжевы (отслеживаются траектории отдельных частиц или "пакетов"частиц) подходы. В контексте производства ТУ из жидкого сырья, дисперсная фаза – это капли сырья, которые испаряются, а затем их пары пиролизуются с образованием сажи. В [18], посвящённой биомассе, подробно рассматривается пиролиз твёрдых частиц с выделением летучих компонентов, включая смолы, которые являются предшественниками сажи. Моделируется разделение биомассы на компоненты (целлюлоза, гемицеллюлоза, лигнин), каждый со своей кинетикой пиролиза. Частицы сажи, образовавшиеся из газовой фазы (паров сырья или смол), также могут рассматриваться как отдельная дисперсная фаза или, как, в их транспорт может описываться в рамках континуального подхода уравнениями конвекции-диффузии-реакции, аналогично газовым компонентам, если частицы достаточно малы и их инерцией можно пренебречь. В работе [18] используется модель из двух уравнений для описания эволюции массовой доли сажи и числовой плотности числа частиц сажи.

Связь с процессом сгорания и сажеобразованием: горение топлива (для создания газа-теплоносителя) моделируется в газовой фазе. Тепло от горения передаётся каплям сырья, вызывая их испарение. Пары сырья затем смешиваются с горячими газами и пиролизуются. Модели сажеобразования (например, учитывающие нуклеацию из газофазных предшественников, рост, коагуляцию и окисление) активируются в тех областях, где условия (температура, концентрация предшественников) становятся подходящими. Происходит тепло- и массообмен между фазами.

Недостатки многофазного подхода (в сравнении с однофазным для некоторых задач):

1. Высокая вычислительная сложность: решение уравнений для нескольких фаз и учёт межфазного взаимодействия требует значительно больших вычислительных ресурсов.

2. Необходимость детальных подмоделей: требуется большее количество подмоделей для описания поведения дисперсной фазы (например, дробление капель, испарение, кинетика пиролиза частиц, взаимодействие частиц со стенками), каждая из которых вносит свои неопределённости и требует калибровки.

3. Сложность верификации: Экспериментальная верификация моделей межфазного взаимодействия и поведения дисперсной фазы в условиях промышленных реакторов затруднена.

Подводя итог, выбор между однофазовым и многофазным подходом для моделирования образования технического углерода зависит от конкретных целей исследования, доступных вычислительных ресурсов и необходимой степени детализации. Однофазовый подход с PDF моделью фракции смеси предлагает хорошее сочетание относительной простоты и способности адекватно описывать ключевые процессы диффузионного горения и связанного с ним сажеобразования. Его преимущества в меньшей вычислительной сложности и более простом задании начальных и граничных условий делают его привлекательным для инженерных расчётов

и оптимизации промышленных реакторов ТУ, особенно когда основное внимание уделяется глобальным параметрам процесса и свойствам сажи в газовой фазе. Многофазный подход позволяет более детально рассмотреть поведение сырья (особенно если оно подаётся в виде капель или твёрдых частиц), процессы его испарения/пиролиза и взаимодействие с газовой средой. Однако это достигается ценой значительного усложнения модели и увеличения вычислительных затрат, как это видно из работы. Такой подход может быть более оправдан, когда критически важно детальное понимание начальных стадий превращения сырья или когда межфазные взаимодействия играют доминирующую роль.

1.5. Проблематика исследования

Моделирование процесса образования технического углерода (ТУ) в промышленных печах является сложной междисциплинарной задачей, имеющей высокую практическую значимость для оптимизации производства и улучшения качества продукции. Одно из предыдущих исследований было посвящено исследованию полуэмпирической модели мгновенного образования технического углерода по Бруксу-Моссу в гипотетическом реакторе с известными массовыми расходами на входе. Эта модель, описываемая системой двух обыкновенных дифференциальных уравнений для концентрации частиц и их массы, с коэффициентами, зависящими от плотности газовой смеси, массовых долей ацетилена, гидроксильных радикалов, кислорода и температуры, позволила получить первоначальное представление о кинетике образования ТУ. Однако, как было отмечено, такая система не была связана напрямую ни с химией протекающих процессов горения и пиролиза в реакторе, ни с физическими процессами переноса тепла и массы, то есть с гидродинамикой потоков внутри реакторного пространства. Это ограничение указывает на необходимость разработки более комплексной и обобщённой модели, способной учитывать эти взаимосвязи для более точного и надёжного прогнозирования процесса.

Объектом исследования является печной процесс образования технического углерода, протекающий в промышленных цилиндрических проточных реакторах, где жидкое углеводородное сырьё впрыскивается в поток горячих газов, образующихся при сжигании топлива. Предметом исследования выступают физико-химические процессы, лежащие в основе образования технического углерода в печном реакторе, и их численное моделирование. Это включает в себя изучение гидродинамики многокомпонентной реагирующей смеси, процессов горения топлива, термического разложения углеводородного сырья, а также кинетики образования и роста частиц технического углерода. Особое внимание уделяется применению и адаптации двухступенчатой модели Теснера-Магнуссена-Хертагера для описания сажеобразования и модели функции плотности вероятности (PDF) фракции смеси для моделирования турбулентного горения в рамках программного комплекса ANSYS Fluent.

Учитывая ограничения модели мгновенного образования, основной целью настоящей работы является разработка и анализ обобщённой численной модели процесса образования технического углерода в печных реакторах, основанной на гидродинамике несущей фазы и учитывающей ключевые физико-химические процессы, протекающие в реакторе, с использованием ресурсов системы ANSYS Fluent. Эта обобщённая модель должна обеспечить более надёжное и комплексное описание процесса по сравнению с упрощёнными подходами.

Для достижения поставленной цели необходимо решить следующие задачи.

— Осуществить переход от модели мгновенного образования к обобщённой модели, базирующейся на уравнениях гидродинамики несущей фазы (уравнения неразрывности, сохранения импульса и энергии), с описанием процесса сажеобразования с помощью двухступенчатой модели Теснера — Магнуссена — Хертагера и моделированием химии горения посредством PDF модели фракции смеси.

— Получить и проанализировать расчётные картины распределения ключевых параметров процесса (концентраций компонентов, температуры, концентрации зародышей и массовой

доли технического углерода) в реакторе с простой геометрией и заданными начальными и граничными условиями.

— Получить и проанализировать расчётные картины распределения параметров процесса в реакторе, моделирующем условия непрерывного потока с использованием условий симметрии для снижения вычислительных затрат и более детального изучения локальных характеристик течения и сажеобразования.

Решение этих задач позволит создать более совершенный инструмент для анализа и оптимизации промышленного производства технического углерода, способствуя лучшему пониманию сложных взаимосвязей между условиями в реакторе и свойствами конечного продукта.

1.6. Предыдущие исследования

В [20–21] предлагаются две численные модели процесса работы реактора. Обе модели описывают в трёхмерной постановке распыл и испарение жидкого углеводородного сырья в потоке газа-теплоносителя в реакторе и выполнены в приближении эйлерово-эйлерова подхода, реализованного на платформах ANSYS и FlowVision. В обоих вариантах движение несущей фазы (газ-теплоноситель и продукты испарения сырья) описывается системой уравнений Навье-Стокса, учитывающей турбулентность, массо- и теплоперенос. В ANSYS движение дисперсной фазы, так же, как и несущей описывается уравнениями Навье — Стокса. Для описания динамики дисперсной фазы во FlowVision применяются конвективно-диффузионные уравнения для концентрации частиц, импульса и энергии фазы. Непосредственно выход самого технического углерода из продуктов испарения сырья в этих работах не моделируется. Но оценки таких важнейших его физико-химических свойств, как степень дисперсности, характер вторичных структур (сажевых цепочек) и свойства поверхности сажевых частиц могут быть получены на стадии испарения распылённого сырья.

2. МАТЕМАТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ. ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИЕ ПРОЦЕССЫ

2.1. Уравнение неразрывности

Уравнение неразрывности, или уравнение сохранения массы, в дифференциальной форме записывается как:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{U}) = S_m, \tag{1}$$

где ρ — плотность среды (кг/м^3); t — время (с); $\mathbf{U}$ — вектор скорости потока (м/с); S_m — источниковый член (кг/(м^3·с)). В большинстве задач $S_m = 0$.

2.2. Уравнение сохранения импульса

Уравнение сохранения импульса для ньютоновской изотропной жидкости имеет вид:

$$\frac{\partial (\rho \mathbf{U})}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{U}\mathbf{U}) = -\nabla p + \nabla \cdot (\boldsymbol{\tau}_{ij}) + \rho \mathbf{g} + \mathbf{F}, \tag{2}$$

где p — статическое давление (Па); $\boldsymbol{\tau}_{ij}$ — тензор вязких напряжений (Па):

$$\boldsymbol{\tau}_{ij} = \mu \left[(\nabla \mathbf{U} + (\nabla \mathbf{U})^T) - \frac{2}{3} (\nabla \cdot \mathbf{U}) \mathbf{I} \right], \tag{3}$$

где μ — динамическая вязкость, $\mathbf{I}$ — единичный тензор. $\rho \mathbf{g}$ — вектор объёмной силы тяжести (Н/м^3); $\mathbf{F}$ — вектор других внешних объёмных сил (Н/м^3).

2.3. Сохранение энергии

Уравнение сохранения энергии, записанное через полную энергию E, выглядит следующим образом:

$$\frac{\partial(\rho E)}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{U}(\rho E + p)) = \nabla \cdot \left(k_{\text{eff}} \nabla T - \sum_j h_j \mathbf{J}_j + (\boldsymbol{\tau}_{\text{eff}} \cdot \mathbf{U}) \right) + S_h, \tag{4}$$

где E — полная энергия на единицу массы (Дж/кг), $E = h - p/\rho + U^2/2$; h — статическая энтальпия; k_{eff} — эффективная теплопроводность (Вт/(м·К)); $\mathbf{J}_j$ — вектор диффузионного потока j-го компонента смеси; $\boldsymbol{\tau}_{\text{eff}}$ — тензор эффективных напряжений; S_h — объёмный источниковый член тепла (Вт/м^3).

