

ГОРЕНИЕ ГАЗОВ В ОГНЕННОМ ШАРЕ

Еналеев Р.Ш., Теляков Э.Ш., Хайруллин И.Р., Качалкин В.А.

Казанский государственный технологический университет

Разработана инженерная модель горения углеводородных газов при аварийном разрушении технологического оборудования. Модель адекватно описывает динамику изменения размеров огненного шара за счет теплоты химических реакций и излучения высокотемпературных продуктов горения. Компьютерная модель горения газов может быть использована в качестве элемента системы «источник излучения – объекты окружающего пространства» для оценки и прогнозирования чрезвычайных ситуаций при крупномасштабных авариях.

Ключевые слова

Горение газов, огненный шар, вычислительная модель, излучение.

Условные обозначения

c , ρ , t – теплоемкость, плотность, температура газовой смеси соответственно, u – скорость движения газовой смеси, r – сферическая координата, τ – время, $w(r, \tau)$ – объемный источник излучения, $Q(\tau)$ – объемный источник химических реакций, $\lambda_{\text{экв}}$ – эквивалентный коэффициент теплопроводности, T_a – адиабатическая температура, $\lambda_{\text{эфф}}$ – эффективный коэффициент теплопроводности в пограничном слое, C – концентрация горючего, ΔH – тепловой эффект химической реакции, C_0 – начальная массовая концентрация топлива в ядре ОШ, t_s – время горения ОШ, P – давление газовой смеси, $V_{\text{см}}$ – объем газовой смеси, $\nu_{\text{см}}$ – количество молей газовой смеси, $T_{\text{см}}$ – средняя температура газовой смеси, R_μ – газовая постоянная, ε – эффективный коэффициент излучения, σ – константа излучения, q – плотность теплового потока излучения, $\rho_n(t)$ – плотность газовой смеси поверхностного слоя, T^* – температура потухания, E – энергия активации.

Введение

В аварийных ситуациях на предприятиях по добыче, переработке, хранению и транспортировке углеводородного топлива может произойти выброс сжатого или сжиженного газа в открытое пространство и образование паровоздушной смеси. После зажигания горючей смеси от постороннего источника возникает сферическое пламя, называемое огненным шаром (ОШ). Масса аварийного выброса горючих углеводородных газов может изменяться от 1 до 5000 тонн, максимальный диаметр ОШ – от 50 до 800 м, время горения – от 6 до 100 сек. Воздействие теплового излучения от высокотемпературных продуктов химических реакций на окружающие объекты может вызвать тепловое поражение человека, возгорание горючих материалов, потерю прочности и устойчивости конструкций. Обеспечение безопасности жизнедеятельности человека в чрезвычайных ситуациях, вызванных

поражающим действием теплового излучения, является важной социально-экономической проблемой. Одной из ключевых задач в выделенной проблеме является моделирование процесса горения углеводородных газов в структуре сферического пламени. Решение поставленной задачи позволяет прогнозировать опасные зоны поражения и обосновывать управленческие решения по ликвидации последствий аварии. По оценке западных специалистов [1] реализация комплекса защитных мер может на порядок снизить последствия поражения человека тепловым излучением.

В математической теории горения газовых смесей [2] рассматриваются два предельных случая – нормальное распространение пламени предварительно перемешанных газов и диффузионное горение не перемешанных горючего и окислителя. Между предельными случаями, очевидно, существует область частичного смешения компонентов горючей смеси, в которой химические реакции и смешение происходят с соизмеримыми скоростями. Эта промежуточная область из-за её сложности остается малоизученной.

