

Е. В. Старовойтова, А. Д. Галеев, С. И. Поникаров

## ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ИСПАРЕНИЯ БЕНЗИНА С УЧЕТОМ ТЕПЛОМАССОПЕРЕНОСА В ЖИДКОЙ ФАЗЕ

Ключевые слова: многокомпонентная жидкость, испарение, конвекция, численное моделирование.

Представлена математическая модель испарения многокомпонентной жидкости (бензина) с поверхности аварийного пролива с учетом тепломассопереноса в жидкой фазе. Численно проведена оценка влияния процесса перемешивания во всем объеме жидкости на динамику испарения бензина при толщинах пролива 0,05 и 0,5 м при теплопритоке от солнечной радиации и без него.

Keywords: multicomponent liquid, evaporation, convection, numerical simulation.

The mathematical model of evaporation of multicomponent liquid (petrol) from accident spill surface with heat-and-mass transfer in liquid phase is presented. The estimation of influence of mixing in the whole volume of liquid on evaporation dynamic of petrol at spill thickness 0,05 and 0,5 m with and without solar radiation was carried out numerically.

### Введение

В последнее время в связи с ускорением темпов и расширением масштабов производственной деятельности все большее внимание уделяется вопросам анализа риска и оценке опасностей возможных аварий, которые могут иметь место на опасных производственных объектах.

Особый интерес представляет задача определения интенсивности испарения со свободной поверхности аварийного пролива таких сложных смесей, как бензин. Процесс испарения бензина протекает значительно сложнее химически однородных жидкостей, так как в первую очередь испаряются легкие фракции.

Ранее были разработаны и представлены модели парообразования сжиженных газов [1,2], модели испарения однокомпонентных [3], многокомпонентных жидкостей [4, 5], бинарных растворов [6].

В данной работе на базе численного моделирования проведена оценка влияния толщины пролива многокомпонентной жидкости и теплопритока от солнечной радиации на процесс перемешивания в слое жидкости и, как следствие, на динамику интенсивности ее испарения.

### Математическая модель испарения

При разработке модели испарения бензина были приняты следующие допущения:

- 1) бензин – идеальная смесь и, следовательно, подчиняется закону Рауля;
- 2) взаимное влияние процессов молекулярной диффузии компонентов не учитывается;
- 3) свободная граница жидкости при испарении не подвижна;
- 4) концентрационная конвекция не учитывается.

Бензин представлялся дискретной смесью, состоящей из 12 условных компонентов (см. табл.).

Зависимость давления насыщенных паров компонентов бензина от температуры аппроксимировалась полиномиальной функцией, полученной с помощью программы ChemCAD [7]:

$$P_{Vi}(T_s) = A_{0,i} + A_{1,i}T_s + A_{2,i}T_s^2 + A_{3,i}T_s^3 + A_{4,i}T_s^4,$$

где  $P_{Vi}(T_s)$  – давление насыщенных паров компонента бензина при температуре  $T_s$ , Па;  $A_0, A_1, A_2, A_3, A_4$  – коэффициенты для расчета давления насыщенных паров компонентов бензина;  $T_s$  – температура бензина, К.

Массовый поток  $i$ -ого компонента с поверхности пролива определялся из уравнения (1), с учетом поправки на стефановский поток [8]. Данное уравнение справедливо в случае отсутствия возмущающего действия испаряющегося компонента на структуру потока над проливом.

$$W_i = \frac{k_i \cdot M_i \cdot P_{Vi}(T_s) \cdot K_S}{R_0 \cdot T_0}, \quad (1)$$

где  $M_i$  – молекулярная масса  $i$ -ого компонента, кг/моль;  $R_0$  – универсальная газовая постоянная, Дж/(моль·К);  $K_S$  – поправка на Стефановский поток.

Коэффициент массоотдачи  $k_i$  рассчитывается по формуле [9]:

$$k_i = 0,029 \cdot U^{0,78} \cdot d^{-0,11} \cdot Sc_i^{-0,67} \quad (2)$$

где  $U$  – скорость ветра, м/час;  $d=2$  м – диаметр пролива, или другой характерный геометрический размер, м;  $Sc_i$  – число Шмидта, которое определяется по следующему уравнению:

$$Sc_i = \frac{\mu}{\rho \cdot D_i},$$

где  $\mu$  – вязкость газа над проливом, кг/(м·с);  $\rho$  – плотность газовой фазы над проливом, кг/м<sup>3</sup>;  $D_i$  – коэффициент молекулярной диффузии компонента в газовой фазе, м<sup>2</sup>/с.

