

Численное моделирование динамики аварийного выброса пропана, сопровождаемого горением, в приземном слое атмосферы

И. Р. ХАМИДУЛЛИН

Бирская государственная социально-педагогическая академия, Россия

e-mail: ildar_kh_r@rambler.ru

И. М. БАЯНОВ

Институт механики УНЦ РАН, Уфа, Россия

e-mail: bim1966@mail.ru

A 3D distribution of industrial emissions in the atmosphere accompanied by an ignition is considered. The characteristics of evolution of the hydrodynamic, concentration and temperature fields depending on both parameters of the cloud of the hydrocarbon emission and the ambient air are investigated.

Введение

В ближайшие десятилетия объемы потребления легких углеводородных соединений как одного из главных источников энергии будут только возрастать. В частности, это связано с большими запасами природного газа в виде газогидратов. Природный газ обладает такими достоинствами, как высокая экологическая чистота продуктов сгорания, сравнительно дешевые добыча и транспортировка. Однако при нормальных условиях природный газ имеет большой удельный объем, поэтому хранение и транспорт осуществляются при высоких давлениях. Все это значительно повышает вероятность аварийных ситуаций из-за возможного нарушения герметичности емкостей и трубопроводов. Кроме того, природный газ используется как топливо в различных видах транспорта, что повышает риск их применения в качестве взрывных устройств экстремистскими группировками. Все это требует глубокого изучения закономерностей распространения выбросов углеводородных соединений и последующего возгорания образовавшейся смеси в открытой атмосфере в городских каньонах, сложной пересеченной местности и т.д.

1. Основные уравнения

Рассмотрим облако как смесь газов, которая принимается за гомогенную среду с плотностью ρ , температурой T , давлением p . Пусть $\mathbf{v} = \mathbf{v}(x, y, z, t)$ — скорость этой среды, определяемая как среднемассовая скорость составляющих:

$$\rho \mathbf{v} = \sum_i \rho_i \mathbf{v}_i. \quad (1)$$

Введем среднемассовые концентрации каждого компонента смеси $k_i = \rho_i/\rho$. Здесь и в дальнейшем индексы $i = 1, \dots, 6$ будут соответствовать углеводороду, кислороду, углекислому газу, водяному пару, окиси углерода и азоту. Эти значения концентраций удовлетворяют условию

$$\sum_i k_i = 1. \quad (2)$$

Для смеси газов выполняется закон Дальтона, и для определения давления смеси используем уравнение Менделеева—Клапейрона

$$p = \rho R_g T, R_g = R \sum_i \frac{k_i}{\mu_i}, \quad (3)$$

где R — универсальная газовая постоянная; μ_i — молярные массы газов.

На основе принятых предположений можем записать систему, описывающую динамику облака газов, в которую входят уравнения неразрывности, диффузии, импульсов для всей смеси и уравнение теплового баланса:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla^k \rho v^k = 0; \quad (4)$$

$$\rho \frac{dk_i}{dt} = -\nabla^k \left(\rho \frac{\nu_t}{\sigma_d} \nabla^k k_i \right) + R_i; \quad (5)$$

$$\rho \frac{dv^k}{dt} = -\nabla^k p + \rho g^k + \nabla^n \tau^{kn}; \quad (6)$$

$$\rho c \frac{dT}{dt} = \nabla^k \left(\rho \frac{\nu_t}{\sigma_t} \nabla^k T \right) + q_1 R_1 + q_6 R_6 - Q_r. \quad (7)$$