В литературе предлагаются различные подходы при моделировании процесса горения газов в ОШ. В одном из них [1] применяется предельно упрощенная схема, основанная на эмпирических зависимостях интегральных характеристик – эффективного диаметра, времени горения и излучающей способности ОШ от массы аварийного выброса топлива. В другом – сложная внутренняя структура ОШ изучается с привлечением моделей и методов, разработанных в гидродинамике конвективных течений и теории радиационного переноса [3, 4]. Согласно этому подходу скорость горения лимитируется процессом турбулентного смешения компонентов горючей смеси, тогда как сама химическая реакция считается бесконечно быстрой. Третий подход основан на применении теории тепломассообмена для построения инженерных моделей горения газовых смесей. Так в [5], рассматривая фронт горения как межфазную поверхность между горючим и окислителем, используется теория пограничного слоя для построения расчетных моделей диффузионного горения водорода. В теории горения могут быть использованы также и другие интегральные характеристики процессов тепломассообмена. Например, теплообмен в ограниченном пространстве характеризуется эффективным коэффициентом теплопроводности; влияние турбулентности на скорость переноса субстанции оценивается коэффициентом продольного перемешивания; излучение продуктов горения углеводородных газов аппроксимируется законом Стефана-Больцмана с эффективным коэффициентом излучения. Правомочность этого подхода подтверждена многочисленными опытными данными в широком диапазоне изменения параметров типовых процессов переноса массы и энергии [6].

Целью данной работы является построение инженерных вычислительных моделей горения газов с различной степенью перемешивания с использованием апробированных методов теории тепломассообмена.

Обоснование физико-химической модели

В аварийных ситуациях наблюдаются различные сценарии образования парового облака, его смешения с окружающим воздухом и зажигания горючей смеси от источника. Например, при разливе нефтепродуктов образующаяся

переобогащенная смесь горит вокруг своей внешней оболочки [1, 7]. При разгерметизации емкостей высокого давления и мгновенном выбросе топлива образующаяся смесь горит в ядре ОШ [3, 4]. Известны режимы горения в бунзеновских горелках [8], когда частично перемешанная газо-воздушная смесь начинает гореть в ядре пламени и «догорает» на её границе. Очевидно, в процессе эволюции ОШ могут также наблюдаться различные режимы горения газов.

Предварительная оценка составляющих теплового баланса превращения химической энергии при аварийном выбросе углеводородного топлива показывает, что примерно три четверти этой энергии выделяется в ядре ОШ, а одна четверть – на его периферии. В [7] считается, что в ядре ОШ химическая энергия аккумулируется в виде нагретых горючей смеси и продуктов горения, а на периферии происходит полное сгорание горючей смеси и истечение продуктов при температуре горения в окружающее пространство. В [9] при построении полуэмпирической модели горения ракетного топлива в аварийных ситуациях принято равномерное тепловыделение в объеме ОШ и нормальное распространение пламени на его поверхности. В связи с изложенным в данной работе предлагается двухзонная физико-химическая модель, схематично представленная на рис. 1.

