



ΕΘΝΙΚΟ ΜΕΤΣΟΒΙΟ ΠΟΛΥΤΕΧΝΕΙΟ  
ΔΙΑΤΜΗΜΑΤΙΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ ΜΕΤΑΠΤΥΧΙΑΚΩΝ ΣΠΟΥΔΩΝ

ΥΠΟΛΟΓΙΣΤΙΚΗ ΜΗΧΑΝΙΚΗ – ΡΟΗ ΡΕΥΣΤΑ

**ΥΠΟΛΟΓΙΣΤΙΚΗ ΠΡΟΣΟΜΟΙΩΣΗ ΕΚΡΗΞΕΩΝ  
ΚΑΙ  
ΕΦΑΡΜΟΓΗ ΣΕ ΕΚΡΗΞΕΙΣ ΣΚΟΝΗΣ**

**ΜΕΤΑΠΤΥΧΙΑΚΗ ΕΡΓΑΣΙΑ  
ΘΕΑΝΩ ΚΡΑΣΣΑ**

ΕΠΙΒΛΕΠΩΝ ΚΑΘΗΓΗΤΗΣ

**B. ΡΙΖΙΩΤΗΣ**

Υπ' όψιν

**N.X. ΜΑΡΚΑΤΟΥ, Ομότιμου καθηγητή ΕΜΠ**

**ΑΘΗΝΑ 2019**

# Μεταπτυχιακή Εργασία

Υπολογιστική Προσομοίωση Εκρήξεων  
και Εφαρμογή σε Εκρήξεις Σκόνης

**ΥΠΟΛΟΓΙΣΤΙΚΗ ΠΡΟΣΟΜΟΙΩΣΗ ΕΚΡΗΞΕΩΝ  
ΚΑΙ  
ΕΦΑΡΜΟΓΗ ΣΕ ΕΚΡΗΞΕΙΣ ΣΚΟΝΗΣ**

**ΘΕΑΝΩ ΚΡΑΣΣΑ**

**3**

Μεταπτυχιακή Φοιτήτρια Ε. Μ. Πολυτεχνείου

*Η παρούσα εργασία αφιερώνεται στον Άγγελο*

## Ευχαριστίες

*Η παρούσα μεταπτυχιακή εργασία πραγματοποιήθηκε στο πλαίσιο των μεταπτυχιακών μου σπουδών στο Διατμηματικό Πρόγραμμα Υπολογιστικής Μηχανικής (Ροής Ρευστών) υπό την αιγίδα της Σχολής Χημικών Μηχανικών του Ε.Μ.Π. Εκφράζω τις ευχαριστίες μου στους καθηγητές του Ε.Μ.Π. Ν. Μαρκάτο, Β. Ριζιώτη και Α. Μπουντουβή για την επιστημονική υποστήριξη και τη γενικότερη συμπαράστασή τους τόσο στην ολοκλήρωση των σπουδών μου, όσο και στην ανάθεση αυτής της εργασίας. Επίσης, οι ευχαριστίες μου εκφράζονται προς τον ομότιμο καθηγητή του Ε.Μ.Π. Α. Παπαϊωάννου για τη σημαντική συμβολή του κατά τη διάρκεια των μεταπτυχιακών σπουδών μου.*

## Περίληψη

Η εργασία αυτή έχει ως αντικείμενο μελέτης την υπολογιστική προσομοίωση των εκρήξεων και την εφαρμογή της στην έκρηξη σκόνης. Για τον σκοπό αυτό, αρχικά παρουσιάζεται μια αναλυτική περιγραφή του φαινομένου της έκρηξης με έμφαση στις εκρήξεις αερίων και σκόνης, εστιάζοντας κυρίως στον μηχανισμό έναρξης της έκρηξης σκόνης, καθώς και στις παραμέτρους που προσδιορίζουν τον βαθμό εκρηκτικότητας της καύσιμης σκόνης. Επίσης, γίνεται διεξοδική ανασκόπηση του βιβλιογραφικά επικρατέστερου απλοποιημένου μαθηματικού μοντέλου που περιγράφει το φαινόμενο της έκρηξης σκόνης.

Στη συνέχεια, αναπτύσσεται ένα υπολογιστικό μοντέλο έκρηξης σκόνης στο λογισμικό PHOENICS. Αρχικά περιγράφεται συνοπτικά η δομή και ο τρόπος λειτουργίας του συγκεκριμένου λογισμικού και, στη συνέχεια, παρουσιάζεται το προς επίλυση σύστημα διαφορικών εξισώσεων μεταφοράς μάζας, ορμής και ενέργειας για τη στερεή και την αέρια φάση. Τα αποτελέσματα του υπολογιστικού μοντέλου συγκρίνονται για διαφορετικά μοντέλα τύρβης, οι εξισώσεις των οποίων παρουσιάζονται αναλυτικά. Οι προς επίλυση διαφορικές εξισώσεις διακριτοποιούνται με τη μέθοδο των πεπερασμένων όγκων ελέγχου, ενώ παράλληλα ορίζονται οι αρχικές και οι οριακές συνθήκες του υπό μελέτη φαινομένου που πρέπει να ικανοποιούνται.

Κατόπιν γίνεται σύγκριση των αποτελεσμάτων του μοντέλου με αντίστοιχο υπολογιστικό μοντέλο που είναι διαθέσιμο στη βιβλιογραφία. Τέλος, για την ακριβέστερη προσέγγιση του υπό μελέτη φαινομένου, προτείνονται για μελλοντική εργασία ορισμένοι τρόποι για βελτίωση του συγκεκριμένου υπολογιστικού μοντέλου.

## Abstract

This project is the computational simulation of explosions and its application in dust explosion. For this purpose, a detailed description of the detonation phenomenon is first presented with emphasis on gas and dust explosions, focusing on dust explosion mechanism and the parameters that determine the degree of explosiveness of the combustible powder. Also, it is a thorough review of the predominant in literature, simplified mathematical model that describes the phenomenon of dust explosion.

Then a computing dust explosion model on commercial software PHOENICS is developed. First a brief description of the structure and the way of said software operation is given and then the set of differential equations of mass transfer, momentum and energy of the solid and gas phase to be solved is presented. The results of the computational model are compared for different turbulence models whose equations are presented in detail. The differential equations that are to be solved are discretized with application of finite control volumes while at the same time the initial and boundary conditions of the phenomenon are being studied.

Furthermore, the comparison of the model results to corresponding computational model in literature, has proved satisfactory.

Finally, for a more precise approach to the phenomenon being studied, some methods for optimizing the particular computational model under the same conditions are suggested.

## Περιεχόμενα

<b>Περίληψη</b> .....	<b>6</b>
<b>Εισαγωγικό Σημείωμα</b> .....	<b>9</b>
<b>1<sup>ο</sup> Κεφάλαιο</b> Ανάλυση του Φαινομένου της Έκρηξης Σκόνης .....	<b>12</b>
<b>2<sup>ο</sup> Κεφάλαιο</b> Υπολογιστική Προσομοίωση της Έκρηξης Σκόνης.....	<b>31</b>
<b>3<sup>ο</sup> Κεφάλαιο</b> Σύγκριση και Αξιολόγηση των Προσομοιώσεων της Έκρηξης Σκόνης.....	<b>56</b>
<b>4<sup>ο</sup> Κεφάλαιο</b> Σχολιασμός και Συμπεράσματα των Προσομοιώσεων της Έκρηξης Σκόνης..	<b>66</b>
<b>5<sup>ο</sup> Κεφάλαιο</b> Προτάσεις για Μελλοντική Έρευνα του Φαινομένου της Έκρηξης Σκόνης ...	<b>71</b>
<b>Παράρτημα</b> .....	<b>76</b>



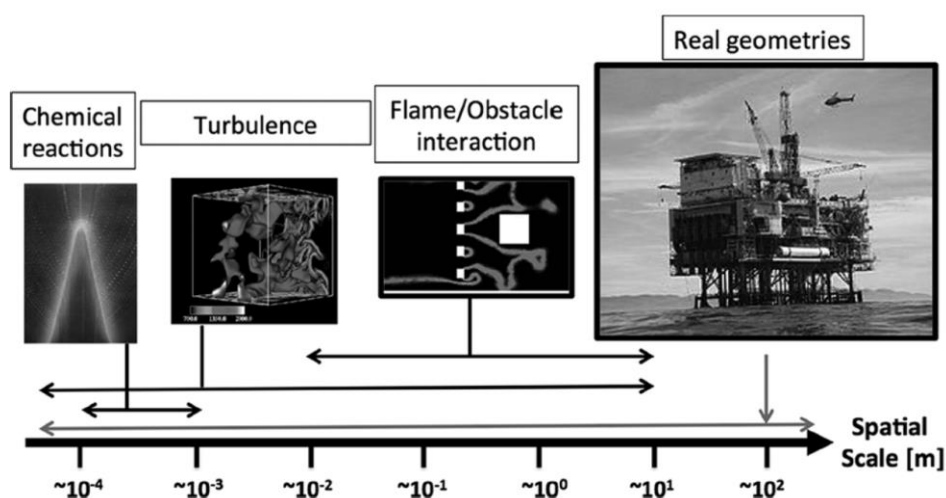
## Εισαγωγικό Σημείωμα

Σύμφωνα με τις διαθέσιμες βιβλιογραφικές αναφορές, το φαινόμενο της έκρηξης σκόνης ξεκίνησε να περιγράφεται ήδη από το 1785 [1]. Ωστόσο η αφορμή για την πειραματική διερεύνηση αυτού του φαινομένου δόθηκε από τις καταστροφικές συνέπειες των ατυχημάτων των εκρήξεων σκόνης που καταγράφηκαν στις αρχές του 20<sup>ου</sup> αιώνα [2]. Σύμφωνα με τον Schoeff [3], στα αγροτικά εργοστάσια των ΗΠΑ έχουν καταγραφεί κατά μέσο όρο πάνω από δέκα εκρήξεις σκόνης κατ' έτος. Χαρακτηριστικά το έτος 2005 συνέβησαν δεκατρείς εκρήξεις σκόνης, ενώ στη βιβλιογραφία αποτελεί ευρέως αποδεκτό το γεγονός ότι τουλάχιστον μία έκρηξη σκόνης εκδηλώνεται ανά ημέρα σε κάθε εκβιομηχανισμένη χώρα. Η τρομακτική συχνότητα εκδήλωσης του φαινομένου και η έκταση των καταστροφών που προκαλεί τόσο σε ανθρώπινο, όσο και σε οικονομικό επίπεδο επέβαλαν την ανάλυση, την πρόληψη και τον έλεγχο των συνθηκών που πυροδοτούν το φαινόμενο έκρηξης σκόνης, αναγνωρίζοντας αυτήν ως έναν από τους πιο σημαντικούς βιομηχανικούς κινδύνους.

Επομένως τα πρωτόκολλα αποθήκευσης, μεταφοράς και διαχείρισης της σκόνης, μεταλλικής και οργανικής, δεν σχεδιάζονται μόνο για να αποφευχθούν οι περιπτώσεις μόλυνσης ή τοξικότητας, αλλά και για να μειωθούν οι κίνδυνοι παραγωγής αναφλέξιμου μείγματος αέρα-σκόνης δεδομένου ότι το 70% της σκόνης είναι καύσιμα. Σημαντική συμβολή για το θέμα αυτό, αποτελεί ο προσδιορισμός των παραμέτρων που ορίζουν την ικανότητα έκρηξης της καύσιμης σκόνης σε εργαστηριακή κλίμακα. Παρόλα αυτά, η ευαισθησία των πειραμάτων στη μεταβολή των φυσικοχημικών ιδιοτήτων της σκόνης, η ετερογένεια του μείγματος νέφους σκόνης-αερίων, καθώς και οι διαφορετικοί μηχανισμοί (πυρόλυση ή επιφανειακή οξείδωση) που οδηγούν στην καύση, καθιστούν δύσκολη την επαναλαμβανόμενη πειραματική δοκιμή.

Η δυνατότητα υπολογιστικής προσομοίωσης του φαινομένου έκρηξης νέφους σκόνης, καθώς και το ενδιαφέρον της επιστημονικής κοινότητας για την περαιτέρω ανάπτυξή του κατά τα τελευταία χρόνια, ορίζει σαφώς πιο αυστηρά πρωτόκολλα ασφαλείας για μια μεγάλη ποικιλία καύσιμης σκόνης με τον προσδιορισμό πρόσθετων κρίσιμων παραμέτρων εκρηκτικότητας που δεν μπορούν να εξεταστούν πειραματικά.

Ωστόσο η δυσκολία στη μελέτη και τη μοντελοποίηση γενικά της έκρηξης αέριου μείγματος συνίσταται στο γεγονός ότι εμπεριέχει φαινόμενα όπως οι χημικές αντιδράσεις (*chemical reactions*), η τύρβη (*turbulence*) και η αλληλεπίδραση φλόγας-γεωμετρίας (*flame/obstacle interaction*) που λαμβάνουν χώρα σε διαφορετικές χωρικές και χρονικές κλίμακες. Στο Σχήμα 1 παρουσιάζονται συνοπτικά τα φαινόμενα, καθώς και οι αντίστοιχες χωρικές κλίμακες που συναντώνται σε γεωμετρία κλίμακας πρακτικού ενδιαφέροντος.



Σχήμα 1 Χωρικές κλίμακες φαινομένων που συνυπάρχουν στην έκρηξη σε γεωμετρία πρακτικού ενδιαφέροντος.

## ΑΝΤΙΚΕΙΜΕΝΟ ΜΕΛΕΤΗΣ ΚΑΙ ΣΤΟΧΟΙ

Στην παρούσα εργασία πραγματοποιήθηκε η ανάπτυξη ενός υπολογιστικού κώδικα χαμηλού υπολογιστικού κόστους που αφορά στις περιπτώσεις καύσης προανεμειγμένου μείγματος αερίου καύσιμου–αέρα και καύσιμης σκόνης–αέρα που οδηγούν σε έκρηξη «ελεύθερου» περιβάλλοντος. Ωστόσο αντικείμενο διεξοδικής μελέτης της παρούσας εργασίας αποτελεί η έκρηξη σκόνης τόσο λόγω του αυξημένου βαθμού της πολυπλοκότητας που την χαρακτηρίζει (σε σύγκριση με την έκρηξη αερίων), όσο και του μικρού αριθμού των υπολογιστικών προσομοιώσεων του φαινομένου, που αναφέρονται στη διαθέσιμη βιβλιογραφία, οι οποίες αποσκοπούν στην πλήρη κατανόησή του.

Η έκρηξη σκόνης περιλαμβάνει εξ ορισμού χημικά και μηχανικά φαινόμενα. Η υπολογιστική προσομοίωση μιας πρωτογενούς και «ελεύθερου» περιβάλλοντος έκρηξης σκόνης πραγματοποιήθηκε με την υιοθέτηση της ακόλουθης εκδοχής:

Σύμφωνα με αυτήν, ο ανεπτυγμένος υπολογιστικός κώδικας προσομοίωσης του φαινομένου περιλαμβάνει μόνο το *τυρβώδες μοντέλο*, με την πίεση έκρηξης και τη θερμοκρασία που αναπτύσσεται στο υπολογιστικό πεδίο να περιγράφεται από την καταστατική εξίσωση ιδανικού αερίου, αμελώντας το μοντέλο καύσης και τους μηχανισμούς μεταφοράς θερμότητας μεταξύ των σωματιδίων σκόνης και αερίου.

Ο υπολογιστικός κώδικας που χρησιμοποιήθηκε στο πλαίσιο της παρούσας μελέτης αναπτύχθηκε στο εμπορικό λογισμικό PHOENICS 2009 της εταιρείας CHAM. Βάσει αυτού του λογισμικού, οι εξισώσεις μεταφοράς μάζας, ορμής και ενέργειας, καθώς και η εξίσωση διατήρησης των χημικών συστατικών των αντιδράσεων διακριτοποιήθηκαν με τη μέθοδο των πεπερασμένων όγκων ελέγχου. Το ρευστοδυναμικό πεδίο της διαφασικής ροής σκόνης-αερίου επιλύεται από τον αλγόριθμο IPSA (*Interphase Slip Algorithm*), που αποτελεί επέκταση του αλγόριθμου SIMPLE.

Συμπερασματικά, ο στόχος της παρούσας εργασίας είναι η παρουσίαση του θερμοκρασιακού και του ροϊκού πεδίου που αναπτύσσεται κατά την έκρηξη σκόνης, καθώς και ο προσδιορισμός των παραμέτρων που επηρεάζουν σημαντικά τα προαναφερθέντα πεδία. Με το πέρας της σύγκρισης των υπολογιστικών προσομοιώσεων που αναπτύχθηκαν (με βάση την 1<sup>η</sup> και 2<sup>η</sup> εκδοχή) και της αξιολόγησης αυτών βασισμένη σε πειραματικά δεδομένα της διαθέσιμης βιβλιογραφίας, επιχειρείται να δοθεί απάντηση στο παρακάτω ερώτημα:

- Σε ποιόν βαθμό το υπολογιστικό μοντέλο που αναπτύχθηκε παρουσιάζει την πραγματική εξέλιξη της έκρηξης σκόνης σε σύγκριση με τα υπάρχοντα βιβλιογραφικά δεδομένα;

## Κεφάλαιο Πρώτο

# Ανάλυση του Φαινομένου Έκρηξης

Το παρόν κεφάλαιο έχει ως αντικείμενο μελέτης το φαινόμενο της έκρηξης και, κυρίως, τις εκρήξεις αερίων και σκόνης. Ιδιαίτερη έμφαση δίνεται στον μηχανισμό έναρξης της έκρηξης σκόνης και αναφέρονται οι παράμετροι που προσδιορίζουν τον βαθμό εκρηκτικότητας της καύσιμης σκόνης. Επίσης, γίνεται διεξοδική ανασκόπηση του επικρατέστερου, βιβλιογραφικά, απλοποιημένου μαθηματικού μοντέλου που περιγράφει το φαινόμενο της έκρηξης σκόνης. Έτσι, δίνεται η δυνατότητα να «αναγνωριστούν» οι παράμετροι που παίζουν σημαντικό ρόλο στην εξέλιξη των εκρήξεων σκόνης, ενώ παράλληλα «χτίζεται» το απαιτούμενο γνωστικό υπόβαθρο για τη δημιουργία του σεναρίου έκρηξης σκόνης με το οποίο θα ασχοληθούμε στο επόμενο κεφάλαιο.

ΠΕΡΙΕΧΟΜΕΝΑ	
<b>1-1</b>	Ορισμός και Μηχανισμοί Έναρξης της Έκρηξης Αερίου–Σκόνης ..... 15
	Έκρηξη Αερίου ..... 18
	Έκρηξη Σκόνης ..... 19
	Μηχανισμός της Έκρηξης Σκόνης ..... 20
<b>1-2</b>	Χαρακτηριστικοί Παράμετροι της Έκρηξης Σκόνης ..... 21
	Μέγιστη Πίεση και Μέγιστος Ρυθμός Αύξησης της Πίεσης ..... 21
	Μέγεθος των Σωματιδίων της Σκόνης ..... 23
	Συγκέντρωση Σκόνης στο Νέφος Σκόνης- Αερίου ..... 24
	Θερμοκρασία Ανάφλεξης του Νέφους Σκόνης- Αερίου ..... 25
	Ο Ρόλος της Τύρβης ..... 25
	Πρόληψη και Περιορισμός της Έκρηξη Σκόνης ..... 26
<b>1-3</b>	Απλοποιημένο Μαθηματικό Μοντέλο της Έκρηξης Σκόνης ..... 27
	Θερμοκρασία Ανάφλεξης του Νέφους Σκόνης ..... 27
	Ταχύτητα Διαστολής και Ταχύτητα Διάδοσης της Έκρηξης ..... 29

## 1-1 Ορισμός και Μηχανισμοί Έναρξης της Έκρηξης Αερίου - Σκόνης

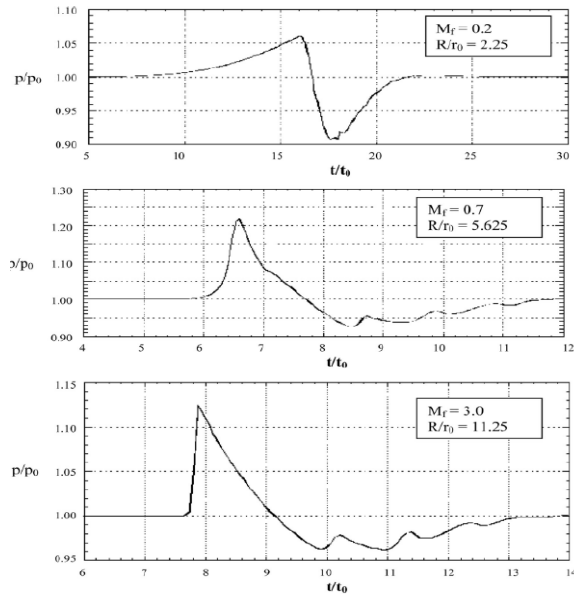
Ως έκρηξη ορίζεται η αιφνίδια και βίαιη απελευθέρωση χημικής και μηχανικής ενέργειας που οδηγεί σε απότομη και σημαντική αύξηση της πίεσης. Η πηγή της ενέργειας μπορεί να είναι δυναμική ενέργεια (αέριο υπό πίεση) και χημική ενέργεια (εξώθερμη χημική αντίδραση).

