

I denna studie har bildning av CO från sot i det heta gaslagret, som bildas i en rumsbrand, undersökts. Undersökningen har i huvudsak fokuserats på rika bränsle-luft blandningar, dvs underventilerade förhållanden. Vid undersökning av ekvivalenskvotens och uppehållstidens inverkan på sotbildning har ekvivalenskvoter från 0,5 till 4,0 och uppehållstider från 0,25 till 10 s studerats.

Sandias CHEMKIN program har använts för att beräkna gasfaskemin [1]. En s k "perfectly stirred reactor" (PSR) metod har använts för att modellera gaslagret. De parametrar som har varierats för att undersöka de olika termokemiska förhållanden som råder i olika delar av gaslagret är bl a gastemperaturen på inflöde, ekvivalenskvoten samt gasens uppehållstid i reaktorn. Eten (C<sub>2</sub>H<sub>4</sub>) valdes som bränsle eftersom den har de nödvändiga förutsättningarna för bildning av sot, d v s har tillräckligt hög kol/väte kvot samt att dess sönderdelningsprodukter leder till bildning av ämnen som är specifika för introduktion av sotpartikelbildning.

Den använda kemisk kinetiska modellen består av en gasfaskemimodell som inkluderar aromatisk kemi, sotpartikelkoagulation, partikelaggregation och yttillväxt.

GRI-Mech 1.2 reaktionsmodellen [2] har använts för beräkning av kemin för mindre kolväten. Modellen har kompletterats för att inkludera reaktioner för aromatiska kolväten. Bildning av bensen och fenyl modelleras genom reaktion av C<sup>•</sup> med acetylen och med reaktioner för ringbildning från C<sub>6</sub>H<sub>5</sub> - ämnen samt genom rekombination av propargylradikaler [3]. Polyaromater upp till fyra ringar har inkluderats i den aromatiska kemin [4]. Bildning av pyren utgår från bensen som följer en s k HACA sekvens (väte abstraktion - kol addition) via bildning av bifenyl (s k ring-ring - kondensation). Schemat inkluderar totalt 542 reaktionssteg.

Dynamiken av sotpartikelkoagulation beskrivs med hjälp av momentmetoden som innehåller totalt 6 moment [5]. Yttillväxten av sotpartiklar inkluderar 6 reaktionssteg, en mekanism som liknar HACA mekanism för polyaromater [3,6]. Sotbildningen startar vid ekvivalenskvoten 1.0 och ökar linjärt med ökad ekvivalenskvot. Sotpartikelstorleken ökar med längden av uppehållstiden. Reaktionen mellan sot och CO<sup>•</sup>, som producerar CO, sker vid temperaturer på 950 °C och högre. Ju högre temperaturen är desto högre är CO produktionen på detta sätt. Addition av extra CO<sup>•</sup> in i blandningen ökar CO produktionen och minskar volymfraktionen av sot. Denna effekt ökar med ökning av temperatur och ekvivalenskvot.

Identifieringen av denna "nya" källa av CO ökar vår kunskap om CO produktion i det heta gaslagret. Resultaten kan användas för att bättre kunna förutsäga CO produktion i underventilerade rumsbränder.