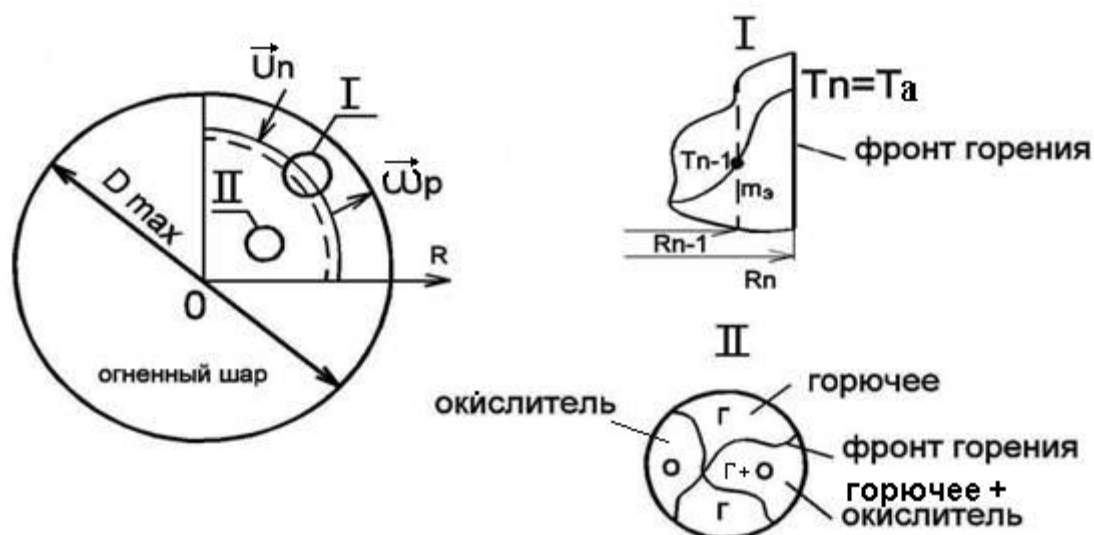


Рис. 1. Структура сферического пламени.

В первой зоне происходит поверхностное горение на границе ОШ, во второй – объемное горение частично перемешанной газовой смеси. В обеих зонах происходит диффузионное горение газовой смеси, скорость которого зависит не только от условий перемешивания, но и от кинетических параметров. Согласно классической теории диффузионного горения газовых смесей, фронт горения устанавливается в тех локальных объемах, где окислитель и горючее поступают в стехиометрическом отношении. При этом максимальная скорость диффузионного горения равна максимальной скорости нормального распространения пламени [2, 10, 11]. Можно ожидать, что для частично перемешанных газов нормальная скорость распространения фронта химических реакций будет зависеть от влияния физико-

химических факторов – давления, температуры горения, температуры подогрева исходной смеси, концентрации горючего и окислителя на нормальную скорость горения, условно называемой стандартной [12]. В теории турбулентного горения [2] стандартная скорость горения является также основной характеристикой при определении газодинамических режимов. Следует отметить, что в большинстве моделей ОШ влияние турбулентности на стандартную скорость горения оценивается только из законов газодинамики многокомпонентных сред. Однако кроме прямого влияния турбулентности на горение, имеется обратное влияние горения на турбулентность [2]. В [11, 12] экспериментально установлено, что интенсивность турбулентности, генерируемой процессом горения, превышает интенсивность турбулентности, инициируемой внешним источником. Совместное влияние условно газодинамической и химической турбулентности на скорость горения проявляется в увеличении поверхности горения. При нормальном распространении пламени скорость возрастает за счет искривления и увеличения поверхности фронта горения [13]. При объемном горении – за счет возрастания удельной поверхности фронта горения (удельной межфазной поверхности) и объемных коэффициентов переноса массы и энергии [14]. Кроме того, в теории горения газов экспоненциальный закон убывания компонентов горючей смеси является наиболее типичным. Поэтому многие процессы горения, не являющиеся мономолекулярными, часто суммарным образом близко следуют этому простейшему закону [15]. В уравнениях кинетики относительное содержание горючего обычно принимается за основную характеристику реагирующей системы.

Объемная скорость горения топлива в ядре ОШ согласно фрактальной теории горения газов [16] может быть определена как произведение удельной межфазной поверхности между окислителем и горючим на массовую нормальную скорость распространения пламени на этой поверхности. Теоретическое или экспериментальное определение межфазной поверхности является трудноразрешимой задачей. Поэтому в физико-химической модели горения ОШ используется экспоненциальный закон изменения относительной концентрации углеводородного топлива в ядре ОШ. Коэффициент пропорциональности в уравнении кинетики зависит от комплекса физико-химических факторов и условий турбулентного смешения. Значение этого коэффициента можно определять методами решения обратной задачи кинетики.

Скорость горения на поверхности ОШ оценивается влиянием тех же факторов, что и в объемном горении ОШ, но при известной межфазной поверхности (поверхность шара). Влияние физико-химических факторов на стандартную скорость горения экспериментально исследовано в фундаментальных работах по горению газовых смесей. Зависимость скорости горения от температуры – в [17], от начальной температуры и времени пребывания горючей смеси при этой температуре – в [18, 19], от концентрации горючего и окислителя – в [20]. Обобщение всех результатов исследований выполнено в [12]. В [21] дополнительно получена зависимость скорости горения от адиабатической температуры.

