

*К.В. Корытченко, д.т.н., нач. каф., ФВП НТУ «ХПИ»,
А.В. Сакун, к.б.н., нач. каф., ФВП НТУ «ХПИ»,
Ц. Сендеровски, д.т.н., нач. каф., ВТА им. Я. Домбровского*

МОДЕЛЬ ДЛЯ ПРОГНОЗИРОВАНИЯ ПОЖАРО- И ВЗРЫВООПАСНОСТИ ЭЛЕКТРИФИЦИРОВАННЫХ ПРОМЫШЛЕННЫХ ОБЪЕКТОВ С ГОРЮЧИМИ ГАЗАМИ

(представлено д.т.н. Тарасенко А.А.)

Разработана модель для прогнозирования пожаро- и взрывоопасности электрофицированных промышленных объектов, в производственном цикле которых используются горючие газы. Модель позволяет предсказать возможность возникновения взрыва горючих газов в зависимости от параметров электросиловых установок, используемых в производстве, на основе анализа процесса инициирования детонации искровым разрядом.

Ключевые слова: пожароопасность, взрывоопасность, искровой разряд, детонация в газах, горючие газы.

Постановка проблемы. В различных отраслях промышленности широко используют горючие газы как сырье для производства различных материалов, в качестве энергоносителей, хладагента и т.д. Горючие газы широко используются в технологиях нанесения покрытий, включая технологию детонационного напыления [1-3]. Производственные аварии могут приводить к формированию взрывоопасных концентраций горючих газов. Последствия от воспламенения таких газов в значительной мере определяются режимом их сгорания – медленным (дефлаграционным) или взрывным (детонационным). Если при дефлаграционном сгорании в условиях, приближенных к нормальным, давление продуктов взрыва в помещениях достигает, как правило, не более двух атмосфер, то при детонации – в пять раз больше. Это приводит к более значительным разрушениям в результате детонационного взрыва газов. Множество производственных площадок содержат мощные электросиловые установки, неуправляемое срабатывание которых в условиях аварийного выброса горючих газов может приводить к электроразрядному инициированию детонации.

Актуальным является задача прогнозирования пожаро- и взрывоопасности электрифицированных промышленных объектов, в производственном цикле которых используются горючие газы.

Анализ последних исследований и публикаций. Оценка взрывоопасности объекта проводится на основании анализа условий прямого инициирования детонации в горючих газовых смесях. Экспериментальные исследования прямого инициирования детонации искровым разрядом в горючих газах сделаны в ряде работ [4-8]. Предложено [9] теоретическое обоснование критической энергии, при превышении которой

обеспечивается прямое инициирование детонации. Но известные результаты не позволяют дать оценку возможности инициирования детонации от искрового разряда для произвольной электрической цепи.

Математическая модель, описанная в работе [10], позволяет исследовать процессы в искровом разряде для произвольной электрической цепи. В ранее разработанной модели развития искрового разряда в реагирующем газе достигнуто удовлетворительное согласие расчетных и экспериментальных результатов по скоростям расширения токопроводящего канала искры и генерируемой ударной волны, изменению напряженности электрического поля в столбе искрового канала, изменению сопротивления искры, состоянию плазмы в искровом канале и т.д. [11]. Но использование данной модели для расчета процесса инициирования детонации приводило к получению заниженных значений энергии инициирования. Для разрешения данного противоречия в данной работе представлена модель инициирования детонации искровым разрядом, учитывающая неравновесное колебательное возбуждение молекул за фронтом инициирующей ударной волны и влияние данного процесса на протекание химических реакций.

Целью данной работы является разработка модели для прогнозирования пожаро- и взрывоопасности электрифицированных промышленных объектов, которая позволит предсказать возможность возникновения взрыва горючих газов в зависимости от параметров электросиловых установок.

Постановка задачи и её решение. С целью сокращения затрат на оценку взрывоопасности объектов, разработана математическая модель прямого инициирования детонации искровым разрядом в газовых смесях для произвольных электрических цепей.

Процесс инициирования детонации искровым разрядом исследовался с использованием уравнений нестационарной газодинамики и неравновесной химической кинетике по модели локальных колебательных температур применительно к исходным компонентам смеси. В качестве газоразрядной среды рассматривалась стехиометрическая смесь водорода с кислородом.

