

УДК 532.525.2+536.46

ОЦЕНКА РАЗМЕРОВ ОГНЕННОГО ШАРА ПРИ ВЗРЫВЕ АЦЕТИЛЕНОВОЗДУШНОЙ СМЕСИ

И. Хуан¹, Ц. Чжан¹, Х. Янь¹, В. Гао^{2,3}¹Пекинский технологический институт, 100081 Пекин, Китай, qzhang@bit.edu.cn²Университет Тохоку, 980-8577 Сендай, Мияги, Япония³Даляньский технологический университет, 116024 Далянь, Ляонин, Китай

Аварии, связанные с взрывами газа, часто сопровождаются сильным огнем. Чтобы эффективно предотвратить такой пожар, необходимо определенное понимание соответствующих взрывных процессов. Методами численного моделирования проведено исследование дефлаграции за пределами исходного облака и установлен размер горящего облака (огненного шара) при взрыве ацетиленовоздушной смеси. Получены данные по избыточному давлению взрыва, скорости потока и скорости реакции. Обнаружено, что пиковое избыточное давление за пределами исходного облака достигает максимума при объемной концентрации ацетилена более 13 %. Избыточное давление за пределами исходного облака может быть выше, чем внутри его. Отношение протяженности зоны горения к размеру исходного облака составляет $1.4 \div 2.7$ вдоль радиуса на поверхности земли и $1.5 \div 4$ вдоль оси симметрии, перпендикулярной земной поверхности.

Ключевые слова: численное моделирование, взрыв, ацетиленовоздушная смесь, исходное облако.

DOI 10.15372/FGV20180115

ВВЕДЕНИЕ

Взрыв газа часто сопровождается сильным огнем. Огненный шар (горящее облако), генерируемый в результате взрыва газа, может стать источником инициирования пожара. Насколько вероятно возникновение пожара при взрыве, зависит от особенностей процесса взрыва. Поэтому при проектировании пожарной защиты, кроме волн избыточного давления, также должно рассматриваться распространение пламени. Пиковые давления фиксируются и за пределами начального радиуса облака. Хотя поведение избыточного давления ранее уже анализировалось в литературе, данные о поведении горения за пределами начального объема смеси отсутствуют.

Предшествующие работы были посвящены переходу дефлаграции в детонацию в смесях горючих газов и воздуха [1–5] и ударным волнам в воздухе, вызванным взрывом в туннеле [6–10]. Распространение взрыва газа в длин-

ном канале также достаточно хорошо исследовано [11–17]. Однако распространение пламени за пределами исходного облака горючего газа изучено меньше по сравнению с распространением пламени и переходом дефлаграции в детонацию в границах начального облака.

Оценка объема пламени (огненного шара) при взрыве облака чрезвычайно важна [18]. В настоящей работе методами численного моделирования определены избыточные давления взрыва ацетиленовоздушной смеси и области распространения пламени за пределами исходного облака смеси. Разработан новый метод предсказания размеров огненного шара при взрыве облака ацетиленовоздушной смеси.

Диапазон распространения пламени при взрыве облака намного больше размера самого облака. Необходимо изучить связь между диапазоном распространения пламени и размером облака.

1. МАТЕМАТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ

Расчеты взрыва ацетиленовоздушной смеси проводились на основе следующих уравнений.

Уравнение сохранения массы:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho v) = 0, \quad (1)$$

© Huang Ying¹, Zhang Qi¹, Yan Hua¹, Gao Wei^{2,3}, 2018.

¹State Key Laboratory of Explosion Science and Technology, Beijing Institute of Technology, 100081 Beijing, China. ²Institute of Fluid Science, Tohoku University, 980-8577 Sendai, Miyagi, Japan. ³School of Chemical Machinery, Dalian University of Technology, 116024 Dalian, Liaoning, China.

где ρ и \mathbf{v} — соответственно плотность и вектор скорости газа.