При горении углеводородных газов в ОШ интенсивность излучения зависит от температуры продуктов горения двуокиси углерода и паров воды. Обобщение экспериментальных данных в [1] показывает, что излучение происходит при эффективной температуре поверхности ОШ порядка 1650 К, а доля энергии

излучения составляет примерно одну треть от химической энергии массы аварийного выброса топлива. Если применить методы теории теплопередачи [22], то эффективную температуру можно рассматривать как среднегеометрическую от адиабатической температуры и температуры продуктов горения в процессе охлаждения до значений, при которых теплообменом излучения можно пренебречь. Тогда физическую модель теплового излучения можно представить следующим образом. После формирования и зажигания ОШ продукты горения образуются вокруг поверхности ОШ, и их интенсивность излучения рассчитывается по закону Стефана-Больцмана с эффективным коэффициентом излучения при температуре 1650 К [22]. При превышении средней температуры в объеме ОШ эффективной температуры на поверхности интенсивность излучения рассчитывается как для модели абсолютно черного тела. При достижении максимальной температуры в ОШ порядка 1900 К начинается охлаждение продуктов горения в объеме ОШ до прекращения всех химических реакций [3].

Вычислительная модель и алгоритм решения

В качестве исходной модели процесса объемного горения газов в ядре ОШ принято известное уравнение теории горения в сферической системе координат:

$$c(t) \rho(t) \frac{\partial t(r, \tau)}{\partial \tau} = \frac{\partial}{\partial r} \left(\lambda_{\text{экв}} \frac{\partial t}{\partial r} - c(t) \rho(t) u t \right) + \lambda_{\text{экв}} \frac{2}{r} \frac{\partial t}{\partial r} + w(r, \tau) + Q(\tau). \quad (1)$$

Начальные значения теплофизических свойств принимаются при нормальных условиях. Граничные условия записываются в виде:

$$\text{при } r=0 \quad \frac{\partial T}{\partial r} = 0; \quad \text{при } r=R \quad T(R, \tau) = T_a. \quad (2)$$

Условия на подвижной границе: скорость перемещения подвижной границы относительно эпицентра равна векторной сумме нормальной скорости горения на поверхности ОШ и скорости расширения газовой смеси в объеме ОШ:

$$\vec{\omega} = \vec{u}_n + \vec{\omega}_p. \quad (3)$$

Закон сохранения энергии на подвижной границе формально записывается в постановке Стефана:

$$\lambda_{\text{эфф}} \frac{\partial t}{\partial r} \Big|_{r=R} = C \Delta H u. \quad (4)$$

В постановке (4) имеются принципиальные отличия от задачи типа Стефана: за температуру фазового перехода принимается адиабатическая температура горения, за подвижную границу – фронт горения, за теплоту фазового перехода –

тепловыделение химической реакции в относительно тонкой волне горения, за скорость движения границы – линейная скорость распространения пламени, зависящая от физико-химических факторов и условий турбулентного смешения.

Эквивалентный коэффициент теплопроводности определяется из критериальных уравнений теории теплообмена в ограниченном пространстве [22], а эффективный – из зависимости стандартной скорости горения от числа Рейнольдса [12]. Объемный источник энергии зависит от кинетики объемного горения топлива:

$$Q(\tau) = \Delta H \frac{dC}{d\tau}. \quad (5)$$

Кинетика химических реакций в ядре ОШ учитывается зависимостью скорости реакции от концентрации горючего:

$$\frac{dC}{d\tau} = -\kappa C. \quad (6)$$

Значение коэффициента κ определяется из граничных условий:

$$\text{при } \tau=0 \quad C=C_0; \quad \text{при } \tau=t_s \quad C=0, \quad (7)$$

t_s – рассчитывается по эмпирическим формулам [1].