В одномерной постановке задачи в расчетном диапазоне $0 < r < L_*$, где L_* – размер области моделирования, решалась система газодинамических уравнений (неразрывности, импульса и энергии) для многокомпонентной химически реагирующей газовой смеси в виде:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{1}{r} \frac{\partial (r \rho u)}{\partial r} = 0 \quad (1)$$

$$\frac{\partial \rho u}{\partial t} + \frac{1}{r} \frac{\partial [r(p + \rho u^2)]}{\partial r} = \frac{p}{r}, \quad (2)$$

$$\frac{\partial \left[\rho \epsilon + \frac{\rho u^2}{2} \right]}{\partial t} + \frac{1}{r} \frac{\partial \left[r \left(u \left(\rho \epsilon + \frac{\rho u^2}{2} + p \right) + k_T \frac{dT}{dt} \right) \right]}{\partial r} = \sigma E^2 - \sum_x \dot{e}_x - W_{em}, \quad (3)$$

$$\frac{\partial y_i}{\partial t} + \frac{1}{r} \frac{\partial(r u y_i)}{\partial r} = \omega_i, \quad i = 1-8 \quad (10), \quad (4)$$

$$\frac{\partial y_x e_x}{\partial t} + \frac{1}{r} \frac{\partial(r u y_x e_x)}{\partial r} = y_x \dot{e}_x + e_x \omega_x, \quad x = 1, \quad (5)$$

где r – радиальная координата; u – скорость среды; t – время; p , ρ и ε – плотность, давление и внутренняя энергия смеси; ε – внутренняя энергия газа на единицу массы (без учета колебательной энергии компонентов H_2 , O_2 , N_2); k_T – коэффициент теплопроводности; T – температура газа (отражающая кинетическую энергию газа); E – напряженность электрического поля в столбе разрядного канала; σ – проводимость плазмы в канале; W_{em} – удельная мощность излучения; y_i – молярная концентрация i -й компоненты (H_2 , O_2 , H_2O , H , O , OH , H_2O_2 , HO_2 , N , N_2); ω_i – скорость изменения концентрации i -й компоненты смеси за счет химических реакций; ω_x – скорость изменения концентрации x -й моды за счет химических реакций; e_x – удельная колебательная энергия x -й моды (H_2 , O_2); $\dot{e}_x$ – скорость изменения удельной колебательной энергии x -й моды (H_2 , O_2) в результате колебательно-поступательной релаксации.

В области токопроводящего канала состояние среды рассчитывалось по модели локального термодинамического равновесия. Рассматривались компоненты e , O , O^+ , O^{++} , H , H^+ . Внутренняя энергия единицы объема газа определялась по уравнению

$$\rho \varepsilon = \frac{3}{2} (N_H + n_{H^+} + N_O + n_{O^+} + n_{O^{++}} + n_e) kT + \\ + n_{H^+} e I_{H^+} + n_{O^+} e I_{O^+} + n_{O^{++}} e I_{O^{++}}, \quad (6)$$

где N_i – плотность нейтральных компонентов (O , H); e – заряд электрона; k – постоянная Больцмана; n_e – плотность электронов; n^+ – плотность однократно ионизированных атомов; n^{++} – плотность двукратно ионизированного атома; I^+ , I^{++} – энергия однократной и двукратной ионизации соответствующих компонентов.

В области токопроводящего канала уравнение состояния имеет вид

$$p = (N + n_e + n^+ + n^{++}) kT. \quad (7)$$

Ввод энергии, подводимой к искре электрической цепью, осуществлялся только в область токопроводящего канала.

В области вне токопроводящего канала состав среды определялся по уравнениям неравновесной химической кинетики. Энергия единицы объема смеси в этой области рассчитывалась по выражению

$$\rho\varepsilon = \sum_i y_i U_i^0, \quad (8)$$

где y_i – молярная концентрация i -й компоненты (H_2 , O_2 , H_2O , H , O , OH , H_2O_2 , HO_2); U_i^0 – внутренняя (химическая и тепловая) энергия 1 моля i -й компоненты смеси.

