

# 超临界二氧化碳 BLEVE 机理数值模拟

张德平<sup>1</sup>, 赵耀<sup>2</sup>, 史晓慧<sup>2</sup>, 刘振翼<sup>2</sup>

1. 中国石油吉林油田采油工艺研究院, 松原 138000

2. 北京理工大学爆炸科学与技术国家重点实验室, 北京 100081

**摘要** 碳捕集与贮存及提高油田采收率(CCS-EOR)技术是节能减排的有效手段。本文以超临界CO<sub>2</sub>为研究对象,采用数值模拟的方法(使用FLUENT软件及可压缩形式的N-S方程,采用SIMPLEC求解有限差分方程,选用标准k-ε湍流模型,多相流模型选用FLUENT自带的VOF(volume of fluid)模型),对其在注入油管内发生沸腾液体扩展蒸气云爆炸(BLEVE)事故的初期过程进行模拟计算,建立并验证合理可靠的数学模型,分析容器内流场演化过程及压力、温度的变化过程,揭示超临界CO<sub>2</sub> BLEVE过程的发生机理与变化规律。

**关键词** 超临界二氧化碳;沸腾液体扩展蒸气云爆炸;爆炸机理;数值模拟

**中图分类号** X937

**文献标志码** A

**doi** 10.3981/j.issn.1000-7857.2014.25.007

## Numerical Simulation of BLEVE Mechanism of Supercritical Carbon Dioxide

ZHANG Deping<sup>1</sup>, ZHAO Yao<sup>2</sup>, SHI Xiaohui<sup>2</sup>, LIU Zhenyi<sup>2</sup>

1. Production Technology Research Institute of Jilin Oilfield of PetroChina, Songyuan 138000, China

2. State Key Laboratory of Explosion Science & Technology, Beijing Institute of Technology, Beijing 100081, China

**Abstract** Greenhouse effect and energy shortage are becoming increasingly serious problems with rapid development of the oil-refining industry. Oil carbon capture and storage and the enhanced oil recovery (CCS-EOR) is developed to alleviate the shortage. A simulation was carried out using CFD method in this paper. The FLUENT software was used, and the SIMPLEC method and standard turbulent model were adopted to solve compressible N-S equations. VOF (volume of fluid) model was chosen as the multiphase model. The numerical simulation was based on the physical model and suitable mathematical model. A model was established to illustrate the mechanism and rule of supercritical CO<sub>2</sub> BLEVE, providing technical support to accident prevention and reference for future research.

**Keywords** supercritical CO<sub>2</sub>; boiling liquid expanding vapor explosion; blast mechanism; numerical simulation

工业和人类生活过程中排放的温室气体CO<sub>2</sub>使全球气候变暖,人类赖以生存的地球环境日趋恶化,捕集与贮存及提高油田采收率技术(carbon capture and storage-enhanced oil recovery, CCS-EOR)的推广和应用不仅能够变废为宝,而且可为节能减排作出贡献。石油行业在CCS-EOR方面的最大优势是可将CO<sub>2</sub>驱油与CO<sub>2</sub>埋存相结合,实现社会效益与经济效益的双赢。一般认为,CO<sub>2</sub>是一种无色无味的微毒气体,在自然状态下是无害的,但是,CCS-EOR技术处理的是高浓

度和高压下的超临界CO<sub>2</sub>,一旦在运输、注入和封存过程的任何环节发生失误,很有可能发生严重的CO<sub>2</sub>沸腾液体扩展蒸气云爆炸(boiling liquid expanding vapor explosion, BLEVE)<sup>[1]</sup>,产生的高压冲击波、高速飞行破片、高浓度窒息性气体以及迅速相变引起的冻伤不仅会危及现场操作人员的人身安全,导致生产设备设施严重破损,甚至会对附近的居民和生态系统造成不良影响。

目前的研究主要集中在外界热作用下容器热力响应和

收稿日期:2014-06-12;修回日期:2014-07-27

基金项目:国家科技重大专项(2011ZX05054)

作者简介:张德平,工程师,研究方向为油气田开发技术与应用,电子信箱:swpizhdping@163.com

引用格式:张德平,赵耀,史晓慧,等.超临界二氧化碳BLEVE机理数值模拟[J].科技导报,2014,32(25):46-50.