2.4. Модель напряжений Рейнольдса (RSM)

Для адекватного моделирования сложных турбулентных течений (сильно закрученные и рециркуляционные потоки), стандартные модели (как k-ε), могут быть неточными. В данной работе применяется модель напряжений Рейнольдса (RSM), которая напрямую вычисляет компоненты тензора напряжений Рейнольдса $\mathbf{R}_{ij} = \overline{u_i' u_j'}$. Общая форма транспортного уравнения для R_{ij}:

$$\frac{\partial R_{ij}}{\partial t} + C_{ij} = P_{ij} + \Phi_{ij} + D_{ij} - \varepsilon_{ij} + F_{ij}, \tag{5}$$

где C_{ij} — конвективный перенос; P_{ij} — член генерации напряжений; Φ_{ij} — тензор корреляции давления и градиента скорости; D_{ij} — диффузионный перенос; ε_{ij} — тензор скорости диссипации; F_{ij} — член генерации за счёт объёмных сил.

2.5. PDF – подход. Метод фракции смеси

Для моделирования турбулентного диффузионного горения используется метод фракции смеси (Non-Premixed Combustion Model). Подход основан на введении консервативной скалярной величины — фракции смеси (f):

$$f = \frac{\text{масса, пришедшая из потока топлива}}{\text{общая масса в точке}} \tag{6}$$

При допущении о «бесконечно быстрой химии», все термохимические свойства смеси становятся однозначными функциями от f. Вместо решения уравнений для всех компонентов, решается одно транспортное уравнение для осреднённой фракции смеси $\bar{f}$:

$$\frac{\partial(\rho \bar{f})}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{U} \bar{f}) = \nabla \cdot \left(\left(\frac{\mu}{Sc} + \frac{\mu_t}{Sc_t} \right) \nabla \bar{f} \right) + S_{m_f}. \tag{7}$$

Влияние турбулентных флуктуаций учитывается с помощью функции плотности вероятности (PDF), $P(f)$. Среднее значение скаляра $\bar{\phi}$ вычисляется как:

$$\bar{\phi} = \int_0^1 \phi(f) P(f; \bar{f}, \overline{f'^2})\, df. \tag{8}$$

Для построения PDF решается дополнительное транспортное уравнение для её дисперсии $g = \overline{f'^2}$.

2.5.1. Модель Теснера с модификациями Магнуссена и Хертагера.

Для описания кинетики сажеобразования применяется двухстадийная модель Теснера.

Образование зародышей (нуклеация): Скорость образования зародышей (N):

$$R_{N,f} = n_0 + (k_f - k_g)n_N - k_{t0}n_s n_N \tag{9}$$

Решается транспортное уравнение для числовой концентрации зародышей n_N:

$$\frac{\partial n_N}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{U}n_N) = \nabla \cdot \left(\left(\frac{\mu}{Sc_{N,t}} \right) \nabla n_N \right) + R_N \tag{10}$$

Рост и окисление сажи: Скорость роста массы сажи Y_s за счёт конденсации:

$$R_{s,f} = M_{\text{part}}(k_\alpha - k_\beta n_N)n_N \tag{11}$$

Скорость окисления сажи ($R_{s,c}$) лимитируется скоростью турбулентного смешения и описывается моделью Магнуссена и Хертагера (Eddy Dissipation Model):

$$R_{s,c} = A_M \rho \frac{\varepsilon}{k} \min \left(Y_s, \frac{Y_{\text{Ox}}}{S_{\text{Ox}}}, C_{M,R} \frac{Y_{\text{Fuel}}}{S_{\text{Fuel}}} \right) \tag{12}$$

Решается транспортное уравнение для массовой доли сажи Y_s:

$$\frac{\partial(\rho Y_s)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{U} Y_s) = \nabla \cdot \left(\left(\frac{\mu_t}{Sc_{s,t}} \right) \nabla Y_s \right) + R_s \tag{13}$$

2.6. Немного о связи моделей

Для прояснения возможных неясностей, прямо обозначим связи, присутствующие в перечисленных уравнениях. Основополагающая система уравнений Навье — Стокса предоставляет нам данные о перемещении потока смеси по измерениям, используемых потом в каждом из используемых уравнений, что в принципе естественно. Эти данные используются в том числе моделью сохранения энергии для предоставления нам данных о множестве параметров потока, в том числе о температуре, а также в системе уравнений RSM, дающих нам представление об анизотропных свойствах потока во всех направлениях, а также о кинетической энергии турбулентности k и скорости её диссипации ε.

Эти данные существенны. Полученные значения играют важную роль в модели не перемешанного горения PDF для предоставления данных о вязких свойствах газового потока и температурных характеристиках. На их основе вычисляются среднее параметра смеси (mean mixture fraction) и дисперсия параметра смеси (mixture fraction variance), на основе которых по предрасчитанным данным можно получить содержательные характеристики различных продуктов горения.

Ну и далее, температурные характеристики и характеристики движения потока, а также параметры получаемых из системы RSM, наряду с концентрационными характеристиками сажеобразующих углеводородов образуют достаточный набор данных для расчёта образования сажи через генерацию и поверхностный рост в условиях возможного окисления.

Таким образом, получаем достаточную и ёмкую систему для моделирования большинства процессов, происходящих в реакторе при генерации частиц технического углерода.

2.7. Валидация некоторых уравнений

2.7.1. RSM.

Модель напряжений Рейнольдса (RSM, Reynolds Stress Model) представляет собой один из наиболее продвинутых подходов в рамках осреднённых по Рейнольдсу уравнений Навье-Стокса (RANS). В отличие от более простых двухпараметрических моделей (таких как $k - \varepsilon$

и $k-\omega$), которые опираются на гипотезу Буссинеска об изотропной турбулентной вязкости, RSM напрямую решает транспортные уравнения для всех шести компонент тензора напряжений Рейнольдса. Этот фундаментальный отход от упрощений наделяет модель RSM значительными преимуществами при анализе сложных турбулентных течений, что убедительно демонстрируется в обеих представленных статьях, посвящённых как горению, так и аэродинамике [22, 23].

В исследовании горения аммиачно-водородной смеси в вихревой горелке [22] модель RSM проявила себя как лучший компромисс между точностью и вычислительными затратами среди всех рассмотренных RANS-моделей. Её превосходство было особенно заметно в следующих аспектах.

— Точное описание структуры течения. В вихревых потоках формируются сложные зоны рециркуляции. В то время как стандартные $k-\varepsilon$ модели предсказывали единую внутреннюю зону рециркуляции (IRZ), модель RSM, так же как и высокоточная модель крупных вихрей (LES), смогла корректно описать её разделение на две части. Это указывает на способность RSM улавливать тонкие особенности течения, имеющие решающее значение для стабилизации пламени и смешения.

— Учёт анизотропии турбулентности. Вихревые течения по своей природе анизотропны — турбулентные пульсации в них имеют разную интенсивность по разным направлениям. Модели, основанные на изотропной вязкости, неспособны это учесть. RSM, решая уравнения для каждой компоненты напряжений, напрямую моделирует анизотропию. Именно это позволило ей, в отличие от других RANS-моделей, предсказать профиль скорости, близкий к результатам LES, с ошибкой в зонах рециркуляции менее 7 м/с.

— Повышенная точность прогнозирования температуры и характеристик пламени. Благодаря более точному описанию гидродинамики, RSM показала результаты по температуре пламени, которые были значительно ближе к данным LES (разница до 100 K с другими RANS-моделями). Это напрямую связано с тем, что RSM решает отдельные уравнения для компонент напряжений, которые влияют на перенос тепла. Как следствие, толщина пламени и его положение также были предсказаны с большей точностью.

— Улучшенное прогнозирование выбросов. Выбросы NOx критически зависят от полей температуры и времени пребывания. Модель RSM, обеспечивая более точные температурные и скоростные поля, предсказала уровень выбросов со значительно меньшей ошибкой (недооценка на 35% у других RANS-моделей) по сравнению с экспериментом, приблизившись к результатам LES. Авторы заключают, что для адекватного предсказания медленно формирующихся веществ, таких как NOx, нестационарный подход является обязательным, и RSM в этом контексте показывает себя как лучшая из RANS-моделей.

Работа [23] дополнительно подтверждает ценность RSM, используя её как основу для создания усовершенствованной модели для анализа переходных течений на крыле в транзвуковом режиме. Авторы изначально выбирают RSM, поскольку двухпараметрические модели сталкиваются с серьёзными ограничениями при наличии таких сложных явлений, как вторичные и отрывные течения; поперечные течения (crossflow) и течения в углах; эффекты сжимаемости.

Исследование показывает, что RSM является не просто более точной, но и надёжной платформой для дальнейшего усовершенствования. Её успешно объединяют с моделью перехода и добавляют поправки на сжимаемость, что позволяет с высокой точностью моделировать сложнейшие аэродинамические процессы.

Обе работы, несмотря на разницу в прикладных областях, сходятся в одном: модель напряжений Рейнольдса (RSM) является мощным инструментом, превосходящим стандартные RANS-модели. Её ключевое преимущество заключается в отказе от гипотезы изотропности

турбулентности и прямом расчёте анизотропных напряжений Рейнольдса. Это позволяет с высокой точностью описывать сложные вихревые и отрывные течения, что, в свою очередь, ведёт к более достоверному прогнозированию температурных полей, характеристик пламени и уровня вредных выбросов. Хотя RSM требует больших вычислительных ресурсов, чем модели $k-\varepsilon$ или $k-\omega$, она представляет собой оптимальный компромисс между точностью и затратами, приближаясь по качеству результатов к дорогостоящим LES-расчётам, и является незаменимым инструментом для высокоточного инженерного анализа.