Температура тонкого приповерхностного слоя жидкости  $T_s$  определяется из уравнения теплового баланса с учетом испарительного охлаждения  $q_{evap}$  и естественного нагрева пролива за счет солнечной радиации  $q_s$ , а также за счет тепла глубинных слоев жидкости  $q_b$ :

$$\frac{dT_s}{dt} = \frac{q_s + q_b - q_{evap}}{C_{p,i} \cdot m_{liq}},$$

где  $C_{p,i}$  – удельная теплоемкость жидкости, Дж/(кг·К);  $m_{liq}$  – масса жидкости, отнесенная к единице объема поверхностного слоя, кг/м<sup>3</sup>;  $t$  – время.

Тепловой поток от солнца с учетом отражения от зеркала пролива определялся по формуле [9]:

$$q_s = 1110 \cdot (1 - 0,0071 \cdot \omega^2) \cdot (\sin\varphi - 0,1)$$

Зависимость  $\varphi$  от временных параметров, т.е. от времени года и суток, а также от широты местности имеет вид [10]:

$$\sin\varphi = \sin\varphi_i \cdot \sin\vartheta - \cos\varphi_i \cdot \cos\vartheta \cdot \cos(\pi \cdot \tau/12)$$

$$\varphi_i = 23,5 \cdot (1 - |n - 6|/3),$$

где  $\varphi$  — высота солнцестояния, угловые градусы;  $\tau$  — текущее время суток, ч;  $\omega$  — коэффициент облачности, изменяющийся от 0 до 10 (для безоблачного неба  $\omega=0$ );  $\vartheta$  — широта местности, угловые градусы;  $n$  — номер месяца года;  $i$  — январь и т.д.

В работе принималось, что  $q_s=651$  Вт/м<sup>2</sup>. В случае, когда солнечная радиация отсутствует, составляющая  $q_s=0$ .

Теплообменом с атмосферным воздухом пренебрегали, ввиду малых значений соответствующего теплового потока [11].

Поле температур в глубинных слоях жидкости получено путем решения системы двухмерных нестационарных уравнений Навье-Стокса, неразрывности и сохранения энергии в приближении Буссинеска [12]:

$$\frac{\partial u_i}{\partial x_i} = 0$$

$$\frac{\partial u_i}{\partial t} + \frac{\partial(u_i u_j)}{\partial x_j} = -\frac{1}{\rho_0} \frac{\partial p}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left( \nu \frac{\partial u_i}{\partial x_j} \right) + \beta(T_0 - T)g_i$$

$$\frac{\partial T}{\partial t} + \frac{\partial(u_i T)}{\partial x_i} = \frac{\partial}{\partial x_i} \left( a \frac{\partial T}{\partial x_i} \right)$$

$$\frac{\partial C_i}{\partial t} + \frac{\partial(u_i C_i)}{\partial x_i} = \frac{\partial}{\partial x_i} \left( D_i \frac{\partial C_i}{\partial x_i} \right),$$

где  $u$  – компонент вектора скорости;  $x$  – направление координат;  $p$  – давление;  $\rho_0$  – плотность жидкости;  $\nu$  – коэффициент кинематической вязкости;  $\beta$  – коэффициент температурного расширения, 1/К;  $T$  – температура;  $g$  – ускорение свободного падения;  $a$  – коэффициент теплопроводности;  $C$  – концентрация компонента.

Модель Буссинеска рассматривает плотность как постоянное значение во всех решаемых уравнениях, за исключением составляющей плавучести в уравнении моментов:

$$(\rho - \rho_0)g \approx -\rho_0\beta(T - T_0)g.$$

Это уравнение получено с использованием аппроксимации Буссинеска  $\rho = \rho_0(1 - \beta\Delta T)$ , для того, чтобы исключить  $\rho$  из составляющей плавучести.

Отток теплоты при испарении равен:

$$q_{\text{evap}} = \sum (-W_i \cdot \Delta H_i)$$

где  $\Delta H_i$  – удельная теплота парообразования  $i$ -ого компонента, Дж/кг.

При определении теплового потока от подстилающей поверхности для твердого слоя решалось уравнение теплопроводности:

$$C_{pn}\rho_n \frac{\partial T}{\partial t} = \lambda_n \left( \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial y^2} \right).$$

На границе, разделяющей твердое тело и жидкость ( $y=0$ ), выполняется условие равенства тепловых потоков:

$$\lambda_l \frac{\partial T}{\partial y} \Big|_{y=+0} = -\lambda_n \frac{\partial T}{\partial y} \Big|_{y=-0}.$$

При моделировании использовалось предположение, что теплофизические свойства жидкости и подстилающего слоя незначительно зависят от температуры.