Αν και οι εκρήξεις φαίνεται να διαφέρουν πολύ μεταξύ τους, παρουσιάζουν κοινά χαρακτηριστικά. Το κύριο αποτέλεσμα των εκρήξεων είναι η απότομη αύξηση της πίεσης. Η πιο βίαιη μορφή έκρηξης είναι η υπερηχητική, καθώς η αύξηση της πίεσης συμβαίνει απότομα σε σύντομο χρονικό διάστημα. Τα δημιουργούμενα κύματα πίεσης που δημιουργούνται μπορούν να κατηγοριοποιηθούν με βάση τον αριθμό *Mach*,  $M$ , της ταχύτητας καύσης σε τρία είδη:

- *Ακουστικά κύματα* (όταν  $M < 0.35$ )
- *Κύματα πίεσης* (όταν  $0.35 < M < 1$ )
- *Κρουστικά κύματα* (όταν  $M > 1$ )

Στο Σχήμα 1-1 απεικονίζεται η χρονική εξέλιξη της πίεσης σε δεδομένο σημείο του χώρου για τα προαναφερθέντα τρία είδη κυμάτων. Από την εξέταση των γραφημάτων του Σχήματος 1-1, προκύπτουν τα εξής συμπεράσματα:

- Στην περίπτωση των *ακουστικών κυμάτων*, η αύξηση της πίεσης είναι πολύ μικρή, εκτός από τις περιοχές των θετικών και αρνητικών υπερπιέσεων, με τη μέγιστη υποπίεση να είναι (κατ' απόλυτη τιμή) περίπου ίση με τη μέγιστη πίεση.
- Στην περίπτωση των *κυμάτων πίεσης*, η υπερπίεση που αναπτύσσεται είναι σαφώς μεγαλύτερη από εκείνη των ακουστικών κυμάτων, καθώς και ο ρυθμός αύξησης της πίεσης. Η καμπύλη της μορφής αυτής είναι χαρακτηριστική των επιταχυνόμενων εκρήξεων.
- Στην περίπτωση των *κρουστικών κυμάτων*, η αύξηση της πίεσης είναι πολύ πιο απότομη, δημιουργώντας ένα οξύ μέγιστο.



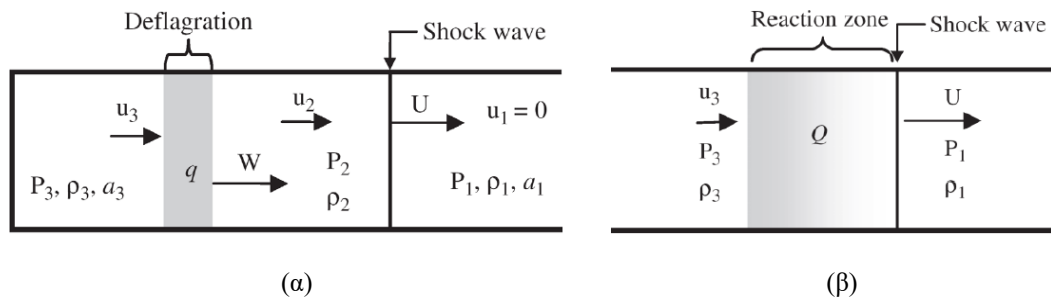
Σχήμα 1-1 Τυπικές κατανομές κυμάτων για ακουστικά κύματα, κύματα πίεσης και κρουστικά κύματα κρούσης [4].

Στην παρούσα εργασία αναλύονται η έκρηξη αερίων και η έκρηξη σκόνης που προέρχονται από την ανάφλεξη νέφους αερίων και σκόνης. Οι συγκεκριμένες εκρήξεις διακρίνονται σε δύο είδη: την *επιταχυνόμενη έκρηξη* και την *υπερηχητική έκρηξη*.

Η *επιταχυνόμενη έκρηξη* αποτελεί τη συνήθη περίπτωση καύσης νέφους αερίων ή νέφους σκόνης-αερίων, όπου ο ρυθμός καύσης εξαρτάται από τη μοριακή και την τυρβώδη διάχυση. Στην ειδική περίπτωση *στρωτής* ροής, η ταχύτητα του μετώπου καύσης είναι μικρή και δεν αναπτύσσονται μεγάλες πιέσεις δημιουργείται μια σύντομη λάμψη φωτιάς. Όμως στις περισσότερες περιπτώσεις, η ροή παρουσιάζει τυρβώδη χαρακτηριστικά με αποτέλεσμα την επιτάχυνση του μετώπου της φλόγας και την ανάπτυξη μεγάλων υπερπιέσεων.

Η *υπερηχητική έκρηξη* συναντάται σπάνια καθώς οι συνθήκες που απαιτούνται για να συμβεί είναι δύσκολο να επιτευχθούν. Το μέτωπο καύσης του συγκεκριμένου τύπου εκρήξεων χαρακτηρίζεται ως *υπερηχητικό*, καθώς κινείται με ταχύτητα της τάξης των 1000 m/s ή ακόμη μεγαλύτερων. Η καύση συντελείται ως αποτέλεσμα της αύξησης της θερμοκρασίας, λόγω της αδιαβατικής συμπίεσης που προκαλεί το δημιουργούμενο κύμα πίεσης. Αυτό συνεπάγεται κίνηση του κύματος πίεσης και της πρωτεύουσας ζώνης αντίδρασης με σταθερή ταχύτητα. Για μείγματα σε στοιχειομετρική αναλογία, ο λόγος πίεσης κατά μήκος του κύματος κυμαίνεται μεταξύ 15 και 20, το οποίο αντιστοιχεί σε διπλάσιο λόγο πίεσης σε σύγκριση με μια επιταχυνόμενη έκρηξη του ίδιου μείγματος σε αδιαβατικές συνθήκες υπό σταθερό όγκο.

Στο Σχήμα 1-2 απεικονίζονται οι κύριες ζώνες από τις οποίες αποτελείται μια ιδεατή έκρηξη σε οριζόντιο κανάλι για τους προαναφερθέντες δύο τύπους εκρήξεων. Στην περίπτωση της επιταχυνόμενης έκρηξης, η περιοχή χωρίζεται σε τρεις ζώνες. Την πρώτη ζώνη, η οποία βρίσκεται μπροστά από το κύμα πίεσης, τη δεύτερη που βρίσκεται μεταξύ του μετώπου της φλόγας και του κύματος πίεσης και την τρίτη ζώνη η οποία βρίσκεται πίσω από το μέτωπο της φλόγας. Στις δύο πρώτες ζώνες βρίσκονται τα άκαυστα συστατικά του μείγματος, ενώ στην τρίτη ζώνη υπάρχουν τα προϊόντα της καύσης. Από την άλλη μεριά, η υπερηχητική έκρηξη διακρίνεται σε δύο κύριες ζώνες, δεδομένου ότι το κύμα πίεσης και η ζώνη αντίδρασης κινούνται μαζί. Οι αντιδράσεις καύσης πραγματοποιούνται λόγω της υψηλής πίεσης και θερμοκρασίας τις οποίες προκαλεί το κύμα πίεσης.



Σχήμα 1-2 Σχηματική απεικόνιση (α) επιταχυνόμενης και (β) υπερηχητικής και έκρηξης [5]

Υπερηχητική έκρηξη μπορεί να δημιουργηθεί από την ύπαρξη πολύ μεγάλης ποσότητας ενέργειας σε πολύ μικρό όγκο μείγματος, κάτι που στην πράξη είναι αρκετά δύσκολο να επιτευχθεί. Συνήθως, μια υπερηχητική έκρηξη αναπτύσσεται μέσω μιας επιταχυνόμενης έκρηξης, λόγω της συνεχούς αύξησης του ρυθμού καύσης.

## ΕΚΡΗΞΗ ΑΕΡΙΟΥ

Για την πραγματοποίηση μιας έκρηξης αερίου, απαιτείται αρχικά η διαρροή του εύφλεκτου αερίου καυσίμου στο περιβάλλον, η οποία μπορεί να οδηγήσει στη δημιουργία εκρηκτικού μείγματος, λόγω της ανάμειξης του καυσίμου με τον αέρα περιβάλλοντος. Για την έναρξη της καύσης του δημιουργούμενου μείγματος απαιτείται παρουσία τουλάχιστον ενός σημείου ανάφλεξης, οπότε δημιουργείται ένα μέτωπο φλόγας το οποίο κατευθύνεται προς την άκαυστη περιοχή. Το αποτέλεσμα της καύσης του νέφους καυσίμου-αερίου είναι η ανάπτυξη υπερπιέσεων και αυξημένων θερμοκρασιών.

Οι συνέπειες των εκρήξεων αερίου δεν είναι πάντα καταστροφικές, καθώς αυτές εξαρτώνται από διάφορους παράγοντες όπως είναι π.χ. η χρονική στιγμή έναρξης της καύσης, η ποσότητα του προανεμειγμένου μίγματος καυσίμου-αέρα που βρίσκεται εντός των ορίων αναφλεξιμότητας και η ταχύτητα διάδοσης της φλόγας. Παρόλα αυτά, καθοριστικό ρόλο για την σοβαρότητα των συνεπειών που έχει μια έκρηξη αερίου παίζει ο χώρος που περιβάλλει το νέφος καυσίμου-αερίου. Έτσι, οι εκρήξεις αερίων διακρίνονται σε τρεις τύπους: εκρήξεις κλειστού χώρου, εκρήξεις κλειστού χώρου με ανοίγματα και εκρήξεις ελεύθερου περιβάλλοντος. Στην περίπτωση που το αέριο καύσιμο μείγμα βρίσκεται σε κλειστό χώρο, η αύξηση της πίεσης εξαρτάται από το μέγεθος του νέφους αερίων προκαλώντας συνήθως καταστροφή του περιβάλλοντος χώρου. Όταν το εκρηκτικό μείγμα αερίων βρίσκεται εντός ενός αεριζόμενου κλειστού χώρου, η έκρηξη χαρακτηρίζεται ως μερικώς περιορισμένη και οι συνέπειες αυτής εξαρτώνται από διάφορες παραμέτρους όπως π.χ. η γεωμετρική διάταξη του χώρου και των ανοιγμάτων του, ο τύπος του αερίου, η συγκέντρωση και το μέγεθος του νέφους αερίων καθώς και το είδος της πηγής ανάφλεξης.

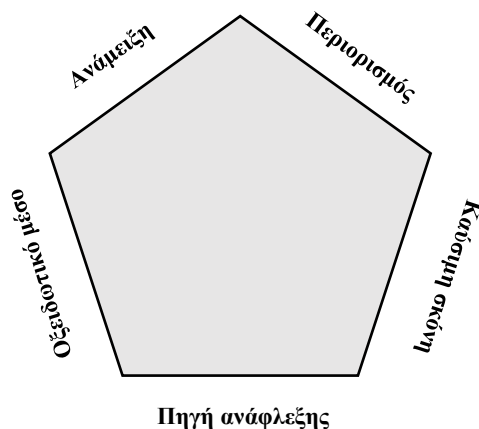
Στις *επιταχυνόμενες* εκρήξεις αερίων, η ταχύτητα της φλόγας ποικίλλει μεταξύ 1m/s και 500 έως 1000 m/s και η μέγιστη πίεση είναι της τάξης mbar. Στις *υπερηχητικές* εκρήξεις, η ταχύτητα της φλόγας μπορεί να φτάσει στα 2000 m/s και η μέγιστη πίεση στα 20 bar.



## ΕΚΡΗΞΗ ΣΚΟΝΗΣ

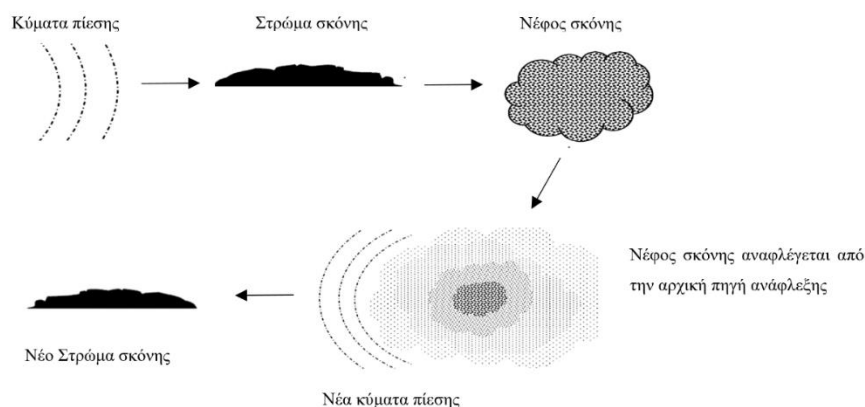
Σύμφωνα με την Αμερικανική Εθνική Ένωση Πυροπροστασίας (NFPA–National American Protection Association) ως «καύσιμη σκόνη» ορίζεται το λεπτοδιαμερισμένο στερεό υλικό με μέγιστη τιμή μέσης διαμέτρου 420  $\mu\text{m}$ , που έχει την ικανότητα να αναφλεγεί και να προκαλέσει κίνδυνο πυρκαγιάς ή ακόμη και έκρηξης όταν διαχέεται στον αέρα ή σε κάποιο άλλο οξειδωτικό μέσο. Να σημειωθεί ότι σε πολλές μελέτες υιοθετείται η άποψη του Palmer [6], σύμφωνα με την οποία η μέγιστη διάμετρος της καύσιμης σκόνης ορίζεται ίση με 1000  $\mu\text{m}$ .

Το μείγμα αερίου–σκόνης πρέπει να πληροί πέντε προϋποθέσεις ώστε η «καύσιμη σκόνη» να θεωρείται επικίνδυνη. Η περίσσεια συγκέντρωσης του οξειδωτικού μέσου, η πηγή ανάφλεξης και η καύσιμη ύλη οδηγούν αναπόφευκτα στην ανάφλεξη της τελευταίας. Ωστόσο για την ανάπτυξη μιας έκρηξης σκόνης απαιτείται επιπλέον η ανάμειξη της σκόνης με το οξειδωτικό μέσο καθώς και το είδος της κλειστής επιφάνειας που περιβάλλει το νέφος σκόνης, γνωστή και ως *επιφάνεια ελέγχου*, προκειμένου να αναπτυχθεί υπερπίεση από τη θερμότητα καύσης του υλικού. Το τελευταίο χαρακτηριστικό σχετίζεται περισσότερο με την σοβαρότητα της έκρηξης, παρά με την ανάφλεξη της σκόνης, δεδομένου ότι η απουσία του οδηγεί σε πυρκαγιά, ενώ η παρουσία του μπορεί να οδηγήσει σε έκρηξη. Στο Σχήμα 1-3 απεικονίζεται το πεντάγωνο της έκρηξης σκόνης όπου σημειώνονται οι επιμέρους διεργασίες που συμβαίνουν κατά την θεωρούμενη έκρηξη.



Σχήμα 1-3 Πεντάγωνο έκρηξης σκόνης.

Οι εκρήξεις σκόνης διακρίνονται σε πρωτογενείς και δευτερογενείς. Η *πρωτογενής έκρηξη* σκόνης αφορά τον διασκορπισμό της σκόνης στην ατμόσφαιρα με επαρκή ποσότητα οξυγόνου παρουσία μιας πηγής ανάφλεξης. Η *δευτερογενής έκρηξη* σκόνης προκύπτει από την ανάφλεξη συσσωρευμένης σκόνης που έχει παρασυρθεί από κύματα πίεσης της πρωτογενούς έκρηξης παρουσία της αρχικής ή διαφορετικής πηγής ανάφλεξης. Μια σχηματική απεικόνιση της πρωτογενούς και δευτερογενούς έκρηξης φαίνεται στο Σχήμα 1-4.



Σχήμα 1-4 Σχηματική αναπαράσταση της πρωτογενούς και δευτερογενούς έκρηξης σκόνης.

### ΜΗΧΑΝΙΣΜΟΣ ΤΗΣ ΕΚΡΗΞΗΣ ΣΚΟΝΗΣ

Η κατηγοριοποίηση της καύσης του μείγματος αερίων σε *προ-αναμεμειγμένη* (ανάμειξη του αντιδρώντος μείγματος πριν οδηγηθεί σε χημική αντίδραση) και σε μη *προ-αναμεμειγμένα* δεν επαρκεί για τη μελέτη του μηχανισμού εξάπλωσης της φλόγας από εκρήξεις σκόνης, καθώς η ομοιομορφία του μείγματος σκόνης-αερίου δε διατηρείται στη μικροκλίμακα λόγω της φύσης της στερεής φάσης.

Η πτητική ύλη παίζει κυρίαρχο ρόλο στον μηχανισμό έναρξης της έκρηξης της σκόνης, καθώς από αυτήν καθορίζεται η ποσότητα αερίου την οποία απελευθερώνει η σκόνη κατά την θέρμανσή της. Ο Medard [7] εξήγησε ότι η εκπεμπόμενη ακτινοβολία του νέφους σκόνης κατά την καύση του θερμαίνει τα άκαυστα σωματίδια, δημιουργώντας μια μικρή σφαίρα της οποίας η ατμόσφαιρα είναι μείγμα αερίου και προϊόντων καύσης. Οι Gomez [8] και Di Benedetto et al. [9] μετά από πειραματική μελέτη της καύσης μεμονωμένων σωματιδίων άνθρακα διαπίστωσαν ότι η έκρηξη σκόνης συμβαίνει μέσω δύο κύριων διαδρομών, την *ετερογενή* (*Nusselt flame*) και την *ομοιογενή* καύση (*volatile flame*).

Η *ετερογενής καύση* αναφέρεται στην οξείδωση της επιφάνειας των στερεών σωματιδίων και είναι υπεύθυνη για την ανάφλεξη και τη διάδοση της φλόγας χαμηλής πτητικότητας υλικών, όπως π.χ. τα μέταλλα.

Η *ομοιογενής καύση* αναφέρεται στην οξείδωση πτητικών ουσιών που προέρχονται από την οξείδωση ουσιών πριν από την ανάφλεξη και είναι υπεύθυνη τόσο για την ανάφλεξη, όσο και τη διάδοση της φλόγας υψηλής πτητικότητας ουσιών, όπως π.χ. οργανικές ενώσεις και αέρια.