Уравнение сохранения импульса:

$$\frac{\partial(\rho\mathbf{v})}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho\mathbf{v}\mathbf{v}) = -\nabla p + \nabla \cdot (\boldsymbol{\tau}), \quad (2)$$

где p — давление газа; $\boldsymbol{\tau}$ — тензор вязких напряжений, действующих на поверхность удельного объема газа за счет молекулярной вязкости,

$$\begin{aligned} \boldsymbol{\tau} &= \mu_{eff} \left[(\nabla\mathbf{v} + \nabla\mathbf{v}^T) - \frac{2}{3}\nabla \cdot \mathbf{v}\mathbf{I} \right] = \tau_{ij} = \\ &= \mu_{eff} \left[\left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) - \frac{2}{3} \frac{\partial u_k}{\partial x_k} \delta_{ij} \right], \quad (3) \end{aligned}$$

\mathbf{I} — вектор единичной длины; μ_{eff} — эффективная динамическая вязкость, равная сумме молекулярной динамической вязкости μ_l и турбулентной динамической вязкости μ_t ; δ_{ij} — единичный тензор.

Уравнение сохранения энергии:

$$\begin{aligned} \frac{\partial(\rho E)}{\partial t} + \nabla \cdot [\mathbf{v}(\rho E + p)] = \\ = \nabla \cdot \left[k_{eff} \nabla T - \sum_j h_j \mathbf{J}_j + (\boldsymbol{\tau} \cdot \mathbf{v}) \right] + R_j q_j, \quad (4) \end{aligned}$$

где R_j и q_j — соответственно скорость реакции и теплота сгорания компонента j ; \mathbf{J}_j — диффузионный поток компонента j ,

$$\mathbf{J}_j = - \left(\rho D_{i,m} + \frac{\mu_t}{Sc} \right) \nabla Y_j, \quad (5)$$

$D_{j,m}$ — массовый коэффициент диффузии компонента j ; Sc — число Шмидта.

Полная энергия удельного объема:

$$E = h - \frac{p}{\rho} + \frac{v^2}{2}, \quad (6)$$

где h — энтальпия смеси идеальных газов,

$$h = \sum_j Y_j h_j, \quad (7)$$

Y_j — массовая доля компонента j . Если N — общее количество химических компонентов, то

$$Y_j = 1 - \sum_{i=1}^{N-1} Y_i. \quad (8)$$

Энтальпию компонента j можно определить как

$$h_j = \int_{T_{ref}}^T c_{p,j} dT, \quad (9)$$

где $c_{p,j}$ — теплоемкость компонента j при постоянном давлении; k_{eff} — эффективная теплопроводность, равная сумме ламинарной теплопроводности k_l и турбулентной теплопроводности k_t ; $T_{ref} = 298.15$ К — нормальная температура.

Уравнение сохранения массы химических компонентов записывается в общем виде следующим образом:

$$\frac{\partial(\rho Y_i)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{v} Y_i) = -\nabla \cdot \mathbf{J}_j + R_j. \quad (10)$$

Для описания турбулентности, которая является ключевым фактором физических механизмов газового взрыва, принимается стандартная модель, которая включает в себя уравнения для турбулентной кинетической энергии k и ее диссипации ε :

$$\begin{aligned} \frac{\partial(\rho k)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} (\rho k u_i) = \\ = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\frac{\mu_{eff}}{\sigma_k} \frac{\partial k}{\partial x_j} \right) + \tau_{ij} \frac{\partial u_i}{\partial x_j} - \rho \varepsilon, \quad (11) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial(\rho \varepsilon)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} (\rho \varepsilon u_i) = \\ = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\frac{\mu_{eff}}{\sigma_\varepsilon} \frac{\partial \varepsilon}{\partial x_j} \right) + C_1 \tau_{ij} \frac{\partial u_i}{\partial x_j} \frac{\varepsilon}{k} - C_2 \rho \frac{\varepsilon^2}{k}, \quad (12) \end{aligned}$$

где приняты коэффициенты: $C_1 = 1.4$, $C_2 = 1.92$, $\sigma_k = 1.0$, $\sigma_\varepsilon = 1.3$.