По данным [1, 3, 8] после расширения горючей смеси в объеме ОШ устанавливается практически равномерное распределение температуры. Тогда уравнение состояния горючей смеси и продуктов горения в ядре ОШ представляется в виде:

$$PV_{cm} = \nu_{cm} R_{\mu} T_{cm} \quad (8)$$

В первом приближении можно принять равномерное распределение объемного источника излучения, значение которого рассчитывается из баланса энергии излучения в объеме и на поверхности ОШ:

$$w(\tau) = \frac{3q}{R_n}; \quad q = \varepsilon \sigma \left(\frac{T_{cm}}{100} \right)^4. \quad (9)$$

Дополнительно на подвижной границе записывается уравнение неразрывности:

$$\frac{\partial \rho_n(t)}{\partial \tau} = -u_n \frac{\partial \rho_n(t)}{\partial r}. \quad (10)$$

Система уравнений (1) – (10) решается численным методом конечных разностей. Учитывая механизм послыонного горения газа [2], объем исходной смеси делится на n равных эквимольных объемов m_3 . Ширина i -того объема, уменьшающаяся от центра к поверхности ОШ, принята за шаг интегрирования по координате. Известно [14], что значимое тепловыделение химической реакции начинается при температуре $1100 \div 1200^{\circ}\text{C}$. Поэтому минимальный шаг по координате, равный $R_n - R_{n-1}$ (рис. 1), лимитируется значением температуры на предпоследнем координатном слое. Шаг интегрирования по времени при заданном шаге по координате определяется по скорости распространения пламени на поверхности ОШ.

Алгоритм численного решения вычислительной модели реализуется в несколько этапов. На каждом этапе используется принцип расщепления сложных сопряженных процессов тепло- массообмена [23]. С этой целью временной шаг интегрирования делится на несколько равных дробных шагов по времени. На каждом дробном шаге оценивается влияние сопряженных кинетических (химических), энергетических и газодинамических процессов на температурное поле ОШ. Доказано [24], что совокупный эффект от дробных шагов эквивалентен решению уравнения (1) при целом шаге интегрирования. Предлагаемый подход позволяет не только упростить решение поставленной задачи, но и оценить влияние каждого процесса на динамику изменения характеристик и параметров процесса горения топлива как в объеме ОШ, так и на его поверхности.

В качестве примера рассмотрим вычислительную процедуру на произвольном временном шаге интегрирования на этапе интенсивного горения топлива и увеличения размеров ОШ. В объеме ОШ на первом дробном шаге по времени рассчитывается изменение концентрации горючего в результате химической реакции. На втором шаге – изменение температуры газовой смеси, состоящей из горючего, окислителя и продуктов горения, за счет тепловыделения и излучения продуктов горения. На третьем шаге – изменение теплофизических свойств газовой смеси и скорости расширения каждого эквимольного объема и объема ОШ в целом. На поверхности ОШ за целый шаг интегрирования по времени сгорает один эквимольный объем газовой смеси. Время сгорания зависит от физико-химических факторов и турбулентного смешения, определяемых по экспериментальным зависимостям, описанных выше. С другой стороны, время горения можно рассчитать из уравнения неразрывности (10) для поверхностного слоя по скорости расширения (движения) газовой смеси. Из условия сопряжения теплового и газодинамического процессов эти значения времени должны быть равными. Если равенства нет, то нулевая гипотеза о механизме горения поверхностного слоя отвергается и принимается новая. Следует подчеркнуть важность сравнения независимых способов определения целого шага интегрирования по времени, которое позволяет в вычислительном эксперименте идентифицировать влияние физико-химических факторов на стандартную скорость горения и сопоставлять их с экспериментальными данными. В процессе горения отдельные этапы возникают или исчезают в зависимости от скорости химических реакций и условий теплообмена. Например, гашение диффузионного пламени в поверхностном слое происходит в тот момент, когда адиабатическая температура уменьшается на величину [2]:

$$\Delta T = T_a - T^* = 3R_\mu T_a^2 / E. \quad (11)$$

Алгоритм решения вычислительной модели реализован в виде комплекса компьютерных программ. Результаты вычислительного эксперимента по моделированию процессов горения углеводородных газов в структуре сферического пламени представлен на рис. 2.