Для i -х компонентов (H_2O , H , O , OH , H_2O_2 , HO_2) внутренняя энергия определялась по выражению

$$U_i^0 = \Delta H_{298,15i}^0 + \int C_{Vi} dT, \quad (9)$$

где $\Delta H_{298,15i}^0$ – стандартная молярная энтальпия образования i -й компоненты смеси; C_{Vi} – молярная теплоемкость i -й компоненты при постоянном объеме.

Для x -й моды внутренняя энергия рассчитывалась по выражению

$$U_x^0 = \Delta H_{298,15x}^0 + \frac{5}{2} R(T - T_0) + e_x(T_{v,x}), \quad (10)$$

где $T_0 = 298,15$ К; R – универсальная газовая постоянная.

Давление в смеси в области вне токопроводящего канала определялось суммой парциальных давлений компонентов смеси в виде

$$p = RT \sum_i y_i. \quad (11)$$

Использовалась редуцированная кинетическая схема сгорания водорода [12], применимая при давлении в газовой смеси до 30 МПа и начальной температуре до 3000 К. В химических реакциях с участием x -й моды скорость реакции зависела от эффективной температуры T_{ef} в виде:

$$k_k(T_{ef,x}) = A_k \cdot T_{ef}^{n_k} \exp\left[-\frac{E_{ak}}{kT_{ef,x}}\right], \quad (12)$$

где $k_k(T_{ef,x})$ – константа скорости k -й реакции с участием x -й моды в зависимости от эффективной температуры T_{ef} ; $T_{ef,x}$ – эффективная температура x -й моды; A_k , n_k , E_{ak} – коэффициенты в обобщенной формуле Аррениуса.

Эффективная температура T_{ef} , входящая в выражение (12), представлялась по модели Парка в виде

$$T_{ef,x} = T^s T_{v,x}^{1-s}, \quad (13)$$

где s – параметр модели; $T_{v,x}$ – колебательная температура x -вой моды, определяемая из среднего значения колебательной энергии.

Скорость процесса колебательно-поступательной релаксации описывалась уравнением вида

$$\frac{de_x}{dt} = -\frac{e_x - e_{x0}}{\tau_{VT}}, \quad (14)$$

где e_{x0} – равновесное значение средней колебательной энергии 1 моля x -й моды; τ_{VT} – время колебательно-поступательной релаксации.

В данной работе проведено моделирование газодинамического расширения искрового разряда, где в качестве импульсного источника энергии использовался конденсатор. Следует отметить, что модель допускает применение произвольных разрядных цепей. Расчет переходного процесса в рассматриваемой электрической цепи проводился по уравнению

$$L \frac{di}{dt} + [R_c + R_k(t)] \cdot i + \frac{1}{C} \int_0^t i dt = U_c, \quad (15)$$

где C – электрическая емкость конденсатора, R_c – активное сопротивление разрядной цепи; L – индуктивность разрядной цепи; U_c – начальное напряжение заряда конденсатора.

Определение границы токопроводящего канала проводилось путем оценки степени ионизации и проводимости газа в области, где газ практически полностью диссоциирован. Поэтому движение границы токопроводящего канала задавалось процессами тепломассопереноса, вызванными газодинамическим расширением токопроводящего канала, а также переносом тепла электронной теплопроводностью и излучением.

В начальных условиях реагирующие компоненты заданной концентрации равномерно распределены во всей расчетной области. На левой границе расчетной области, описывающей параметры состояния газа на оси разрядного канала, задавалось отсутствие градиентов термодинамических параметров газа. Размер расчетной области определялся из условия не достижения волны давления правой границы на расчетном интервале времени.

Описание релаксационных процессов в ударных волнах принято осуществлять в гидродинамическом приближении. В модели за фронтом ударной волны принималось отсутствие изменения колебательной энергии x -й моды (H_2 , O_2) в виде:

$$e_x|_{r=r_f} = e_{x0}(T_0), \quad (16)$$

где r_f – радиус фронта ударной волны; T_0 – температура исходной горючей смеси (задается в начальных условиях).

Решение системы уравнений с заданными начальными и граничными условиями (1–16) осуществлялось численно с использованием метода расщепления по физическим процессам: газодинамический, химический, термической ионизации, переходной в электрической цепи, колебательно-поступательной релаксации.

