

Горение залпового выброса пропана в каньоне между зданиями

Хамидуллин И.Р.

Нефтекамский филиал Башкирского государственного университета, Нефтекамск

В работе представлены результаты численных расчетов горения облака, содержащего пропан, на основе схемы с учетом кинетики химических реакций. Проанализировано влияние наземных объектов на распространение полей температур и давления.

1. Введение

В ближайшие десятилетия объемы потребления легких углеводородных соединений, как одного из главных источников энергии, будут только возрастать. В частности, это связано также с большими запасами природного газа в виде газогидратов. Природный газ обладает такими достоинствами, как достаточно высокая экологическая чистота продуктов сгорания, сравнительно дешевые добыча, переработка 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 возможных нарушений герметичности емкостей и трубопроводов.

Моделирование таких процессов и их последствий путем натурных физических экспериментов было и является основным способом исследований, но требует больших затрат. В настоящее время, благодаря успехам в развитии компьютерной техники, наиболее рациональным и распространенным методом является численное моделирование динамики выбросов в атмосфере, которое позволяет проводить прогнозирование последствий, оценку ущерба и разработку мер защиты. Последствия аварий, сопровождаемых горением газоздушных облаков, оцениваются по размерам зоны разрушений и зоны, подвергшейся тепловому воздействию продуктов горения. Большинство промышленных зданий разрушается от избыточных давлений 25–30 кПа при внешних и 20–25 кПа при внутренних взрывах [1]. Зона теплового воздействия определяется безопасным для живых организмов расстоянием от центра взрыва, которое по оценкам [2] должно в 3–4 раза превышать радиус образующегося ог-

ненного шара продуктов горения ($R_{EV} \approx 3.6R_{FB}$). Таким образом, основной задачей численного моделирования горения облака углеводорода на местности является оценка зон разрушения и теплового воздействия продуктов горения на основе рассчитанных полей давления и температуры.

В данной работе рассмотрен процесс горения газообразной смеси пропана с воздухом в рамках упрощенной модели диссоциации продуктов горения.

2. Основные уравнения

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

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

Введем среднемассовые концентрации каждой компоненты 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 ($C_n H_m$, O_2 , CO_2 , H_2O , CO , N_2). 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:

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

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

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

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

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

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

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

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

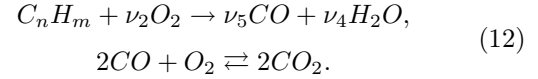
$$\rho \frac{d\varepsilon}{dt} = \nabla^k \left(\rho \frac{\nu_t}{\sigma_\varepsilon} \nabla^k \varepsilon \right) + \frac{\varepsilon}{K} (C_{1\varepsilon} \tau^{kn} \nabla^k v^n - C_{1\varepsilon} \rho \varepsilon), \quad (10)$$

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

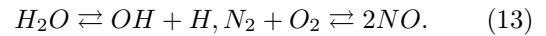
Здесь $\tau^{kn} = \rho \nu_t \left(\nabla^n v^k + \nabla^k v^n - \frac{2}{3} \nabla^j v^j \delta_{kn} \right) - \frac{2}{3} \rho K \delta_{kn}$ — турбулентная составляющая тензора касательных напряжений; $C_\mu = 0.09$, $C_{\varepsilon 1} = 1.43$, $C_{\varepsilon 2} = 1.92$, $\sigma_K = 1$, $\sigma_\varepsilon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

Скорость химической реакции определяется температурой смеси (через соотношения Аррениуса) и считается, что перемешивание смеси, следовательно, и доставка окислителя к топливу происходят очень быстро. Согласно данной схеме учиты-

ваются процессы образования монооксида углерода [3]



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



Как показывают оценки, концентрации окисей водорода и азота (OH и NO) при температурах ниже 2500 К, реализуемых для рассматриваемых смесей, малы ($\sim 1\%$). 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

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

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

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

Реакция горения окиси углерода обратима, поэтому скорости прямой и обратной реакции выражаются соотношениями [3]:

$$\begin{aligned} R_2^+ &= \frac{\rho \mu k_5}{\mu_5} \frac{\rho \mu k_2}{\mu_2} A_2 \exp \left(-\frac{E_{a2}}{RT} \right), \\ R_2^- &= \rho^2 \frac{\mu k_3}{\mu_3} A_3 \exp \left(-\frac{E_{a3}}{RT} \right), \end{aligned} \quad (16)$$

где A_1, A_2, A_3 — константы реакции; E_{a1}, E_{a2}, E_{a3} — энергии активации.