## 1-2 Χαρακτηριστικές Παράμετροι της Έκρηξης Σκόνης

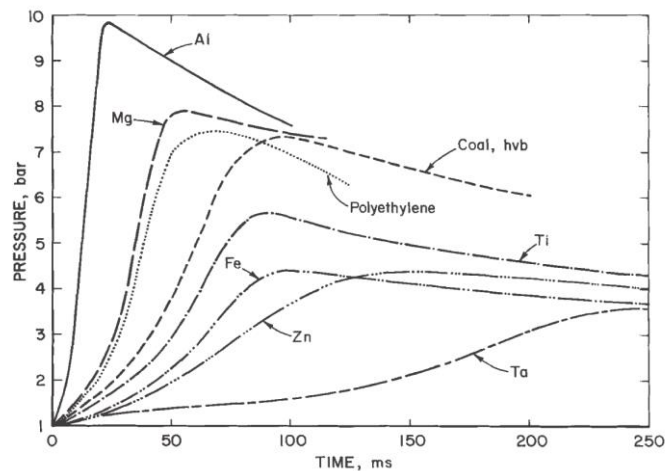
### ΜΕΓΙΣΤΗ ΠΙΕΣΗ ΚΑΙ ΜΕΓΙΣΤΟΣ ΡΥΘΜΟΣ ΑΥΞΗΣΗΣ ΤΗΣ ΠΙΕΣΗΣ

Η χρονική εξέλιξη της πίεσης υπό σταθερό όγκο κατά τη διάρκεια μιας σφαιρικής έκρηξης προβλέπεται από την κλασική θεωρία καύσης των Lewis και von Elbe [10]. Σύμφωνα με τους Herzberg και Cashdollar [11], για ένα ιδανικό αέριο σταθερού όγκου, η απόλυτη πίεση συναρτήσει του χρόνου,  $P(t)$ , σχετίζεται με τον κλασματικό όγκο,  $V(t)$ , που καταλαμβάνεται από την πυρκαγιά κατά τη διάρκεια της ανάφλεξης,  $t$ , ως εξής:

$$\frac{P(t) - P_o}{P_{max} - P_o} = k \frac{V(t)}{V_o} \quad (1-1)$$

όπου  $P_o$  είναι η αρχική απόλυτη πίεση,  $V_o$  ο όγκος του συστήματος και  $k$  ο συντελεστής διόρθωσης της διαφοράς συμπιεστότητας του καίόμενου και άκαυστου αερίου μίγματος.

Στο Σχήμα 1-5 δίνεται η εξάρτηση της απόλυτης πίεσης ως συνάρτηση του χρόνου για ανθρακοειδείς και μεταλλικές σκόνες.



Σχήμα 1-5 Κατανομή της πίεσης για ανθρακοειδείς και μεταλλικές σκόνες. [12]

Για την περίπτωση διάδοσης μιας σφαιρικής έκρηξης από μια σημειακή πηγή, ο κλασματικός όγκος συσχετίζεται με τον αρχικό όγκο του συστήματος από την ακόλουθη εξίσωση:

$$\frac{V(t)}{V_o} = \left[ \frac{r(t)}{r_o} \right]^3 = \left[ \frac{S_b t}{r_o} \right]^3 \quad (1-2)$$

όπου  $r(t)$  είναι η ακτίνα της πυρκαγιάς,  $r_o$  η αρχική ακτίνα του συστήματος και  $S_b$  η ταχύτητα της φλόγας, η οποία δίνεται από την σχέση:

$$S_b = \frac{dr(t)}{dt} = \left(\frac{\rho_u}{\rho_b}\right) S_u = \left(\frac{M_u T_b}{M_b T_o}\right) = E S_u \quad (1-3)$$

Ο λόγος των πυκνοτήτων του άκαυστου και του καιόμενου μείγματος ( $\rho_u/\rho_b$ ), υπό σταθερή πίεση, αποτελεί τον συντελεστή επέκτασης,  $E$ . Κάνοντας χρήση της καταστατικής εξίσωσης, ο συντελεστής  $E$  ορίζεται επίσης συναρτήσει των θερμοκρασιών και των μοριακών μαζών του άκαυστου και του καιόμενου μίγματος, αντίστοιχα ( $M_u T_b/M_b T_o$ ). Η ταχύτητα καύσης,  $S_u$ , εκφράζει τον ρυθμό διάδοσης της φλόγας σχετικά με το άκαυστο μίγμα μπροστά από αυτήν. Επίσης, αξίζει να σημειωθεί ότι οι ταχύτητες  $S_b$  και  $S_u$  έχουν νόημα μόνο υπό τυρβώδεις συνθήκες των εκρήξεων σκόνης.

Παραγωγίζοντας την εξίσωση (1-1), σε συνδυασμό με τις εξισώσεις (1-2) και (1-3), ο ρυθμός αύξησης της πίεσης δίνεται από την ακόλουθη σχέση:

$$\frac{dP(t)}{P_o} = 3(P_{max} - P_o) \left(\frac{\rho_u}{\rho_b}\right) S_u \frac{r(t)^2}{r_o^3} \quad (1-4)$$

Στην περίπτωση σφαιρικού συστήματος σταθερού όγκου και σφαιρικής διάδοσης της φλόγας ο συντελεστής διόρθωσης  $k$  της εξίσωσης (1-4) είναι ίσος με 1. Ο μέγιστος ρυθμός αύξησης της πίεσης συμβαίνει όταν η φλόγα έχει διαδοθεί σε όλη την έκταση του συστήματος. Επομένως, αν θέσουμε στην εξίσωση (1-4)  $r(t) = r_o = (3V_o/4\pi)^{1/3}$  και λάβουμε υπ' όψιν την προσεγγιστική σχέση  $\rho_u/\rho_b \approx T_b/T_o \approx P_{max}/P_o$ , προκύπτει η παρακάτω έκφραση για τον μέγιστο ρυθμό πίεσης:

$$K_{st} = \left. \frac{dP}{dt} \right|_{max} V_o^{1/3} = 4.84 \left(\frac{P_{max}}{P_o} - 1\right) P_{max} S_u \quad (1-5)$$

Η εξίσωση (1-5) είναι γνωστή ως **κυβικός νόμος**. Η εφαρμογή του κυβικού νομού προϋποθέτει ότι ο όγκος του συστήματος να είναι πολύ μεγαλύτερος σε σύγκριση με το πάχος της έκρηξης σκόνης ή τον όγκο της φλόγας. Σύμφωνα με τους Zhen και Leuckel [13], ο κυβικός νόμος ικανοποιείται προσεγγιστικά σε δεξαμενή όγκου 1 m<sup>3</sup>, ενώ η εφαρμογή του σε δεξαμενές όγκου 20 L πρέπει να αποφεύγεται.

Ο όρος  $K_{st}$  ορίστηκε από τον Bartknecht [14], [15] ως ο κανονικοποιημένος λόγος μέγιστου ρυθμού πίεσης με μονάδα μέτρησης (bar/m<sup>3</sup>s), η τιμή του οποίου εξαρτάται από το υλικό, το

μέγεθος και τη συγκέντρωση της σκόνης. Η τιμή του όρου  $K_{St}$  έχει ιδιαίτερη σημασία για τον σχεδιασμό συστημάτων εξαερισμού [16].

Οι Bartknecht [17] και Wiemann [18] μελετώντας την επίδραση της αρχικής απόλυτης πίεσης στη μέγιστη πίεση που αναπτύσσεται και στην τιμή του  $K_{St}$ , κατέληξαν στο συμπέρασμα ότι η τιμή της μέγιστης πίεσης  $P_{max}$  αυξάνεται γραμμικά με την αύξηση της αρχικής πίεσης, ενώ ταυτόχρονα αυξάνεται και η τιμή του  $K_{St}$ . Παρόλο που η ισχύς του κυβικού νόμου είναι περιορισμένη, η τιμή του  $K_{St}$  αποτελεί, επίσης, μέτρο εκτίμησης του βαθμού εκρηκτικότητας της σκόνης όπως φαίνεται στον Πίνακα 1-1 .

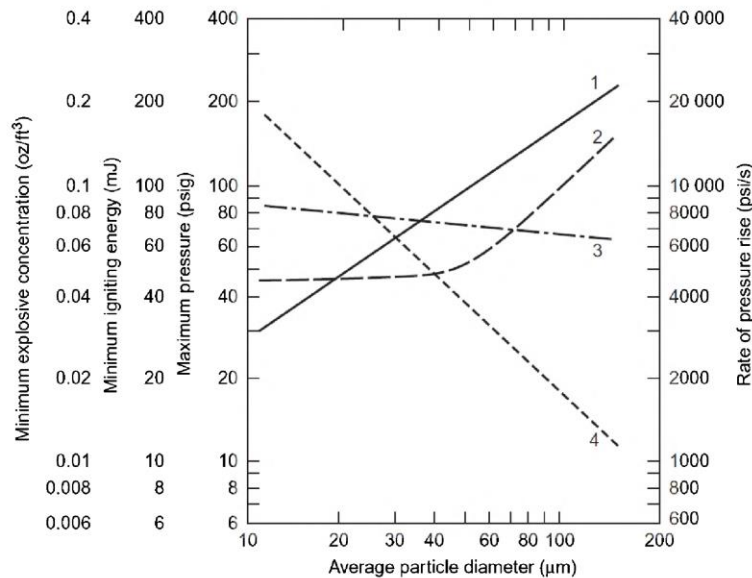
Πίνακας 1-1 Η τιμή του $K_{St}$ ως δείκτης εκρηκτικότητας της σκόνης		
$K_{St}$	St0	Μη εκρηκτική
$0 < K_{St} < 200$	St1	Αδύναμη
$200 < K_{St} < 300$	St2	Ισχυρή
$300 < K_{St}$	St3	Πολύ ισχυρή

### ΜΕΓΕΘΟΣ ΤΩΝ ΣΩΜΑΤΙΔΙΩΝ ΤΗΣ ΣΚΟΝΗΣ

Η διάδοση της φλόγας σε ένα νέφος σκόνης μπορεί να γίνει με δύο τρόπους:

- Με την καύση εύφλεκτων αερίων που εκπέμπονται από σωματίδια τα οποία έχουν θερμανθεί μέχρι το σημείο εξάτμισης ή πυρόλυσης.
- Με άμεση οξείδωση στην επιφάνεια των σωματιδίων σκόνης.

Επομένως, το μέγεθος των σωματιδίων επηρεάζει την ανάφλεξη καθώς και την έκρηξη σκόνης. Η συγκεκριμένη παράμετρος είναι επιθυμητό να εκφράζεται ως συνάρτηση της ισοδύναμης διαμέτρου του σωματιδίου, δεδομένου ότι αυτή παίζει σημαντικό ρόλο κατά την καύση. Με τον όρο *ισοδύναμη διάμετρος* εννοούμε τη διάμετρο που θα είχε ένα σωματίδιο ακανόνιστου σχήματος αν ήταν σφαιρικό. Στο Σχήμα 1-7 φαίνεται η επίδραση του μεγέθους της ισοδύναμης διαμέτρου των σωματιδίων σκόνης αλουμινίου στις παραμέτρους εκρηκτικότητας της σκόνης (περισσότερες πληροφορίες δίνονται στον πίνακα 1-2).



Σχήμα 1-7 Επίδραση της ισοδύναμης διαμέτρου των σωματιδίων στις κύριες παραμέτρους εκρηκτικότητας του ατμοποιημένου αλουμινίου. [(1) Ελάχιστη ενέργεια ανάφλεξης (MIE), (2) ελάχιστη συγκέντρωση σκόνης (MEC), (3) μέγιστη πίεση (MEP) και (4) μέγιστος ρυθμός αύξησης της πίεσης (MRPR)].

Η αύξηση του μεγέθους των σωματιδίων προκαλεί μείωση τόσο της μέγιστης εκρηκτικής πίεσης, όσο και του μέγιστου ρυθμού μεταβολής αύξησης της πίεσης. Προφανώς, η μείωση της διαμέτρου των σωματιδίων αυξάνει την απόδοση της καύσης, ωστόσο αξίζει να σημειωθεί ότι η εκρηκτικότητα μιας σκόνης δε μεταβάλλεται γραμμικά με την ισοδύναμη διάμετρο των σωματιδίων που την αποτελούν, καθώς άλλοι παράγοντες όπως π.χ. η ταχύτητα καύσης της πτητικής ύλης και η συγκέντρωση της σκόνης παίζουν επίσης σημαντικό ρόλο.

### ΣΥΓΚΕΝΤΡΩΣΗ ΣΚΟΝΗΣ ΣΤΟ ΝΕΦΟΣ ΣΚΟΝΗΣ – ΑΕΡΙΟΥ

Από πειραματικές μελέτες έχει αποδειχθεί ότι ένα νέφος σκόνης μπορεί να εκραγεί όταν η τιμή της περιεκτικότητας της σκόνης βρίσκεται εντός των ορίων  $50 - 100 \text{ g/m}^3$  (Ελάχιστη συγκέντρωση) και  $2 - 3 \text{ kg/m}^3$  (Μέγιστη συγκέντρωση). Σύμφωνα με τους Hertzberg et al. [19], το κατώτερο όριο συγκέντρωσης καθορίζεται από την ελάχιστη ποσότητα σωματιδίων που πρέπει να υπάρχει για να διατηρηθεί η καύση, εφόσον μια ορισμένη στοιχειομετρική συγκέντρωση πτητικών ουσιών αρκεί για να διαδοθεί γρήγορα η φλόγα στο νέφος σκόνης, ενώ το ανώτατο όριο συγκέντρωσης εξαρτάται από την ελάχιστη ποσότητα οξυγόνου που απαιτείται για την έκρηξη. Η σχέση που συνδέει τη συγκέντρωση σκόνης με την ενέργεια ανάφλεξης είναι παραβολική. Με τη μείωση της συγκέντρωσης σκόνης, η ενέργεια ανάφλεξης φτάνει σε μια ελάχιστη τιμή. Περαιτέρω μείωση της συγκέντρωσης σκόνης συνεπάγεται αύξηση της ενέργειας ανάφλεξης [20].

### ΘΕΡΜΟΚΡΑΣΙΑ ΑΝΑΦΛΕΞΗΣ ΤΟΥ ΝΕΦΟΥΣ ΣΚΟΝΗΣ—ΑΕΡΙΟΥ

Η χαμηλότερη θερμοκρασία καύσης μιας περιοχής του νέφους σκόνης, κατά τη διάρκεια της θέρμανσής του, χαρακτηρίζεται ως *ελάχιστη θερμοκρασία ανάφλεξης*. Η τιμή της ελάχιστης θερμοκρασίας ανάφλεξης αυξάνει με την παρουσία υγρασίας ή αδρανών ουσιών στο νέφος σκόνης, ενώ μειώνεται με τη μείωση του μεγέθους των σωματιδίων και την αύξηση της συγκέντρωσης των πτητικών ουσιών στο μείγμα αερίου—σκόνης, της συγκέντρωσης οξυγόνου και του πάχους του στρώματος σκόνης. Η μέτρηση της ελάχιστης θερμοκρασίας καύσης είναι σημαντική για την εξάλειψη πηγών ανάφλεξης, καθώς και τον σχεδιασμό συστημάτων καταστολής της έκρηξης.

Όταν το νέφος σκόνης υπόκειται σε θερμοκρασίες υψηλότερες από τη χαμηλότερη θερμοκρασία καύσης, το χαμηλότερο όριο ανάφλεξης και η ελάχιστη τιμή της συγκέντρωσης εκρηκτικής σκόνης μειώνονται, όπως επίσης και η μέγιστη απόλυτη πίεση έκρηξης. Τυπικές θερμοκρασίες ανάφλεξης της σκόνης τριών συνήθων υλικών στον αέρα σχετικής υγρασίας 30 έως 90% είναι: *αλεύρι σίτου* (410 έως 430 °C), *άμυλο καλαμποκιού* (410 έως 450 °C) και *σκόνη σίκαλης* (430 έως 500 °C). Αξίζει να σημειωθεί ότι η ανάφλεξη της σκόνης αυτών των υλικών μπορεί να γίνει και σε θερμοκρασία 200 °C, αρκεί οι συνθήκες να είναι ευνοϊκές (μικρότερη σχετική υγρασία, μικρότερο μέγεθος σωματιδίων και υψηλή τυρβώδη διαταραχή) [21].

### Ο ΡΟΛΟΣ ΤΗΣ ΤΥΡΒΗΣ

Η τύρβη είναι απαραίτητη για την εμφάνιση των εκρήξεων σκόνης καθώς είναι αναγκαία για τη διασπορά των σωματιδίων, την ανάμιξή τους με τον αέρα και τη διατήρησή τους. Η τύρβη παίζει περίπλοκο ρόλο στον κίνδυνο έκρηξης σκόνης. Από τη μια πλευρά, η αυξημένη ένταση της τύρβης μειώνει τον κίνδυνο έκρηξης, καθώς μειώνεται ο συντελεστής ευαισθησίας της εκρηκτικότητας. Η φυσική ερμηνεία αυτού είναι ότι με την αύξηση της τύρβης αναμειγνύεται μεγαλύτερη ποσότητα ρευστού χαμηλής θερμοκρασίας με το μόλις αναφλεγόμενο μίγμα αέρα-σκόνης, με αποτέλεσμα αυτό το φαινόμενο απόσβεσης να εμποδίζει την περαιτέρω ανάφλεξη του καυσίμου. Όμως από την άλλη πλευρά, για ένα μόλις ενεργειακά πλούσιο αναφλεγόμενο μίγμα σκόνης-αερίων, η αύξηση της τύρβης αυξάνει σημαντικά τον κίνδυνο έκρηξης, καθώς αυξάνεται ο συντελεστής ευαισθησίας της εκρηκτικότητας, ειδικά όταν αυξάνεται η ταχύτητα φλόγας και, κατ' επέκταση, ο ρυθμός αύξησης της πίεσης και η τιμή της παραμέτρου  $K_{St}$ .

## ΠΡΟΛΗΨΗ ΚΑΙ ΠΕΡΙΟΡΙΣΜΟΣ ΤΗΣ ΕΚΡΗΞΗΣ ΣΚΟΝΗΣ

Οι εύφλεκτες σκόνες δεν είναι απαραίτητα εκρηκτικές και, συνεπώς, για την πρόβλεψη του βαθμού της εκρηκτικότητάς τους καταφεύγουμε σε ένα σύνολο τυποποιημένων δοκιμών με στόχο τον προσδιορισμό των παραμέτρων που τον επηρεάζουν σημαντικά. Στον πίνακα 1-2 παρουσιάζονται οι σχετικές παράμετροι.