Сравнение результатов расчета характеристик горения углеводородных газов при аварийном выбросе топлива в диапазоне массы от 1 до 5 000 тонн с экспериментальными данными подтверждает адекватность инженерной вычислительной модели.

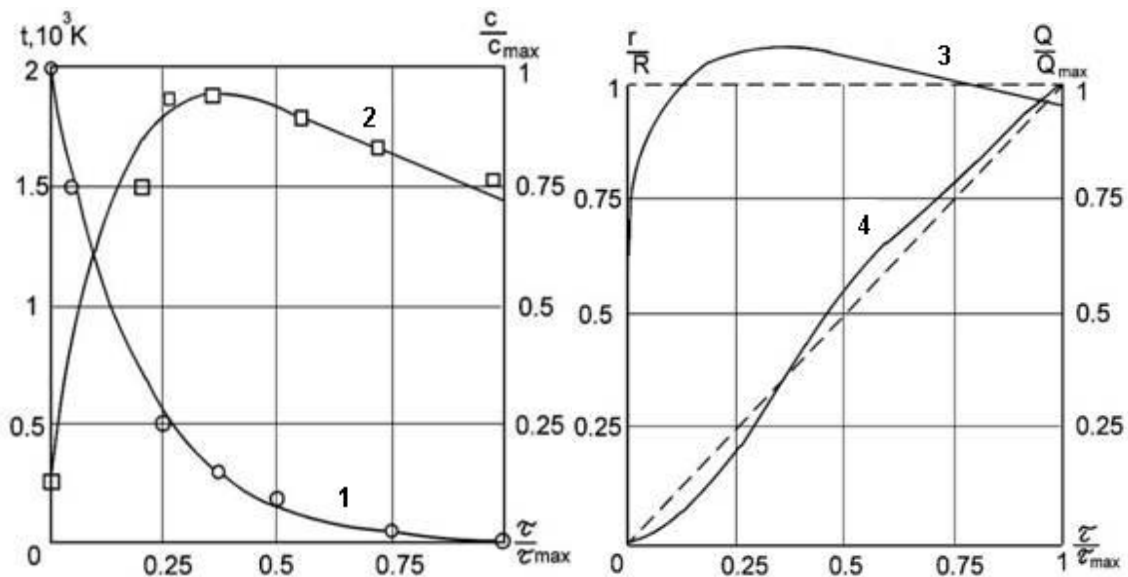


Рис. 2. Зависимость концентрации топлива (1), температуры газовой смеси в ОШ (2), относительных радиуса (3), энергии излучения (4), от времени горения топлива.

— — — эмпирические формулы [1]; \circ, \square — эксперимент с массой топлива до 1 т [2];
 ————— вычислительная модель.

Моделирование горения углеводородных газов в структуре сферического пламени позволяет количественно описать динамику физико-химических процессов как на поверхности ОШ, так и в его объеме для массы аварийного выброса топлива до несколько тысяч тонн. В первой четверти периода времени горения ОШ скорости горения и тепловыделения принимают относительно наибольшие значения, что приводит к нагреву и расширению газовой смеси и увеличению диаметра шара от начального до максимального значения (рис. 2). В экстремальной точке изменения диаметра ОШ поверхностное горение гасится из-за снижения концентрации горючего до предельного минимального значения. При этом скорость охлаждения газовой смеси за счет излучения и скорость нагрева за счет химических реакций становится равными. В оставшиеся приблизительно три четверти периода скорость

излучения превалирует над скоростью горения, и диаметр шара уменьшается до тех пор, пока не прекратятся все химические реакции.

Выводы

1. Разработана инженерная вычислительная модель для расчета энергетических характеристик горения углеводородных газов в структуре сферического пламени.

2. В вычислительном эксперименте установлена адекватность модели реальным параметрам огненного шара при аварийном выбросе топлива.

3. Компьютерная модель горения может быть использована в качестве элемента системы «источник излучения – объекты окружающего пространства» для оценки и прогнозирования аварийных ситуаций.