Скорости изменения концентраций других компонент смеси через R_1 , R_2^+ и R_2^- выражаются по формулам [3]:

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

Константы реакций диссоциации и рекомбинации (13) имеют вид [4]:

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

3. Начальные и граничные условия

При залповых намеренных и аварийных выбросах углеводородов могут образоваться облака различной конфигурации. Но, в большинстве случаев горения облака в открытой атмосфере, когда горизонтальные и вертикальные линейные размеры облака одного порядка, начальная форма практически не играет роли. Конфигурация зон, охваченных продуктами горения, приобретает обычно куполообразную форму. Поэтому в дальнейшем для удобства задания начальных условий на прямоугольной сетке примем исходную форму облака в виде куба.

В начальный момент времени 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:

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

В облаке горючей смеси в начальный момент времени давление соответствует распределению давления в окружающей атмосфере, и температура в облаке T_g однородна и равна температуре окружающего воздуха. Начальные значения энергии турбулентных пульсаций K и диссипации энергии ε определяются решением задачи о горизонтально однородном воздушном стационарном турбулентном потоке над поверхностью с шероховатостью z_0 в виде [5]:

$$K(x, y, z, 0) = \bar{K}(z) = \sqrt{C_\mu} v_*^2, \\ \varepsilon(x, y, z, 0) = \bar{\varepsilon}(z) = \frac{v_*^3}{\kappa(z + z_0)},$$

где $\kappa = 0.41$ — постоянная Кармана; v_* — динамическая скорость.

Расчетная область ограничена 6-ю плоскими границами. Верхняя и боковые границы являются открытыми и на них для параметров задаются фоновые значения. Нижняя граница является закрытой и на ней скорость равна нулю. Размеры расчетной области выбраны достаточно большими, чтобы за характерные времена горения облака возмущения, отраженные от границ, не достигли исследуемой области.

Значения энергии турбулентных пульсаций и диссипации энергии на открытых границах равны фоновым значениям, а на нижней границе — ставятся условия непротекания

$$\frac{\partial K(x, y, 0, t)}{\partial z} = 0.$$

4. 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 [6]. В настоящей работе к этой схеме добавлена часть, моделирующая процесс горения углеводородов.

5. Результаты расчетов

В процессе горения смеси углеводорода и воздуха в открытой атмосфере образуется облако раскаленных газов — продуктов горения. При температуре газов выше 1000 К излучение облака находится в видимой области спектра. Такое облако из-за круглой формы часто называют огненным шаром. Основными параметрами огненного шара являются максимальный диаметр D_{FB} и время жизни t_{FB} . В результате многочисленных полевых экспериментов [7–10] в открытой местности было показано, что эти параметры определяются начальной массой топлива M_0 и для значений $M_0 = 1 - 10^3$ кг получены эмпирические зависимости в виде $D_{FB} = (5.8 - 6.25)M_0^{1/3}$ и $t_{FB} = (0.30 - 0.45)M_0^{1/3}$. Здесь D_{FB} , t_{FB} , M_0 измеряются в м, с и кг, соответственно.

Проведено сравнение результатов расчетов с эмпирическими кривыми. Начальное значение массы топлива в облаке горючей газовой смеси ва-

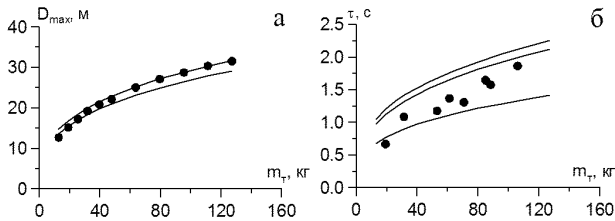


Рис. 1. Сравнение результатов расчета с результатами физических экспериментов: а — максимальный диаметр огненного шара, б — время жизни огненного шара. Сплошной линией обозначены эмпирические кривые, точками — варианты расчетов

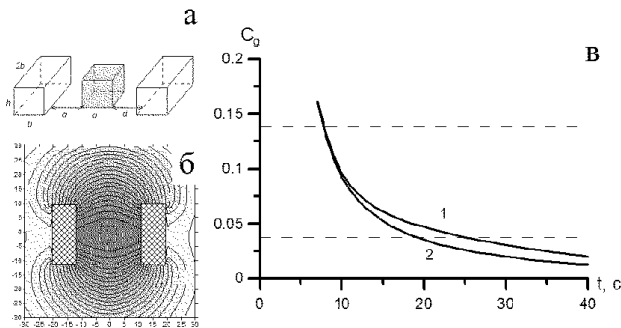


Рис. 2. Перемешивание залпового выброса пропана с окружающим воздухом: а — конфигурация строений и начального положения облака (размеры: $a = 8$ м, $d = 12$ м, $b = h = 10$ м), б — форма облака в момент зажигания (вид сверху), в — эволюция максимального значения концентрации пропана в облаке при наличии (1) и отсутствии строений (2)

рировалось путем изменения начальных значений объема облака и концентрации углеводорода. В расчетах максимальный диаметр D_{FB} и время жизни t_{FB} огненного шара определялись по уровню температуры 1000 К. Сравнение показывает (рис. 1), что расчетные точки D_{FB} и t_{FB} лежат в коридоре, указанном в эмпирической зависимости. Таким образом, результаты расчетов находятся в удовлетворительном согласии с экспериментальными данными.