Здесь k_i — массовые концентрации компонентов смеси; R_i — скорости изменения концентраций в результате химической реакции; q_1 и q_6 — удельные теплоты сгорания углеводорода и окиси углерода; Q_r — тепловой вклад диссоциации продуктов сгорания. Удельная теплоемкость смеси определяется через удельные теплоемкости компонентов:

$$c_p = \sum_i c_{pi} k_i. \quad (8)$$

С целью более полного описания процессов тепломассопереноса к данной системе уравнений (3)–(7) добавляются дополнительные уравнения $k - \varepsilon$ -модели для определения энергии турбулентных пульсаций K , диссипации ε и коэффициента кинетической турбулентной вязкости ν_t :

$$\rho \frac{dK}{dt} = \nabla^k \left(\rho \frac{\nu_t}{\sigma_K} \nabla^k K \right) + \tau^{kn} \nabla^k v^n - \rho \varepsilon; \quad (9)$$

$$\rho \frac{d\varepsilon}{dt} = \nabla^k \left(\rho \frac{\nu_t}{\sigma_\varepsilon} \nabla^k \varepsilon \right) + \frac{\varepsilon}{K} (C_{1\varepsilon} \tau^{kn} \nabla^k v^n - C_{1\varepsilon} \rho \varepsilon); \quad (10)$$

$$\nu_t = C_\mu K^2 / \varepsilon. \quad (11)$$

Здесь $\tau^{kn} = \rho \nu_t \left(\nabla^n v^k + \nabla^k v^n - \frac{2}{3} \nabla^j v^j \delta_{kn} \right) - \frac{2}{3} \rho K \delta_{kn}$ — турбулентная составляющая тензора касательных напряжений; $C_\mu = 0.09$, $C_{\varepsilon 1} = 1.43$, $C_{\varepsilon 2} = 1.92$, $\sigma_K = 1$, $\sigma_\varepsilon = 1.3$ — эмпирические константы.

Для описания химических реакций рассмотрим следующую схему горения смеси углеводорода с воздухом в открытой атмосфере. В ней скорость реакции определяется температурой смеси (через соотношения Аррениуса) и считается, что перемешивание смеси, а следовательно, и доставка окислителя к топливу происходят мгновенно.

В схеме горения учитываются процессы образования монооксида углерода [2]:



Также учитывается диссоциация молекул воды и азота горения при высокой температуре согласно следующим схемам:



Как показывают оценки, концентрации окисей водорода и азота при температурах ниже 2500 К, реализуемых для рассматриваемых смесей, малы (1 %). Кроме того, характерные времена химических превращений с образованием и рекомбинацией этих компонентов значительно меньше по сравнению с временами диффузионного перемешивания. Поэтому дополнительным диффузионным переносом этих составляющих смеси в общем балансе масс будем пренебрегать. В соответствии с этими допущениями уравнение масс для окисей водорода и азота имеет вид

$$\rho \frac{dk_{r,j}}{dt} = R_{r,j}, \quad (14)$$

где $k_{r,j}$, $j = 1, 2$, — концентрации OH и ON; $R_{r,j}$ — скорости изменения концентраций в результате диссоциации. В то же время образование и исчезновение OH и NO сопровождаются значительными тепловыми эффектами, поэтому будем учитывать их вклад в теплоемкость (8) и в уравнение теплового баланса (7):

$$Q_r = q_{r1} (R_{r1}^+ - R_{r1}^-) + q_{r2} (R_{r2}^+ - R_{r2}^-).$$

Здесь q_{r1} и q_{r2} — удельные теплоты образования; R_{r1}^+ , R_{r1}^- и R_{r2}^+ , R_{r2}^- — скорости реакции образования и рекомбинации OH и NO соответственно. Скорость реакции горения углеводорода определяется согласно соотношению Аррениуса:

$$R_1 = \frac{\rho \mu k_1}{\mu_1} \frac{\rho \mu k_2}{\mu_2} A_1 \exp\left(-\frac{E_{a1}}{RT}\right). \quad (15)$$

Реакция горения окиси углерода обратима, поэтому скорости прямой и обратной реакций выражаются соотношениями [2]

$$R_2^+ = \frac{\rho \mu k_5}{\mu_5} \frac{\rho \mu k_4}{\mu_2} A_2 \exp\left(-\frac{E_{a2}}{RT}\right), R_2^- = \rho^2 \frac{\mu k_3}{\mu_3} A_3 \exp\left(-\frac{E_{a3}}{RT}\right), \quad (16)$$