2.7.2. PDF.

Моделирование турбулентного горения — одна из сложнейших задач в вычислительной гидродинамике. Сложность заключается в нелинейном взаимодействии между хаотичным движением жидкости (турбулентностью) и чрезвычайно быстрыми и сложными химическими реакциями. Традиционные подходы часто требуют значительных упрощений, что снижает точность прогнозов. Работы [24, 25] демонстрируют мощь и преимущества метода транспортных PDF (transported PDF) как передового инструмента для высокоточного моделирования таких систем.

Главное и фундаментальное преимущество PDF-подхода, которое выделяется в обеих статьях, заключается в том, что химические реакции учитываются точно, без осреднения. В традиционных моделях осредняются уравнения для концентраций и температуры, что приводит к появлению нелинейных членов (скоростей химических реакций), которые невозможно замкнуть без введения гипотез и упрощённых моделей.

PDF-подход обходит эту проблему, моделируя не осреднённые значения, а саму функцию плотности вероятности (PDF) для набора скалярных величин (состав смеси, температура). Поскольку химические реакции происходят на молекулярном уровне, их скорости являются функцией мгновенных, а не осреднённых значений. В рамках PDF-метода эти вычисления производятся напрямую для каждой «частицы» в стохастическом ансамбле, что полностью исключает ошибки, связанные с осреднением химических источников.

В [24] PDF-подход применяется к одной из самых сложных промышленных систем. Здесь горение является гетерогенным (двухфазным), включая газовую фазу (воздух, продукты сгорания); твёрдую фазу (частицы угля); процессы массо- и теплообмена между фазами: выход летучих (деволатилизация), горение коксового остатка и радиационный теплообмен.

Имею место следующие особенности.

— Высокая точность прогнозов: Модель успешно предсказала распределение температур, концентраций ключевых компонентов (O_2, CO_2, CO) и степень выгорания угля в полупромышленной печи, показав отличное согласие с экспериментальными данными.

— Анализ упрощённых моделей: Транспортный PDF-подход позволил провести критический анализ допущений, используемых в более простых «предполагаемых» PDF-методах (presumed PDF). Было показано, что стандартные гипотезы (например, о статистической независимости состава смеси и энтальпии или о бета-распределении для PDF) не выполняются в реальном пламени и приводят к значительным ошибкам в прогнозах. Это доказывает, что транспортный PDF-подход не только точнее, но и служит инструментом для проверки и улучшения инженерных моделей.

— Детальная физика: Метод позволяет учесть флуктуации состава газа, которые «видят» частицы угля, что влияет на скорость их выгорания.

[25] посвящена моделированию горения в предварительно перемешанных пламенах, где взаимодействие турбулентности и химии особенно тонкое. Ключевой проблемой здесь является моделирование молекулярного смешения (микросмешения), которое определяет скорость выравнивания концентраций и температуры на малых масштабах.

Выделяются следующие особенности.

— Обобщённая модель скалярной частоты смешения (GC-модель): Авторы предложили новую, более фундаментальную модель для частоты смешения. В отличие от стандартных

подходов, которые часто требуют эмпирических констант и применимы лишь в определённых режимах горения (например, в режиме «ламинарных пламячков»), GC-модель является универсальной.

— Физическая обоснованность: GC-модель динамически вычисляет интенсивность смешения на основе локальных характеристик потока, учитывая как влияние турбулентности, так и косвенное влияние химии. Быстрая реакция создаёт очень резкие градиенты температуры и концентраций, что, в свою очередь, интенсифицирует диффузионные процессы и микросмешение. GC-модель успешно улавливает этот важный физический эффект.

— Широкий диапазон применимости: благодаря своей универсальности, предложенный PDF-подход смог точно смоделировать пламёна в различных режимах — от режима «ламинарных пламячков» (flamelet) до режима «распределённой реакции» (distributed combustion), что является большим достижением.

Несмотря на более высокие вычислительные затраты по сравнению с традиционными инженерными моделями, транспортный PDF-подход является мощным и незаменимым инструментом для исследований и разработок, где требуется максимальная точность и глубокое понимание физики турбулентного горения.

3. ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ

3.1. Реактор 1 (простой случай с перемешиванием)

3.1.1. Геометрия и дискретизация модели.

В данном разд. представлены результаты численного моделирования процесса образования технического углерода (ТУ) в реакторе, геометрия которого основана на конфигурации, описанной в работе [19]. Целью данного этапа исследования является анализ распределения ключевых параметров процесса при использовании обобщённой модели, включающей гидродинамику несущей фазы, модель горения на основе фракции смеси (PDF) и двухстадийную модель образования сажи Теснера — Магнуссена — Хертагера.

Рассматриваемый реактор (см. рис. 1) представляет собой осесимметричную печь малого масштаба, предназначенную для производства технического углерода из газообразного сырья.

Основные элементы конструкции описаны ниже.

Предкамера (Precombustor): здесь происходит сжигание топлива (природного газа), подаваемого аксиально, с технологическим воздухом, который вводится через два тангенциальных патрубка для создания закрученного потока горячих газов.

Зона смешения (Mixing Zone): В эту зону, расположенную вблизи выхода из предкамеры, радиально впрыскивается сырьевой природный газ (метан). Резкое расширение канала на выходе из «горловины» (choke) способствует интенсивному перемешиванию сырья с горячими продуктами сгорания.

Реактор (Reactor): Основная часть установки, где происходят процессы термического разложения сырья и формирования частиц технического углерода.

Для численного моделирования была создана трёхмерная расчётная область, которая затем была дискретизирована с использованием неструктурированной сетки (см. рис. 2). Расчётная сетка состоит из приблизительно 100 000 смешанных ячеек (преимущественно тетраэдрических с возможными призматическими элементами в пристеночных областях) и около 40 000 узлов. Сгущение сетки применялось в областях с ожидаемыми высокими градиентами параметров, таких как зоны впрыска топлива и сырья, а также в зоне смешения.

3.1.2. Постановка математической модели.

Численное моделирование выполнялось с использованием пакета ANSYS Fluent. Была решена система осреднённых по Рейнольдсу уравнений Навье — Стокса (RANS), включающая уравнение неразрывности (1), уравнения сохранения импульса (2), уравнение сохранения энергии (4).

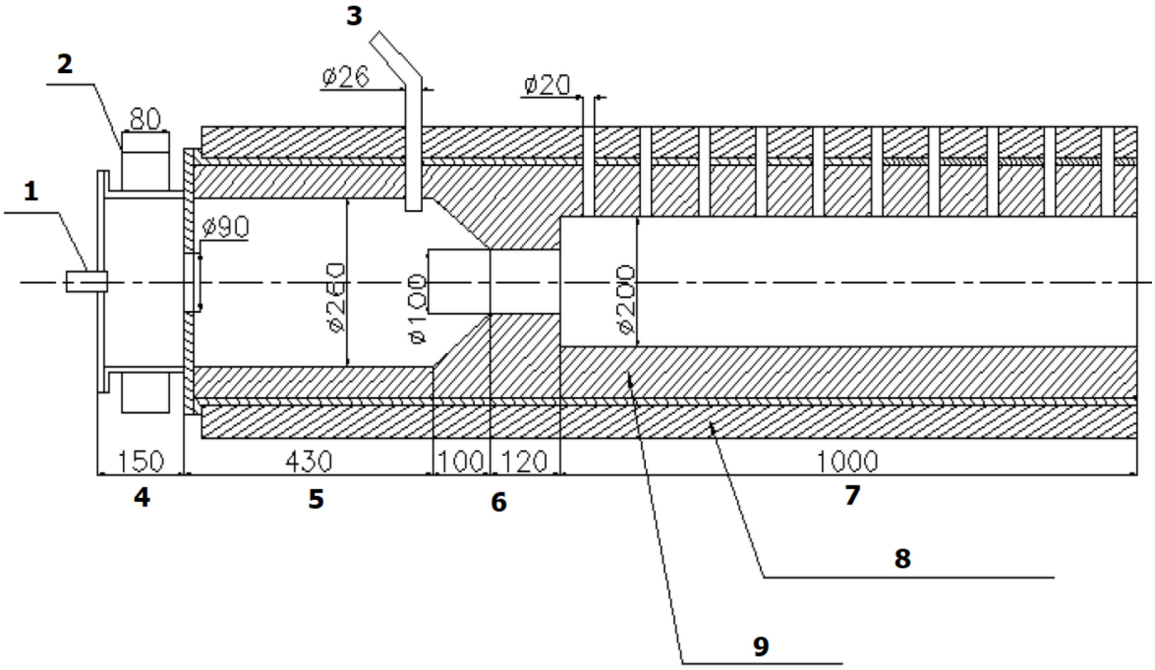


Рис. 1. Схема реактора простой геометрии, используемого в численном моделировании:
1 — осевой вход топлива; 2 — тангенциальный вход воздуха;
3 — вход углеводородного сырья; 4 — вихревая горелка;
5 — камера предварительного сгорания; 6 — зона перемешивания; 7 — реактор;
8 — термоизоляция; 9 — огнеупор

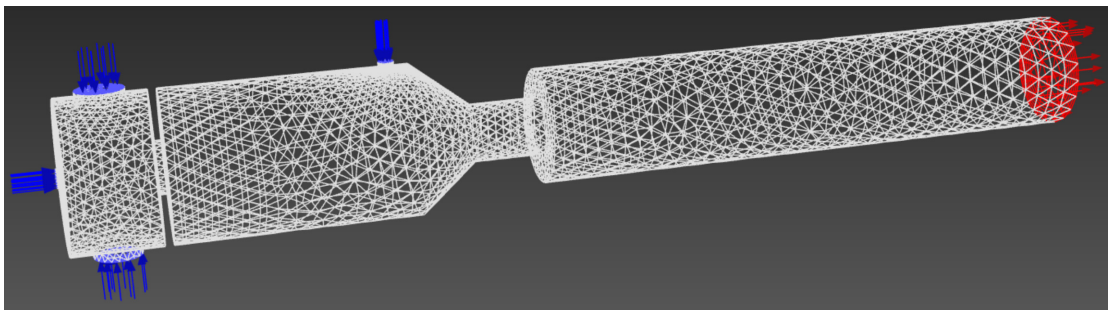


Рис. 2. Расчётная сетка, использованная для моделирования течения
в реакторе простой геометрии

Для замыкания системы уравнений RANS использовались следующие модели.