Литература

1. Маршалл В. Основные опасности химических производств. М.: Мир, 1989. 671 с.
2. Зельдович Я.Б. и др. Математическая теория горения и взрыва. М.: Наука, 1980. 478 с.
3. Махвиладзе Г.М., Робертс Дж.П., Якуш С.Е. Огненный шар при горении выбросов углеводородного топлива // Физика горения и взрыва, т 35, № 3, 1999. С. 17-19.
4. Селезнев В.Е. Численный анализ пожарной опасности магистральных газопроводов // Безопасность труда в промышленности, №6, 2005. С. 98-43.
5. Карпов В.Л., Мостинский И.Л., Полежаев Ю.В. Ламинарный и турбулентный режим горения водородных затопленных струй // ТВТ, Т.43, № 6, 2005. С. 933-942.
6. Теория теплообмена. Под ред. акад. РАН А.И. Леонтьева. М.:Издательство МГТУ им Н.Э.Баумана, 1997. 683 с.
7. Гельфанд Б.Е., Махвиладзе Г.М., Новожилов В.Б., Таубкин И.С., Цыганов С.А. Об оценке характеристик аварийного взрыва приповерхностного паровоздушного облака // Докл. АН СССР, Т.321, № 5, 1996. С. 979-983.
8. Гейдон А., Вольфгард Х.Г. Пламя, его структура, излучение и температура. М.: Металлургиздат, 1959. 333 с.
9. Суржиков С.Т. Полуэмпирическая модель динамики и излучения крупномасштабных огневых шаров, образующихся при авариях ракет // ТВТ, т. 35, №6, 1997. С. 972-939.
10. Burke S.P., Shuman T.E. Diffusion flames // Ind.Eng.Chem., vol. 20, №10, 1928. pp. 998-1004.
11. Основы горения углеводородных топлив: пер. с англ. /Под ред. чл-кор. Хитрина Л.И., М.: Изд-во ин. литературы, 1960. 663 с.
12. Законы горения. Под ред. Ю.В.Полежаева. М.: УНПЦ «Энергомаш», 2006. 351 с.
13. Щелкин К.И., Трошин Я.К. Газодинамика горения. М.: Изд-во АН СССР, 1963. 255 с.
14. Щетинков Е.С. Физика горения газов. М.: Наука, 1965. 739 с.
15. Хитрин Л.Н. Физика горения и взрыва. М.: Издательство МГУ, 1957. 442 с.
16. Сабденков К.О., Миньков Л.Л. К фрактальной теории перехода медленного горения в детонацию в газах // ФГВ, Т.34, №1, 1996. С. 70-78.
17. Льюис Б., Эльбе Г. Горение, пламя и взрывы в газах: пер.с англ. / Под ред. Щелкина К.И.и Борисова А.А. М.: Изд-во МИР, 1968. 592 с.

18. Dugger G.L., Weast R.C., HeimeI S. Flame velocity and preflame reaction in heated propane-air mixtures // *Ind. Engng. Chem.*, v.47, №1, 1955.
19. Dugger G.L. Effect of initial mixture temperature on flame speed of methane-air, propane-air and ethylene-air mixtures. NACA, Rep. 1061, 1952.
20. Edmonson H., Heap M.P., Pritchard R. Ambient atmosphere effect in flat-flame measurements of burning velocity // *Combustion and flame*, v.19, 1972. p.136.
21. Полежаев Ю.В., Мостинский И.Л. Нормальная скорость распространения пламени и анализ влияния на неё параметров системы // *ТВТ*, т.43, №6, 2005. С. 933-942.
22. Михеев М.А. Основы теплопередачи. М.: Госэнергоиздат, 1956. 392с.
23. Пасконов В.М., Полежаев В.И., Чудов Л.А. Численное моделирование процессов тепло- и массообмена. М.: Наука, 1984. 285с.
24. Марчук Г.И. Методы вычислительной математики. М.: Наука, 1989. 608 с.