Для ацетиленовоздушной смеси рассматривалась одноступенчатая необратимая реакция



В численном расчете горения использовалась аррениусовская модель распада турбулентного вихря. Скорость реакции R_s принимает меньшее значение из двух — скорости реакции в соответствии с законом Аррениуса R_{sA} и скорости реакции, обусловленной диссипацией вихря, R_{st} :

$$R_s = (R_{sA}, R_{st})_{\min}. \quad (14)$$

Здесь

$$R_{sA} = v_j M_j A_r T^{\beta_r} \exp\left(-\frac{E_r}{RT}\right) \prod_{j=1}^N C_j^{\eta_j}. \quad (15)$$

Для скорости реакции R_{st} выбирается наименьшее значение из полученных по приведенным ниже уравнениям:

$$R_{st} = v_j M_j A \rho \frac{\varepsilon}{k} \min\left(\frac{Y_R}{v_R M_R}\right), \quad (16)$$

$$R_{st} = v_j M_j A B \rho \frac{\varepsilon}{k} \left(\sum_P Y_P / \sum_j v_j M_j\right) \quad (17)$$

Здесь v_j и M_j — соответственно число молей и молярная масса компонента j в реагентах; A_r — предэкспоненциальный множитель, $A_r = 1.0 \cdot 10^9 \text{ м}^3/(\text{кг} \cdot \text{с})$; β_r — показатель степени для температуры, $\beta_r = 0$; E_r — энергия активации реакции, $E_r = 2.46 \cdot 10^6 \text{ Дж/кг}$; R — газовая постоянная, $R = 286.7 \text{ Дж}/(\text{кг} \cdot \text{К})$; C_j и η_j — соответственно массовая доля компонента j и индекс скорости химической реакции; A и B — константы, $A = 4.0$, $B = 0.5$.

2. ВЕРИФИКАЦИЯ ЧИСЛЕННОГО МЕТОДА

Программный код для решения уравнений сохранения массы, энергии и импульса основан на методе конечного объема. В данном расчете тип сетки соответствовал кубу с 8 узлами. Сетка для расчетной области строилась радиально ориентированной относительно точки воспламенения.

При численном моделировании за счет точного разрешения можно повысить точность расчетов. Изучалось влияние размера ячеек на точность вычислений для взрыва ацетилена. Размеры ячейки принимались равными 5, 0.5 и 0.005 мм. Зависимость результатов моделирования от сетки отсутствовала при размере ячейки менее 0.5 мм. Минимальный размер ячейки, принятый в данной работе, составлял 0.5 мм. Общее количество ячеек около 150 000.

Для проверки эффективности численного метода расчеты проводились при параметрах, полностью соответствующих условиям экспериментов [19]. Диаметр полусферического облака на земной поверхности составлял 2 м. Объем заполняли гомогенной ацетиленовоздушной смесью при концентрации ацетилена 13 %. Источник воспламенения был помещен

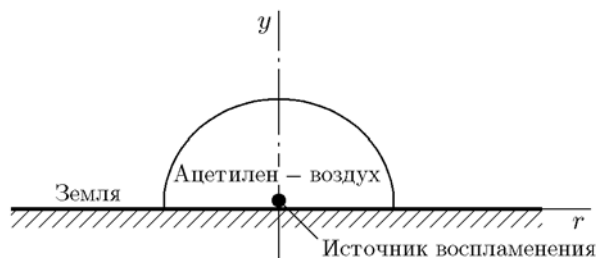


Рис. 1. Схема численного расчета

в центр полусферического облака, как показано на рис. 1.

Временные зависимости избыточного давления p_{over} , скорости потока u , температуры T и объемной концентрации ацетилена в воздухе c , определенные методом численного моделирования, представлены на рис. 2.

Численные и экспериментальные результаты по избыточному давлению приведены в таблице. Сравнение показывает, что численная модель действительно воспроизводит данные экспериментов. Относительные ошибки расчета в дальнем поле течения выше, чем в ближнем поле.

В данном исследовании не учитывались радиационные потери тепла, что может привести к увеличению ошибок в дальнем поле (3 ÷ 7 м), где энергия избыточного давления ниже. Здесь граница между ближним полем и дальним проходит при $r = 2.2$ м.

Цель настоящего исследования состояла в том, чтобы установить закономерности распространения пламени вне исходного объема смеси и обеспечить основу для предупреждения взрывов в технике. Более высокие погрешности, чем в таблице, не влияют на закон распространения пламени. Что еще более важно, в инженерных областях может быть принят порядок относительной погрешности 30 %.