Модель турбулентности: модель напряжений Рейнольдса (Reynolds Stress Model, RSM), как описано в разд. 2.4, для адекватного учёта анизотропии турбулентности и сложных вихревых структур течения, характерных для данной геометрии.

Модель горения: метод фракции смеси (Mixture Fraction) с использованием функции плотности вероятности (PDF) для учёта турбулентно-химического взаимодействия (разд. 2.5). Предполагалось состояние химического равновесия для продуктов сгорания топлива.

Модель образования сажи: двухстадийная модель Теснера — Магнуссена — Хертагера, описывающая процессы зародышеобразования (нуклеации) и окисления сажи (разд. 2.6).

Использовались следующие граничные условия.

Вход топлива (аксиальный, предкамера): расход 0.15 м^3/мин, температура 673 K, состав: CH_4.

Входы воздуха (тангенциальные, предкамера): суммарный расход 1.4 м^3/мин, тем-

пература 300 K, состав: N_2 (0.77 массовых долей), O_2 (0.23 массовых долей).

Вход сырья (радиальный): расход 0.3 м^3/мин, температура 300 K, состав: CH_4.

Стенки реактора: адиабатические, с условием отсутствия трения (frictionless). Это допущение принято для упрощения на данном этапе исследования, фокусируясь на основных процессах в потоке.

Выход из реактора: условие постоянного статического давления (pressure outlet).

Важным аспектом постановки задачи являлся подбор параметров на входах (расходы, температуры) с целью оптимизации суммарного выхода твёрдого углерода. Эта оптимизация проводилась итерационно: варьированием входных условий добивались таких полей температуры и концентраций компонентов газовой фазы (рассчитанных с помощью модели фракции смеси), которые приводили бы к максимальному образованию сажи согласно двухстадийной модели Теснера — Магнуссена — Хертагера суммарно с твёрдым углеродом — продуктом сгорания сырья, получаемого из метода фракции смеси.

Для дискретизации конвективных членов во всех транспортных уравнениях использовались схемы второго порядка точности (Second-Order Upwind). Критерий сходимости решения для невязок всех уравнений был установлен на уровне 10^{-4}.

3.1.3. Результаты численного моделирования и их анализ.

Ниже представлены поля распределения ключевых параметров, полученные в результате численного моделирования для описанной конфигурации реактора и условий.

На рис. 3 показано распределение осреднённой массовой доли метана в реакторе.

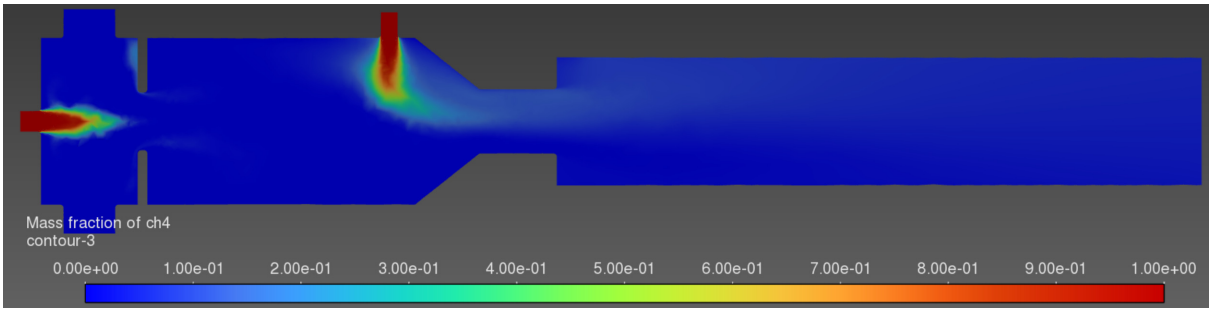


Рис. 3. Распределение осреднённой массовой доли метана (CH_4) в реакторе

Видно, что метан, как топливо для предкамеры, подаётся аксиально и быстро выгорает. Сырьевой метан впрыскивается радиально и его концентрация максимальна вблизи точек ввода. По мере смешения с горячими газами и продвижения вдоль реактора, концентрация сырьевого метана уменьшается за счёт его термического разложения и участия в реакциях неполного сгорания, приводящих к образованию предшественников сажи.

Распределение осреднённой температуры в объёме реактора представлено на рис. 4.

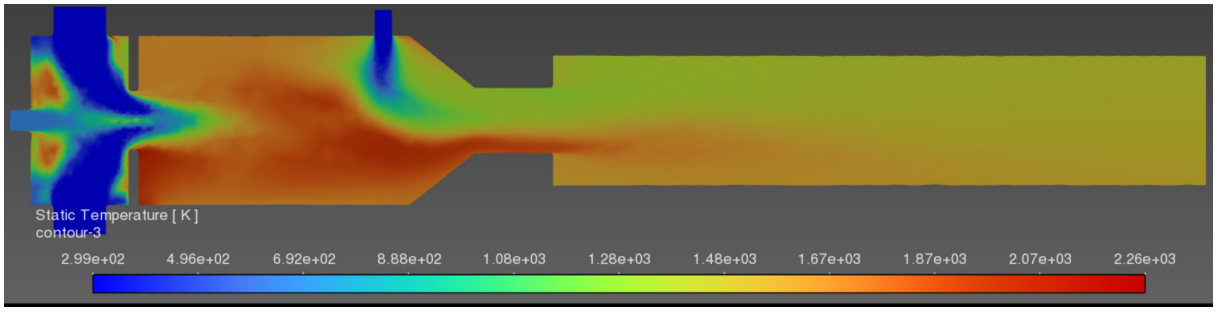


Рис. 4. Распределение осреднённой температуры (K) в реакторе

Максимальные температуры наблюдаются в предкамере и зоне смешения, где происходит интенсивное горение топлива. Далее, по мере продвижения потока вдоль реактора и подмешивания холодного сырья, а также за счёт эндотермических процессов разложения метана, температура постепенно снижается. Температурное поле является критически важным, так как оно определяет кинетику как реакций горения, так и процессов образования и окисления сажи.

На рис. 5 показано распределение нормированной концентрации зародышей сажи (элементарных частиц).

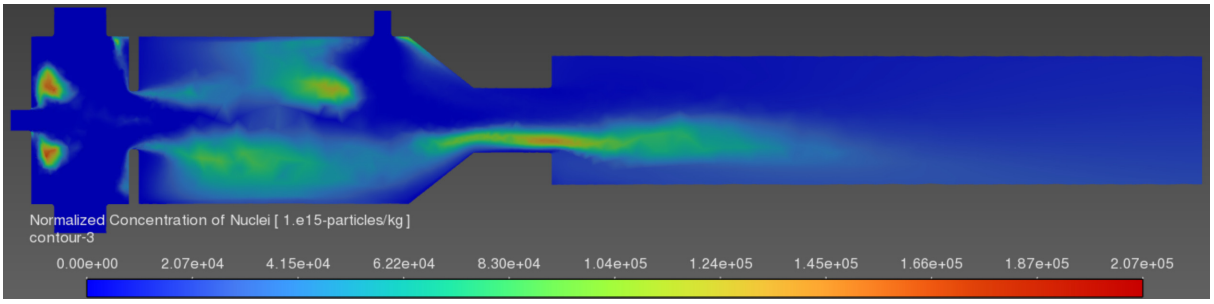


Рис. 5. Распределение нормированной концентрации зародышей сажи (частиц/кг)

Зародыши сажи образуются в результате термического разложения метана. Наибольшая их концентрация наблюдается в областях, где сырьевой метан смешивается с высокотемпературными газами, создавая благоприятные условия для пиролиза. Эти зоны расположены сразу после ввода сырья и в начальной части реакторной зоны.

Распределение осреднённой массовой доли сформировавшейся сажи (ТУ) показано на рис. 6.

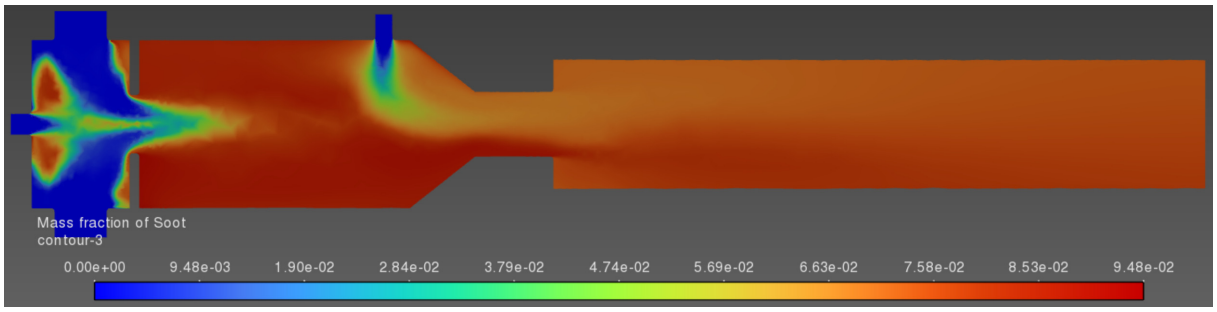


Рис. 6. Распределение осреднённой массовой доли сажи (технического углерода)

Области с высокой концентрацией сажи коррелируют с зонами наличия зародышей и подходящих температур для роста частиц сажи. Основное формирование сажи происходит в реакторной части, после зоны интенсивного смешения и начального пиролиза. В этих областях температура достаточно высока для роста частиц, но уже не так высока, чтобы доминировало их полное окисление.