模型研究<sup>[2-4]</sup>、BLEVE泄压过程的影响<sup>[5-7]</sup>、液体温度分层对BLEVE过程的影响<sup>[8,9]</sup>和微观运动演化机理的研究<sup>[10]</sup>等方面。这些研究大多着眼于宏观方面,通过实验研究的手段,局限性较大。另外,有关碳氢化合物如液化天然气、丙烷的BLEVE现象研究比较深入,包括点火、起爆过程等,而关于超临界CO<sub>2</sub> BLEVE的研究在理论与实验方面都比较欠缺。因此,通过数值模拟的方法研究超临界CO<sub>2</sub> BLEVE现象,有利于更好的探究BLEVE机理和过程,便于确定合适的防灾减灾措施。

## 1 数值模拟过程

本文选用FLUENT模拟软件,使用可压缩形式的N-S方程,采用SIMPLEC求解有限差分方程,选用标准k-ε湍流模型。多相流模型选用FLUENT自带的VOF(volume of fluid)模型,对相界面进行重构,计算时需考虑体积力的影响<sup>[11]</sup>。由于软件本身并不带有计算相变的模型,需要用户自行加入所需的UDF(user-defined function)程序段。

### 1.1 基本假设

BLEVE是一个非常复杂的物理变化过程,是相间热传递、热交换、蒸发凝结等多种过程的相互作用,以及系统能量释放和储罐约束等耦合作用共同导致的结果,有必要做出合理简化和假设:1) 将物理模型采用简化的二维矩形模型;2) 介质温度分布均匀,各处相等;3) 假设容器内所有气体为理想气体,气体物性参数是随温度变化的;4) 不考虑热作用时,所有壁面设定为绝热不可移动壁面;考虑热作用时,壁面为热传导壁面,且壁面各处温度恒定。

### 1.2 物理模型

如图1所示,以二维矩形表示一个高度为300 mm,内径

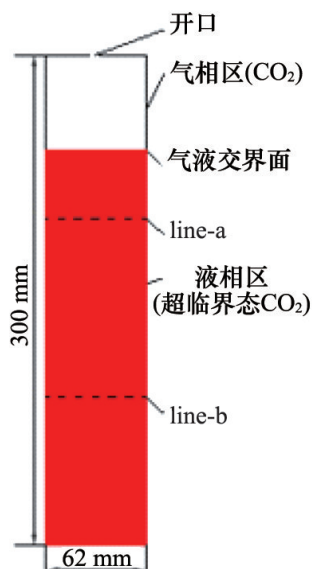


图1 物理模型

Fig. 1 Physical model

为62 mm柱形压力容器的纵向截面,在容器上表面中心处有圆形开口。在三等分的位置设置监测线a和b,采用单元面平均值的方法(facet average)监测温度和压力随时间的变化过程。

### 1.3 用户自定义函数UDF

由于FLUENT本身并不带有计算相变的模型,因此需加入UDF程序段,用以计算油管内部BLEVE过程中的气液相变过程,气液互换的计算关系为<sup>[12]</sup>

$T > T_{sat}$  时(沸腾状态)

$$R_l = -\lambda \alpha_l \rho_l \frac{|T - T_{sat}|}{T_{sat}}, R_v = \lambda \alpha_v \rho_v \frac{|T - T_{sat}|}{T_{sat}} \quad (1)$$

$T < T_{sat}$  时(凝结状态)

$$R_l = \lambda_l \alpha_l \rho_l \frac{|T - T_{sat}|}{T_{sat}}, R_v = -\lambda_v \alpha_v \rho_v \frac{|T - T_{sat}|}{T_{sat}} \quad (2)$$

式中,  $R_l$ ,  $R_v$  分别为液相和气相质量源项;  $\alpha_l$ ,  $\alpha_v$  分别为液相和气相体积分数;  $\rho_l$ ,  $\rho_v$  分别为液体和气体密度;  $T$  为系统温度;  $T_{sat}$  为饱和温度;  $\lambda_l$ ,  $\lambda_v$  为参数,称为质量传输时间松弛因子,根据文献[13],取  $\lambda_l = \lambda_v = 0.1$ 。

两相界面处的换热量计算式为

$$q = R_l h_{fg} \quad (3)$$

式(3)表示超临界态CO<sub>2</sub>的气化潜热。

蒸发和冷凝速率由下式确定<sup>[14]</sup>

$$\Gamma_{lv} = \frac{h_{lv} A_{lv} (T_{sat} - T_l)}{h_{fg}}, \Gamma_{vl} = \frac{h_{lv} A_{lv} (T_l - T_{sat})}{h_{fg}} \quad (4)$$