3. АНАЛИЗ РЕЗУЛЬТАТОВ РАСЧЕТОВ

Численный расчет воспроизводит сценарий взрыва полусферического облака ацетиленовоздушной смеси диаметром 2 м, расположенного на земной поверхности, как показано на рис. 1. В центре облака находится сферический источник воспламенения диаметром 4 мм, энергия и длительность воспламенения составляют 500 мДж и 10 мс соответственно. Контрольные точки расположены как по радиальному направлению r на поверхности земли, так

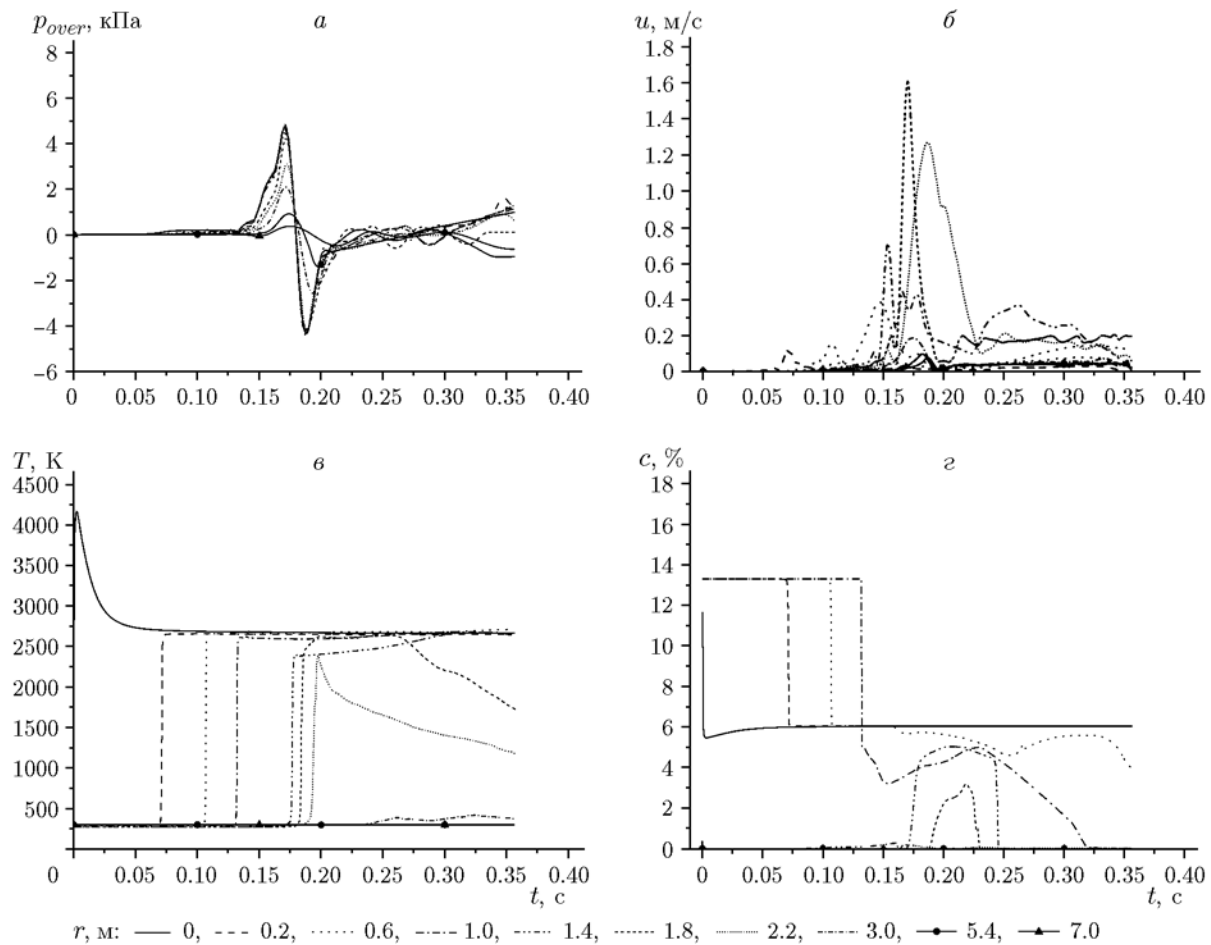


Рис. 2. Распределение во времени избыточного давления (*a*), скорости потока (*б*), температуры (*в*), объемной концентрации ацетилена (*г*) в различных точках на поверхности земли при взрыве полусферического ацетиленовоздушного облака диаметром 2 м:

аналогичное поведение наблюдается вдоль оси, перпендикулярной к поверхности земли

Численные и экспериментальные результаты по избыточному давлению

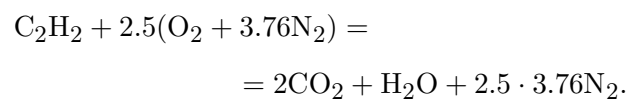
<i>r</i> , м	<i>p_{over}</i> , кПа		Относительная ошибка, %
	расчет	эксперимент [19]	
1.4	4.523	4.528	0.1
1.8	4.231	3.937	7.4
2.2	3.103	2.811	10.4
3	2.085	1.513	37.8
5.4	0.915	0.704	29.9
7	0.367	0.284	29.2

и по оси симметрии *y*, перпендикулярной к поверхности.

Численные расчеты проводились при начальных объемных концентрациях ацетилена в воздухе $c_e = 5, 13, 23, 33$ и 43% на вычислительной кубической сетке с 8 узлами при минимальном размере сетки 0.5 мм с градиентом размера ячейки по расстоянию 1.02.

Расчетные значения избыточного давления в различных точках вдоль радиуса на поверхности земли показаны на рис. 3, *a* (подобное поведение типично и вдоль оси симметрии, перпендикулярной к поверхности земли).

При стехиометрической объемной концентрации ацетилена в смеси реакция имеет вид



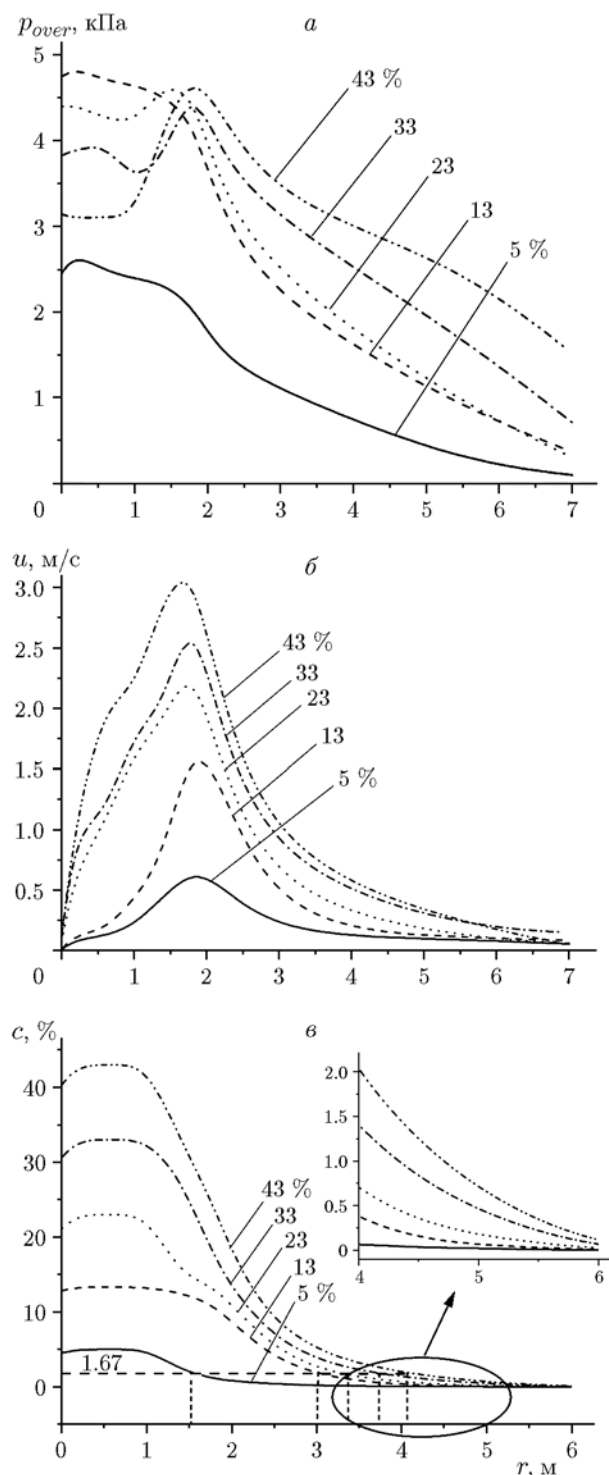


Рис. 3. Распределение избыточного давления (а), скорости течения (б), концентрации ацетилена (в) вдоль радиального направления на уровне поверхности земли при взрыве ацетиленовоздушной смеси