На рис. 7 показано распределение массовой доли твёрдого углерода, представляющего собой конечный продукт, оставшийся после процессов горения и окисления.

Наибольшая концентрация твёрдого углерода наблюдается в дальней части реактора, где температура потока снижается. Это указывает на то, что сформировавшиеся частицы сажи, не успевшие окислиться в более горячих зонах, переносятся потоком и аккумулируются здесь.

Анализ других химических компонентов: помимо представленных основных параметров, для полного понимания процессов важно анализировать распределение и других химических компонентов. Краткие выводы по ним приведены ниже.

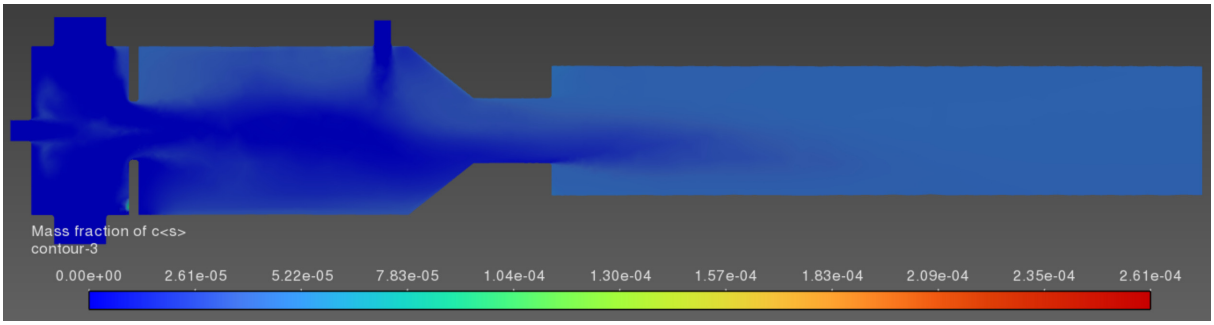


Рис. 7. Распределение осреднённой массовой доли твёрдого углерода (C(s))

Водород (H_2): является побочным продуктом разложения метана. Его концентрация максимальна в зонах пиролиза.

Оксид углерода (CO): продукт неполного сгорания, его концентрация высока в зонах с недостатком кислорода.

Диоксид углерода (CO_2): продукт полного сгорания, максимален в зонах с достаточным количеством кислорода (предкамера).

Гидроксильный радикал (OH): важный окислитель, в том числе и для сажи. Его концентрация высока в активных зонах горения.

Проведённый численный эксперимент на реакторе простой геометрии позволил получить качественные картины распределения основных параметров процесса образования технического углерода. Результаты демонстрируют логичную последовательность процессов.

— Высокотемпературное горение топлива в предкамере.

— Смешение горячих газов с сырьевым метаном.

— Термическое разложение метана с образованием зародышей сажи в зонах с высокой температурой.

— Рост частиц сажи на зародышах.

— Частичное окисление сажи в высокотемпературных зонах с наличием окислителя.

— Перенос и накопление твёрдого углерода в более холодной части реактора.

Полученные поля распределений служат основой для дальнейшего анализа и оптимизации процесса.

3.2. Реактор 2 (реактор ОмскТУ)

3.2.1. Геометрия и дискретизация модели.

В данном разд. представлены результаты численного моделирования процесса образования технического углерода (ТУ) в реакторе иной конфигурации, характеризующейся радиальной симметрией и непрерывной подачей высокотемпературного теплоносителя (продуктов сгорания природного газа), в который осуществляется радиальный впрыск углеводородного сырья [20]. Данная постановка в большей степени соответствует некоторым промышленным конструкциям и позволяет исследовать влияние гидродинамики сплошного потока на процессы сажеобразования. Учитывая повышенный интерес к данной конфигурации, для численного моделирования использовалась более детальная расчётная сетка.

Рассматриваемый реактор (см. рис. 8) представляет собой цилиндрическую камеру, осевой вход которой предназначен для подачи сплошного потока горячего газа-теплоносителя. Углеводородное сырьё (метан) впрыскивается радиально через шесть инжекторов (сопел), равномерно расположенных по окружности в плоскости, перпендикулярной оси реактора. Такая конфигурация обеспечивает интенсивное перемешивание сырья с горячим потоком и инициирует процессы пиролиза и последующего образования ТУ.

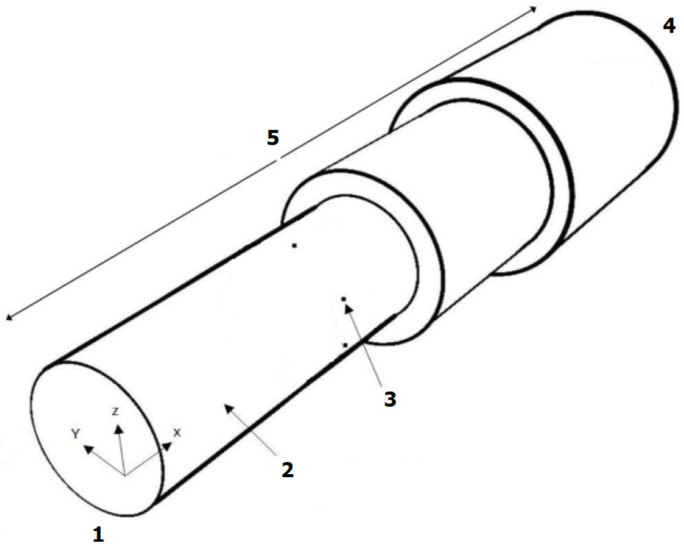


Рис. 8. Схема реактора ОмскТУ с предположением цикличности:
1 — вход газа теплоносителя (280 мм); 2 — твёрдые стенки; 3 — сопла (2.8 мм);
4 — выход (504 мм); 5 — длина установки (≈ 3 м)

Учитывая осевую симметрию течения и равномерное расположение инжекторов, для сокращения вычислительных затрат моделирование проводилось на секторе реактора, составляющем 1/6 полной геометрии, с применением соответствующих условий симметрии на боковых гранях сектора.

Для численного моделирования была создана трёхмерная расчётная область данного сектора, которая затем была дискретизирована с использованием неструктурированной сетки (см. рис. 9).

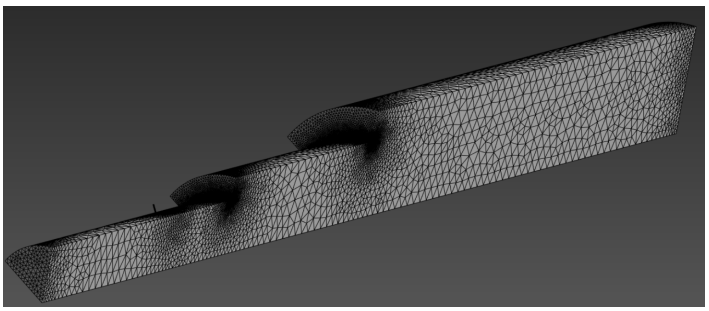


Рис. 9. Расчётная сетка (сектор 1/6) для реактора ОмскТУ

Расчётная сетка является более подробной по сравнению с предыдущим случаем и состоит из приблизительно 500 000 смешанных ячеек и 100 000 узлов. Особое внимание при построении сетки уделялось областям вблизи инжекторов сырья и зоне их взаимодействия с основным потоком теплоносителя, где ожидаются наиболее интенсивные процессы смешения и химических реакций.

3.2.2. Постановка математической модели.

Численное моделирование выполнялось с использованием пакета ANSYS Fluent. Система уравнений, описывающая течение и процессы сажеобразования, аналогична той, что использовалась в разд. 3.1, и включает уравнение неразрывности (1), уравнения сохранения импульса (2), уравнение сохранения энергии (4).

Для замыкания системы уравнений RANS использовались те же модели, что и в предыдущем вычислительном эксперименте.

Модель турбулентности: модель напряжений Рейнольдса (RSM) (Глава 2.4).

Модель горения (для теплоносителя и взаимодействия с сырьём): метод фракции смеси (Mixture Fraction) с PDF-подходом (Глава 2.5).

Модель образования сажи: двухстадийная модель Теснера — Магнуссена — Хертагера (2.6).

Использовались следующие граничные условия.

Вход теплоносителя (продукты сгорания природного газа): скорость 28 м/с, температура 1673 K.

Вход сырья (CH_4, через радиальные инжекторы): скорость 27.07 м/с, температура 300 K.

Стенки реактора: адиабатические, с условием отсутствия трения (frictionless).

Боковые грани сектора: условия симметрии.

Выход из реактора: условие постоянного статического давления (pressure outlet).

Оптимизация граничных условий на входах также являлась частью постановки задачи: параметры потоков теплоносителя и сырья подбирались с целью максимизации выхода технического углерода, аналогично предыдущему случаю, путём анализа влияния полей температуры и концентраций (полученных из PDF-модели) на скорости образования сажи по модели Теснера — Магнуссена — Хертагера.