На основе представленных теоретических построений были проведены расчеты процесса горения облака углеводородно-воздушной смеси, образовавшейся в результате залпового выброса на местности. Этому этапу предшествует период формирования горючей смеси в результате перемешивания углеводородного газа с окружающим возду-

хом. Чаще всего происходит выброс чистого углеводорода, и поэтому первоначально его концентрация в облаке близка к единице. Период перемешивания с окружающим воздухом должен быть достаточно длительным, чтобы объемное содержание углеводорода в смеси снизилось до значений, входящих в диапазон воспламенения (например, для пропана $\alpha = 2.3 - 9.5\%$). Многие газообразные углеводородные соединения тяжелее воздуха, и наряду с перемешиванием происходит также их оседание и накопление у подстилающей земной поверхности, что наиболее опасно с точки зрения ущерба, наносимого в результате горения образовавшегося облака. Такая ситуация часто возникает на промышленных площадках и жилых массивах при утечке бытового газа. Сложная конфигурация наземных объектов приводит к локализации горючей смеси в отдельных участках. Как показывают многочисленные теоретические и экспериментальные исследования [7], наиболее интересным с практической точки зрения является возгорание облаков с начальной массой топлива $M_0 = 10^1 - 10^3$ кг. Такие процессы протекают в течение 1–10 с, за которые теплота, выделяемая в процессе горения, не успевает рассредоточиться в пространстве в результате теплопереноса, и температура в облаке достигает высоких значений, соответствующих адиабатическому процессу.

Рассмотрим случай залпового выброса пропана в простейшей конфигурации строений — в городском каньоне, образованном двумя зданиями, расположенными симметрично относительно центра выброса. Когда начальные размеры выброса сопоставимы с размерами строений (рис. 2(а)), форма облака определяется преимущественно конфигурацией этих строений [6]. Примем, что в начальный момент времени залповый выброс чистого пропана в виде облака кубической формы находится на горизонтальной подстилающей поверхности в центре расчетной области на удалении от зданий, равном размеру облака. Был рассмотрен ряд случаев с различными начальными объемами выбросов $V = 100 - 1000$ м³ (длина ребра куба изменялась в пределах от 5 до 10 м) и установлено, что разрушительное действие пожара становится катастрофическим, начиная с объема 500 м³. Далее проанализированы результаты расчетов для начального объема $V = 512$ м³ ($M_0 = 904$ кг).

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 отсутствие зданий (рис. 2(б)). Это отличие наблюдается с момента времени ($t = 8$ с), когда фронт об-

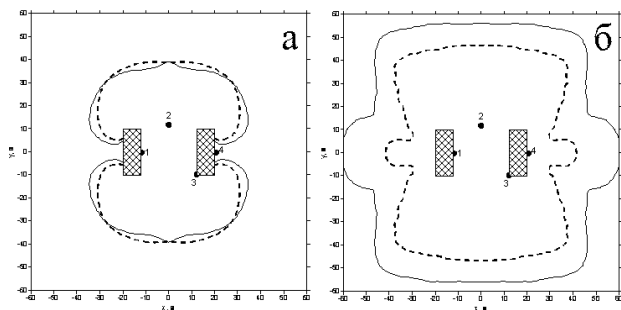


Рис. 3. Зоны теплового (а) и силового (б) воздействия при горении пропано-воздушного облака (сплошная линия для момента зажигания $t_3 = 15$ с, пунктирная — 20 с)

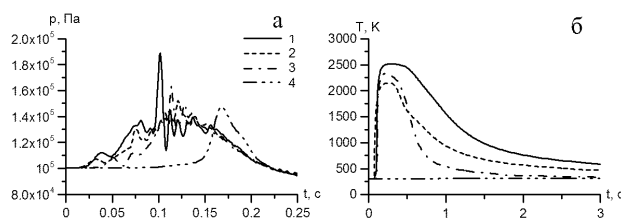


Рис. 4. Эволюция давления (а) и температуры (б) в характерных точках расчетной области при горении облака пропана в каньоне между двумя зданиями для момента зажигания $t_3 = 20$ с

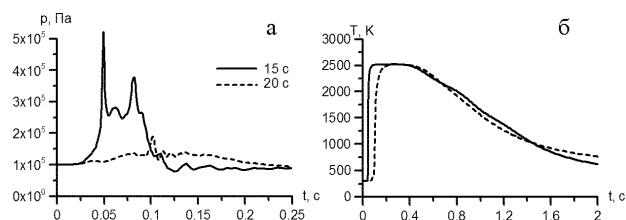


Рис. 5. Сравнение давления (а) и температуры (б) на стене здания (точка 1) для моментов зажигания $t_3 = 15$ и 20 с.