式中,  $h_{lv}$  为换热系数,  $A_{lv}$  为单元体积的截面面积。

### 1.4 初始条件及边界条件

容器内实验介质为超临界态CO<sub>2</sub>和饱和CO<sub>2</sub>蒸气。取容器顶部开口开启的瞬间为计算初始时间,记为 $t=0$ 时刻,整个系统的初始条件与边界条件为:

- 1) 容器内液态区域为超临界CO<sub>2</sub>,初始充装量为整个容器高度的90%,气相区域为饱和CO<sub>2</sub>蒸气;
- 2) 系统初始温度设定为404.15 K,且容器内所有区域温度分布均匀;
- 3) 气相区初始压力为超临界点的饱和蒸气压7.38 MPa;
- 4) 开口直径  $D = 0.6$  mm,位于压力容器顶部中心位置,边界条件设定为压力出口;
- 5) 不考虑外界热作用,壁面设定为不可移动的绝热壁面;
- 6) 超临界态CO<sub>2</sub>参数:密度为463.9 kg/m<sup>3</sup>,定压比热容为842 J/(kg·K),导热系数为0.016 W/(m·K),黏度为4.04×10<sup>-5</sup> kg/(m·s),标准焓为-4.129×10<sup>8</sup> J/(kg·mol)。