Использовались следующие численные параметры.

— Для дискретизации конвективных членов во всех транспортных уравнениях использовались схемы второго порядка точности (Second-Order Upwind).

— Критерий сходимости решения для невязок всех уравнений был установлен на уровне 10^{-4}.

3.2.3. Результаты численного моделирования и их анализ.

Ниже представлены поля распределения ключевых параметров, полученные в результате численного моделирования для описанной конфигурации реактора с радиальной симметрией.

На рис. 10 показано распределение осреднённой массовой доли метана (сырья) в секторе реактора.

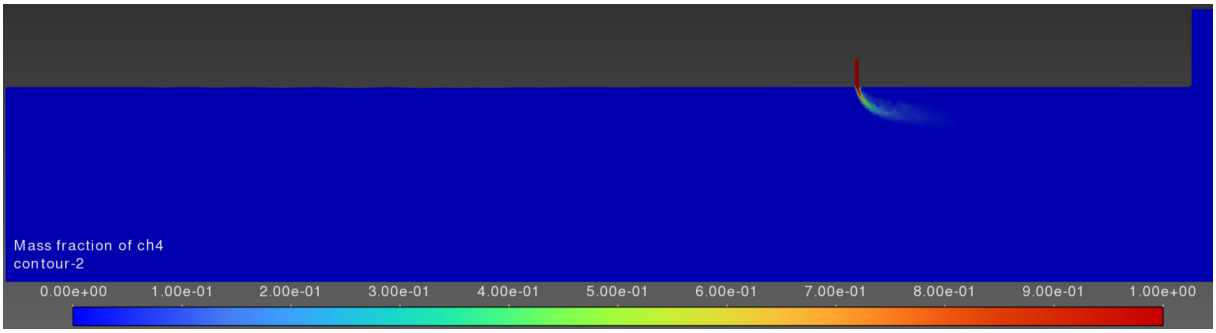


Рис. 10. Распределение осреднённой массовой доли метана (CH_4) в реакторе ОмскТУ

Струя сырьевого метана проникает из радиального инжектора в сплошной поток горячего теплоносителя. Максимальная концентрация метана наблюдается непосредственно у среза сопла инжектора и быстро уменьшается по мере смешения с основным потоком и протекания реакций пиролиза.

Распределение осреднённой температуры в объёме реактора представлено на рис. 11.

Высокотемпературный поток теплоносителя занимает основную часть объёма. В зоне впрыска холодного сырьевого метана наблюдается локальное понижение температуры. Далее,

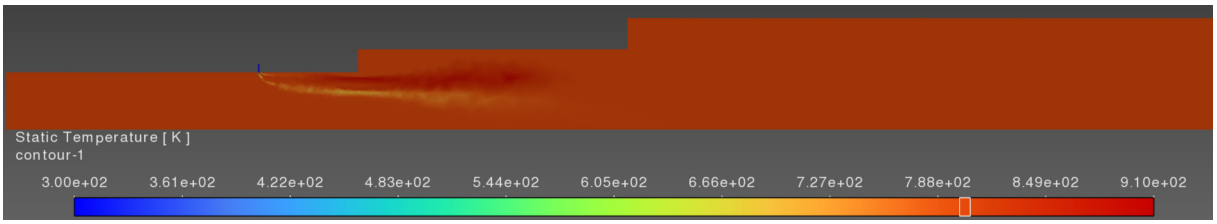


Рис. 11. Распределение осреднённой температуры (К) в реакторе ОмскТУ

по мере смешения и протекания экзотермических реакций неполного окисления и эндотермических реакций пиролиза, формируется сложное температурное поле, определяющее кинетику сажеобразования.

На рис. 12 показано распределение нормированной концентрации зародышей сажи. Зона наиболее интенсивного образования зародышей сажи располагается в области смешения струи метана с горячим теплоносителем, где достигаются оптимальные температуры для пиролиза метана. Эта зона имеет форму факела, вытянутого вдоль основного потока.

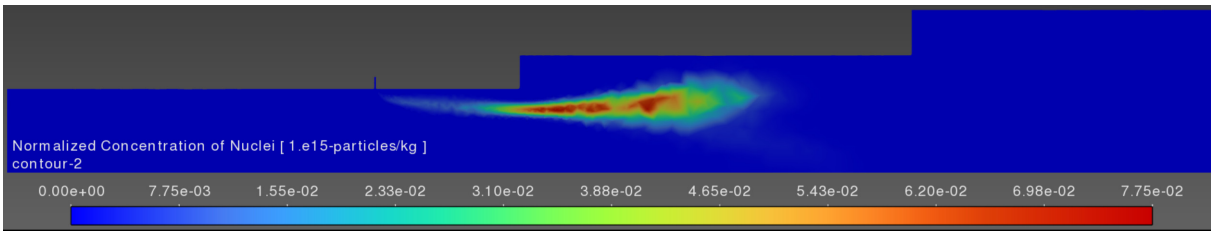


Рис. 12. Распределение нормированной концентрации зародышей сажи (частиц/кг) в реакторе ОмскТУ

Распределение осреднённой массовой доли сформировавшейся сажи (ТУ) показано на рис. 13.

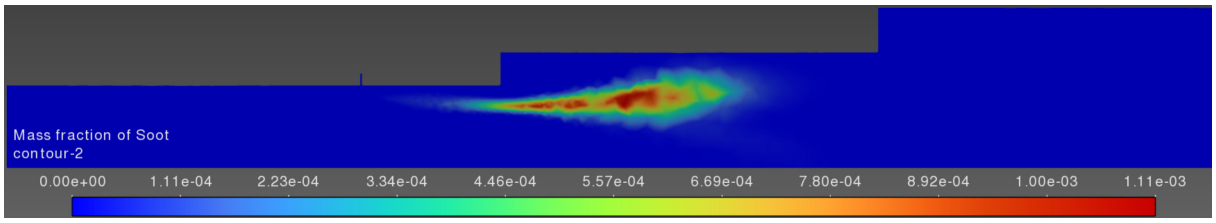


Рис. 13. Распределение осреднённой массовой доли сажи (технического углерода) в реакторе ОмскТУ

Область с максимальной концентрацией сажи следует за зоной образования зародышей и расширяется по мере роста частиц. Формирование ТУ продолжается вдоль реактора, пока существуют благоприятные температурные условия и достаточное количество предшественников.

На рис. 14 показано распределение массовой доли твёрдого углерода (конечного продукта ТУ) в реакторе.

Концентрация образуемого конечного продукта ТУ максимальна в ближайших от инжектора зонах реактора, где созданы наиболее подходящие условия для старта процесса образования сажи, а затем температура снижается (см. рис. 11), уменьшая интенсивность образования продукта.

Численное моделирование процесса образования ТУ в реакторе с предположением цикличности показало следующее:

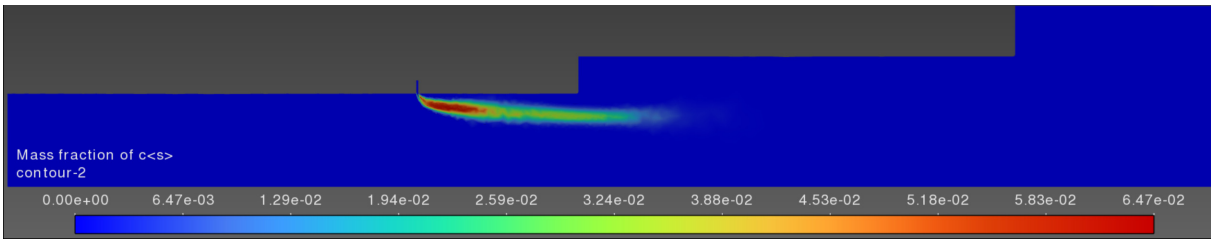


Рис. 14. Распределение осреднённой массовой доли твёрдого углерода (ТУ) в реакторе ОмскТУ

—- Характер взаимодействия газовых компонент существенно отличается от такового в реакторе с предкамерой (разд. 3.1). В данной конфигурации отсутствует предварительное смешение топливовоздушной смеси в отдельной зоне; вместо этого происходит прямое взаимодействие холодного сырья с уже сформированным высокотемпературным потоком продуктов сгорания.

— Несмотря на эти различия в гидродинамике и начальных этапах смешения, основные эффекты и стадии процесса образования ТУ (пиролиз сырья, нуклеация зародышей, рост частиц сажи и их частичное окисление) качественно совпадают с теми, что наблюдались в предыдущем численном эксперименте, а также согласуются с общими представлениями о процессе.

— Полученные картины распределения ключевых параметров (концентраций, температуры) демонстрируют физически правдоподобное поведение системы и подтверждают адекватность используемой обобщённой модели (RSM + PDF + модель Теснера — Магнуссена — Хертагера) для анализа процессов сажеобразования в различных реакторных конфигурациях.

Это указывает на перспективность дальнейшего изучения и тонкой настройки разработанной модели, включая калибровку эмпирических констант модели сажеобразования по экспериментальным данным, для повышения точности количественных предсказаний выхода и свойств технического углерода.

Заключение

В настоящей работе была успешно решена задача постановки и анализа обобщённой численной модели процесса образования технического углерода в печных реакторах. Модель базируется на фундаментальных уравнениях гидродинамики (неразрывности, сохранения импульса и энергии) и включает современные подходы к описанию ключевых физико-химических явлений: турбулентности с использованием модели напряжений Рейнольдса (RSM), турбулентного горения с помощью PDF-модели фракции смеси и кинетики сажеобразования на основе двухстадийной модели Теснера с модификациями Магнуссена и Хертагера для окисления.