Стехиометрическая объемная доля определялась по формуле

$$c = \frac{1}{1 + 2.5(1 + 3.76)} = 7.8\%.$$

Это означает, что при $c = 7.8\%$ теоретическое пиковое давление горения смеси имеет максимальное значение. В реальной ситуации в конечных продуктах реакции, помимо CO_2 и H_2O , присутствуют CO , H_2 и OH . Следовательно, объемная доля, при которой давление и температура продуктов взрыва достигают максимальных значений, всегда больше, чем для стехиометрического состава. В данном исследовании максимальное пиковое давление взрыва ацетиленовоздушной смеси получено при начальной объемной концентрации ацетилена $c_e = 13\%$.

Расчетные скорости течения при взрыве ацетиленовоздушной смеси в различных точках вдоль радиуса на поверхности земли показаны на рис. 3, б. Пиковые значения скорости возрастают с увеличением объемной доли ацетилена в воздухе. Можно заметить, что в различных точках вдоль оси, перпендикулярной к земле, они выше, чем в радиальном направлении на поверхности земли. Скорость течения увеличивается с расстоянием в ближнем поле до точки воспламенения, но уменьшается с расстоянием в дальнем поле. В радиальном направлении максимальные пиковые скорости течения достигались в диапазоне расстояний $1.5 \div 2$ м за пределами исходного облака, вдоль оси, перпендикулярной к земле, — в диапазоне $2 \div 2.5$ м. Это свидетельствует о том, что перед пламенем индуцируется переходный режим течения непрореагировавшего, предварительно перемешанного газа.

Вследствие этого переходного режима течения в смесях с объемной долей ацетилена, превышающей стехиометрическую 7.8% , стехиометрическая объемная концентрация может быть достигнута за пределами исходного облака, следовательно, там может генерироваться более высокое избыточное давление. Для анализа переходного режима проведено численное исследование объемных концентраций ацетилена в воздухе в разных точках вдоль радиального направления при взрыве облака. Соответствующие результаты расчета показаны на рис. 3, в. Как видно из рисунка, в ближнем поле (в пределах $r = 2.2$ м) объемные концентрации увеличиваются с расстоянием до точки

воспламенения. Это указывает на то, что более высокое избыточное давление за пределами исходного облака обусловлено переходным режимом течения несгоревшего, предварительно перемешанного газа.

Пределы воспламенения ацетилена в воздухе составляют 1.67 и 83.7 % [17]. Диапазон размеров пламени оценивался на основе нижнего предела воспламенения 1.67 %. Расчетные значения радиуса зоны пламени в радиальном направлении на поверхности земли при взрыве воздушной смеси с 5.7, 23, 33 и 43 % ацетилена составляли 1.4, 2, 2.2, 2.4 и 2.7 м соответственно. Это в 1.4 ÷ 2.7 раза больше радиуса исходного облака 1 м. Аналогично, вдоль оси, перпендикулярной к земле, при концентрации ацетилена в смеси 5, 13, 23, 33 и 43 % получены радиусы зоны пламени 1.5, 3, 3.3, 3.7 и 4 м соответственно. Это в 1.5 ÷ 4 раза больше радиуса исходного облака 1 м и больше, чем в радиальном направлении на поверхности земли. Рис. 4 иллюстрирует эти результаты расчета (здесь R_0 — начальный радиус облака, R — размер области пламени, R/R_0 — относительный радиус пламени). При начальных объемных концентрациях, превышающих стехиометрическое значение, наблюдается явная линейная зависимость между относительным радиусом зоны пламени при взрыве смеси и начальной объемной концентрацией ацетилена