где A_1, A_2, A_3 — константы реакции; E_{a1}, E_{a2}, E_{a3} — энергии активации. Скорости изменения концентраций других компонентов смеси через R_1, R_2^+ и R_2^- выражаются по формулам [2]

$$R_2 = -R_1 \nu_2 \mu_2 - R_2^+ \mu_2, R_3 = 2R_2^+ \mu_3 - 2R_2^- \mu_3, R_4 = R_1 \nu_4 \mu_4, R_5 = R_1 \nu_5 \mu_5 - 2R_2^+ \mu_5 + 2R_2^- \mu_5.$$

Константы реакций диссоциации и рекомбинации (13) имеют вид [1]

$$\begin{aligned} R_{r1}^+ &= \rho^2 \frac{\mu k_4}{\mu_4} A_{r1}^+ \exp\left(-\frac{E_{ar1}}{RT}\right), & R_{r1}^- &= \rho^2 \frac{\mu k_{r1}}{\mu_{r1}} A_{r1}^- T^{n_1}, \\ R_{r2}^+ &= \rho^2 \frac{\mu k_2}{\mu_2} A_{r2}^+ \exp\left(-\frac{E_{ar2}}{RT}\right), & R_{r2}^- &= \rho^2 \frac{\mu k_{r2}}{\mu_{r2}} A_{r2}^- T^{n_2}. \end{aligned} \quad (17)$$

2. Начальные и граничные условия

При залповых аварийных выбросах углеводородов образуется облако произвольной формы. Но в процессе горения облака в открытой атмосфере начальная форма практически не играет роли и облако горячих продуктов горения в большинстве случаев принимает форму шара. Поэтому в дальнейшем для удобства расчетов на прямоугольной сетке примем начальную форму облака в виде куба.

В начальный момент времени ($t = 0$ с) температура окружающего воздуха T_a однородна во всей расчетной области, давление определяется распределением Больцмана

$$p_a(x, y, z, 0) = p_{a0} \exp(-\mu_a g z / RT_a),$$

где p_{a0} — нормальное атмосферное давление.

Скорость движения в начальный момент времени равна нулю во всей расчетной области:

$$\mathbf{v} = \mathbf{v}(x, y, z, 0) = 0.$$

В облаке горючей смеси в начальный момент времени давление соответствует распределению давления в окружающей атмосфере, а температура в облаке T_g однородна и равна температуре окружающего воздуха.

Расчетная область ограничена шестью плоскими границами. Верхняя и боковые границы являются открытыми, и на них для параметров задаются фоновые значения. Нижняя граница закрыта, и на ней скорость равна нулю.

3. Численная схема

Численная схема решения системы уравнений (3)–(11), (14) основана на методе крупных частиц. К преимуществам данного метода относится устойчивость в широком диапазоне скорости движения среды. Трехмерная постановка задачи позволяет моделировать динамику облака углеводорода при произвольной конфигурации наземных объектов (зданий, лесных насаждений) и с учетом рельефа местности.

Описание работы данной численной схемы применительно к процессам распространения атмосферных выбросов приводится в работе [3]. В настоящей работе к этой схеме добавлена часть, моделирующая процесс горения углеводородов.

При построении алгоритма расчета методом крупных частиц особенно важно выбрать оптимальную последовательность расщепления по физическим процессам. Численный алгоритм решения системы уравнений (3)–(11), (14) на каждом шаге по времени состоит из трех этапов, стандартных для метода крупных частиц, в которых последовательно учитываются сначала (этап I) турбулентный перенос субстанций (массы, импульса и тепла), затем конвективный перенос (этапы II и III). Далее производится расчет процесса горения образовавшейся смеси согласно скоростям реакций (15)–(17), в результате которого происходит изменение масс соответствующих компонентов смеси, а также выделение или поглощение тепла в каждой ячейке расчетной сетки. При этом число участвующих в реакциях компонентов смеси должно быть достаточным, чтобы реакции происходили согласно стехиометрическим соотношениям. Если в данной ячейке наблюдается недостаток данного вещества, то соответствующая реакция происходит до полного его израсходования и затем прекращается. Например, по такому сценарию происходит реакция горения углеводорода, которая прекращается при израсходовании как углеводорода, так и кислорода в смеси в данной ячейке.