Численное моделирование было проведено для двух различных конфигураций реакторов:

реактор с предкамерой сжигания топлива и последующим радиальным впрыском сырья, характеризующийся интенсивным перемешиванием;

реактор с осевым сплошным потоком горячего теплоносителя и радиальным впрыском сырья через шесть инжекторов, с использованием условия симметрии для снижения вычислительных затрат.

Полученные результаты численного моделирования для обеих конфигураций продемонстрировали способность разработанной модели качественно описывать основные стадии процесса образования технического углерода. Были получены и проанализированы поля распределения ключевых параметров: концентраций компонентов (метана, продуктов сгорания), температуры, концентрации зародышей сажи и массовой доли технического углерода (сажи и твёрдого углерода C(s)).

Основные выводы по результатам моделирования.

— Модель адекватно воспроизводит последовательность процессов: горение топлива и генерацию высокотемпературного теплоносителя, смешение теплоносителя с сырьём, термическое разложение сырья (пиролиз) с образованием зародышей сажи, рост частиц сажи за счёт поверхностных реакций и частичное окисление сажи в высокотемпературных зонах с избытком окислителя.

— Распределения параметров процесса логичны и согласуются с теоретическими представлениями: максимальные концентрации зародышей сажи наблюдаются в зонах оптимального сочетания температуры и концентрации сырьевых компонентов, а последующий рост частиц и накопление твёрдого углерода происходят по мере продвижения потока через реактор и снижения температуры.

— Сравнение двух конфигураций реакторов выявило различия в гидродинамике и характере смешения, что влияет на локализацию зон сажеобразования, однако фундаментальные стадии процесса остаются схожими.

— Использование обобщённой модели (RSM + PDF + модель Теснера) позволило получить физически правдоподобное поведение системы и подтверждает адекватность выбранного подхода для анализа процессов сажеобразования в различных реакторных конфигурациях.

Таким образом, поставленные в работе задачи были выполнены. Разработанная численная модель представляет собой ценный инструмент для качественного анализа и понимания сложных взаимосвязанных процессов в реакторах технического углерода, а также для оценки влияния конструктивных и режимных параметров на процесс сажеобразования.

Перспективы дальнейшего развития работы включают следующие направления.

Количественная верификация и калибровка модели: сравнение результатов моделирования с экспериментальными данными, полученными на пилотных или промышленных установках, для калибровки эмпирических констант в модели сажеобразования (Теснера — Магнуссена — Хертагера) и модели горения. Это позволит повысить точность количественных предсказаний.

Использование более детальных моделей сажеобразования: рассмотрение возможности применения более сложных моделей, таких как методы моментов или секционные модели, учитывающие распределение частиц по размерам и процессы коагуляции, для получения информации о дисперсности и структурности технического углерода.

Оптимизация процессов: использование разработанной и откалиброванной модели для проведения параметрических исследований с целью оптимизации технологических режимов (расходов, температур, состава сырья) и геометрии реактора для повышения выхода и качества целевого продукта.

Моделирование с жидким сырьём: расширение модели для учёта процессов распыления, испарения и пиролиза жидкого углеводородного сырья, что актуально для многих промышленных производств технического углерода.

Учёт детальной кинетики и образования ПАУ: интеграция более подробных кинетических схем пиролиза углеводородов и образования полициклических ароматических углеводородов (ПАУ) как предшественников сажи.

Детальное моделирование теплообмена: более точный учёт радиационного теплообмена, играющего значительную роль в высокотемпературных процессах с участием сажи.

Успешная реализация данных направлений позволит создать ещё более надёжный и универсальный инструмент для проектирования, оптимизации и управления процессами производства технического углерода, способствуя повышению эффективности производства и улучшению качества продукции.

ФИНАНСИРОВАНИЕ РАБОТЫ

Исследования выполнены в рамках государственного задания Института теплофизики им. С. С. Кутателадзе СО РАН (проект 125031904210-0). Других источников финансирования проведения или руководства данным конкретным исследованием не было.

КОНФЛИКТ ИНТЕРЕСОВ

Авторы данной работы заявляют, что у них нет конфликта интересов.

ЛИТЕРАТУРА

1. *Зуев В.П., Михайлов В.В.* Производство сажи. М.: Химия, 1965.
2. *Кошелев Ф.Ф., Корнев А.Е., Буканов А.М.* Общая технология резины. М.: Химия, 1978.
3. *Magnussen B.F.* On the structure of turbulence and a generalized eddy dissipation concept for chemical reaction in turbulent flow // Proc. of the 19-th AIAA Meeting, USA, St. Louis, 1981.
4. *Tesner P.A., Snegiriova T.D., Knorre V.G.* Kinetics of dispersed carbon formation // Combust. Flame. 1971. P. 253–260.
5. *Brookes S.J., Moss J.B.* Predictions of soot and thermal radiation properties in confined turbulent jet diffusion flames // Combust. Flame. 1999. N 116. P. 486–503.
6. *Frenklach M., Wang H.* Detailed modeling of soot particle nucleation and growth // Symp. Int. Combust. 1991. N 23. P. 1559–1566.
7. *Yen A.C.Y. et al.* Multiphase CFD modelling for enclosure fires - A review on past studies and future perspectives // Experimental and Computational Multiphase Flow. 2021. P. 1–25;
DOI: 10.1007/s42757-021-0116-4
8. *Ghose P. et al.* Effect of air flow distribution on soot formation and radiative heat transfer in a model liquid fluid spray combustor firing kerosene
Int. J. Heat and Mass Transfer. 2014. N 74. P. 143–155.
9. *Palmer H.B., Cullis H.F.* The formation of carbon from gases // Chemistry and Physics of Carbon. 1965. V. 1. P. 265.
10. *Haynes B.S., Wagner H.G.* Soot formation // Progress in Energy and Combustion Science. 1981. V. 7, Iss. 4. P. 229–273.
11. *Glassman I.* Soot formation in combustion processes // Symp. Int. Combust. 1989. V. 22, Iss. 1. P. 295–311.
12. *Tesner P.A., Snegiriova T.D., Knorre V.G.* Investigating diesel engine performance and emissions using CFD // Combust. Flame. 1971. N 17. P. 253–260.
13. *Барышева О.Б., Хабибуллин Ю.Х., Садыков Р.А.* Математическая модель сажеобразования в пламени гомогенной углеводородовоздушной смеси // Известия КазГАСУ. 2017. Т. 40, № 2. С. 312–321.
14. *Агафонов Г.Л., Власов П.А., Рябиков О.Б., Смирнов В.Н.* Детальное кинетическоемоделирование-процесса сажеобразования: сравнение результатов расчетов методамимоментов, секционнымметодом и дискретнымметодом Галеркина // Горение и взрыв. 2019. Т. 12, № 4. С. 33–53;
DOI: 10.30826/CE19120404
15. *Галанин М.П., Исаев А.В., Конев С.А.* Математическая модель образования сажи при диффузионном горении толуола // Математическое моделирование. 2020. Т. 32, № 6. С. 66–80;
DOI: 10.20948/mm-2020-06-05
16. *Галанин М.П., Исаев А.В., Конев С.А.* О моделировании образования сажи при диффузионном горении углеводородных топлив // Препринты ИПМ им. М. В. Келдыша РАН. 2019. № 110.
17. *Jones W.P., Whitelaw J.H.* Calculation methods for reacting turbulent flows: A review // Combust. Flame. 1982. N 48, P. 1–26.
18. *Chen T., Li T., Sjöblom J., Ström H.* A reactor-scale CFD model of soot formation during high-temperature pyrolysis and gasification of biomass // Fuel. 2021. V. 303. Article number 121240;
DOI: 10.1016/j.fuel.2021.121240

19. *Moghiman M., Hosseini N., Ghodsirad M., Javadi M.* (2008). Experimental and Numerical Studies of Carbon Black Formation Through Thermal Decomposition of Waste Natural Gas // Combust. Sci. Eng. 2008. N 3; DOI: 10.1115/IMECE2008-68883

20. *Cherny S.G., Zeziulin I.V., Tarraf D., Pochuev A.P., Boronenko I.S.* The direct and inverse problems of modeling the carbon black furnace production process // Euras. J. Math. Comput. Appl. 2025. V. 13, Iss. 2. P. 13–42; DOI: 10.32523/2306-6172-2025-13-2-13-42

21. *Аксенов А.А., Жлуктов С.В., Каширин В.С. , Сазонова М.Л., Черный С.Г., Дроздова Е.А., Роде А.А.* Численное моделирование в ПК FlowVision распыла и испарения сырья в потоке газа-теплоносителя при печном производстве технического углерода // Компьютерные исследования и моделирование. 2023. Т. 15, вып. 4. С. 921–939; DOI: 10.20537/2076-7633-2023-15-4-921-939

22. *Mazzotta L., Lamioni R., Agati G., Evangelisti A., Rispoli F., Valera-Medina A., Borello D.* On the Impact of CFD Turbulence Models for Premixed NH3/H2 Combustion on Emissions and Flame Characteristics in a Swirl-Stabilized Burner // Flow, Turbulence Combust. 2025. V. 114. P. 1043–1063; DOI: 10.1007/s10494-025-00638-7

23. *Wang S.S., Wang S.* Compressibility-improved $\gamma - Re_{\theta t}$-based Reynolds stress transition model for transonic wing–body flow // AIAA Journal. 2025. DOI: 10.2514/1.J064918

24. *Stollinger M., Naud B., Roekaerts D., Beishuizen N., Heinz S.* PDF modeling and simulations of pulverized coal combustion. Part 2: Application // Combust. Flame. 2013. V. 160, N 2. P. 384-395; DOI: 10.1016/j.combustflame.2012.10.010