## Результаты численных расчетов

Численные исследования проводились при толщине пролива жидкости  $h = 0,05$  и  $0,5$  м, а также при учете нагрева поверхностного слоя за счет солнечной радиации и без нее.

Начальная температура жидкости и подстилающего слоя принималась равной 303 К, скорость ветра  $U$  в уравнении (2) равна 1 м/с.

Для расчета принимался состав бензина, приведенный в табл. 1.

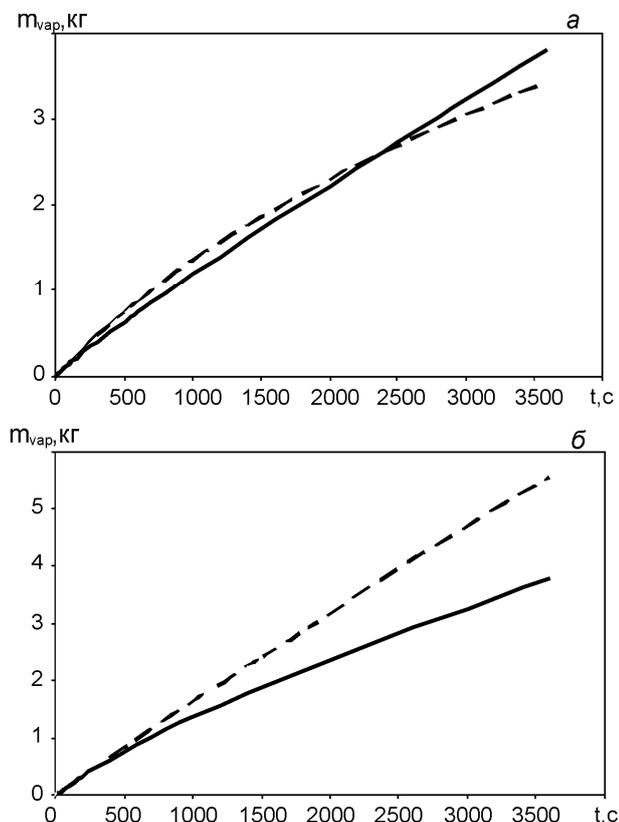
Таблица 1 – Состав бензина

№ п/п	Название компонента	Массовая доля, в %	Молекулярная масса, кг/моль
1	пропан	0,00081	44
2	н-бутан	0,014	58
3	бутен	0,0086	56
4	н-пентан	0,0694	72
5	NBP61	0,0069	82
6	NBP77	0,146	90
7	NBP92	0,133	97
8	NBP107	0,121	105
9	NBP126	0,159	116
10	NBP150	0,133	129
11	NBP173	0,107	143
12	NBP199	0,10129	160

Зависимость массы испарившейся жидкости из пролива от времени приведена на рисунке 1. Изменения температуры бензина со временем показаны на рисунке 2.

Как видно из рис. 1, при малой толщине пролива ( $h=0,05$ м) значения  $m_{\text{vap}}$  отличаются незначительно, несмотря на то, что температура поверхностного слоя бензина при учете теплопритока от солнечной радиации выше, чем при  $q_s=0$  (рис.2а). При толщине пролива  $h=0,5$ м и отсутствия нагрева поверхностного слоя жидкости от солнечной радиации величина массы испарившейся жидкости выше на 32%, чем при

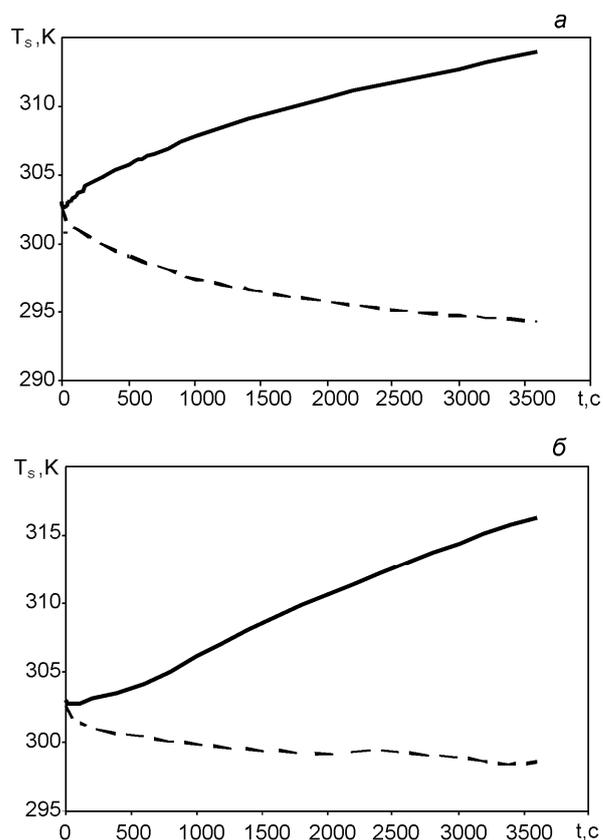
наличии нагрева (рис.1б). Это объясняется тем, что при  $q_s=0$  вследствие испарения жидкости происходит охлаждение поверхностного слоя и увеличения его плотности. При этом тяжелые массы жидкости увлекаются вглубь пролива, а более легкие теплые массы направляются к поверхности. Благодаря градиентам плотности происходит интенсивное перераспределение массы и энергии в рассматриваемой области.