4. Результаты расчета

Рассмотрим залповый выброс пропана в простейшей конфигурации строений — в городском каньоне, образованном двумя зданиями, расположенными симметрично относительно центра выброса. Когда начальные размеры выброса сопоставимы с размерами строений, форма облака определяется преимущественно конфигурацией этих строений [3]. Примем, что в начальный момент времени залповый выброс чистого пропана в виде облака кубической формы объемом $V = 512 \text{ м}^3$ ($M_0 = 904 \text{ кг}$) находится на горизонтальной подстилающей поверхности в центре расчетной области на удалении от зданий, равном размеру облака. Температура в облаке равна температуре окружающего воздуха и составляет 300 К . Несмотря на сравнительно медленное изменение концентрации пропана в облаке (1% за 10 с) в ходе перемешивания с окружающим воздухом, момент зажигания сильно влияет на максимальное значение температуры, достигаемое в облаке в процессе горения, а значит, и степень ущерба (рис. 1, *а*). Рассмотрим движение фронта огненного шара, за который примем поверхность с температурой 1000 К . При достаточно раннем зажигании ($t = 30$ и 35 с) фронт достигает стен здания, при позднем ($t = 40 \text{ с}$) — нет (рис. 1, *б*). Стены подвергаются тепловому воздействию за счет излучения в течение всего времени жизни огненного шара, т. е. в течение $2...3 \text{ с}$. Следует подчеркнуть, что здание находится в опасной для живых организмов зоне (ближе чем 3.6 радиуса огненного шара).

Рассмотрим избыточное давление, действующее на здание в процессе горения. В облаке горючей смеси, образовавшемся в результате перемешивания пропана с воздухом в течение $t = 35 \text{ с}$, максимальное значение объемной доли пропана составляет $\alpha_g = 4\%$