25. *Stollinger M., Heinz S.* (2008). PDF modeling and simulation of premixed turbulent combustion // Monte Carlo Methods and Applications. 2008. V. 14. P. 343–377; DOI: 10.1515/MCMA.2008.016

SIBERIAN JOURNAL OF INDUSTRIAL MATHEMATICS

UDC 621.45:034.3

THREE-DIMENSIONAL NUMERICAL MODEL OF THE FULL-CYCLE FURNACE PROCESS FOR CARBON BLACK PRODUCTION

© 2026 A. P. Pochuev[1], S. G. Cherny[2a]

[1] *Novosibirsk State University,*
Pirogov st., 2, Novosibirsk 630090, Russia,
[2] *Kutateladze Institute of Thermophysics SB RAS,*
Acad. Lavrentyev ave., 1, Novosibirsk 630090, Russia

E-mail: sgcherny2023@yandex.ru

Received 08.09.2025, revised 03.12.2025, accepted 13.05.2026

Abstract. This paper is devoted to the development and analysis of a generalized numerical model of the carbon black (CB) formation process in industrial furnace reactors. The relevance of the study is driven by the practical demand for improving product quality, reducing production costs, and optimizing manufacturing regimes at enterprises such as Omsk Carbon Group. The model is based on the Reynolds-Averaged Navier–Stokes (RANS) equations and incorporates modern approaches to describing the underlying physicochemical phenomena. The Reynolds Stress Model (RSM) is employed to account for complex swirling and anisotropic turbulent flow features. Turbulent combustion is simulated using the non-premixed mixture fraction Probability Density Function (PDF) model, while soot kinetics (nucleation, particle growth, and oxidation) are described via Tesner's two-step model modified by Magnussen and Hjertager. Numerical simulations were performed in ANSYS Fluent for two distinct reactor configurations: 1) a reactor with a fuel precombustion chamber and intense swirling mixing; 2) a reactor with a continuous axial flow of high-temperature carrier gas and radial feedstock injection. Spatial distributions of temperature, chemical species concentrations, soot nuclei number density, and carbon black mass fraction were obtained and analyzed. The results show that the developed model adequately reproduces the sequential stages of the process: high-temperature carrier gas generation, feedstock pyrolysis, nuclei formation in optimal temperature zones, subsequent particle growth, and partial oxidation. A comparative analysis of both configurations revealed the significant influence of hydrodynamics on the localization of soot synthesis zones while confirming the commonality of the fundamental process stages. The proposed numerical model serves as an effective engineering tool for qualitative analysis of coupled transport and reaction processes in carbon black reactors and lays the groundwork for further experimental verification, calibration, and optimization of industrial units.

Keywords: carbon black, computational fluid dynamics (CFD), ANSYS fluent, Reynolds stress model (RSM), mixture fraction PDF model, non-premixed combustion, Tesner soot model, furnace reactor, pyrolysis.

DOI: 10.33048/SIBJIM.2026.29.308

REFERENCES

1. Zuev V.P., Mikhailov V.V. Proizvodstvo sazhi [Soot production]. Moscow: Chemistry, 1965 (in Russian).
2. Koshelev F.F., Kornev A.E., Bukanov A.M. Obshchaya tehnologiya reziny [General rubber technology]. Moscow: Chemistry, 1978 (in Russian).
3. Magnussen B.F. On the structure of turbulence and a generalized eddy dissipation concept for chemical reaction in turbulent flow. *Proc. of the 19-th AIAA Meeting*, USA, St. Louis, 1981.

English translation is published in Journal of Applied and Industrial Mathematics, 2026, Vol. 20, No. 3.

4. Tesner P.A., Snegiriova T.D., Knorre V.G. Kinetics of dispersed carbon formation. *Combust. Flame*, 1971, pp. 253–260.
5. Brookes S.J., Moss J.B. Predictions of soot and thermal radiation properties in confined turbulent jet diffusion flames. *Combust. Flame*, 1999, No. 116, pp. 486–503.
6. Frenklach M., Wang H. Detailed modeling of soot particle nucleation and growth. *Symp. Int. Combust.*, 1991, No. 23, pp. 1559–1566.
7. Yen A.C.Y. et al. Multiphase CFD modelling for enclosure fires - A review on past studies and future perspectives. *Experimental and Computational Multiphase Flow*, 2021, pp. 1–25; DOI: 10.1007/s42757-021-0116-4
8. Ghose P. et al. Effect of air flow distribution on soot formation and radiative heat transfer in a model liquid fluid spray combustor firing kerosene. *Int. J. Heat and Mass Transfer*, 2014, No. 74, pp. 143–155.
9. Palmer H.B., Cullis H.F. The formation of carbon from gases. *Chemistry and Physics of Carbon*, 1965, Vol. 1, pp. 265.
10. Haynes B.S., Wagner H.G. Soot formation. *Progress in Energy and Combustion Science*, 1981. V. 7, Iss. 4. P. 229–273.
11. Glassman I. Soot formation in combustion processes. *Symp. Int. Combust.*, 1989. V. 22, Iss. 1. P. 295–311.
12. Tesner P.A., Snegiriova T.D., Knorre V.G. Investigating diesel engine performance and emissions using CFD. *Combust. Flame*, 1971, No. 17, pp. 253–260.
13. Barysheva O.B., Khabibullin Yu.Kh., Sadykov R.A. Matematicheskaya model' sazheobrazovaniya v plameni gomogennoj uglevodorodovozdushnoj smesi [Mathematical model of soot formation in a homogeneous hydrocarbon-air mixture flame]. *Izvestiya KazGASU*, 2017, Vol. 40, No. 2, pp. 312–321 (in Russian).
14. Agafonov G.L., Vlasov P.A., Ryabikov O.B., Smirnov V.N. Detal'noe kineticheskoe modelirovanie processa sazheobrazovaniya: sravnenie rezul'tatov raschetov metodam i momentov, sekcionnym metodom i diskretnym metodom Galerkina [Detailed kinetic modeling of the soot formation process: Comparison of calculation results by the method of moments, the sectional method, and the discrete Galerkin method]. *Gorenie i Vzryv* [Combustion and Explosion], 2019, No. 12, pp. 33–53 (in Russian); DOI: 10.30826/CE19120404
15. Galanin M.P., Isaev A.V., Konev S.A. Matematicheskaya model' obrazovaniya sazhi pri diffuzionnom gorenii toluol [Mathematical model of soot formation during the diffusion combustion of toluene]. *Mat. Model.* [Math. Model.], 2020, Vol. 32, No. 6, p. 66–80 (in Russian).
16. Galanin M.P., Isaev A.V., Konev S.A. O modelirovanii obrazovaniya sazhi pri diffuzionnom gorenii uglevodorodnyh topliv [On modeling soot formation during the diffusion combustion of hydrocarbon fuels]. *Keldysh Institute Preprints*, 2019, No. 110 (in Russian); DOI: 10.20948/prepr-2019-110
17. Jones W.P., Whitelaw J.H. Calculation methods for reacting turbulent flows: A review. *Combust. Flame*, 1982, No. 48, pp. 1–26.
18. Chen T., Li T., Sjöblom J., Ström H. A reactor-scale CFD model of soot formation during high-temperature pyrolysis and gasification of biomass. *Fuel*, 2021, Vol. 303, Article number 121240; DOI: 10.1016/j.fuel.2021.121240
19. Moghiman M., Hosseini N., Ghodsirad M., Javadi M. (2008). Experimental and Numerical Studies of Carbon Black Formation Through Thermal Decomposition of Waste Natural Gas. *Combust. Sci. Eng.*, 2008, No. 3; DOI: 10.1115/IMECE2008-68883
20. Cherny S.G., Zeziulin I.V., Tarraf D., Pochuev A.P., Boronenko I.S. The direct and inverse problems of modeling the carbon black furnace production process. *Euras. J. Math. Comput. Appl.*, 2025, Vol. 13, Iss. 2, pp. 13–42; DOI: 10.32523/2306-6172-2025-13-2-13-42
21. Aksenov A.A., Zhluktov S.V., Kashirin V.S., Sazonova M.L., Cherny S.G., Drozdova E.A., Rode A.A. Chislennoe modelirovanie v PK FlowVision raspyla i ispareniya syr'ya v potoke gaza-teplonositelya pri pechnom proizvodstve tehnicheskogo ugleroda [Numerical simulation in FlowVision software package of raw material atomization and evaporation in a heat-carrier gas flow during the furnace production of carbon black]. *Comput. Res. Model.*, 2023, Vol. 15, No. 4, pp. 921–939 (in Russian); DOI: 10.20537/2076-7633-2023-15-4-921-939

22. Mazzotta L., Lamioni R., Agati G., Evangelisti A., Rispoli F., Valera-Medina A., Borello D. On the impact of CFD turbulence models for premixed NH3/H2 combustion on emissions and flame characteristics in a swirl-stabilized burner. *Flow, Turbulence Combust.*, 2025, Vol. 114, pp. 1043–1063; DOI: 10.1007/s10494-025-00638-7

23. Wang S.S., Wang S. Compressibility-improved $\gamma - Re_{\theta t}$-based Reynolds stress transition model for transonic wing–body flow. *AIAA Journal*, 2025; DOI: 10.2514/1.J064918

24. Stollinger M., Naud B., Roekaerts D., Beishuizen N., Heinz S. PDF modeling and simulations of pulverized coal combustion. Part 2: Application. *Combust. Flame*, 2013, Vol. 160, No. 2, pp. 384-395; DOI: 10.1016/j.combustflame.2012.10.010

25. Stollinger M., Heinz S. (2008). PDF modeling and simulation of premixed turbulent combustion. *Monte Carlo Methods and Applications*, 2008, Vol. 14, pp. 343–377; DOI: 10.1515/MCMA.2008.016