**Рис. 1 - Масса испарившегося бензина при  $h = 0,05$  м (а) и  $0,5$  м (б) при скорости ветра 1 м/с:**  
 — с учетом притока тепла от солнечной радиации;  
 - - - без учета притока тепла от солнечной радиации

Конвективные потоки способствуют выравниванию температуры и концентрации по высоте слоя. При наличии солнечного потока поверхностный слой жидкости нагревается (рис.2б), становится легче и препятствует перемешиванию жидкости по высоте слоя, наблюдается явление устойчивой стратификации.

Без подвода тепла к поверхности, температура жидкости вследствие испарения падает в среднем на  $9^{\circ}\text{C}$  (при  $h=0,05\text{м}$ ) и  $4^{\circ}\text{C}$  (при  $h=0,5\text{м}$ ), при подводе теплоты температура жидкости повышается соответственно на 11 и  $13^{\circ}\text{C}$  (рис. 2).



**Рис. 2 - Средняя температура бензина  $h = 0,05$  м (а) и  $0,5$  м (б) при скорости ветра 1 м/с:**  
 — с учетом притока тепла от солнечной радиации;  
 - - - без учета притока тепла от солнечной радиации

## Вывод

Таким образом, полученные результаты свидетельствуют о том, что нагрев поверхностного слоя пролива бензина приводит к ослаблению эффекта конвективного перемешивания в слое жидкости, что, в свою очередь, приводит к уменьшению интенсивности испарения.

Установлено, что учет тепломассопереноса в жидкой фазе имеет важное значение при оценке последствий аварийных проливов многокомпонентных жидкостей.

## Литература

1. Е.В. Старовойтова, А.Д. Галеев, С.И. Поникаров, *Вестник Казан. технол. ун-та*, **14**, 1, 323-325 (2011).
2. Е.В. Старовойтова, А.Д. Галеев, С.И. Поникаров, *Вестник Казан. технол. ун-та*, **15**, 4, 110-112 (2012).
3. С.И. Поникаров, А.Д. Галеев, М.А. Долгова, *Вестник Казан. технол. ун-та*, **12**, 4, 187-192 (2009).
4. А.Д.Галеев, С.И.Поникаров, *Пожаровзрывобезопасность*, **19**, 2, 22-27 (2010).
5. A.D. Galeev, S.I. Ponikarov, *J. of Engineering Physics and Thermophysics*. 2011. С. 1-10.
6. А.А. Салин, А.Д. Галеев, С.И. Поникаров, *Вестник Казан. технол. ун-та*, **13**, 8, 445-447 (2010).
7. Chemstations Inc. ChemCad 5.0. User's Guide, 2002.

8. C.K. Law, *Combustion physics*. Cambridge University Press, 2006.
9. P. I.Kawamura, D. Mackay, *Journal of Hazardous Materials*, **15**, 3, 343-364 (1987).
10. В.П.Воротилин, В.Д. Горбулин, *Химическая промышленность*, **6**, 354-359 (1992).
11. Е. В. Старовойтова, А. Д. Галеев, С. И. Поникаров, *Пожаровзрывобезопасность*, **2**, 24-28 (2011).
12. А.Д. Галеев, С.И. Поникаров, М.А. Долгова, *Химическая промышленность сегодня*, **2**, 43-48 (2012).

---

© **Е. В. Старовойтова** – к.т.н., асс. каф. машин и аппаратов химических производств КНИТУ, starovojtova@inbox.ru;  
**А. Д. Галеев** – к.т.н., доцент той же кафедры; **С. И. Поникаров** – д.т.н., проф., зав. каф. машин и аппаратов химических производств КНИТУ.