Πίνακας 1-2 Παράμετροι που επηρεάζουν το βαθμό εκρηκτικότητας του μείγματος		
Δείκτης Σοβαρότητας της Έκρηξης	Μονάδα Μέτρησης	Ορισμοί - Διευκρινήσεις
$P_{max}$ (MEP)	bar	Μέγιστη πίεση κατά την έκρηξη. Με την αύξηση αυτής, αυξάνει ο κίνδυνος έκρηξης.
$(dP/dt)_{max}$ (MRPR)	bar/s	Μέγιστος ρυθμός μεταβολής της πίεσης με αρχικές συνθήκες 1 bar και 25°C. Με την αύξηση αυτού, αυξάνει ο κίνδυνος έκρηξης. Ο όρος αυτός συνήθως προσδιορίζεται πειραματικά.
$K_{st}$	bar m <sup>-1</sup> s <sup>-1</sup>	Μέγιστος κανονικοποιημένος ρυθμός αύξησης της πίεσης. Με την αύξηση αυτού, αυξάνει ο κίνδυνος έκρηξης. Ο όρος αυτός προσδιορίζεται πάντα πειραματικά.
$S_u$ , $S_f$	m/s	Ταχύτητα καύσης ως προς ακίνητο παρατηρητή, $S_f$ . Αυτή αυξάνει συνεχώς και είναι δυνατό να φτάσει σε υπερηχητικές τιμές κατά τη μετάβαση από την κατάκαυση στην έκρηξη. Στρωτή ταχύτητα καύσης, $S_u$ , ως προς το άκαυστο μείγμα υπό στοιχειομετρική αναλογία. Η ταχύτητα $S_u$ κυμαίνεται μεταξύ των τιμών 0,2 -0,4 m/s.
LFL ή LEL ή MEC	g/m <sup>3</sup> ή kg/m <sup>3</sup>	Ελάχιστη συγκέντρωση ουσίας, η οποία μπορεί να καεί ή να εκραγεί. Προσδιορίζεται πειραματικά σε πίεση 1 bar και θερμοκρασία δωματίου. Ο κίνδυνος έκρηξης αυξάνεται με τη μείωση του LEL, ακόμη και για πολύ μικρή συγκέντρωση σωματιδίων.
UFL ή UEL	g/m <sup>3</sup> ή kg/m <sup>3</sup>	Μέγιστη συγκέντρωση ουσίας που μπορεί να καεί ή εκραγεί. Προσδιορίζεται πειραματικά σε πίεση 1 bar και θερμοκρασία δωματίου. Από πρακτική άποψη, η παράμετρος αυτή ενδιαφέρει περισσότερο τα αέρια, παρά τα στερεά σωματίδια. Αυτό συμβαίνει επειδή στα στερεά σωματίδια, η συγκέντρωση μεταβάλλεται συνεχώς λόγω της καθίζησης.
UFL – LFL	g/m <sup>3</sup> ή kg/m <sup>3</sup>	Εύρος συγκέντρωσης της σκόνης στο εκρηκτικό μείγμα. Γενικά, όσο αυξάνει το εύρος της συγκέντρωσης, τόσο αυξάνεται η πιθανότητα της ανάφλεξης, συνεπώς, και ο κίνδυνος έκρηξης του μείγματος.
LFP	°C ή K	Χαμηλότερο σημείο ανάφλεξης, δηλαδή η μικρότερη θερμοκρασία στην οποία η ουσία φτάνει τη μέγιστη τάση ατμών. Ο κίνδυνος έκρηξης του μείγματος αυξάνεται με τη μείωση της τιμής του LFP.
MIE	mJ	Ελάχιστη απαιτούμενη ενέργεια για τη δημιουργία σπινθήρα (από τον αναφλεκτήρα), ικανού να προκαλέσει ανάφλεξη του μείγματος. Να σημειωθεί ότι όσο μικρότερη είναι η τιμή του MIE, τόσο πιο εύκολα εκρήγνυται το συγκεκριμένο μείγμα.
MOC ή LOC	mol ή vol% O <sub>2</sub>	Ελάχιστη συγκέντρωση οξυγόνου στο αέριο μείγμα που απαιτείται για την καύση του. Δηλαδή, η ανάφλεξη της σκόνης ευνοείται με την αύξηση της τιμής του MOC.
MESG	Mm	Μέγιστο διάκενο ασφαλείας που επιτρέπει τη διάδοση της φλόγας σε συγκεκριμένο σωματίδιο. Δηλαδή, όσο μικρότερο είναι το MESG τόσο αυξάνεται ο κίνδυνος έκρηξης των γειτνιαζόντων σωματιδίων του μείγματος.
MIT ή AIT	°C ή K	Ελάχιστη θερμοκρασία της επιφάνειας η οποία έρχεται σε επαφή με το νέφος σκόνης-αέρα, που είναι δυνατόν να προκαλέσει έκρηξη του μείγματος.

Το Γραφείο Ορυχείων (The Bureau of Mines) όρισε έναν *δείκτη εκρηκτικής συμπεριφοράς* της σκόνης, με αναφορά τα χαρακτηριστικά του άνθρακα του Pittsburgh, που ορίζεται από την σχέση:



$$IE = IS \times ES \quad (1-6)$$

Οι όροι  $IS$  και  $ES$  που υπάρχουν στην Εξ. (1-6) ορίζονται από τις σχέσεις:

$$IS = \frac{(MIT \cdot MIE \cdot MEC)_{Pc}}{(MIT \cdot MIE \cdot MEC)_{sample}} \quad (1-7) \quad ES = \frac{(MEP \cdot MRPR)_{Pc}}{(MEP \cdot MRPR)_{sample}} \quad (1-8)$$

\* $Pc$ : Pittsburgh coal

### 1-3 Απλοποιημένο Μαθηματικό Μοντέλο της Έκρηξης Σκόνης

#### ΘΕΡΜΟΚΡΑΣΙΑ ΑΝΑΦΛΕΞΗΣ ΤΟΥ ΝΕΦΟΥΣ ΣΚΟΝΗΣ

Σύμφωνα με τον Hottel et al. [22], ο ρυθμός αντίδρασης της οξειδωσης ενός σφαιρικού σωματιδίου διαμέτρου,  $D_p$ , δίνεται από τη σχέση:

$$-\frac{dm}{dt} = \frac{k_s}{\sqrt{T_s}} \exp\left(-\frac{E}{RT_s}\right) C_g \pi D_p^2 \quad (1-9)$$

όπου  $m$  είναι η μάζα του σωματιδίου,  $k_s$  ο ρυθμός αντίδρασης,  $E$  η ενέργεια ενεργοποίησης και  $C_g$  η συγκέντρωση του οξυγόνου.

Ο αριθμός των σωματιδίων  $n$  πυκνότητας  $\rho_s$  που αποτελούν το νέφος σκόνης διαμέτρου  $l$  και συγκέντρωσης σκόνης  $C_d$  και η θερμότητα που μεταφέρεται στα σωματίδια δίνονται από τις εξισώσεις (1-10) και (1-11), αντίστοιχα:

$$n = C_d l^3 / \rho_s D_p^3 \quad (1-10)$$

$$G = nQ \left(-\frac{dm}{dt}\right) \quad (1-11)$$

Η εξίσωση (1-11) με την αντικατάσταση του όρου  $dm/dt$  από την εξίσωση (1-9) και υποθέτοντας για τη σταθερά  $A$  ότι ισχύει η σχέση  $A = k_s Q$  τροποποιείται ως εξής:

$$G = n \pi D_p^2 \frac{A}{\sqrt{T_s}} \exp\left(-\frac{E}{RT_s}\right) C_g \quad (1-12)$$

Η θερμότητα που μεταφέρεται από τα σωματίδια στο περιβάλλον με συναγωγή και ακτινοβολία δίνεται από τη σχέση:

$$U = \pi D_p^2 h(T_s - T) + \pi D_p^2 (\epsilon_p a_G \sigma T_s^4 - \epsilon_G a_p \sigma T^4) + \pi l^2 (\epsilon_p a_w \sigma T_s^4 - \epsilon_w a_p \sigma T_w^4) \quad (1-13)$$

όπου  $\sigma$  ( $=5.67 \times 10^{-5} \text{ kW}/(\text{m}^2 \text{ K}^4)$ ) είναι η σταθερά Stefan–Boltzmann,  $h$  ο συντελεστής συναγωγής,  $\alpha_G$ ,  $\alpha_p$ ,  $\alpha_w$ ,  $\epsilon_G$ ,  $\epsilon_p$  και  $\epsilon_w$  οι συντελεστές απορροφητικότητας και ακτινοβολίας των αερίων, των σωματιδίων και του τοιχώματος, αντίστοιχα.

Η θερμοκρασία ανάφλεξης προκύπτει από την επίλυση του συστήματος των δύο εξισώσεων αντικαθιστώντας του όρους  $G$  και  $U$  με τις εκφράσεις τους από τις δύο τελευταίες εξισώσεις:

$$G = U \text{ και } \frac{dG}{dT_s} = \frac{dU}{dT_s} \quad (1-14)$$

### ΤΑΧΥΤΗΤΑ ΔΙΑΣΤΟΛΗΣ ΚΑΙ ΤΑΧΥΤΗΤΑ ΔΙΑΛΟΣΗΣ ΤΗΣ ΕΚΡΗΞΗΣ

Η μάζα του σωματιδίου μεταβάλλεται με τον χρόνο σύμφωνα με τη σχέση:

$$m(t) = m_o \left[ 1 - \left( \frac{D_p(t)}{D_{po}} \right) \right] \quad (1-15)$$

Επομένως ο ρυθμός μεταβολής της χρονικά μεταβαλλόμενης μάζας του σωματιδίου λαμβάνεται με παραγωγή της εξίσωσης (1-15):

$$\frac{dm(t)}{dt} = \frac{3m_o}{\tau} \left( 1 - \frac{t}{\tau} \right)^2 \quad (1-16)$$

Η παράμετρος  $\tau$  παριστάνει τον απαιτούμενο χρόνο για την πλήρη καύση ενός σωματιδίου διαμέτρου  $D_p$ , η τιμή του οποίου υπολογίζεται από τη σχέση:

$$\tau = K_D D_p^2 \quad (1-17)$$

Η σταθερά  $K_D$  στην εξίσωση (1-17) μεταβάλλεται περίπου από 100 ~ 1000 (sec/cm<sup>2</sup>).

Αν από την καύση 1 mol σωματιδίων παράγονται  $n_c$  mol αερίου, ο όγκος αυξάνεται υπό σταθερή πίεση  $P$  και θερμοκρασία  $T_G$  από  $V_1$  σε  $V_2$ , οι τιμές τους υπολογίζονται από τις σχέσεις:

$$V_1 = n_N RT_o / P \quad V_2 = (n_N + n_c) RT_G / P \quad (1-18)$$

όπου  $n_N$  είναι ο αριθμός του αερίου ανά ένα mol σωματιδίου και  $n_C$  είναι ο αριθμός των mol του αερίου κατά την καύση ενός mol σωματιδίου.

Η ταχύτητα  $v(\theta)$  που οφείλεται στην αναφερθείσα διαστολή όγκου δίνεται από την σχέση:

$$v(\theta) = \frac{R}{L^2MP} [(n_N + n_C)T_G - n_N T_o] \frac{dm}{d\theta} \quad (1-19)$$

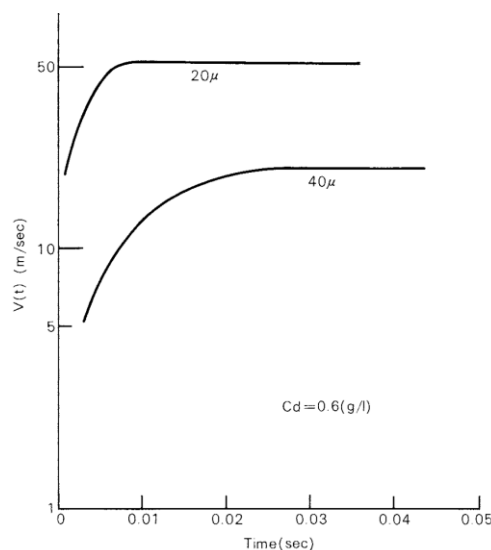
όπου  $M$  είναι το μοριακό βάρος του σωματιδίου. Από τον συνδυασμό των εξισώσεων (1-16) και (1-19), προκύπτει η έκφραση της συνάρτησης  $v(t)$  της ταχύτητας διαστολής:

$$v(t) = \frac{3m_o R}{L^2MP\tau} [(n_N + n_C)T_G - n_N T_o] \left(1 - \frac{t}{\tau}\right)^2 \quad (1-20)$$

Η συνισταμένη ταχύτητα  $V(t)$  (περίπου ίση με την ταχύτητα διαστολής) είναι:

$$V(t) = \sum_{i=1}^{n-1} v(t - i\Delta t) \quad (1-21)$$

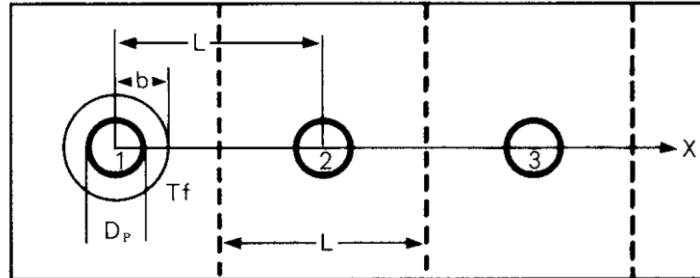
Στο Σχήμα 1-21 παριστάνεται γραφικά η μεταβολή της ταχύτητας  $V$  ως προς τον χρόνο  $t$  στην ειδική περίπτωση σκόνης κυτταρίνης δεδομένης πυκνότητας και συγκέντρωσης.



**Σχήμα 1-8** Η χρονική κατανομή της ταχύτητας διάδοσης της φλόγας σκόνης κυτταρίνης πυκνότητας 1.28 g/cc και συγκέντρωση 0.6 g/l. [23]

### ΤΑΧΥΤΗΤΑ ΔΙΑΔΟΣΗΣ ΤΗΣ ΦΛΟΓΑΣ

Αν θεωρήσουμε ότι ένα νέφος σκόνης καταλαμβάνει ομοιόμορφα έναν πεπερασμένου μεγέθους χώρο σε ομόκεντρες κυκλικές τροχιές όπως φαίνεται στο Σχήμα 1-9.



Σχήμα 1-9 Ομοιόμορφη κατανομή σωματιδίων, διαμέτρου  $D_p$ , σε ομόκεντρες κυκλικές τροχιές.

Η μέση απόσταση,  $L$ , μεταξύ κάθε σωματιδίου διαμέτρου  $D_p$ , υπολογίζεται από τη σχέση:

$$L = \left( \frac{\pi}{6} D_p^3 \rho_s / C_d \right)^{1/3} \quad (1-22)$$

όπου  $C_d$  είναι η συγκέντρωση σκόνης και  $\rho_s$  η πυκνότητα του στερεού. Βάσει της διάταξης των σωματιδίων που φαίνεται στο Σχήμα (1-9), η θερμότητα που εκπέμπεται από την καύση του πρώτου-κεντρικού σωματιδίου οδηγεί στην καύση των σωματιδίων της 1<sup>ης</sup> κυκλικής τροχιάς. Η συνθήκη που καθιστά ικανή τη διάδοση της φλόγας βασίζεται στην υπόθεση ότι η 1<sup>η</sup> κυκλική τροχιά φτάνει στη θερμοκρασία ανάφλεξης και αναφλέγεται τη στιγμή που έχει ολοκληρωθεί η καύση του πρώτου-κεντρικού σωματιδίου. Το όριο της συγκέντρωσης των σωματιδίων,  $C_d$ , ή διαφορετικά το ελάχιστο όριο εκρηκτικής συγκέντρωσης στο νέφος σκόνης υπολογίζεται από την εξίσωση (1-22) της μέσης απόστασης μεταξύ των σωματιδίων ικανοποιώντας, ταυτόχρονα, και την προαναφερθείσα υπόθεση.

Η θερμοκρασία του αερίου,  $T_g$ , υπολογίζεται από την εξίσωση της θερμότητας με αγωγή μεταξύ αερίου και φλόγας. Η συγκεκριμένη εξίσωση εκφράζεται σε σφαιρικές συντεταγμένες με βάση τη διάταξη των σωματιδίων στο Σχήμα (1-9).

$$\frac{\partial T_g}{\partial t} = k \left( \frac{\partial^2 T_g}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial T_g}{\partial r} \right) \quad (1-23)$$

όπου  $k$  είναι ο συντελεστής θερμικής διάχυσης. Η λύση της διαφορικής εξίσωσης (1-23), με τη χρήση των οριακών συνθηκών:  $T = T_f |_{r=R_p}$  και  $T = T_i |_{t=0}$ , όπου  $T_f$  είναι η θερμοκρασία

της φλόγας,  $T_i$  η αρχική θερμοκρασία (ίση με τη θερμοκρασία περιβάλλοντος) και  $R_b$  η ακτίνα της φλόγας, οδηγεί στην ακόλουθη έκφραση της θερμοκρασίας  $T$ :

$$T(r, t) = (T_f - T_i) \frac{R_b}{r} \operatorname{erfc} \left( \frac{r - R_b}{2\sqrt{kt}} \right) + T_i \quad (1-24)$$

Η μαθηματική σχέση που εκφράζει τη θερμική ισορροπία των σωματιδίων είναι:

$$\frac{\pi}{6} D_p^3 \rho_s C_{ps} \frac{dT_d}{dt} = \pi D_p^2 \left( \frac{2k}{D_p} \right) (T_g - T_d) + \frac{\pi}{2} D_p^2 a_p \epsilon_f F \sigma T_f^4 \quad (1-25)$$

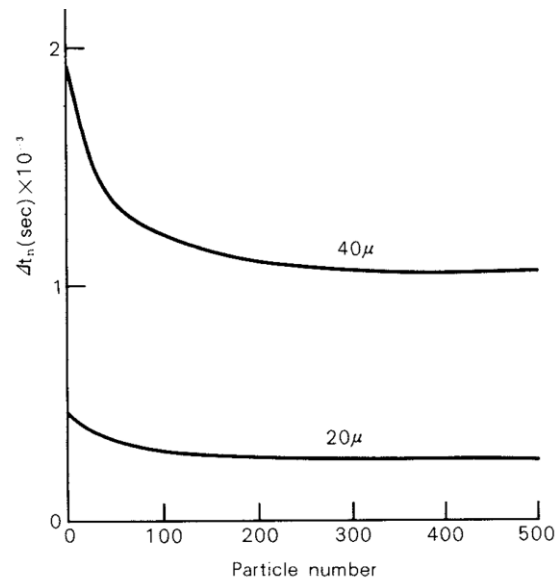
Η χρονικά μεταβαλλόμενη έκφραση της θερμοκρασίας των σωματιδίων προέρχεται από την αναλυτική λύση της εξίσωσης (1-26).

$$T_d(\Delta t) = e^{-A\Delta t} \left[ A \int_0^{\Delta t} e^{A\Delta t} T_g(nL, \Delta t) dt + \frac{B}{A} (e^{A\Delta t} - 1) + T_{do} \right] \quad (1-26)$$

Οι παράμετροι  $A$  και  $B$  στην εξίσωση (1-26) δίνονται από τις σχέσεις:  $A = 12k/\rho_s C_{ps} D_p^2$  και  $B = 3F a_p \epsilon_f F \sigma T_f^4 / \rho_s C_{ps} D_p$ , όπου  $F$  είναι ο παράγοντας σχήματος. Ο χρόνος  $\Delta t$  στον οποίο η θερμοκρασία του σωματιδίου,  $T_d(\Delta t)$ , είναι ίση με τη θερμοκρασία ανάφλεξης,  $T_{ig}$ , ορίζεται ως ο απαιτούμενος χρόνος για τη διάδοση της φλόγας από το  $n$ -οστό στο  $n+1$  σωματίδιο. Εάν οι τιμές του χρόνου  $\Delta t$  και της απόστασης  $L$  μεταξύ των σωματιδίων είναι γνωστές, η ταχύτητα διάδοσης της φλόγας υπολογίζεται από τη σχέση:

$$v = L/\Delta t \quad (1-27)$$

Στο Σχήμα (1-10) απεικονίζεται το χρονικό διάστημα  $\Delta t_n$  συναρτήσει του πλήθους των σωματιδίων του νέφους σκόνης σταθερής συγκέντρωσης σκόνης 0,6 g/l για δύο διαφορετικές διαμέτρους των σωματιδίων 20  $\mu\text{m}$  και 40  $\mu\text{m}$ . Ο χρόνος ανάφλεξης αυξάνεται με την αύξηση της διαμέτρου των σωματιδίων, ενώ είναι ανεξάρτητος από το πλήθος των σωματιδίων που περιέχονται στο νέφος σκόνης.



Σχήμα 1-2 Εξάρτηση του χρόνου  $\Delta t$  από το πλήθος των σωματιδίων με διαμέτρους 20 και 40 $\mu$ m και συγκέντρωση στο νέφος σκόνης 0.6(g/l). [23].