По результатам моделирования развития искрового канала без учета замедленного колебательного возбуждения молекул, получено [10], что инициирование детонации в стехиометрической смеси водорода с кислородом, находящейся в нормальных начальных условиях, достигается при полных затратах электрической энергии, равных 12,5 Дж. Данный результат противоречит результатам экспериментальных исследований, полученных в работе [7], где полные затраты энергии на прямое инициирование детонации превосходили на порядок данное значение. Полагается, что для корректного описания процесса инициирования детонации искровым разрядом необходимо учитывать неравновесное возбуждение молекул за фронтом ударной волны.

Для проверки данного предположения проведено моделирование расширения искрового канала для тех же исходных параметров, но с учетом влияния неравновесного колебательного возбуждения молекул на скорость протекания химических реакций. Соответственно, начальная температура смеси принята равной $T = 300$ К, начальное давление смеси равнялось $p = 0,11$ МПа. Электрическая разрядная цепь имела следующие параметры: $C = 0,25$ мкФ, $U_C = 10$ кВ, $L = 2$ мкГн, $R_C = 10$ мОм, $l_{sp} = 5$ мм. В расчетах параметр Парка принимался равным $s = 0,1$.

Получено следующее распределение термодинамических параметров (рисунок 1) вдоль радиальной координаты на время: 1 – $t_1 = 0,03$ мкс; 2 – $t_2 = 0,1$ мкс; 3 – $t_3 = 0,3$ мкс; 4 – $t_4 = 0,5$ мкс; 5 – $t_5 = 0,7$ мкс; 6 – $t_6 = 1$ мкс; 7 – $t_7 = 1,5$ мкс.

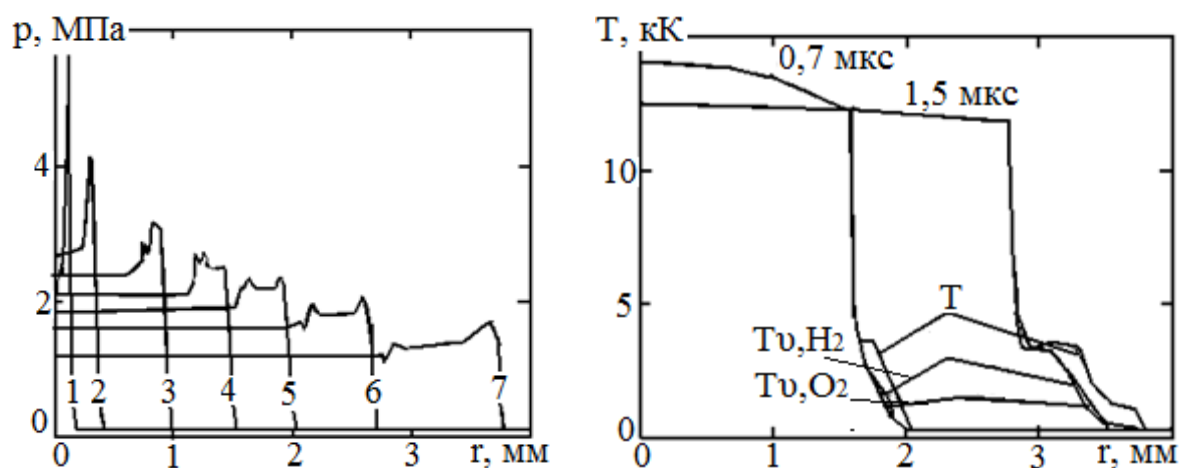


Рис. 1. Распределение давления p и температуры T вдоль радиальной координаты r в расчетном варианте

Получено, что инициирование детонации в заданных условиях в

исследуемой разрядной цепи не достигается, что совпадает с экспериментальными данными. Это отражается в снижении давления во фронте ударной волны ниже параметров детонационной волны Чепмена-Жуге, возрастании отрыва фронта ударной волны от фронта волны горения.