## 2 结果与讨论

### 2.1 流场变化过程

图2显示了开口打开后,容器内部气液两相流动状态的变化过程。左侧的状态图表示超临界CO<sub>2</sub>的体积分数。

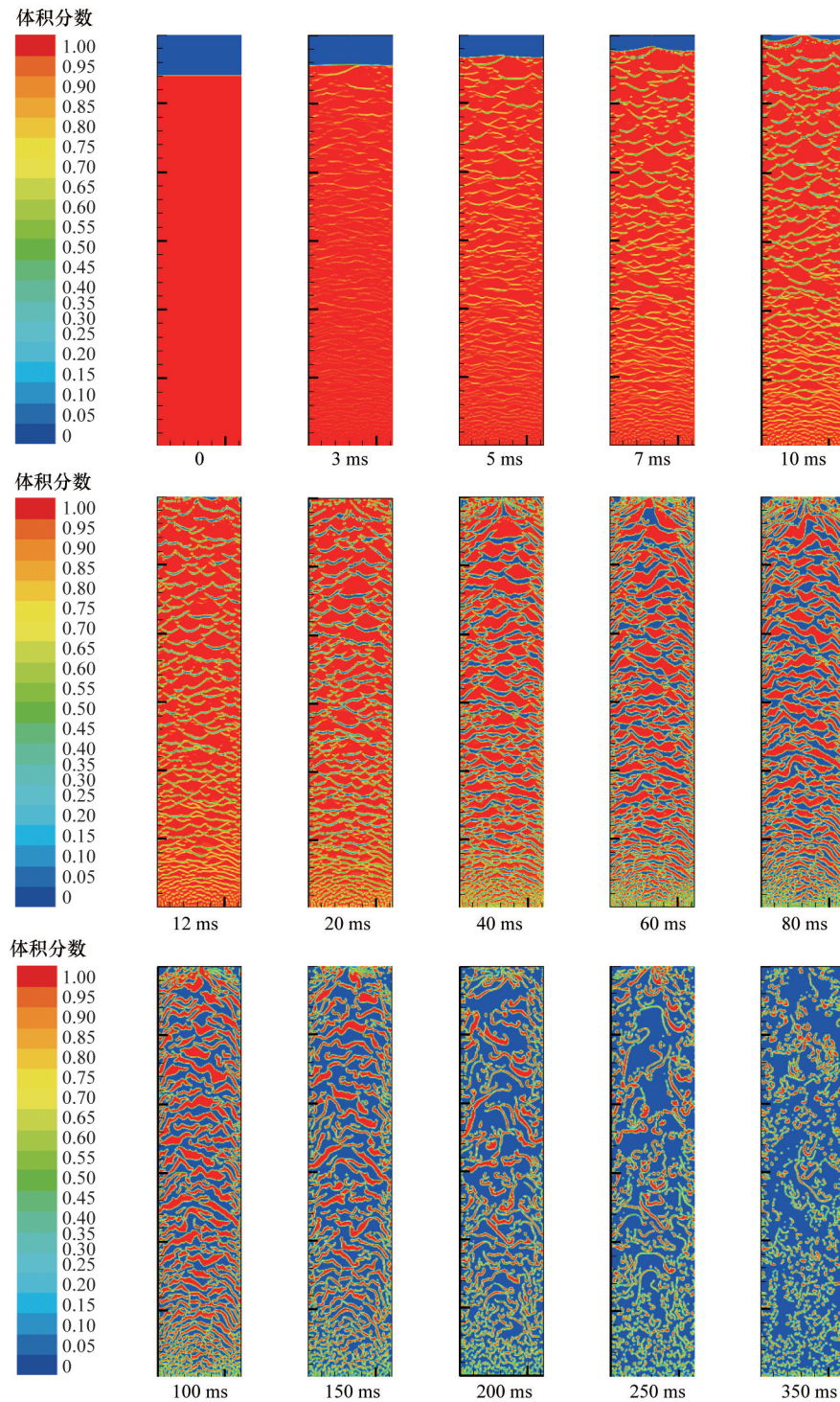


图2 气液两相流流场随时间的变化过程

Fig. 2 Change process of gas-liquid flow field with time

从图2可以看出,初始状态时,容器内介质处于热力学平衡的状态,上部气相区为饱和 $\text{CO}_2$ 蒸气,下部液相区为过热态超临界 $\text{CO}_2$ 。

开口开启后,容器内压力远大于容器外部大气压力,容器内气相空间的介质迅速向外泄放,导致气相空间压力开始下降。波传递到两相界面后,液面压力下降,使超临界 $\text{CO}_2$ 瞬

间处于过热状态,3 ms时,液相区产生肉眼可见的气泡。随着介质释放大导致压力下降,两相流层急速向上扩张,同时随着稀疏波在液相内继续传播,液体过热度持续增大,两相流层开始迅速地双向扩展,分别挤压气相空间和液相空间。

可以看出,此后一段时期内,整个两相流层的扩展呈现

不断扩张的状态, 约在 10 ms 时, 两相流层扩展至容器上壁面。这段时间内, 由于沸腾逐渐加剧, 加上两相流层对容器上壁面的冲击, 使得压力升高的趋势远大于介质泄漏使压力下降的趋势, 容器内压力表现为急剧增大。12 ms 时压力升至最大, 夹杂着液滴的气液两相流从开口迅速喷出, 整个容器内部区域表现为紊乱无序的剧烈过热沸腾, 气液两相相互穿插, 无法明确分辨两相边界, 整体呈现无序的状态。此时, 压力响应为整个超临界 CO<sub>2</sub> BLEVE 过程中的最大值, 对容器壁面造成巨大冲击, 因此, 压力峰值的大小是判定 BLEVE 过程危险度的一个重要指标, 也是本文的重点研究参数。

12 ~ 20 ms 时间段内, 流场形态相对比较稳定, 容器内介质基本处于混乱无序的沸腾状态, 此时容器受流体载荷作用最为强烈, 极易产生变形甚至破裂。此后, 随着液体气化消耗能量增多, 液体温度降低, 过热程度减小, 加上介质的持续泄放, 使容器内压力升高的趋势逐渐小于压力降低的趋势, 这就使气泡生成的过程受到抑制, 两相流层的密度减小, 扩展速度降低, 推动能力减弱, 宏观上导致热沸腾也随之削弱, 容器内压力呈现下降状态。

约 80 ms 之后, 随着介质不断泄放, 介质所含能量逐渐减少, 液体过热度减小, 相变速率逐渐缓慢, 容器内两相流密度减小, 沸腾最终达到稳定减弱的状态, 压降过程也更为稳定和缓慢。约 150 ms 时, 容器内两相流中气相区域占较大比

重, 因为 CO<sub>2</sub> 在常温常压下为气态, 故可以推测, 随着时间的推移, 容器内压力与温度持续下降, 容器内液滴量逐渐减少, 最终可全部转化为气态 CO<sub>2</sub>。

## 2.2 压力场变化过程

从图 3 中可以看出, 两条监测线的压力变化情况极为相似, 可见超临界 CO<sub>2</sub> BLEVE 的初期过程迅猛激烈, 容器内各处压力变化情况几乎相同, 故后文均采用线 a 处的模拟结果进行分析。