## Κεφάλαιο Δεύτερο

# Υπολογιστική Προσομοίωση της Έκρηξης Σκόνης

Το παρόν κεφάλαιο έχει ως αντικείμενο μελέτης την ανάπτυξη ενός υπολογιστικού μοντέλου έκρηξης σκόνης στο λογισμικό PHOENICS. Στην αρχή του κεφαλαίου περιγράφεται συνοπτικά η δομή και ο τρόπος λειτουργίας του εν λόγω λογισμικού και στη συνέχεια παρουσιάζεται το προς επίλυση σύνολο διαφορικών εξισώσεων μεταφοράς μάζας, ορμής και ενέργειας για την στερεή και την αέρια φάση. Τα αποτελέσματα του υπολογιστικού μοντέλου θα συγκριθούν για διαφορετικά μοντέλα τύρβης, των οποίων οι εξισώσεις παρουσιάζονται αναλυτικά. Οι προς επίλυση διαφορικές εξισώσεις διακριτοποιούνται με τη μέθοδο των πεπερασμένων όγκων ελέγχου ενώ παράλληλα ορίζονται οι αρχικές και οι οριακές συνθήκες του υπό μελέτη φαινομένου. Στο τέλος του κεφαλαίου εξετάζεται η ανεξαρτησία της υπολογιστικής λύσης από τον χωροχρόνο, έτσι ώστε να οριστεί ο χρόνος και ο χώρος διεξαγωγής του ανεπτυγμένου υπολογιστικού μοντέλου για την εξαγωγή των τιμών των εξαρτημένων μεταβλητών του φαινομένου που παρουσιάζονται στο 3<sup>ο</sup> κεφάλαιο.

ΠΕΡΙΕΧΟΜΕΝΑ		
2-1	Εισαγωγή .....	32
2-2	Συνοπτική Περιγραφή του Λογισμικού PHOENICS .....	33
2-3	Διαφορικές Εξισώσεις Ροής .....	34
2-4	Μοντέλο Τύρβης .....	38
2-5	Υπολογιστικό Μοντέλο .....	45
	Διαδικασία Επίλυσης .....	45
	Υπολογιστικό Χωρίο .....	49
	Αρχικές και Οριακές Συνθήκες .....	49
	Ανεξαρτησία Υπολογιστικής Λύσης από τον Χρόνο και τον Χώρο .....	51

## 2-1 Εισαγωγή

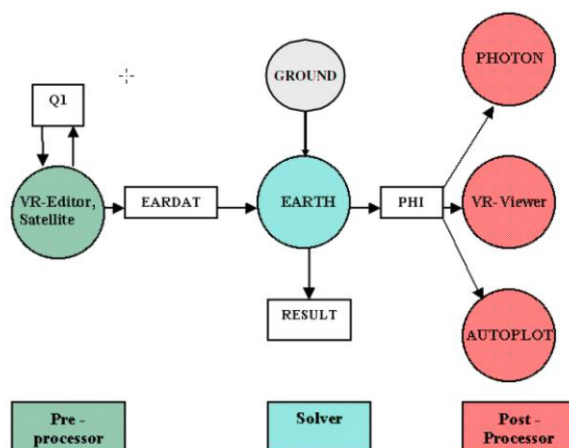
Η υπολογιστική προσομοίωση της έκρηξης σκόνης εξακολουθεί να αποτελεί μέχρι σήμερα πρόκληση για την επιστημονική κοινότητα. Σε μεγάλη κλίμακα το μοντέλο έκρηξης σκόνης προσομοιώνει τη διάδοση της φλόγας αερίων-σκόνης για τον υπολογισμό της υπερπίεσης, ενώ στη μικροκλίμακα του φαινομένου η μοντελοποίηση αποσκοπεί στην αξιολόγηση σημαντικών θερμοφυσικών παραμέτρων, όπως π.χ. η ταχύτητα καύσης, η παράμετρος  $K_{st}$  και η ελάχιστη θερμοκρασία ανάφλεξης. Η υπολογιστική προσομοίωση της χρονικά μεταβαλλόμενης διάδοσης της φλόγας από την έκρηξη σκόνης σε μεγάλη κλίμακα, απαιτεί την αξιολόγηση του βαθμού της αντιδραστικότητας του μείγματος αέρα-σκόνης και τη σύζευξη των μοντέλων καύσης και τύρβης. Σύμφωνα με τη διαθέσιμη βιβλιογραφία, η υπολογιστική προσομοίωση της έκρηξης σκόνης σε μεγάλη κλίμακα προσεγγίζεται ως φλόγα αερίου-αέρα, με τις θερμοφυσικές ιδιότητες της σκόνης να αποτελούν γνωστά πειραματικά δεδομένα [24], [25]. Η υπολογιστική μοντελοποίηση της έκρηξης σκόνης ως διφασική ροή αέρα-σκόνης και η σύζευξή της με το μοντέλο τύρβης αποτελούν ακόμη «ανοικτά» θέματα προς διερεύνηση. Αντίθετα η εξέλιξη των υπολογιστικών προσομοιώσεων στην μικροκλίμακα-είναι ραγδαία, καθώς έχουν προταθεί κατά καιρούς διάφορα μοντέλα [26], [27], [28] για την αξιολόγηση των θερμοφυσικών ιδιοτήτων της σκόνης, ως μία πολλά υποσχόμενη εναλλακτική λύση έναντι των πειραματικών δοκιμών.

Επομένως, η ανάπτυξη της υπολογιστικής προσέγγισης της έκρηξης σκόνης σε μεγάλη κλίμακα, ως διφασική ροή αέρα-σκόνης, κρίνεται αναγκαία τόσο για την ανάπτυξη θεωρητικού μοντέλου της έκρηξης σκόνης, όσο και για το γεγονός ότι μπορεί να αποτελέσει τη βάση για την περαιτέρω ανάπτυξη των κανονισμών ασφαλείας. Στο παρόν κεφάλαιο παρουσιάζεται ένα από τα πιο διαδεδομένα εργαλεία χαμηλού υπολογιστικού κόστους προσομοίωσης φαινομένων μεταφοράς, χημικών αντιδράσεων και καύσης, το λογισμικό PHOENICS (*Parabolic Hyperbolic Or Elliptic Numerical Integration Code Series*) της εταιρείας CHAM, το οποίο και θα χρησιμοποιηθεί στην ανάπτυξη του υπολογιστικού μοντέλου της έκρηξης σκόνης που αποτελεί το αντικείμενο μελέτης της παρούσας εργασίας.



## 2-2 Συνοπτική Περιγραφή του Λογισμικού PHEONICS

Το εμπορικό λογισμικό PHEONICS εμπεριέχει τις τεχνικές υπολογιστικής Ρευστομηχανικής και, συνεπώς, προσφέρεται για την προσομοίωση μεγάλου εύρους φαινομένων ροής ύλης, μεταφοράς θερμότητας και χημικών διεργασιών. Το θεωρούμενο λογισμικό αποτελείται από τρία κύρια τμήματα: το πρόγραμμα *SATELLITE*, το πρόγραμμα *EARTH* και την υπορουτίνα *GROUND*. Η βασική δομή του λογισμικού PHEONICS απεικονίζεται στο Σχήμα 2-1.



Σχήμα 2-1 Βασική δομή του λογισμικού PHEONICS [29].

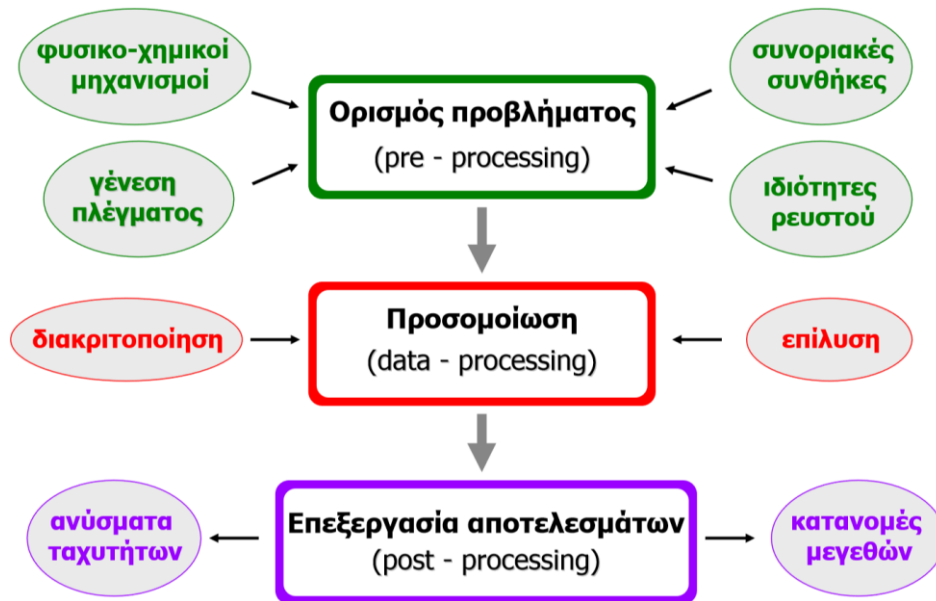
Το πρόγραμμα *SATELLITE* είναι ένας προεπεξεργαστής στον οποίο ορίζεται το υπό μελέτη πρόβλημα. Η γεωμετρία του υπολογιστικού πλέγματος και το σύνολο των απαιτούμενων διαφορικών εξισώσεων, μαζί με τις κατάλληλες οριακές προσδιορίζονται μέσω του συγκεκριμένου προγράμματος, όπως επίσης και τα στοιχεία σύγκλισης στα οποία περιλαμβάνονται οι αρχικές συνθήκες των μεταβλητών, ο αριθμός των επαναλήψεων και η απαραίτητη υποχαλάρωση των εξαρτημένων μεταβλητών του προβλήματος.

Το πρόγραμμα *SATELLITE* μετά από την επεξεργασία των δεδομένων με τα οποία τροφοδοτείται, δημιουργεί το αρχείο δεδομένων EARDAT το οποίο διαβάζεται από το πρόγραμμα EARTH. Το τελευταίο πρόγραμμα χρησιμοποιείται για την επίλυση των διαφορικών εξισώσεων και κατόπιν δημιουργεί το αρχείο εξόδου RESULT στο οποίο αναγράφονται τα αποτελέσματα της προσομοίωσης.

Η υπορουτίνα *GROUND*, σε γλώσσα Fortran, παρέχει πληροφορίες οι οποίες δεν εμπεριέχονται στο πρόγραμμα *SATELLITE*, όπως π.χ. θερμοφυσικές ιδιότητες ρευστών, μη γραμμικές οριακές συνθήκες, ρυθμούς χημικών αντιδράσεων και όρους πηγών.

Η απεικόνιση των αποτελεσμάτων πραγματοποιείται κυρίως από τον γραφικό επεξεργαστή *PHOTON*. Όμως στην παρούσα εργασία, οι κατανομές των μεγεθών των εξαρτημένων μεταβλητών του υπολογιστικού μοντέλου προέκυψαν από τον *GUI-Post processor* με ισούψείς καμπύλες και με γραφήματα των σημείων της διαγωνίου του υπολογιστικού χωρίου.

Η διαδικασία της υπολογιστικής προσομοίωσης της έκρηξης αερίου και νέφους σκόνης-αερίου παρουσιάζεται συνοπτικά στο διάγραμμα ροής του Σχήματος 2-2.



Σχήμα 2-2 Διάγραμμα ροής της υπολογιστική προσομοίωσης στο λογισμικό PHEONICS [29].

### 2-3 Διαφορικές Εξισώσεις Μεταφοράς

Οι *διαφορικές εξισώσεις μεταφοράς* εκφράζουν τους νόμους διατήρησης μάζας, ορμής και ενέργειας για σημείο (απειροστού όγκου) του χώρου στον οποίο συμβαίνει η μεταφορά της ύλης. Στη Μηχανική των Ρευστών, οι εκφράσεις αυτών των τριών νόμων διατήρησης ονομάζονται *διαφορικές εξισώσεις ροής*. Ειδικότερα, ο νόμος διατήρησης της μάζας είναι γνωστός ως *διαφορική εξίσωση συνέχειας*.

Η κατάλληλη επιλογή της υπολογιστικής μεθόδου επίλυσης του πεδίου διφασικής ροής του μείγματος αέρα – σκόνης εξαρτάται από το αν η σωματιδιακή φάση θεωρηθεί συνεχής ή διακριτή. Στην παρούσα υπολογιστική προσομοίωση οι δύο φάσεις θεωρούνται συνεχή μέσα που αλληλοεισέρχονται η μία στην άλλη και καταλαμβάνουν τον ίδιο χώρο, ως εκ τούτου, η απεικόνιση του πεδίου ροής γίνεται με την *προσέγγιση Euler – Euler*.

Με βάση τη συγκεκριμένη προσέγγιση, κάθε φάση είναι διακριτή στον χώρο του μείγματος και το επιμέρους ποσοστό του χώρου που καταλαμβάνει η φάση είναι γνωστή ως **κλάσμα όγκου**,  $R_i$  ( $\text{m}^3/\text{m}^3$ ), [30], [31]. Επομένως σε κάθε σημείο του υπολογιστικού χωρίου πρέπει να ικανοποιείται η εξίσωση:

$$R_1 + R_2 = 1 \quad (2-1)$$

όπου ο δείκτης 1 αναφέρεται στην *αέρια φάση* και ο δείκτης 2 στην *στερεή φάση*.

Σύμφωνα με την προσέγγιση *Euler–Euler*, η κίνηση των σωματιδίων σε κάθε φάση περιγράφεται από τις **διαφορικές εξισώσεις μεταφοράς**, οι οποίες εκφράζουν τους νόμους διατήρησης μάζας, ορμής και ενέργειας για σημείο (απειροστού όγκου) του πεδίου ροής του θεωρούμενου μείγματος. Η εξίσωση που περιγράφει τη διαφορική τριβή ανά μονάδα όγκου στη διεπιφάνεια των δύο φάσεων εισάγεται απευθείας στις εξισώσεις ορμής [32].

Το μοντέλο προσομοίωσης της έκρηξης σκόνης λαμβάνει χώρα σε διδιάστατο ορθογώνιο πεδίο. Οι χωρικές μεταβλητές και ο χρόνος αποτελούν τις *ανεξάρτητες* μεταβλητές του προβλήματος, ενώ οι συνιστώσες της ταχύτητας, η πίεση, η θερμοκρασία, η ενθαλπία, η πυκνότητα, το κλάσμα όγκου, η κινητική ενέργεια της τύρβης και ο ρυθμός απορρόφησης της αποτελούν τις *εξαρτημένες* μεταβλητές του μοντέλου.

Η υπολογιστική μοντελοποίηση έκρηξης σκόνης βασίστηκε στις εξής παραδοχές:

1. Η *αέρια φάση* υπακούει στην *καταστατική εξίσωση ιδανικού αερίου*.
2. Τα *σωματίδια της στερεής φάσης* θεωρούνται *αδρανή, άκαμπτα και σφαιρικά*.
3. Η *ειδική θερμοχωρητικότητα των δύο φάσεων (αέριας και στερεής)* παραμένει *σταθερή*.
4. Η *κατανομή της θερμοκρασίας σε κάθε σωματίδιο* θεωρείται *ομοιόμορφη*.
5. Το *κλάσμα όγκου των σωματιδίων* θεωρείται *μικρό* και, *κατά συνέπεια, οι συγκρούσεις μεταξύ των σωματιδίων αμελητέες*.
6. Οι *μηχανισμοί μεταφοράς θερμότητας με ακτινοβολία και συναγωγή μεταξύ αερίου και σκόνης* δεν συμπεριλαμβάνονται στο ενεργειακό ισοζύγιο.

Το σύνολο των παραπάνω παραδοχών οδηγεί στην κατάστρωση του συστήματος των διαφορικών εξισώσεων διατήρησης της μάζας, της ορμής και της ενέργειας που περιγράφουν το χρησιμοποιούμενο υπολογιστικό μοντέλο.

**ΔΕ Μεταφοράς Μάζας:** Οι μαθηματικές εκφράσεις της εξίσωσης αυτής για την αέρια φάση ( $i = 1$ ) και τη στερεή φάση ( $i = 2$ ) στο σύστημα καρτεσιανών συντεταγμένων ( $x, y, z$ ) είναι :

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho_1 R_1) + \frac{\partial}{\partial x}(\rho_1 R_1 u_1) + \frac{\partial}{\partial y}(\rho_1 R_1 v_1) = \dot{m}''_{21} \quad (2-2.1)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho_2 R_2) + \frac{\partial}{\partial x}(\rho_2 R_2 u_2) + \frac{\partial}{\partial y}(\rho_2 R_2 v_2) = -\dot{m}''_{21} \quad (2-2.2)$$

όπου ο όρος  $\dot{m}''_{21}$  εκφράζει τον ρυθμό μεταφοράς μάζας ανά μονάδα επιφάνειας από την στερεή στην αέρια φάση, λόγω της αεριοποίησης των στερεών σωματιδίων.

**ΔΕ Μεταφοράς Ορμής:** Η καρτεσιανή έκφραση της συγκεκριμένης εξίσωσης για την αέρια φάση ( $i = 1$ ) και τη στερεή φάση ( $i = 2$ ) εκφράζεται μαθηματικά ως εξής:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho_i R_i \varphi) + \frac{\partial}{\partial x}(\rho_i u_i R_i \varphi) + \frac{\partial}{\partial y}(\rho_i v_i R_i \varphi) = \frac{\partial}{\partial x} \left( R_i \Gamma_\varphi \frac{\partial \varphi}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left( R_i \Gamma_\varphi \frac{\partial \varphi}{\partial y} \right) + S_\varphi \quad (2-3)$$

όπου  $\varphi$  είναι οι συνιστώσες της ταχύτητας της κάθε φάσης. Ο όρος διάχυσης,  $\Gamma_\varphi$ , παριστάνει τη μοριακή και την τυρβώδη ανάμειξη εντός της φάσης και ο όρος πηγής,  $S_\varphi$ , εκφράζει την δύναμη αλληλεπίδρασης των δύο φάσεων στη διεπιφάνεια αυτών. Οι αναλυτικές εκφράσεις των όρων διάχυσης και πηγής δίνονται από τις παρακάτω σχέσεις:

$$\Gamma_\varphi = \frac{\partial}{\partial x_j} \left( R_i \mu_{eff} \frac{\partial u_i}{\partial x_j} \right) \quad S_\varphi = -FIP(u_i - u_j) \quad (2-4)$$

Για τον υπολογισμό του συντελεστή αλληλεπίδρασης,  $FIP$ , των δύο φάσεων στη διεπιφάνεια τους, χρησιμοποιήθηκε το μοντέλο **διασκορπισμένης ροής**. Σύμφωνα με το μοντέλο αυτό, στο οποίο η κύρια φάση είναι η αέρια, ο συντελεστής  $FIP$  υπολογίζεται από την σχέση:

$$FIP = 0.75 C_d RHO1 R2 R1^* Vol < V_{slip}, CFIPA > / D_p \quad (2-5)$$

όπου  $D_p$  είναι η διάμετρος της διασκορπισμένης φάσης και  $Vol$  ο όγκος του όγκου ελέγχου.

Το λογισμικό PHOENICS [33] παρέχει στον χρήστη την δυνατότητα να επιλέξει τον τύπο της διασκορπισμένης φάσης από τον ορισμό της παραμέτρου CFIPD. Η συγκεκριμένη παράμετρος μπορεί να καθοριστεί από ένα σύνολο συσχετίσεων που περιγράφουν τον συντελεστή οπισθέλ-

κουσας,  $C_d$ . Στο παρόν υπολογιστικό μοντέλο επιλέχθηκε η σχέση που αντιστοιχεί στην πρότυπη καμπύλη οπισθέλκουσας. Η απόρριψη των υπόλοιπων συσχετίσεων έγινε διότι αυτές λαμβάνουν υπ' όψιν τη δύναμη Stokes, αφορούν τη μοντελοποίηση φυσαλίδων ή απαιτούν το κλάσμα όγκου της κύριας φάσης να είναι μεγαλύτερο από 0.8. Αξίζει να σημειωθεί ότι η επιλεγμένη έκφραση του συντελεστή  $C_d$  δεν παραβιάζει την ισχύ της 2<sup>ης</sup> παραδοχής.