Сопоставление распределения давления, температуры и молярной плотности компонентов к моменту времени $t = 1,5$ мкс показывает, что за фронтом ударной волны первоначально происходит нагревание газовой смеси. При этом смесь начинает реагировать с задержкой, определяемой скоростью протекания процесса колебательной релаксации. Длительность периода задержки зависит от интенсивности ударной волны. Так, в расчетном варианте при скачке давления $p_{fr} = 2,5$ МПа во фронте ударной волны протяженность участка, связанного с периодом задержки воспламенения, составила около 0,2 мм. Снижение давления во фронте ударной волны до $p_{fr} = 1,8$ МПа привело к увеличению протяженности данного участка до 0,5 мм (рисунок 2).

Корректность принятого допущения о значении параметра s проверяется путем экспериментального исследования расстояния, возникающего между фронтом ударной волны и фронтом пламени, в зависимости от интенсивности волны.

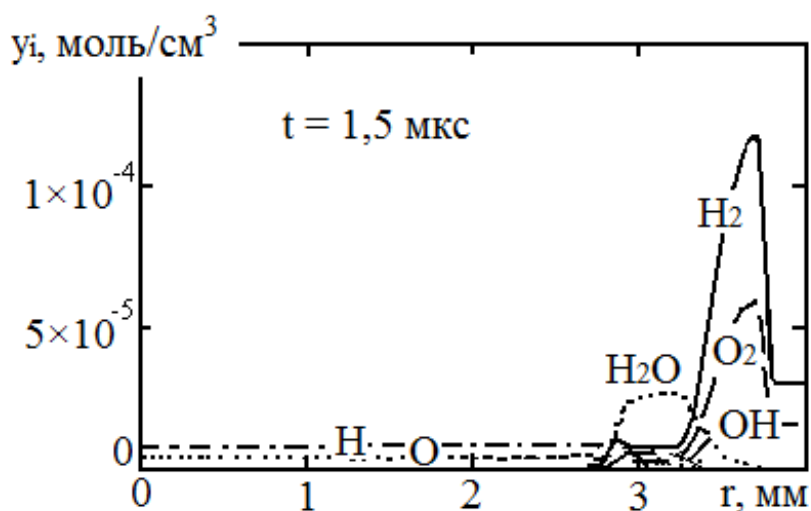


Рис. 2. Распределение молярной плотности компонентов в расчетном варианте вдоль радиальной координаты на время $t = 1,5$ мкс

По разработанной модели расширения искрового канала с учетом замедленного колебательного возбуждения молекул проведено исследование инициирования детонации при параметрах разрядной цепи, соответствующих условиям инициирования детонации в эксперименте [7]. В следующем расчетном варианте электрическая разрядная цепь имела следующие параметры: $C = 2$ мкФ, $U_C = 15$ кВ, $L = 0,9$ мкГн, $R_C = 10$ мОм, $l_{sp} = 5$ мм. Получено следующее распределение термодинамических параметров (рисунок 3) вдоль радиальной координаты на время: 1 – $t_1 = 0,3$ мкс; 2 – $t_2 = 0,5$ мкс; 3 – $t_3 = 1$ мкс; 4 – $t_4 = 1,5$ мкс; 5 – $t_5 = 1,85$ мкс; 6 – $t_6 = 2,2$ мкс.

В отличие от предыдущего расчетного варианта, в данном случае

имеет место инициирование детонации. То есть, имеется согласие с экспериментальными данными. Наличие детонации отражается в том, что фронт сгорания связан с фронтом ударной волны, так как скачок температуры происходит непосредственно за фронтом волны.