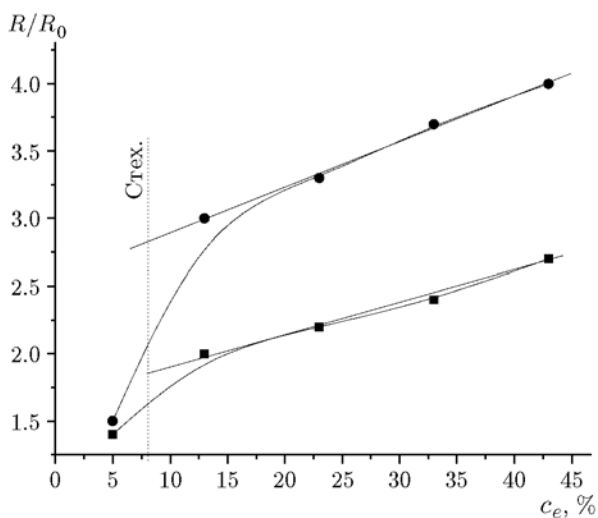


Рис. 4. Зависимости размера пламени вдоль радиального направления на поверхности земли (квадраты) и перпендикулярно к поверхности (кружки) от начальной объемной концентрации ацетилена в воздухе

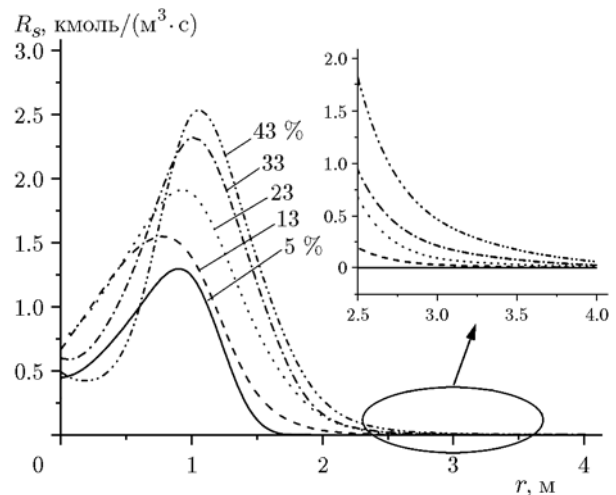


Рис. 5. Распределение пиковых скоростей реакции вдоль радиального направления на уровне поверхности земли при взрыве ацетиленовоздушной смеси

на в воздухе. Для радиальных направлений на поверхности земли эта линейная зависимость описывается функцией

$$R/R_0 = 1.681 + 0.023c_e$$

(скорректированный $R^2 = 0.98$),

вдоль оси, перпендикулярной к земле, — функцией

$$R/R_0 = 2.548 + 0.034c_e$$

(скорректированный $R^2 = 0.99$).

Скорость реакции при взрыве облака меняется во времени и пространстве. Полученные численным расчетом пиковые скорости реакции в различных точках представлены на рис. 5. Видно, что максимум пиковой скорости реакции обычно достигается на границе исходного облака или за его пределами. Это согласуется с расчетами пикового избыточного давления, скорости потока и объемной доли ацетилена при взрыве в смеси с воздухом.

ВЫВОДЫ

1. Для смесей ацетилена и воздуха, в которых объемная доля ацетилена превышает 13 %, избыточное давление при взрыве достигает максимума за пределами исходного облака.

2. Отношение радиуса зоны горения к размеру исходного облака при взрыве ацетиленовоздушной смеси в неограниченном пространстве достигает $1.4 \div 2.7$ вдоль радиального направления на поверхности земли и $1.5 \div 4$ вдоль оси симметрии, перпендикулярной к поверхности земли.

3. Для начальных объемных концентраций ацетилена, превышающих стехиометрическое значение, относительный радиус зоны пламени при взрыве ацетиленовоздушной смеси линейно зависит от начальных объемных концентраций ацетилена в воздухе.

Работа поддержана Национальным научным фондом Китая (1177257) и проектом Государственной головной лаборатории науки и технологии взрывов Пекинского технологического института (KFJJ14-3M).

