

Динамика горения выбросов в приземном слое атмосферы

И. Р. Хамидуллин

Бирская государственная социально-педагогическая академия, Бирск

Аннотация. На основе относительно простой модели горения на местности рассчитана динамика горения облака углеводородно-воздушной смеси, образовавшейся в результате аварийного выброса на промышленном объекте.

Ключевые слова: выброс, горение, модель

1 Введение

В ближайшие десятилетия объемы потребления легких углеводородных соединений, как одного из главных источников энергии, будет только возрастать. В частности это связано с большими запасами природного газа в виде газогидратов. Природный газ обладает такими достоинствами как достаточно высокая экологическая чистота продуктов сгорания, сравнительно дешевая добыча и транспортировка. Однако, при нормальных условиях природный газ имеет большой удельный объем, поэтому хранение и транспорт осуществляется при высоких давлениях. Все это значительно повышает вероятность аварийных ситуаций из-за нарушений 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 так далее.

2 Математическая модель

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

$$\rho \vec{v} = \sum_{i} \rho_i \vec{v}_i. \tag{1}$$

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

$$\sum_{i} k_i = 1. \tag{2}$$

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

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

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

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

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla^k \rho v^k = 0, \tag{4}$$

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

$$\rho \frac{dv^k}{dt} = -\nabla^k p + \rho g^k + \nabla^n \tau^{kn}, \tag{6}$$

$$\rho c \frac{dT}{dt} = \nabla^k \left(\rho \frac{\nu_t}{\sigma_t} \nabla^k T \right) + q_1 R_1 + q_5 R_5 - Q_r, \tag{7}$$

где k_i — массовые концентрации компонент смеси; R_i — скорости изменения концентраций в результате химической реакции; q_1, q_5 — удельные теплоты сгорания углеводорода и окиси углерода; Q_r — тепловой вклад диссоциации продуктов сгорания. Удельная теплоемкость смеси определяется через удельные теплоемкости компонент

$$c_p = \sum_i c_{pi} k_i. \tag{8}$$

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

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

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

$$\nu_t = C_\mu K^2 / \varepsilon. \tag{11}$$

Здесь $\tau^{kn} = \rho \nu_t \left(\nabla^n \upsilon^k + \nabla^k \upsilon^n - \frac{2}{3} \nabla^j \upsilon^j \delta_{kn} \right) - \frac{2}{3} \rho K \delta_{kn}$ — 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 в ходе горения рассмотрим следующую схему горения углеводорода [1]

$$\begin{array}{l}
C_n H_m + \nu_2 O_2 \to \nu_5 CO + \nu_4 H_2 O, \\
2CO + O_2 \rightleftharpoons 2CO_2.
\end{array}$$
(12)

Наряду с образованием *CO* будем учитывать также диссоциацию молекул воды и азота горения при высокой температуре согласно следующим схемам

$$\begin{array}{l} H_2 O \rightleftharpoons OH + H, \\ N_2 + O_2 \rightleftharpoons 2NO. \end{array}$$

$$(13)$$

Как показывают оценки, концентрации окисей водорода и азота при температурах ниже 2500 K, реализуемых для рассматриваемых смесей малы (~1%). Кроме того, характерные времена химических превращений с образованием и рекомбинацией этих компонент 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:

$$\rho \frac{dk_{r,j}}{dt} = R_{r,j},\tag{14}$$

где $k_{r,j}(j = 1, 2)$ — концентрации OH и NO; $R_{r,j}$ — скорости изменения концентраций в результате диссоциации.

В то же время образование и исчезновение OH и NO сопровождается 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} , q_{r2} — удельные теплоты образования, R_{r1}^+ , R_{r1}^- , R_{r2}^+ , R_{r2}^- — скорости реакции образования и рекомбинации *OH* и *NO*, соответственно.

Численная схема решения системы уравнений (3)–(11), (14) основана на методе крупных частиц [3].

На основе представленной относительно простой модификации модели горения на местности возможно рассчитать динамику горения облака углеводородно-воздушной смеси, образовавшейся в результате аварийного выброса на промышленном объекте. Этот процесс можно разделить на 2 этапа — образование облака в результате перемешивания углеводорода с окружающим воздухом и горение этого облака. При этом чаще всего происходит выброс чистого углеводорода, и первоначально его концентрация в облаке близка к единице. Поэтому этап перемешивания с окружающим воздухом должен быть достаточно длительным, чтобы объемное содержание углеводорода в смеси снизилось до значений, входящих в диапазон воспламенения. Многие углеводородные соединения тяжелее воздуха и наряду с перемешиванием происходит также их накопление у подстилающей поверхности, что наиболее опасно с точки зрения ущерба, наносимого в результате горения образовавшегося облака.

Рассмотрим случай залпового выброса пропана в простейшей конфигурации строений — в городском каньоне, образованном двумя зданиями, расположенными симметрично относительно центра выброса. Когда начальные размеры выброса близки к размерам строений, форма облака определяется преимущественно конфигурацией этих строений [3]. В начальный момент времени залповый выброс чистого пропана в виде облака кубической формы объемом 216 м³ (381 кг) находится на горизонтальной подстилающей поверхности в центре расчетной области. Температура в облаке равна температуре окружающего воздуха и составляет 300 К. В процессе перемешивания с окружающим воздухом значение концентрации горючего газа в центре облака в этом случае снижается со временем значительно медленнее по сравнению с выбросом в отсутствии зданий. Таким образом, несмотря на сравнительно медленное изменение концентрации пропана в облаке (~ 1% за 10 с) в ходе перемешивания с окружающим воздухом, выбор момента зажигания сильно влияет на максимальное значение температуры, достигаемое в облаке в процессе горения, а значит и степень ущерба (Рис. 1(a)). Момент зажигания определяет также количество несгоревшего топлива в облаке (Рис. 1(б)). Рассмотрим далее ситуацию аварийного выброса пропана на промышленном объекте с более сложной конфигурацией зданий, с последующим возгоранием образующейся смеси пропана с воздухом. Пусть в начальный момент времени произведен залповый выброс облака чистого пропана объемом 216 м³. В результате турбулентного перемешивания с окружающим воздухом в течение 40 с образовалось облако сложной формы (Рис. 2). Распределение



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



Рис. 2. Конфигурация облака пропана на местности: а — поле концентрации в разрезе облака; б — вид сверху

концентрации пропана на местности неравномерное и в большей части облака ее величина находится в диапазоне воспламенения. Этап горения этого облака происходит в течение 1–2 с. При этом наблюдается резкое возрастание давления и температуры (Рис. 1). Часть пропана в облаке не сгорает из-за недостатка кислорода. Образовавшееся облако продуктов горения из-за высокой температуры обладает положительной плавучестью и поднимается вверх в виде огненного шара.

3 Заключение

На основе уравнений газогидродинамики построена относительно простая модель горения углеводородно-воздушной смеси. Рассчитаны гидродинамические, концентрационные и температурные поля для некоторых случаев.

Список литературы

- Smirnov N. N., Nikitin V. F., Legros J. C. Ignition and combustion of turbulent dust-air mixtures // Combustion and Flame. 2000. V. 123. Pp. 46–67.
- [2] Физико-химические процессы в газовой динамике. Справочник в 3-х томах. Т.2: Физико-химическая кинетика и термодинамика / Под ред. Г. Г. Черного и С. А. Лосева. М.: Изд. МГУ, 2002. 368 с.
- [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.