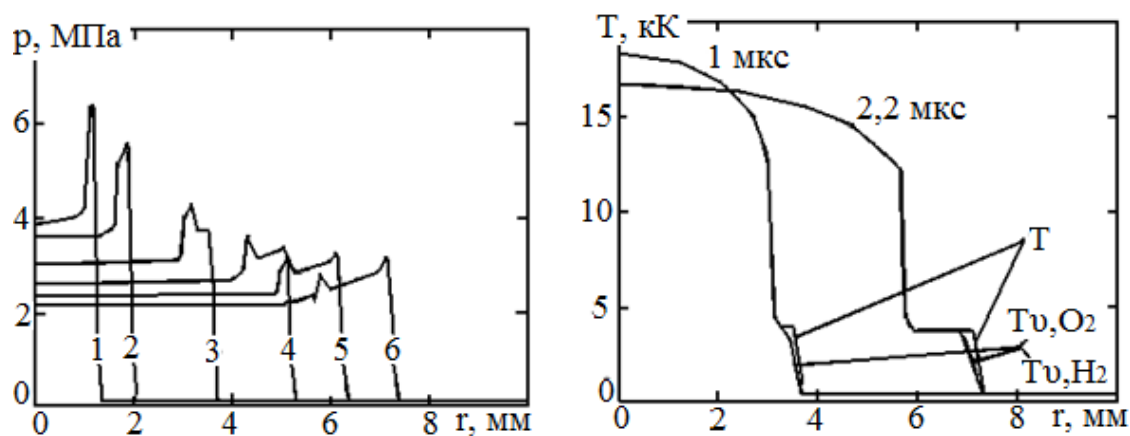


Рис. 3. Распределение давления p и температуры T вдоль радиальной координаты r в расчетном варианте

Распределение мольной концентрации компонентов подтверждает (рис. 4), что скачок температуры вызван сгоранием водорода, так как концентрация молекул воды возрастает за фронтом волны.

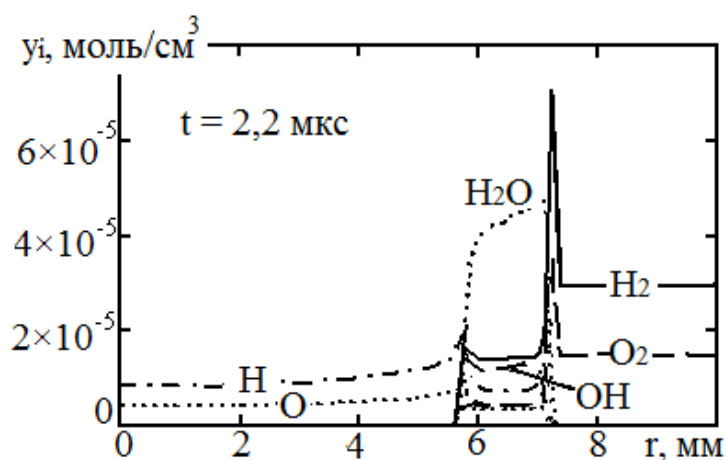


Рис. 4. Распределение молярной плотности компонентов в расчетном варианте вдоль радиальной координаты на время $t = 2,2$ мкс

Расчет скорости распространения детонационной волны, проведенный по оценке перемещения её фронта показывает, что данная скорость в расчетном варианте составляет $D \approx 2860$ м/с. Данное значение скорости менее отклоняется от экспериментальных значений, чем расчетная скорость по модели, не учитывающей неравновесное состояние газа. Температура продуктов детонации составила около 3750 К.

Так как сопротивление искрового канала является нелинейным (рис. 5), то представляет интерес сравнить количество энергии, выделяе-

мой в расчетном варианте, с энергией, рассчитываемой по результатам экспериментальных исследований [7].

По результатам экспериментальных исследований других исследователей данная величина составляет около 10 Дж [4]. Данное отличие поясняется тем, что при обработке экспериментальных результатов использовалось усредненное значение сопротивления искрового канала, что приводило к существенной ошибке при оценке результатов.

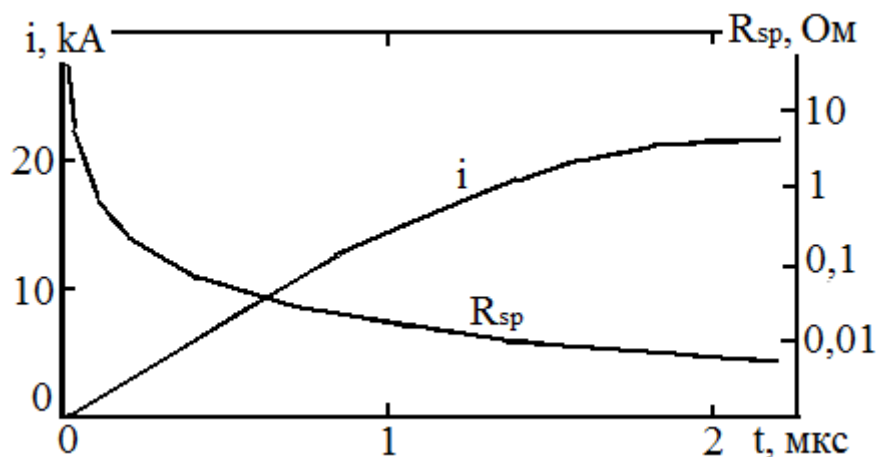


Рис. 5. Изменение разрядного тока i и сопротивления R_{sp} искрового канала в расчетном варианте