Η σχέση που εκφράζει τον συντελεστή οπισθέλκουσας, βάσει του επιλεγμένου μοντέλου, εξαρτάται από το εύρος τιμών που λαμβάνει ο αριθμός Reynolds,  $Re_p$ , των σωματιδίων. Η αδιάστατη παράμετρος  $Re_p$  ορίζεται από τη σχέση:

$$Re_p = \frac{D_p \rho_1 V_{slip}}{\mu_1} \quad (2-6)$$

όπου  $V_{slip}$  είναι η σχετική ταχύτητα μεταξύ της αέριας και της στερεής φάσης και  $\mu_1$  το δυναμικό ιξώδες της κύριας φάσης.

Στον Πίνακα 2-1 δίνονται οι τιμές των παραμέτρων που αποτελούν τη δύναμη αλληλεπίδρασης μεταξύ δύο φάσεων σε επαφή. Η ονοματολογία των παραμέτρων έγινε σύμφωνα με αυτή που περιέχεται στο λογισμικό PHEONICS [33].

Πίνακα 2-1 Παράμετροι της δύναμης αλληλεπίδρασης μεταξύ δύο φάσεων σε επαφή		
Παράμετρος	Ερμηνεία	Τιμή
CFIPA	Ελάχιστη επιτρεπόμενη τιμή της ταχύτητας ολίσθησης, $V_{slip}$ , μεταξύ των δύο φάσεων	$10^{-2}$ m/s
CFIPB	Διάμετρος σωματιδίου	25 $\mu$ m
RLOLIM	Μέγιστη τιμή του κλάσματος όγκου της κύριας φάσης, $R_1$	$10^{-9}$

**ΔΕ Μεταφοράς Ενέργειας:** Η καρτεσιανή έκφραση της εξίσωσης αυτής για την  $i$ -φάση, λαμβάνοντας υπ' όψιν και την 6<sup>η</sup> παραδοχή, είναι:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} (\rho_i R_i \tilde{h}_i) + \frac{\partial}{\partial x} (\rho_i u_i R_i \tilde{h}_i) + \frac{\partial}{\partial y} (\rho_i v_i R_i \tilde{h}_i) \\ = \pm \dot{m}_{21}'' \left( h_s + \frac{u_1^2}{2} + \frac{v_1^2}{2} \right) + (-FIP(u_i - u_j)u_i) \end{aligned} \quad (2-7)$$

Ο ενθαλπικός όρος παριστάνει την ενέργεια που εκλύεται κατά την ανάφλεξη του νέφους σκόνης-αερίου,  $h_s = \tilde{h}_i + h_c$ .

## 2-4 Μοντέλο Τύρβης

Τα μοντέλα των εξισώσεων μεταφοράς για την τυρβώδη κινητική ενέργεια  $k$  και του ρυθμού απορρόφησης της κινητικής ενέργειας  $\varepsilon$  επιλύονται μόνο για την κύρια/συνεχή φάση. Ωστόσο τα τυρβώδη μοντέλα τροποποιούνται κατάλληλα έτσι ώστε η τύρβη να έχει λάβει τις απαραίτητες πληροφορίες από τη διασκορπισμένη φάση.

Στην παρούσα εργασία η υπολογιστική προσέγγιση του φαινομένου της έκρηξης σκόνης έγινε με τη μελέτη και τη σύγκριση των εξής μοντέλων τύρβης: του πρότυπου μοντέλου  $k-\varepsilon$  και μίας παραλλαγής αυτού, του κανονικοποιημένου μοντέλου  $k-\varepsilon$ , του «σύνθετου»  $k-\omega$  SST και του μοντέλου τάσεων Reynolds. Επίσης, δοκιμάστηκε η προσομοίωση της τύρβης από τη μέθοδο προσομοίωσης μεγάλων δινών, LES, κάνοντας χρήση του μοντέλου Smagorinsky που είναι διαθέσιμο ως προεπιλογή στο λογισμικό PHOENICS.

**Πρότυπο Μοντέλο  $k-\varepsilon$  (standard  $k-\varepsilon$ ):** Το μοντέλο αυτό αποτελεί το βασικό εργαλείο μοντελοποίησης της τύρβης για βιομηχανικές προσομοιώσεις διεργασιών μεταφοράς ύλης και θερμότητας. Το μοντέλο αυτό αναπτύχθηκε από τους Spalding και Launder [34] και βασίζεται σε δύο εξισώσεις που εκφράζουν την τυρβώδη κινητική ενέργεια της τύρβης,  $k$  ( $m^2/s^2$ ) και τον «μέσο» ρυθμό απορρόφησης της τυρβώδους κινητικής ενέργειας [που είναι γνωστή και ως συνάρτηση καταστροφής της τύρβης,  $\varepsilon$  ( $m^2/s^3$ )].

Η κλίμακα της ταχύτητας και του μήκους της δίνης μπορούν να εκφραστούν συναρτήσει των δύο παραπάνω μεταβλητών από τις παρακάτω σχέσεις:

$$u = k^{1/2} \quad l = \frac{k^{3/2}}{\varepsilon} \quad (2-8)$$

Η κινητική ενέργεια  $k$  και η συνάρτηση καταστροφής  $\varepsilon$  της τύρβης εκφράζονται μαθηματικά με τις διαφορικές εξισώσεις (2-9) και (2-10), αντίστοιχα:

$$\frac{\partial(\rho_i R_i k_i)}{\partial t} + \nabla(\rho_i R_i u_i k_i) = \nabla \left[ R_i \left( \mu_{L,i} + \frac{\mu_{T,i}}{\sigma_k} \right) \nabla k_i \right] + R_i \Pi_i - R_i \rho_i \varepsilon_i + S_k \quad (2-9)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial(\rho_i R_i \varepsilon_i)}{\partial t} + \nabla(\rho_i R_i u_i \varepsilon_i) \\ = \nabla \left[ R_i \left( \mu_{L,i} + \frac{\mu_{T,i}}{\sigma_k} \right) \nabla \varepsilon_i \right] + C_1 R_i \frac{\varepsilon_i}{k_i} \Pi_i - C_2 R_i \rho_i \frac{\varepsilon_i^2}{k_i} + S_\varepsilon \end{aligned} \quad (2-10)$$

όπου ο όρος  $\Pi_i$  παριστάνει τον ρυθμό παραγωγής της τυρβώδους κινητικής ενέργειας και οι  $S_k$  και  $S_\varepsilon$  αποτελούν επιπλέον όρους πηγής που σχετίζονται με την αλληλεπίδραση των δύο φάσεων. Για την ειδική περίπτωση όπου το τυρβώδες μοντέλο λύνεται μόνο για την κύρια φάση, ο δείκτης  $i = 1$ . Να σημειωθεί ότι για τη διασκορπισμένη φάση, οι τάσεις Reynolds θεωρούνται αμελητέες και, συνεπώς, η ροή της διασκορπισμένης φάσης είναι στρωτή.

Στο συμβατικό μοντέλο  $k$ - $\varepsilon$  προκειμένου να ληφθεί υπ' όψιν η επίδραση της διασκορπισμένης φάσης στον σχηματισμό και την εξέλιξη της τύρβης, οι όροι  $S_k$  και  $S_\varepsilon$  εκφράστηκαν ως εξής:

$$\begin{aligned} S_k &= R_1 \cdot P_b \\ S_\varepsilon &= \frac{R_1 \cdot C_1 \cdot P_b \cdot \varepsilon}{k} \end{aligned} \quad (2-11)$$

Ο όρος  $P_b$  που υπάρχει στις δύο εξισώσεις (2-11) παριστάνει τον ρυθμό παραγωγής της τυρβώδους κινητικής ενέργειας η οποία οφείλεται στην οπισθέλκουσα δύναμη που ασκείται στα στερεά σωματίδια κατά την κίνησή τους στην αέρια φάση και δίνεται από τη σχέση:

$$P_b = C_b \cdot (F_i \cdot V_{slip}) \quad (2-12)$$

όπου ο συντελεστής  $C_b$  είναι μια εμπειρική σταθερά.

Το τυρβώδες ιζώδες,  $\mu_{T,i}$ , δίνεται από την παρακάτω εξίσωση:

$$\mu_{T,i} = C_\mu \rho_i \frac{k_i^2}{\varepsilon_i} \quad (2-13)$$

Οι σταθερές του τυρβώδους μοντέλου  $k$ - $\varepsilon$  παρουσιάζονται στον Πίνακα 2-2.

Πίνακας 2-2 Τιμές των σταθερών του τυρβώδους μοντέλου $k$ - $\varepsilon$				
$C_\mu$	$C_1$	$C_2$	$S_k$	$S_\varepsilon$
0,009	1,44	1,92	1	1,314

**Κανονικοποιημένο Μοντέλο  $k$ - $\varepsilon$  (RNG  $k$ - $\varepsilon$ ):** Το μοντέλο αυτό είναι στην ουσία μια βελτιωμένη μορφή του πρότυπου μοντέλου  $k$ - $\varepsilon$  [35], [36], οι κύριες διαφορές ως προς το πρότυπο  $k$ - $\varepsilon$  είναι οι εξής:

- Περιέχει έναν πρόσθετο όρο στην εξίσωση μεταφοράς της τυρβώδους κινητικής ενέργειας,  $\varepsilon$ , η παρουσία του οποίου βελτιώνει την ακρίβεια των αποτελεσμάτων στις περιπτώσεις ροών ταχείας παραμόρφωσης.
- Ενσωματώνει την επίδραση δινών στην τύρβη.
- Περιλαμβάνει μια αναλυτική σχέση η οποία επιτρέπει τον άμεσο προσδιορισμό του αριθμού Prandtl, σε αντίθεση με το πρότυπο μοντέλο  $k$ - $\varepsilon$  όπου ζητείται από τον χρήστη η εισαγωγή της παραμέτρου αυτής ως σταθερά.
- Έχει ενσωματωμένη μια διαφορική συνάρτηση για την ενεργή συνεκτικότητα η οποία δίνει τη δυνατότητα μελέτης ροών με μικρό αριθμό Reynolds.

Η σημαντικότερη διαφορά μεταξύ των δύο προαναφερθέντων μοντέλων βρίσκεται στην αντικατάσταση της σταθεράς  $C_{\varepsilon,1}$ , που περιέχεται στην εξίσωση μεταφοράς της ενέργειας  $\varepsilon$ , με τη συνάρτηση  $C_{\varepsilon,2}$ , που επιτρέπει πιο ακριβή προσέγγιση ροών ταχείας παραμόρφωσης.

Ο τρόπος που επηρεάζει αυτός ο όρος τον ρυθμό απορρόφησης της κινητικής ενέργειας,  $\varepsilon$ , μπορεί να γίνει οπτικά αντιληπτός στις παρακάτω εξισώσεις:

$$\frac{\partial(\rho_i R_i k_i)}{\partial t} + \nabla(\rho_i R_i u_i k_i) = \nabla \left[ R_i \left( \mu_{L,i} + \frac{\mu_{T,i}}{\sigma_k} \right) \nabla k_i \right] + R_i \Pi_i - R_i \rho_i \varepsilon_i \quad (2-14)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial(\rho_i R_i \varepsilon_i)}{\partial t} + \nabla(\rho_i R_i u_i \varepsilon_i) \\ = \nabla \left[ R_i \left( \mu_{L,i} + \frac{\mu_{T,i}}{\sigma_k} \right) \nabla \varepsilon_i \right] + \frac{\varepsilon_i}{k_i} (C_{\varepsilon,1} R_i \Pi_k - C_{\varepsilon,2} R_i \rho_i \varepsilon_i) - R_i \rho_i R \end{aligned} \quad (2-15)$$

Ο όρος  $R$  που εμφανίζεται στην εξίσωση (2-15) δίνεται από την ακόλουθη σχέση:

$$R = \frac{C_\mu \eta^3 (1 - \eta/\eta_o) \varepsilon^2}{1 + \beta_1 \eta^3} \frac{1}{k} \quad (2-16)$$

Η μεταβλητή  $\eta$  που υπάρχει στην εξίσωση (2-16) δίνεται από την συναρτησιακή σχέση:

$$\eta = S \frac{k}{\varepsilon} \quad , \quad S = (S_{ij} S_{ij})^{\frac{1}{2}} \quad , \quad S_{ij} = \frac{1}{2} \left( \frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) \quad (2-17)$$

Οι τιμές των σταθερών του συγκεκριμένου τυρβώδους μοντέλου δίνονται στον Πίνακα 2-3:



Πίνακας 2-3 Τιμές των σταθερών του τυρβώδους μοντέλου RNG $k-\varepsilon$						
$C_\mu$	$C_{\varepsilon,1}$	$C_{\varepsilon,2}$	$S_k$	$S_\varepsilon$	$\eta_0$	$\beta_1$
0,0845	1,42	1,68	0,718	0,718	4,38	0,012

«Σύνθετο» Μοντέλο  $k-\omega$  (SST  $k-\omega$ ): Αυτό είναι ένα υβριδικό μοντέλο που αναπτύχθηκε από τον Menter [37] και προέρχεται από τη μείξη των μοντέλων τύρβης  $k-\varepsilon$  και  $k-\omega$  ενσωματώνοντας τα πλεονεκτήματα και των δύο. Είναι παρόμοιο με το κλασικό μοντέλο  $k-\omega$  που προτάθηκε από τον Wilcox [38], με τη διαφορά ότι περιλαμβάνει και έναν μετασχηματισμό του μοντέλου  $k-\varepsilon$ . Συγκεκριμένα, το σύνθετο μοντέλο  $k-\omega$  χρησιμοποιεί:

- Έναν μετασχηματισμό του  $k-\varepsilon$  μοντέλου σε  $k-\omega$  στην περιοχή κοντά στο τοίχωμα, καθώς το πρώτο είχε μη ικανοποιητική απόδοση για οριακές συνθήκες με δυσμενείς κλίσεις πίεσης.
- Το μοντέλο  $k-\varepsilon$  σε περιοχές πολύ μακριά από το τοίχωμα.

Οι εξισώσεις μεταφοράς για την τυρβώδη κινητική ενέργεια,  $k$ , και για τον ειδικό ρυθμό απόσβεσης (δηλαδή, τον ρυθμό απόσβεσης ανά μονάδα τυρβώδους κινητικής ενέργειας, που είναι γνωστός και ως τυρβώδης συχνότητα),  $\omega$ , και μπορεί να θεωρηθεί ως ο λόγος του  $\varepsilon$  προς το  $k$ , εκφράζονται μαθηματικά ως εξής:

$$\frac{\partial(\rho_i R_i k)}{\partial t} + \nabla(\rho_i R_i u_i k_i) = \nabla \left[ R_i \left( \mu + \frac{\mu_t}{\sigma_{k1}} \right) \nabla k_i \right] + R_i \Pi_k - \beta^* R_i \rho_i k \omega \quad (2-18)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial(\rho_i R_i \omega)}{\partial t} + \nabla(\rho_i R_i u_i \omega_i) &= \nabla \left[ R_i \left( \mu + \frac{\mu_t}{\sigma_{k1}} \right) \nabla \omega_i \right] \\ + \alpha_1 \frac{\omega}{k} \Pi_k - \beta_1 R_i \rho_i \omega^2 + 2(1 - F_1) R_i \rho_i \frac{1}{\omega \sigma_{\omega,2}} \frac{\partial k}{\partial x_j} \frac{\partial \omega}{\partial x_j} \end{aligned} \quad (2-19)$$

Οι συντελεστές του συγκεκριμένου μοντέλου είναι ένας γραμμικός συνδυασμός των αντίστοιχων συντελεστών των μοντέλων  $k-\omega$  και  $k-\varepsilon$ , δηλαδή ισχύει η σχέση:

$$\Phi = F_1 \Phi_{k\omega} + (1 - F_1) \Phi_{k\varepsilon} \quad (2-20)$$

Ο όρος  $F_1$  αποτελεί μια συνάρτηση που επιτρέπει την ομαλή μετάβαση από το ένα μοντέλο στο άλλο. Η  $F_1$  είναι ίση με ένα πάνω στα τοιχώματα οπότε ενεργοποιείται το μοντέλο  $k-\omega$ , ενώ είναι μηδέν στην ελεύθερη ροή, όπου η χρήση του μοντέλου  $k-\varepsilon$  είναι πιο αποτελεσματική.

Ο όρος της τυρβώδους συνεκτικότητας δίνεται από την εξίσωση:

$$\mu_t = \frac{\rho_i k}{\omega} \frac{1}{\max\left[\frac{1}{a^*}, \frac{SF_2}{a_1 \omega}\right]} \quad (2-21)$$

Οι βασικές σταθερές του συγκεκριμένου μοντέλου είναι:

$$\beta^* = 0.09 \quad \beta_1 = 0.075 \quad \alpha_1 = 5/9 \quad \sigma_k = 0.85 \quad \sigma_{\omega,2} = 1.168$$

**Μοντέλο Τάσεων Reynolds (Reynolds stress model):** Το συγκεκριμένο μοντέλο είναι το πιο πολύπλοκο μοντέλο τύρβης καθώς δεν λαμβάνει υπ' όψιν την ισοτροπική θεώρηση της τυρβώδους συνεκτικότητας, όπως συμβαίνει με τα υπόλοιπα μοντέλα τύρβης δύο εξισώσεων, γεγονός που αποτελεί και το σημαντικότερο μειονέκτημά τους, [39]. Η ακριβής έκφραση του μοντέλου τάσεων Reynolds είναι:

$$\frac{DR_{ij}}{Dt} = \frac{\partial R_{ij}}{\partial t} + C_{ij} = P_{ij} + D_{ij} - \varepsilon_{ij} + \Pi_{ij} + \Omega_{ij} \quad (2-22)$$

Η μαθηματική έκφραση και η φυσική ερμηνεία των όρων  $C_{ij}$ ,  $P_{ij}$ ,  $D_{ij}$ ,  $\varepsilon_{ij}$ ,  $\Pi_{ij}$  και  $\Omega_{ij}$  είναι:

$$C_{ij} = \text{div}(\rho_i R_i \overline{u'_j U}) = \{\text{Μεταφορά του } R_{ij} \text{ με συναγωγή}\} \quad (2-23.1)$$

$$P_{ij} = -\left(R_{im} \frac{\partial U_j}{\partial x_m} + R_{jm} \frac{\partial U_i}{\partial x_m}\right) = \{\text{Ρυθμός παραγωγής του } R_{ij}\} \quad (2-23.2)$$

$$D_{ij} = \text{div}\left(\frac{v_t}{\sigma_k} \text{grad} R_{ij}\right) = \{\text{Μεταφορά του } R_{ij} \text{ με διάχυση}\} \quad (2-23.3)$$

(όπου:  $v_t = C_\mu (k^2/\varepsilon)$     $C_\mu = 0.09$     $\sigma_k = 1.0$ )

$$\varepsilon_{ij} = \frac{2}{3} \varepsilon \delta_{ij} = \{\text{Ρυθμός σκέδασης του } R_{ij}\} \quad (\text{όπου } \varepsilon = 2v \overline{s'_{ij} s'_{ij}}) \quad (2-23.4)$$

$$\begin{aligned} \Pi_{ij} &= -C_1 \frac{\varepsilon}{k} \left( R_{ij} - \frac{2}{3} k \delta_{ij} \right) - C_2 \left( P_{ij} - \frac{2}{3} P \delta_{ij} \right) \\ &= \{ \text{όρος συσχέτισης τυρβώδους πίεσης} \sim \text{παραμόρφωσης} \} \\ &\quad (\text{όπου: } C_1 = 1.8 \text{ \& } C_2 = 0.6) \end{aligned} \quad (2-23.5)$$

$$\begin{aligned} \Omega_{ij} &= -2\omega_k (\overline{u'_m u'_m} e_{ikm} + \overline{u'_i u'_m} e_{jkm}) \\ &= \{ \text{Μεταφορά του } R_{ij} \text{ λόγω περιστροφής} \} \end{aligned} \quad (2-23.6)$$

Η κινητική ενέργεια, που είναι απαραίτητη στους παραπάνω όρους [Εξ. (2-23.1) έως και (2-23.6), μπορεί να υπολογιστεί με απλή άθροιση των τριών ορθών τάσεων:

$$k = \frac{1}{2} (R_{11} + R_{22} + R_{33}) = \frac{1}{2} (\overline{u_1'^2} + \overline{u_2'^2} + \overline{u_3'^2}) \quad (2-24)$$

Οι παραπάνω εξισώσεις για τη μεταφορά των τάσεων Reynolds λύνονται μαζί με μια εξίσωση για τον υπολογισμό του ρυθμού βαθμωτής σκέδασης  $\varepsilon$ :

$$\begin{aligned} \frac{D\varepsilon}{Dt} &= \text{div} \left( \frac{v_t}{\sigma_\varepsilon} \text{grad} \varepsilon \right) + C_{1\varepsilon} \frac{\varepsilon}{k} 2v_t S_{ij} \cdot S_{ij} - 2C_{2\varepsilon} \frac{\varepsilon^2}{k} \\ &\quad (\text{όπου: } C_{1\varepsilon} = 1.44 \quad C_{2\varepsilon} = 1.92) \end{aligned} \quad (2-25)$$

**Μοντέλο Προσομοίωσης Μεγάλων Δινών (Large Eddy Simulation):** Η προσέγγιση ΠΜΔ είναι συνδυασμός της άμεσης αριθμητικής προσομοίωσης και των συμβατικών μοντέλων της τύρβης. Οι μεγάλης κλίμακας δίνες προσομοιώνονται άμεσα, ενώ οι μικρής κλίμακας δίνες που δεν μπορούν να επιλυθούν από το πλέγμα (υποπλεγματικές δομές) μοντελοποιούνται. Το συγκεκριμένο μοντέλο προτείνεται για τριδιάστατες προσομοιώσεις παρόλο που οι χρονικά μέσοι όροι είναι μικρότερων διαστάσεων. Ωστόσο αρκετοί ερευνητές το έχουν εφαρμόσει σε διδιάστατα μοντέλα διφασικής ροής με αποδεκτά αποτελέσματα [40]. Τα βασικά βήματα κατά τη χρήση του μοντέλου ΠΜΔ είναι τα εξής [41]:

- Εφαρμόζεται στην ταχύτητα ένα χωρικό φίλτρο, με αποτέλεσμα αυτή να αναλύεται ως εξής:  $u = \hat{u} + u_{sgs}$  όπου  $\hat{u}$  είναι το προς επίλυση μέρος της και  $u_{sgs}$  το μη επιλυόμενο ή, διαφορετικά, το υπο-πλεγματικό μέρος. Το πεδίο των φιλτραρισμένων ταχυτήτων είναι τριδιάστατο και χρονικά ασταθές, αφού παριστάνει την κίνηση των μεγάλων δινών.