压力的变化过程可以分为两个阶段, 增压阶段和降压阶段。t=0 时刻开口打开后, 气相区介质瞬间开始释放, 容器内压力迅速降低, 当稀疏波传递到液相时, 液体发生过热沸腾, 两相流层以高速向上膨胀, 最终猛烈撞击到容器的上壁面, 其对壁面的冲击被称为“液体锤”, 具有严重的破坏性, 甚至可能导致容器的瞬间整体破裂。t 为 12 ms 时, 两相流膨胀至容器顶部, 超临界 CO<sub>2</sub> BLEVE 过程出现最大压力约为 56 MPa, 该过程如图 3(a) 中 A 区所示。压力达到峰值后, 高压下的介质的泄放速率也会增大, 系统内总能量随之减少, 另外整体温度的降低导致超临界 CO<sub>2</sub> 过热度减小, 这一系列因素的共同作用, 导致容器内沸腾削弱, 两相流密度降低, 两相流向上的推动力减小, 从而使容器内压力下降的趋势逐渐超过压力上升的趋势, 宏观上表现为下降趋势, 如图 3(a) 中 B 区所示。

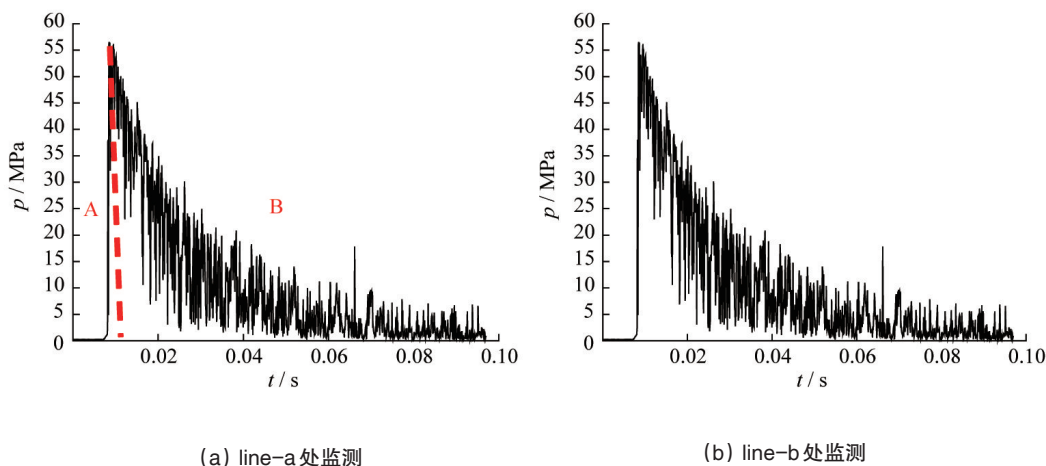


图 3 压力响应

Fig. 3 Pressure response

## 2.3 温度场变化过程

两条监测线处的温度响应情况相似, 如图 4 所示。可见在超临界 CO<sub>2</sub> BLEVE 过程中, 压力会发生剧烈变化, 而容器内温度的变化则相对比较稳定。

结果显示, 在 0~8 ms 时, 温度保持不变, 该段时间内气相

区域泄放, 两相流急速膨胀扩张, 温度保持相对恒定。8 ms 以后, 随着介质不断释放, 相变过程持续进行, 100 ms 内系统温度下降约为 4 K, 呈现单调下降, 未出现剧烈波动。超临界 CO<sub>2</sub> BLEVE 过程是一个吸热过程, 若存在外围火焰的作用, BLEVE 过程中介质将会吸收更多的能量, 造成更大危害。

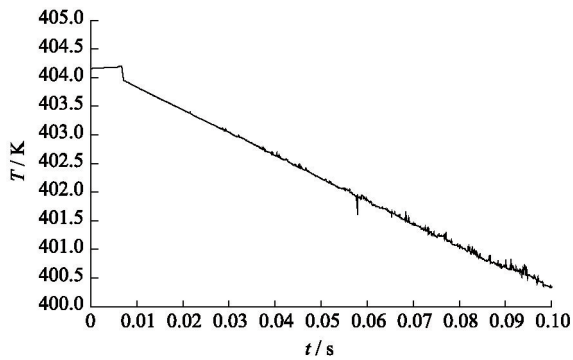


图4 温度响应

Fig. 4 Temperature response

### 3 结论

根据模拟计算的基本条件假设及所采用的物理和数学模型,研究了构建用户自定义函数(UDF)的相关内容,详述了建模的方法与过程,从流场、压力场与温度场的变化过程3个方面,阐述了超临界CO<sub>2</sub> BLEVE的机理与过程。

1) 开口瞬间压力骤降,过热液相发生剧烈沸腾,形成急剧膨胀和高速上升的两相流层,随着介质释放,相变逐渐衰弱,直至所有液体均转化为气态。

2) 压力场变化可以分为两个阶段:增压阶段和降压阶段。第一阶段是在开口打开后的短时间内发生的,相变过程产生大量CO<sub>2</sub>气体,不断扩张的两相流挤压气相空间,导致压力急剧增大;在系统内压力达到峰值后,由于压力、温度以及介质释放等因素的共同作用,液体沸腾开始逐渐削弱,宏观上表现为下降趋势。

3) 整个过程,系统温度的变化相对稳定,呈单调递减的趋势。

#### 参考文献 (References)

[1] Abbasi T, Abbasi S A. The boiling liquid expanding vapor explosion (BLEVE): Mechanism, consequence assessment, management[J]. Journal of Hazardous Materials, 2007, 141(3): 489-519.