В расчетном варианте за $\frac{1}{4}$ периода разряда в искровом канале выделяется энергия, составляющая около 6,5 Дж (рис. 6). Также, при обработке экспериментальных результатов возникают сложности в определении доли энергии разряда теряемой в приэлектродных областях.

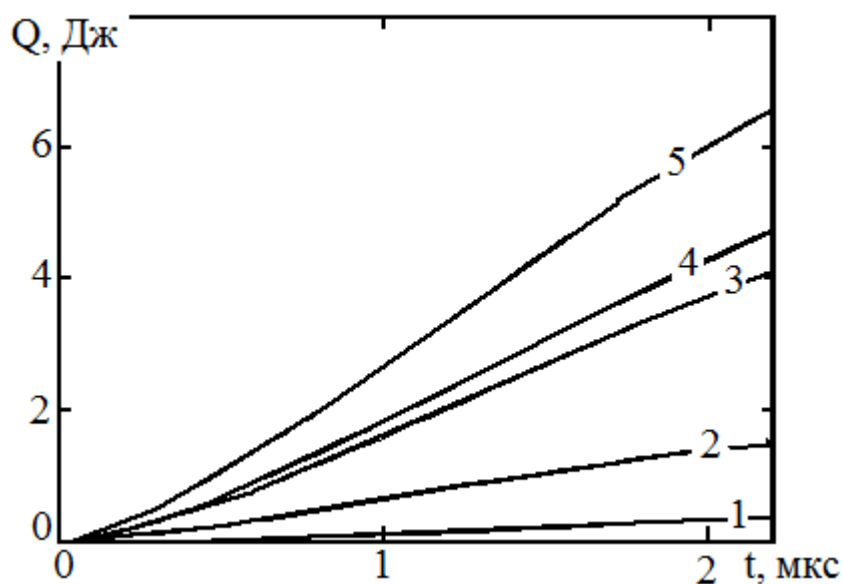


Рис. 6. Долевое распределение во времени энергии разряда, введенной в искру: 1 – потери энергии разряда на излучение; 2 – энергия, затраченная на ионизацию; 3 – энергия, затраченная на диссоциацию, 4 – кинетическая энергия газового потока; 5 – тепловая энергия

Вышеизложенное дает основание принять наличие удовлетворительного согласия между экспериментальными и расчетными результатами. Таким образом, за счет учета неравновесного колебательного возбуждения молекул за фронтом инициирующей ударной волны и влияния данного процесса на протекание химических реакций достигнуто удовлетворительное согласие результатов моделирования прямого инициирования детонации искровым разрядом с результатами экспериментальных исследований.

Задавая различные параметры электросиловых установок, начальные термодинамические параметры и состав горючих газов и используя разработанную модель, по результатам моделирования можно исследовать наличие или отсутствие инициирования детонации. В представленном варианте к параметрам электросиловых установок относится напряжение заряда, емкость конденсатора, индуктивность и сопротивление разрядной цепи. Наличие условий для прямого инициирования детонации свидетельствует о взрывоопасности промышленного объекта.

Выводы. Разработана модель для прогнозирования пожаро- и взрывоопасности электрифицированных промышленных объектов, в производственном цикле которых используются горючие газы. Оценка проводится на основе моделирования процесса прямого инициирования детонации искровым разрядом от электрической разрядной цепи произвольных параметров. При этом, особенностью разработанной модели является учет неравновесного колебательного возбуждения молекул за фронтом инициирующей ударной волны и влияния данного процесса на протекание химических реакций.