- Οι εξισώσεις που προκύπτουν από την εφαρμογή του φίλτρου στις στιγμιαίες εξισώσεις, που περιγράφουν τον όρο  $\hat{u}$ , είναι όμοιες με τις αρχικές. Η βασική διαφορά εμφανίζεται στις εξισώσεις ορμής που περιλαμβάνουν το υπο-πλεγματικό μέρος του τανυστή τάσεων που προκύπτει από το υπο-πλεγματικό μέρος του τανυστή -ταχυτήτων.
- Το υπο-πλεγματικό μέρος των τάσεων μοντελοποιείται με μία από τις γνωστές κλασικές μεθόδους, π.χ. τη μέθοδο Smagorinsky που περιγράφεται στη συνέχεια.
- Επίλυση των εξισώσεων για τον υπολογισμό των φιλτραρισμένων ποσοτήτων.

**Μοντέλο Smagorinsky:** Είναι το πιο γνωστό και παλιό μοντέλο υπο-πλεγματικής μεθόδου με πολύ καλά αποτελέσματα. Στο συγκεκριμένο μοντέλο, οι υπο-πλεγματικές τάσεις  $T_{ij}$  μοντελοποιούνται με βάση την υπόθεση *Boussinesq*, σύμφωνα με την οποία ισχύει η σχέση:

$$T_{ij} - \frac{1}{3}\delta_{ij}T_{kk} = -v_t \left( \frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \tilde{u}_j}{\partial x_i} - \frac{2}{3}\delta_{ij} \frac{\partial \tilde{u}_k}{\partial x_k} \right) = -2v_t \left( \tilde{S}_{ij} - \frac{1}{3}\delta_{ij}\tilde{S}_{ij} \right) \quad (2-26)$$

Το ισότροπο μέρος των υπο-πλεγματικών τάσεων ενσωματώνεται συνήθως στην φιλτραρισμένη πίεση  $\bar{p}$  [42], ενώ το υπο-πλεγματικό κινηματικό ιξώδες  $v_t$  μοντελοποιείται ως εξής:

$$v_t = (C_s \Delta)^2 |\tilde{S}| = (C_s \Delta)^2 \sqrt{2\tilde{S}_{ij}\tilde{S}_{ij}} \quad (2-27)$$

όπου  $\Delta$  είναι το πλάτος του φίλτρου, το οποίο συνήθως είναι ίσο με την κυβική ρίζα του όγκου  $V$  του υπολογιστικού κελιού (δηλαδή,  $\Delta = V^{1/3}$ ) και  $C_s$  η σταθερά *Smagorinsky*, η τιμή της οποίας είναι ίση με 0,17.

## 2-5 Υπολογιστικό Μοντέλο

### ΔΙΑΔΙΚΑΣΙΑ ΕΠΙΛΥΣΗΣ

Η μετατροπή των διαφορικών εξισώσεων που περιγράφουν τη διφασική ροή αερίου-σκόνης σε σύστημα αλγεβρικών εξισώσεων πραγματοποιήθηκε με τη μέθοδο των πεπερασμένων όγκων ελέγχου. Επομένως, οι εξισώσεις διακριτοποίησης, μέσω των οποίων προσδιορίζεται η αριθμητική λύση, προέκυψαν από την ολοκλήρωση της εξίσωσης μεταφοράς μιας εξαρτημένης μεταβλητής  $\varphi_i$  για απειροστό όγκο ελέγχου. Η γενικευμένη μορφή της διαφορικής εξίσωσης μεταφοράς για την εξαρτημένη μεταβλητή  $\varphi_i$  είναι:

$$\frac{\partial}{\partial t}(R_i \rho_i \varphi_i) + \text{div}(R_i \rho_i \varphi_i \mathbf{v}) = \text{div}(R_i \Gamma_\varphi \text{grad} \varphi) + S_\varphi \quad (2-28)$$

(I)                      (II)                      (III)                      (IV)

Οι αριθμημένοι όροι που φαίνονται στην εξίσωση (2-28) είναι: ο όρος ρυθμού μεταβολής (I), όρος συναγωγής (II), όρος διάχυσης (III) και όρος πηγής ή κατανάλωσης (IV).

Η ολοκλήρωση και μετά η διακριτοποίηση της εξίσωσης μεταφοράς προϋποθέτει τη διαίρεση του υπολογιστικού πεδίου σε στοιχειώδεις όγκους ελέγχου. Στην παρούσα εργασία το υπολογιστικό πεδίο είναι διδιάστατο και ορθογώνιο. Ο εσωτερικός κόμβος του στοιχειώδους όγκου ελέγχου συμβολίζεται με  $P$  και σε αυτόν προσδιορίζονται οι τιμές των βαθμωτών μεγεθών  $\rho_i$ ,  $R_i$ ,  $P$ ,  $KE$  και  $EP$ . Οι γειτονικοί κόμβοι του στοιχειώδους όγκου ελέγχου χαρακτηρίζονται με βάση τον προσανατολισμό τους ως ανατολικός ( $E$ ), δυτικός ( $W$ ), νότιος  $S$  και βόρειος ( $N$ ) και σε αυτούς αποθηκεύονται τα δεδομένα των διανυσματικών μεγεθών  $u_i$  και  $v_i$ . Η διακριτοποιημένη μορφή της θεωρούμενης εξίσωσης μεταφοράς είναι:

$$(A_P - S_P)\varphi_P = A_E\varphi_E + A_W\varphi_W + A_N\varphi_N + A_S\varphi_S + S_U \quad (2-29)$$

όπου οι συντελεστές  $A_i$  της εξαρτημένης μεταβλητής  $\varphi_i$  περιέχουν τους όρους μεταφοράς, συναγωγής και διάχυσης. Οι συγκεκριμένοι συντελεστές συνδέονται με τη σχέση:

$$A_P = A_E + A_W + A_N + A_S \quad (2-30)$$

Από το άλλο μέρος, ο όρος πηγής  $S_\varphi$ , ως συνάρτηση της εξαρτημένης μεταβλητής  $\varphi_i$ , μπορεί να εκφραστεί σύμφωνα με την γραμμικοποιημένη σχέση:

$$S_{\varphi} = S_U + S_P \varphi_P \quad (2-31)$$

Στο δεξιό μέλος της διακριτοποιημένης εξίσωσης (2-29) εκτός από τους όρους πηγής μεταφέρονται και οι κατάλληλες οριακές συνθήκες οι οποίες λαμβάνουν την ακόλουθη γραμμικοποιημένη μορφή:

$$S_{BC} = TC(V - \varphi) \quad (2-32)$$

Έτσι, η διακριτοποιημένη εξίσωση μεταφοράς παίρνει τελικά την ακόλουθη μορφή:

$$A_p \varphi_p = \sum_{N,S,E,W,B,T} A_k \varphi_k + S_{\varphi} + \sum_{Patches} TC(V - \varphi_p) \quad (2-33)$$

όπου  $V$  είναι η τιμή της θεωρούμενης μεταβλητής στο όριο,  $C$  ένας συντελεστής και  $TC$  ένας γεωμετρικός πολλαπλασιαστής. Με βάση τα παραπάνω, η μεταβλητή  $\varphi$  στον κεντρικό κόμβο υπολογίζεται από τη σχέση:

$$\varphi_p = \frac{\sum A_k \varphi_k + S_{\varphi} + \sum TVC}{A_p + \sum TC} \quad (2-34)$$

Στον Πίνακα 2-3 δίνεται η ονοματολογία και η αντίστοιχη ερμηνεία των οριακών συνθηκών όπως αυτές περιγράφονται στη βιβλιοθήκη του λογισμικού Phoenix.

<b>Πίνακας 2-3</b> Τύποι και περιγραφή των οριακών συνθηκών στο Phoenix [33]	
<b>Τύπος Οριακής Συνθήκης</b>	<b>Ερμηνεία - Έκφραση</b>
FIXVAL	Ο.Σ. σταθερής τιμής. $\varphi_p = V$ {θέτοντας στην .. C>>}
FIXFLU	Ο.Σ. σταθερής ροής. $\varphi_p = \frac{\sum A_k \varphi_k + S_{\varphi} + \text{Πηγή}}{A_p}$ {θέτοντας στην .. V= πηγή/C}
FIXP	Ο.Σ. σταθερής τιμής πεδίου. Διατήρηση της τιμής $\varphi_p = V$ σε εσωτερικό κόμβο
ONLYMS	Ο.Σ. μεταφοράς της μεταβλητής $\varphi$ από το κέντρο στο όριο εξαιτίας της συναγωγής

Η αριθμητική προσέγγιση των συντελεστών  $A_i$  γίνεται βάσει της προσέγγισης των τιμών της εξαρτημένης μεταβλητής  $\varphi_i$  στα μέτωπα των όγκων ελέγχου. Για την συγκεκριμένη υπολογιστική μοντελοποίηση εφαρμόστηκε το υβριδικό σχήμα διαφόρισης σύμφωνα με το

οποίο η προσέγγιση των τιμών της μεταβλητής  $\varphi_i$  στα μέτωπα του όγκου ελέγχου είναι συνάρτηση της απόλυτης τιμής του αριθμού Péclet,  $Pe_c$ , δηλαδή:

$$\text{Υβριδικό σχήμα} \rightarrow \begin{cases} \text{Σχήμα κεντρικών διαφορών} (Pe_c \leq 2) \\ \text{Σχήμα ανάντι διαφορών} (Pe_c > 2) \end{cases} \quad (2-35)$$

Στην εργασία αυτή εφαρμόστηκε η επαναληπτική μέθοδος ADI (*Alternating Direction Implicit*) και υποστηρίζεται από το λογισμικό PHOENICS. Πρόκειται για μια μέθοδο επίλυσης γραμμής προς γραμμή και, συνεπώς, μετατρέπει το θεωρούμενο σύστημα σε τρι-διαγώνιο σύστημα εξισώσεων (αλγόριθμος *Thomas*). Ωστόσο για τη μεταβλητή  $R_i$  χρησιμοποιήθηκε η μέθοδος πλήρους πεδίου, της οποίας το πλεονέκτημα είναι η ταχύτατη μεταφορά των οριακών συνθηκών στο εσωτερικό του πεδίου.

Μία από τις δυσκολίες που συναντώνται στην υπολογιστική προσομοίωση του φαινομένου της έκρηξης είναι οι έντονες διακυμάνσεις των εξαρτημένων μεταβλητών του προβλήματος ανάμεσα σε δύο διαδοχικές επαναλήψεις, που συχνά οδηγούν στην απόκλιση της λύσης. Για τον λόγο αυτό καθίσταται αναγκαία η υπο-χαλάρωση των προς επίλυση μεταβλητών. Εδώ έγινε χρήση δύο τεχνικών υπο-χαλάρωσης, της γραμμικής και του ψευδούς χρονικού βήματος.

Στον Πίνακα 2-4 καταγράφονται οι τεχνικές και οι αντίστοιχοι συντελεστές υπο-χαλάρωσης των προς επίλυση μεταβλητών του υπολογιστικού μοντέλου:

Πίνακας 2-4 Τεχνικές και αντίστοιχοι συντελεστές υπο-χαλάρωσης των εξαρτημένων μεταβλητών του μοντέλου		
Τεχνικές Υπο-χαλάρωσης	Μεταβλητές	Συντελεστές
FALSDT	$P1, R1, R2, RS, KE, EP$	0,20
LINRLX	$U1, U2, V1, V2$	0,02
	$H1, H2$	0,01

Με την εφαρμογή του μοντέλου IPSA (*Inter Phase Slip Algorithm*) [43] που παρέχει το λογισμικό PHOENICS καθίσταται δυνατή η προσομοίωση της υπό μελέτη διφασικής ροής αέρα-σκόνης με προσέγγιση κατά *Euler* και, επομένως, κάθε σημείο του υπολογιστικού χωρίου εμπεριέχει ξεχωριστά τις ιδιότητες της κάθε φάσης. Η κύρια αδυναμία του συγκεκριμένου αλγορίθμου είναι να περιγράψει την κατανομή της κάθε φάσης σε τοπικό επίπεδο και, συνεπώς, η χρήση του κλάσματος όγκου κρίνεται αναγκαία. Ο προσδιορισμός του

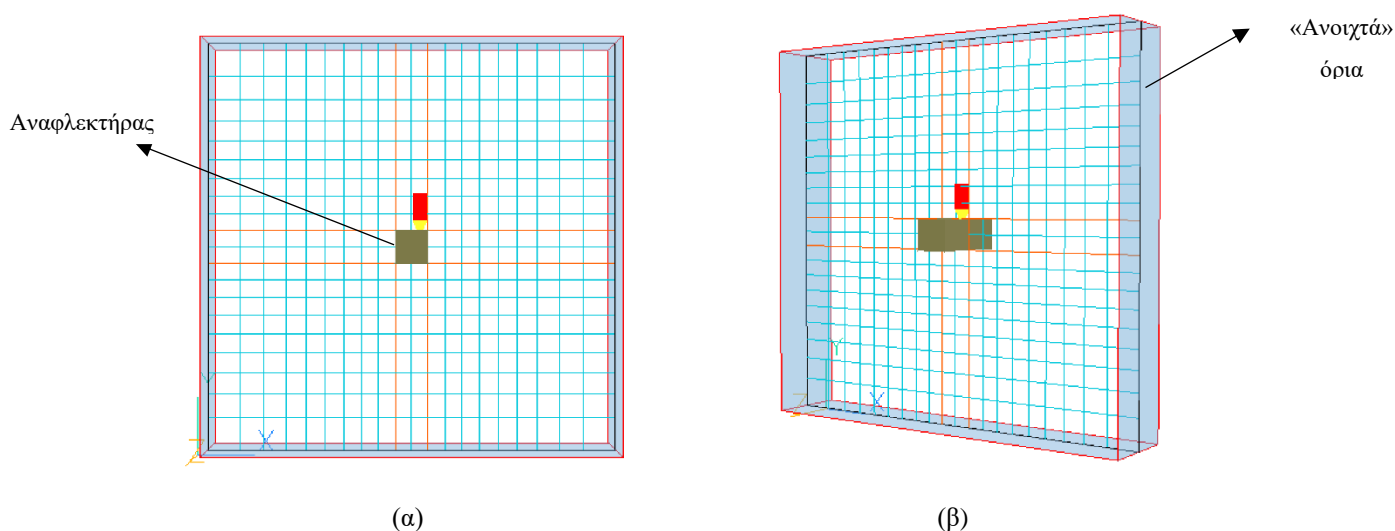
κλάσματος όγκου της αέριας,  $R_{1(g)}$ , και  $R_{2(g)}$  της στερεής φάσης γίνεται από τη διαφορική εξίσωση μεταφοράς μάζας εξασφαλίζοντας την ισχύ της σχέσης:  $R_{1(g)} + R_{2(s)} = 1$ .

Η συνήθης τακτική (που εφαρμόστηκε και εδώ) είναι η παραδοχή ότι η πίεση αποτελεί κοινή μεταβλητή και για τις δύο φάσεις, παρόλο που ο αλγόριθμος IPSA παρέχει τη δυνατότητα υπολογισμού ξεχωριστά της πίεσης κάθε φάσης. Επομένως, ο προσδιορισμός των συνιστωσών των ταχυτήτων από την εξίσωση ορμής γίνεται μετά από την εκτίμηση ενός κοινού πεδίου πίεσης. Η διαδικασία για τη διόρθωση του πεδίου ταχυτήτων, μετά τη διόρθωση της πίεσης με βάση τον αλγόριθμο IPSA είναι παρόμοια με εκείνη του αλγορίθμου του SIMPLE. Για τον λόγο αυτό, ο πρώτος θεωρείται ότι αποτελεί εξέλιξη του δεύτερου για πολυφασικές ροές.



## ΥΠΟΛΟΓΙΣΤΙΚΟ ΧΩΡΙΟ

Στο Σχήμα 2-3 παρουσιάζεται το υπολογιστικό χωρίο στο οποίο έλαβε χώρα η προσομοίωση της έκρηξης αερίου και της έκρηξης νέφους αερίου-σκόνης με την πηγή ανάφλεξης να βρίσκεται στο κέντρο της. Ο ολικός όγκος του χωρίου διαστάσεων 5 m x 5 m x 1 m κατανέμεται σε πεπερασμένο πλήθος υπολογιστικών κελιών. Τα όρια του υπολογιστικού χωρίου είναι «ανοιχτά».



**Σχήμα 2-3** Απεικόνιση του υπολογιστικού χωρίου των προσομοιώσεων έκρηξης:  
(α) στη διεύθυνση + z και (β) υπό γωνία.

Η παρούσα υπολογιστική προσομοίωση της έκρηξης σκόνης περιλαμβάνει υπολογισμούς σε ένα ψευδο-διδιάστατο δομημένο πλέγμα σε καρτεσιανές συντεταγμένες  $(x, y)$  – η διάσταση  $z$  αποτελείται μόνο από ένα κελί. Πρόκειται για πλέγματα υποχωρίων που επιλέγονται για τη διακριτοποίηση του συνολικού πεδίου ροής, τα όρια και το μέγεθος των οποίων καθορίζονται από τη θέση και τα γεωμετρικά χαρακτηριστικά του αναφλεκτήρα. Ο τελευταίος είναι τετραγωνικής διατομής και τοποθετείται στο κεντρικό κελί του χωρίου ανεξάρτητα από τον αριθμό των υπολογιστικών κελιών. Ο συντελεστής αραίωσης των υπολογιστικών κελιών από το κέντρο του αναφλεκτήρα ορίστηκε ίσος με 0,8.