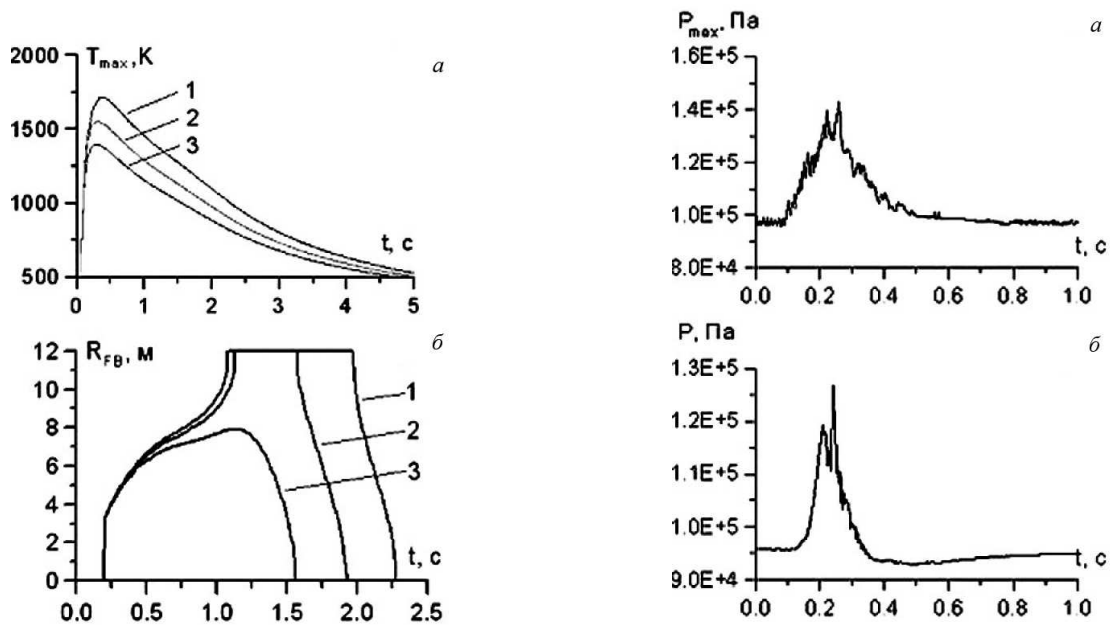


Рис. 1. Эволюция максимальной температуры и фронта огненного шара в облаке пропана при различных моментах времени зажигания $t = 30, 35$ и 40 с (кривые 1, 2 и 3 соответственно)

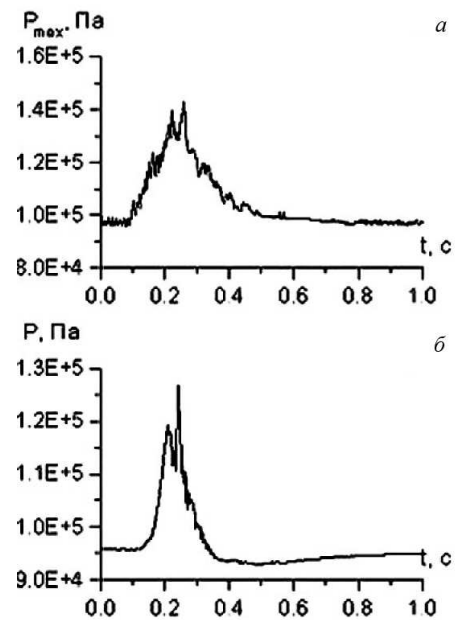


Рис. 2. Эволюция максимального значения давления (*а*) и давления на стене (*б*) здания в процессе горения облака пропана между двумя зданиями при зажигании в момент времени $t = 35 \text{ с}$ после выброса

(массовая концентрация $C_g = 0.062$). Волна давления за 0.2 с момента зажигания доходит до стены здания (рис. 1, *a*), и его амплитуда составляет 0.25 атм, что является достаточным для разрушения здания. Максимальное давление в расчетной области достигает 0.4 атм (рис. 1, *б*).

Заключение

Представлены результаты численных расчетов горения облака пропана в атмосфере на основе двух предельных схем горения. Получены поля температуры и давления при горении пропана в открытой местности и наличии наземных объектов. Рассчитаны зоны разрушений и теплового воздействия продуктов горения на местности. Показано, что наличие наземных объектов существенно усиливает разрушительное действие горения облака выбросов. Это обусловлено, во-первых, затягиванием в 1.2–1.5 раза процесса рассеяния облака — концентрация горючего газа дольше находится в диапазоне воспламенения смеси, во-вторых, усилением в 1.5–2 раза избыточного давления в ограниченных объемах между объектами.

Список литературы

- [1] Физико-химические процессы в газовой динамике: Справочник. В 3 т. Т. 2: Физико-химическая кинетика и термодинамика / Под ред. Г.Г. Черного и С.А. Лосева. М.: Изд-во МГУ, 2002. 368 с.
- [2] SMIRNOV N.N., NIKITIN V.F., LEGROS J.C. Ignition and combustion of turbulent dust-air mixtures // Combustion and Flame. 2000. Vol. 123. P. 46–67.
- [3] Баянов И.М., Гильмуллин М.З., Шагапов В.Ш. Расчет растекания тяжелого газа вдоль земной поверхности по трехмерной модели // Прикладная механика и техническая физика. 2003. Т. 44, № 6. С. 130–139.

Поступила в редакцию 21 февраля 2008 г.