ЛИТЕРАТУРА

1. Senderowski C.Z. Bojar, Influence of Detonation Gun Spraying Conditions on the Quality of Fe-Al Intermetallic Protective Coatings in the Presence of NiAl and NiCr Interlayers, Journal of Thermal Spray Technology, 2009. – V. 18, Issue: 3. – P. 435-447.
2. A. Pawlowski, T. Czeppe, L. Major, C. Senderowski, Structure Morphology of Fe-Al Coating Detonation Sprayed onto Carbon Steel Substrate, Archives of Metallurgy and Materials, 2009. – V. 54, Issue: 3. – P. 783-788.
3. A. Pawlowski, C. Senderowski, W. Wołczyński, J. Morgiel, Ł. Major, Detonation deposited Fe-Al coatings, Part II: Transmission electron microscopy of interlayers and Fe-Al intermetallic coating detonation sprayed onto the 045 steel substrate, Archives of Metallurgy and Materials, 2011. – V. 56, Issue: 1. – P. 71-79.
4. Lee J.H.S. Initiation of gaseous detonation / J.H.S. Lee // Annual Review of Physical Chemistry. – 1977. – V. 28. – P. 75-104.
- Knystautas R. On the effective energy for direct initiation of gaseous detonations / R. Knystautas, J.H.S. Lee // Combustion and flame. – 1976. – V. 27. – P. 221-228.

5. Nettleton M.A. Gaseous Detonations: Their Nature, Effects and Control. London: Chapman and Hall Ltd, 1987.
6. Kamenskihs V. Measurement of critical energy for direct initiation of spherical detonations in stoichiometric high-pressure H_2-O_2 mixture / V. Kamenskihs, Ng HD, JHS Lee // Proc. 22nd ICDERS. – 2009. – P. 157.
7. Levin V. Initiation of gas detonation by means of electrical discharge / V. Levin, V. Markov, S. Osinkin // International Symposium on Combustion and Atmospheric Pollution: Proceeding. – 2003. – P. 290-293.
8. Vasil'ev A.A. Detonation initiation by charges of intermediate symmetry [Электронний ресурс]: Proceeding of 22nd ICDERS / A.A. Vasil'ev. – Rep. 4. – Minsk: Belarus, 25-31 July 2009.
9. Korytchenko K.V. Model of the spark discharge initiation of detonation in a mixture of hydrogen with oxygen / K.V. Korytchenko, E.V. Poklonskii, P.N. Krivosheev // Russian Journal of Physical Chemistry B, September 2014, Volume 8, Issue 5. – P. 692-700.
10. Korytchenko K.V. Numerical simulation of the energy distribution into the spark at the direct detonation initiation / K.V. Korytchenko, V. I. Golota, D.V. Kudin, O.V. Sakun // Problems of atomic science and technology, 2015, N3(97). – P. 154-158.
11. Petersen E. L. Reduced kinetics mechanisms for ram accelerator combustion / E.L. Petersen, R.K. Hanson // Journal of Propulsion and power. – 1999. – V. 15, No 4. – P. 591-600.

Получено редколлегией 10.10.2016

К.В. Коритченко, О.В. Сакун, Ц. Сендеровски

Модель для прогнозування пожежо- та вибухонебезпечності електрифікованих промислових об'єктів з горючими газами

Розроблено модель для прогнозування пожежо- та вибухонебезпечності електрифікованих промислових об'єктів, у виробничому циклі яких використовуються горючі гази. Модель дозволяє передбачити можливість виникнення вибуху горючих газів в залежності від параметрів електросилових установок, що використовуються у виробництві, на основі аналізу процесу ініціювання детонації іскровим розрядом.

Ключові слова: пожежонебезпечність, вибухонебезпечність, іскровий розряд, детонація в газах, горючі гази.

K.V. Korytchenko, O.V. Sakun, C. Senderowski

Prediction model of fire or explosion of electrified objects with combustible gases

A prediction model of a fire and an explosion risk of electrified industrial objects where the production cycle includes using of combustible gases was developed. The model predicts the possibility of an explosion of combustible gases in electric power plants depending on the parameters of equipment used in the production. The model is based on an analysis process of a detonation initiation by a spark discharge.

Keywords: fire risk, explosion risk, spark, detonation in gases, combustible gases.