ЛИТЕРАТУРА

1. **Baer M. R., Gross R. J., Nunziato J. W., Igel E. A.** Experimental and theoretical study of deflagration-to-detonation transition (DDT) in the granular explosive // *Combust. Flame.* — 1986. — V. 65, N 1. — P. 15–30.
2. **Kessler D. A., Gamezo V. N., Oran E. S.** Simulations of flame acceleration and deflagration-to-detonation transitions in ethyne-air systems // *Combust. Flame.* — 2010. — V. 157, N 1. — P. 2063–2077.
3. **Фролов С. М.** Ускорение перехода горения в детонацию в газах: от К. И. Щёлкина до наших дней // *Физика горения и взрыва.* — 2012. — Т. 48, № 1. — С. 13–24.
4. **Kagan L., Sivashinsky G.** On the transition from deflagration to detonation in narrow tubes // *Flow Turbul. Combust.* — 2010. — V. 84, N 1. — P. 423–437.
5. **Middha P., Hansen O. R.** Predicting deflagration to detonation transition in hydrogen explosions // *Process Saf. Prog.* — 2008. — V. 27, N 3. — P. 192–204.
6. **Zhang Q., Qin B., Lin D. C.** Estimation of pressure distribution for shock wave through the bend of bend laneway // *Saf. Sci.* — 2010. — V. 48, N 1. — P. 1263–1268.
7. **Zhang Q., Qin B., Lin D. C.** Estimation of pressure distribution for shock wave through the junction of branch gallery // *Saf. Sci.* — 2013. — V. 57. — P. 214–222.
8. **Zhang Q., Pang L., Liang H. M.** Effect of scale on the explosion of methane in air and its shock wave // *J. Loss Prev. Process Ind.* — 2011. — V. 24, N 1. — P. 43–48.
9. **Zhang Q., Pang L., Zhang S. X.** Effect of scale on flame speeds of methane-air // *J. Loss Prev. Process Ind.* — 2011. — V. 24, N 5. — P. 705–712.
10. **Zhang Q., Pang L.** Flame and temperature wave propagation characteristic of methane-air mixture in mine tunnels // *Intern. J. Numer. Methods Heat Fluid Flow.* — 2013. — V. 23, N 5. — P. 885–898.
11. **Akinori H., Akiko M.** Numerical analysis of gas explosion inside two rooms connected by ducts // *J. Loss Prev. Process Ind.* — 2007. — V. 20, N 4. — P. 455–461.
12. **Jo Y. D., Crowl D. A.** Flame growth model for confined gas explosion // *Process Saf. Prog.* — 2009. — V. 28, N 2. — P. 141–146.
13. **Marc S., Andreas G., Ulrich K.** Experiments on the influence of pre-ignition turbulence on vented gas and dust explosions // *J. Loss Prev. Process Ind.* — 2006. — V. 19, N 2. — P. 194–199.
14. **Zipf R. K., Jr, Gamezo V. N., Sapko M. J., Marchewka W. P., Mohamed K. M., Oran E. S., Kessler D. A., Weiss E. S., Addis J. D., Karnack F. A., Sellers D. D.** Ethyne-air detonation experiments at NIOSH Lake Lynn Laboratory // *J. Loss Prev. Process Ind.* — 2013. — V. 26, N 2. — P. 295–301.
15. **Salzano E., Marra F. S., Russo G., Lee J. H. S.** Numerical simulation of turbulent gas flames in tubes // *J. Hazard. Mater.* — 2002. — V. 95, N 3. — P. 233–247.
16. **Ждан С. А.** Расчет взрыва газовых смесей с учетом сдвига химического равновесия продуктов // *Физика горения и взрыва.* — 1983. — Т. 19, № 1. — С. 131–135.
17. **Ждан С. А.** Расчет взрыва газового сферического заряда // *ПМТФ.* — 1975. — Т. 16, № 6. — С. 69–74.
18. **Novozhilov V.** Some aspects of the mathematical modelling of fireballs // *Proc. Inst. Mech. Eng. Part E. J. Process Mech. Eng.* — 2003. — V. 217, N 2. — P. 103–119.
19. **Yang G., Ding X., Bi M., Abuliti A.** Experimental and simulation study of the effect of fuel concentration on flammable vapor cloud explosion // *Acta Petrolei Sinica (in Chinese).* — 2004. — V. 20, N 5. — P. 553–558.

*Поступила в редакцию 22/VII 2016 г.,
в окончательном варианте — 30/VI 2017 г.*