лака достигает строений. Отрезок времени с момента выброса до момента, когда смесь в облаке становится негорючей (т.е. бедной) назовем периодом взрывоопасности $t_{вз}$. Наличие зданий приводит к значительному затягиванию этого периода ($t_1 \approx 25$ с по сравнению с $t_2 \approx 18$ с при отсутствии зданий), т.е. здания препятствуют рассеянию облака.

Для анализа последствий горения образовавшейся смеси наиболее интересны моменты зажигания $t_3 = 15$ и 20 с. При этих значениях объемная доля пропана в большей части облака близка к стехиометрическому соотношению ($\alpha_g \approx 4.1, 3.1\%$, что соответствует массовой концентрации $C_g = 0.061, 0.047$).

Для количественной оценки последствий горения необходимо проанализировать поля температуры и давления около подстилающей поверхности. На рис. 3 представлена конфигурация зон теплового и разрушительного воздействий, границы которых определены как огибающая площади, в которой в течение всего процесса горения температура и давление превысили критические значения ($T_{кр} = 1000$ К, $p_{кр} = 1.3$ атм). Следует отметить, что зоны теплового воздействия для двух моментов зажигания отличаются незначительно, так как определяются в основном начальной массой топлива в смеси. Зоны разрушений различаются существенно из-за более высокой плотности энерговыделения при раннем зажигании.

На рис. 4 представлены расчетные осциллограммы для ряда характерных точек, указанных на рис. 3, для момента зажигания $t_3 = 20$ с. Значения температуры в каньоне между зданиями (точки 1, 2, 3) достигают величин порядка 2000 К и превышают $T_{кр}$ в течение 0.5–1.5 с. Значение температуры за зданием (точка 4) повышается незначительно ($\Delta T = 13$ К) и, по-видимому, только за счет конвективного переноса тепла из очага горения. Пиковые значения давления в каньоне (точки 1, 2, 3) превышают критическое значение $p_{кр}$. Колеблющийся характер давления объясняется отражением от стен строений. При этом максимальное значение избыточного давления достигается на стене здания (точка 1), что в 1.15 раза больше значения в точке 2 на таком же расстоянии от центра очага возгорания в открытом пространстве. Это позволяет утверждать об усиливающей роли стен зданий.

Для момента зажигания $t_3 = 15$ с качественная картина процесса горения облака не отличается. Как уже отмечалось, количественные различия существенны для поля давления и незначительны для поля температуры. Сравнение этих величин (рис. 5) в точке 1 на стене здания показывает, что пиковые значения давления отличаются в 2.8 раза.

Таким образом, результаты расчетов позволяют определить детальную картину полей температур и давлений в очаге горения в городском каньоне и получить количественную оценку разрушительного действия техногенных или умышленных пожаров с выбросом углеводородов.

6. Заключение

В работе представлены результаты численных расчетов горения облака пропана в атмосфере на основе схемы горения с учетом кинетики химических реакций. Получены поля температуры и давления при горении пропана в открытой местности и при 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 1.4–2 раза избыточного давления в ограниченных объемах между объектами.

Список литературы

- [1] Бесчастнов М.В. Промышленные взрывы. Оценка и предупреждение. М.: Химия, 1991. 432 с.
- [2] Маршалл В. Основные опасности химических производств. Пер. с англ. М.: Мир, 1989. 672 с.

- [3] 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.
- [4] 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.
- [5] Бояршинов М.Г. Модели переноса и рассеяния примесей в растительном массиве. Пермь: ПГТУ, 2000. 142 с.
- [6] 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.
- [7] Johnson D.M., Pritchard M.J. Large-scale experimental study of boiling liquid expanding vapour explosions (BLEVEs). / 14th Int. LNG/LPG Conference & Exhibition, Gastech, 1990. Pp. 1–30.
- [8] Gayle J.B., Bransford J.W. Size and duration of fireballs from propellant explosions / *Tech.Rep.NASA TM X 53314*, George C. Marshall Space Center, Huntsville, Alabama, 1965.
- [9] High R.W. The Saturn fireball // *Annals of New York Academy of Sciences*. 1968. V. 152. Pp. 441–451.
- [10] Roberts A.F. Thermal radiation from releases of LPG from pressurised storage // *Fire Safety Journal*, 1981/82. № 4. Pp. 197–212.