[2] Reid R C. Possible mechanism for pressurized-liquid tank explosion of BLEVEs[J]. Science, 1979, 203(4386): 1263-1265.

[3] Venart J E S, Sousa A C M, Steward R D, et al. Experiments on the physical modeling of LPG tank cars under accident conditions[C]//

Proceedings of International Conference on Storage and Transport of LPG and LNG. Brugge: [S.l.], 1984: 33-41.

[4] Moddie K, Cowly L T, Denny R B, et al. Fire engulfment tests on a 5 tone LPG tank[J]. Journal of Hazardous Materials, 1988, 20(1): 55-71.

[5] 俞昌铭, Venart J E S. 压力陡降及容积加热条件下气-液两相系统瞬态分析[J]. 工程热物理学报, 1994, 15(2): 206-209.

Yu Changming, Venart J E S. Transient analysis of a volumetric heating system during depressurization[J]. Journal of Engineering Thermophysics, 1994, 15(2): 206-209.

[6] Baum M R. Rocket missiles generated by failure of a high pressure liquid storage vessel[J]. Journal of Loss Prevention in the Process Industries, 1998, 11: 11-24.

[7] 陈思凝. 沸腾液体膨胀蒸汽爆炸(BLEVE)动力演化机理的小尺寸模拟试验研究[D]. 合肥: 中国科技大学, 2007.

Chen Sining. Small scale experimental study on boiling liquid expanding vapor explosions mechanism[D]. Hefei: University of Science and Technology of China, 2007.

[8] Aydemir N U, Magapu V K, Sousa A C M, et al. Thermal response analysis of LPG tanks exposed to fire[J]. Journal of Hazardous Materials, 1988, 20: 239-262.

[9] 弓燕舞, 林文胜, 张荣荣, 等. 热分层对蒸汽爆炸影响的实验研究[J]. 工程热物理学报, 2004, 25(6): 925-929.

Gong Yanwu, Lin Wensheng, Zhang Rongrong. Experimental study on the influence of thermal stratification on BLEVE[J]. Journal of Engineering Thermophysics, 2004, 25(6): 925-929.

[10] Chen S N, Sun J H, Wan W. Boiling liquid expanding vapor explosion: Experimental research in the evolution of the two-phase flow and over-pressure[J]. Journal of Hazardous Materials, 2008, 156: 530-537.

[11] 郭雷, 张树生, 程林. 竖直矩形细通道内水沸腾换热的数值模拟[J]. 热能动力工程, 2011, 26(1): 31-35.

Guo Lei, Zhang Shusheng, Cheng Lin. Numerical simulation of water boiling heat exchange inside a vertical rectangular slim passage[J]. Journal of Engineering for Thermal Energy and Power, 2011, 26(1): 31-35.

[12] Lee W H. A pressure iteration scheme for two-phase flow modeling: LA-UR-79-975[R]. Los Alamos: Los Alamos National Laboratory, 1979: 407-431.

[13] 鲁钟琪. 两相流与沸腾传热[M]. 北京: 清华大学出版社, 2002.

Lu Zhongqi. Two-phase and boiling heat transfer[M]. Beijing: Tsinghua University Press, 2002.

[14] Talebi S, Abbasi F, Davilu H. A 2D numerical simulation of sub-cooled flow boiling at low-pressure and low-flow rates[J]. Nuclear Engineering and Design, 2009, 239: 140-146.

(责任编辑 赵业玲)

#### 《科技导报》征集“封面文章”

为快速反映中国最新科技研究成果,《科技导报》拟利用刊物最显著位置——封面将最新科研成果第一时间予以突出报道。来稿要求:研究成果具创新性或新颖性;反映该领域中国乃至世界前沿研究水平;可以图片形式予以反映,图片美观、清晰、分辨率超过300dpi;文章篇幅不限,要说明研究的背景、方法、取得的结果,以及结论。在线投稿:www.kjdb.org。