## ΑΡΧΙΚΕΣ ΚΑΙ ΟΡΙΑΚΕΣ ΣΥΝΘΗΚΕΣ

Κατά την έναρξη της υπολογιστικής προσομοίωσης ( $t = 0$ ) το πεδίο ταχυτήτων σε όλο το υπολογιστικό χωρίο είναι μηδενικό και επικρατεί παντού ενιαία θερμοκρασία  $\theta = 20$  °C και πίεση  $P = 1$  atm. Ο συνολικός χρόνος διεξαγωγής της προσομοίωσης των εκρήξεων είναι της τάξης των χιλιοστών του δευτερολέπτου, ωστόσο ο ακριβής προσδιορισμός του απαιτεί την χρονική ανεξαρτησία της υπολογιστικής λύσης.

Η ενέργεια απελευθέρωσης από τον αναφλεκτήρα ορίστηκε στα 12 MJ. Η πίεση έκρηξης ορίστηκε στα 100 bar όπως, επίσης, δοκιμάστηκε ο υπολογισμός της από την εφαρμογή της καταστατικής εξίσωσης ιδανικού αερίου. Για την τελευταία μέθοδο, η πυκνότητα των αερίων που διασκορπίστηκαν στο υπολογιστικό πεδίο ορίστηκε από το πηλίκο της μάζας αυτών ίση με 0.5 και του όγκου έκρηξης ίσο με 1 L.

Στον Πίνακα 2-5 καταχωρίζονται οι φυσικές ιδιότητες των δύο φάσεων (αέριας και στερεής).

<b>Πίνακας 2-5</b> Φυσικές ιδιότητες αέριας και στερεής φάσης στις αρχικές συνθήκες του πεδίου			
<i>Ιδιότητα</i>	<i>Τιμή</i>	<i>Ιδιότητα</i>	<i>Τιμή</i>
$\mu_L$	$1,7 \cdot 10^{-5} \text{ Pa s}$	$\gamma$	1,4
$\rho_{gas}$	$1,2 \text{ kg/m}^3$	$C_{p,gas}$	1005 J/kg K
$\rho_{particle}$	$128 \text{ kg/m}^3$	$C_{p,particle}$	1880 J/kg K
$R_{gas}$	$290 \text{ J/mol K}$		

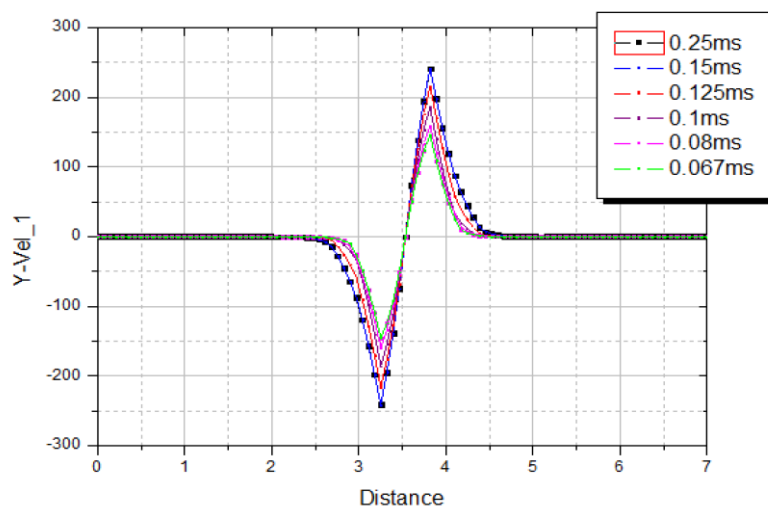
Στον Πίνακα 2-6 καταγράφονται οι οριακές συνθήκες που εφαρμόστηκαν στον αναφλεκτήρα και στα “ανοιχτά” όρια του υπολογιστικού πεδίου. Στα όρια του αναφλεκτήρα ορίστηκε σταθερή τιμή πίεσης ίση με την πίεση έκρηξης,  $PEXP$ , ενώ η εισερχόμενη ενθαλπία,  $H1in$ , μεταφέρεται με συναγωγή στα όρια των κελιών με τιμή ίση με το άθροισμα της ενθαλπίας των θερμών αερίων και της ενέργειας που απελευθερώνεται από το κέντρο του αναφλεκτήρα. Οι οριακές συνθήκες που επιβλήθηκαν στα όρια του υπολογιστικού χωρίου είναι κατάλληλες ώστε αυτά να χαρακτηρίζονται ως «ανοιχτά».

<b>Πίνακας 2-6</b> Οριακές συνθήκες που τέθηκαν στο υπολογιστικό μοντέλο έκρηξης σκόνης-αερίου		
<i>Μεταβλητή</i>	<i>Αναφλεκτήρας</i>	<i>«Ανοιχτά» όρια</i>
P1	FIXVAL, PEXP	FIXP, 0.0
H1	ONLYMS, H1in	ONLYMS, HAMB
H2	-	ONLYMS, HAMB

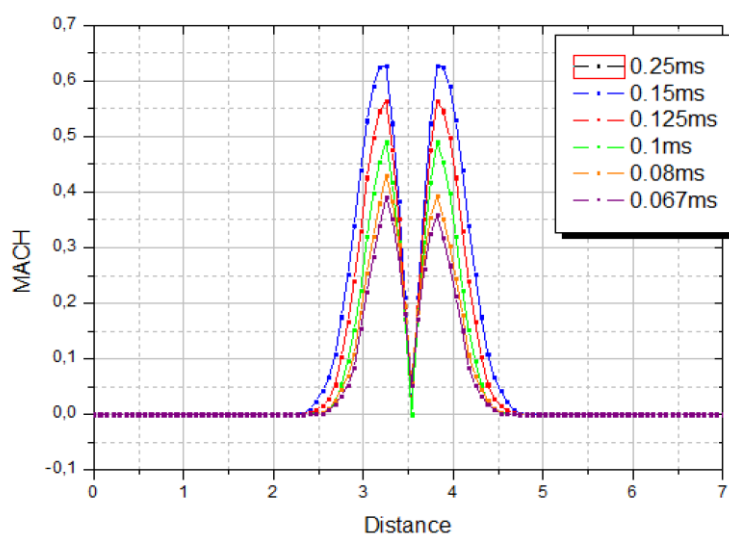
Η ανεξαρτησία της υπολογιστικής λύσης από το λογισμικό PHOENICS του φαινομένου της έκρηξης σκόνης εξετάστηκε τόσο ως προς τον χρόνο, όσο και ως προς τον χώρο. Οι μεταβλητές συσχετίστηκαν με τη διαγώνια απόσταση του υπολογιστικού πεδίου το μέσον της οποίας συναντά την πηγή ανάφλεξης.

### ΑΝΕΞΑΡΤΗΣΙΑ ΥΠΟΛΟΓΙΣΤΙΚΗΣ ΛΥΣΗΣ ΑΠΟ ΤΟΝ ΧΡΟΝΟ ΚΑΙ ΤΟΝ ΧΩΡΟ

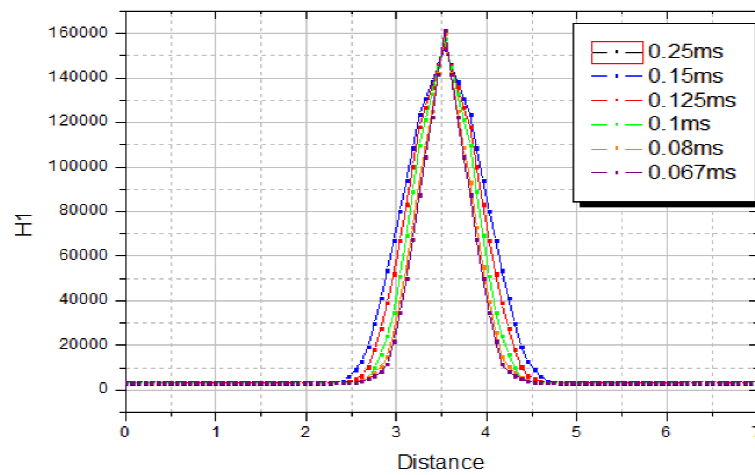
Επειδή το φαινόμενο της έκρηξης διαρκεί ελάχιστα, ο αρχικός χρόνος ορίστηκε στα 0,25 ms και ο βαθμός πύκνωσης του χρονικού διαστήματος στα 1,2 ms. Η ανεξαρτησία της υπολογιστικής λύσης από τον χρόνο εξετάστηκε για όλες τις εξαρτημένες μεταβλητές που έχουν οριστεί σε ορθογώνιο πλέγμα 20 x 20 με σταθερό βαθμό πύκνωσης 0,8. Στα Σχήματα 2-4 έως 2-8 απεικονίζονται τα αποτελέσματα των εξεταζόμενων μεταβλητών σε όλα τα χρονικά βήματα μέχρι τα 0,067 ms. Η μικρότερη διαφορά των αποτελεσμάτων εντοπίστηκε στα 0,08 ms, ενώ κάτω από την τιμή αυτή σχετικό σφάλμα είναι λιγότερο από 1% και, συνεπώς, η διαφορά μπορεί να θεωρηθεί αμελητέα.



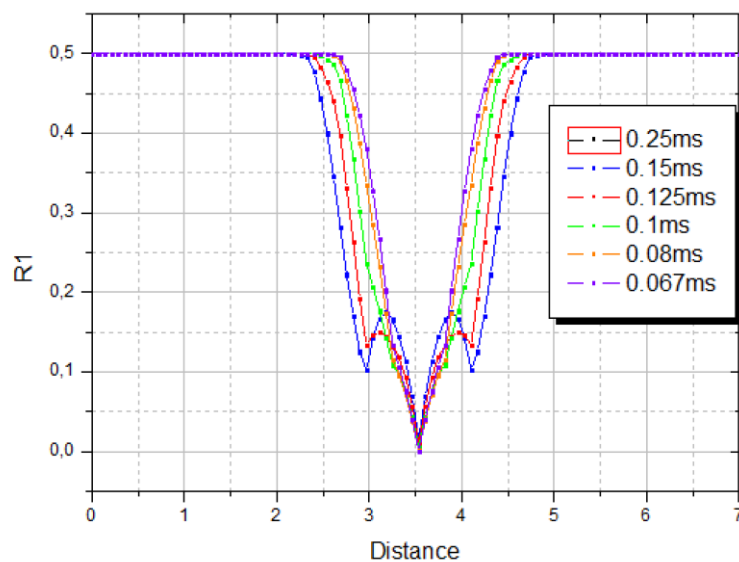
Σχήμα 2-4 Χρονική ανεξαρτησία της υπολογιστικής λύσης της κατακόρυφης συνιστώσας της ταχύτητας της αέριας (κύριας) φάσης κατά μήκος της διαγωνίου του υπολογιστικού χωρίου σε πλέγμα 20 x 20.



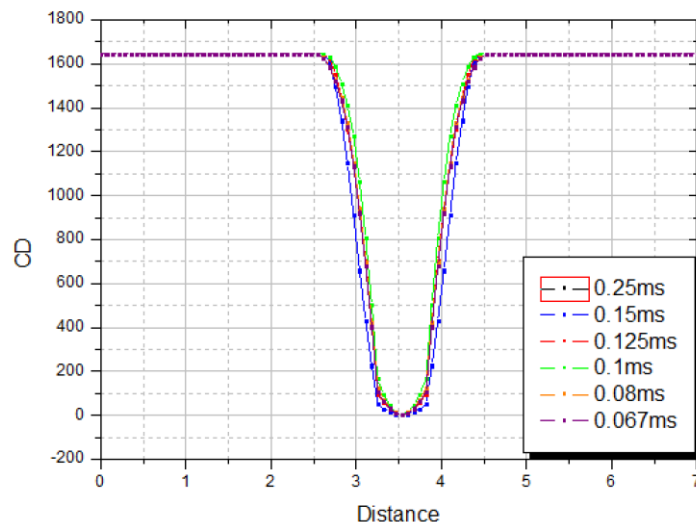
Σχήμα 2-5 Χρονική ανεξαρτησία της υπολογιστικής λύσης του αριθμού Mach κατά μήκος της διαγωνίου του υπολογιστικού χωρίου σε πλέγμα 20 x 20.



Σχήμα 2-6 Χρονική ανεξαρτησία της υπολογιστικής λύσης της ενθαλπίας της αέριας (κύριας) φάσης κατά μήκος της διαγωνίου του υπολογιστικού χωρίου σε πλέγμα 20 x 20.

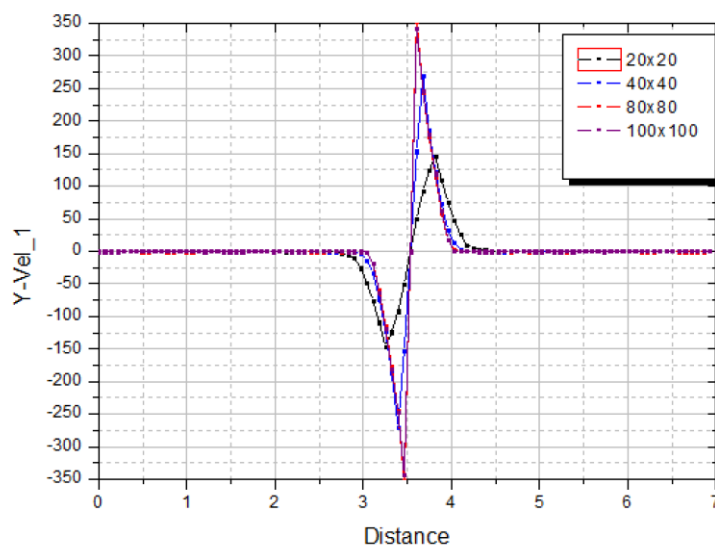


Σχήμα 2-7 Χρονική ανεξαρτησία της υπολογιστικής λύσης του κλάσματος όγκου της αέριας (κύριας) φάσης κατά μήκος της διαγωνίου του υπολογιστικού χωρίου σε πλέγμα 20 x 20.

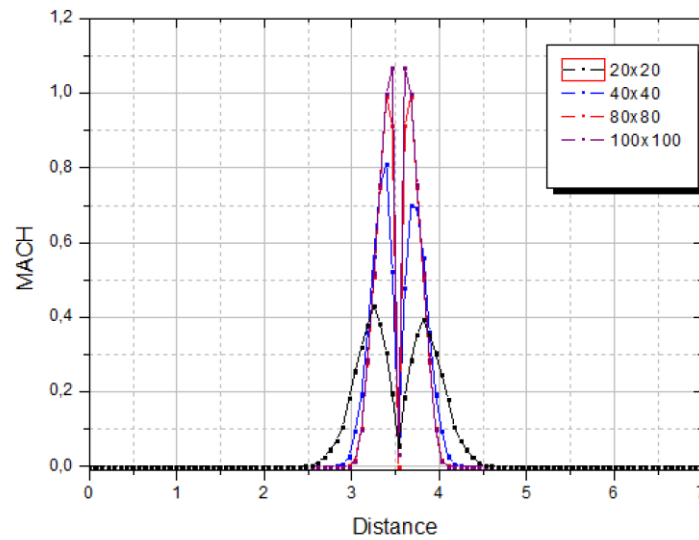


Σχήμα 2-8 Χρονική ανεξαρτησία της υπολογιστικής λύσης του συντελεστή αντίστασης κατά μήκος της διαγωνίου του υπολογιστικού χωρίου σε πλέγμα 20 x 20.

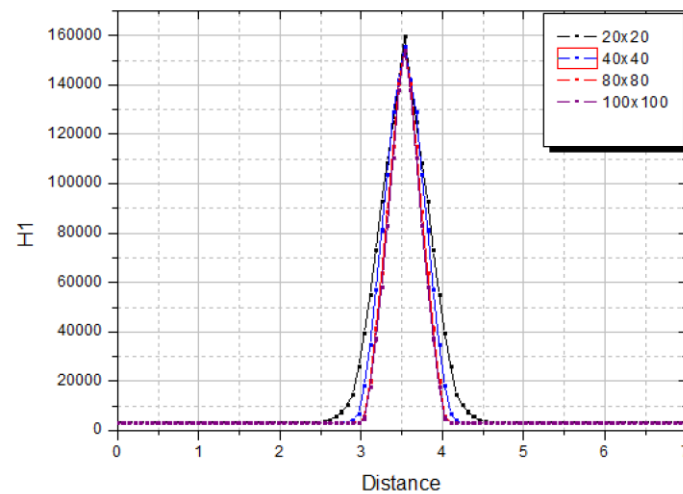
Το διδιάστατο υπολογιστικό χωρίο διάστασης 5.0 x 5.0 διακριτοποιήθηκε σε ορθογώνια υποχωρία με σταθερό ρυθμό πύκνωσης 0.8. Τα πλέγματα που εξετάστηκαν είναι 20 x 20, 40 x 40, 80 x 80 και 100 x 100, με το τελευταίο να αποτελεί το ανεξάρτητο πλέγμα καθώς το σχετικό σφάλμα σε πυκνότερα πλέγματα μειωνόταν σημαντικά. Στα Σχήματα 2-9 έως 2-11 απεικονίζονται τα αποτελέσματα επιλεγμένων εξαρτημένων μεταβλητών.



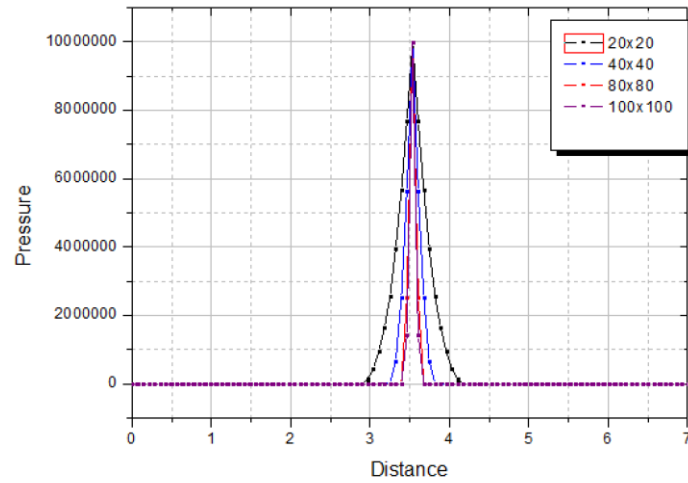
Σχήμα 2-9 Ανεξαρτησία της υπολογιστικής λύσης από το πλέγμα της κατακόρυφης συνιστώσας της ταχύτητας της αέριας (κύριας) φάσης κατά μήκος της διαγωνίου του υπολογιστικού χωρίου με χρόνο έκρηξης 8ms.



Σχήμα 2-10 Ανεξαρτησία της υπολογιστικής λύσης από το πλέγμα του αριθμού Mach κατά μήκος της διαγωνίου του υπολογιστικού χωρίου με χρόνο έκρηξης 8ms.



Σχήμα 2-11 Ανεξαρτησία της υπολογιστικής λύσης από το πλέγμα της ενθαλπίας της αέριας (κύριας) φάσης κατά μήκος της διαγωνίου του υπολογιστικού χωρίου με χρόνο έκρηξης 8ms.



**Σχήμα 2-12** Ανεξαρτησία της υπολογιστικής λύσης από το πλέγμα της πίεσης κατά μήκος της διαγωνίου του υπολογιστικού χωρίου με χρόνο έκρηξης 8ms.

## Κεφάλαιο Τρίτο

### Συγκέντρωση Αποτελεσμάτων

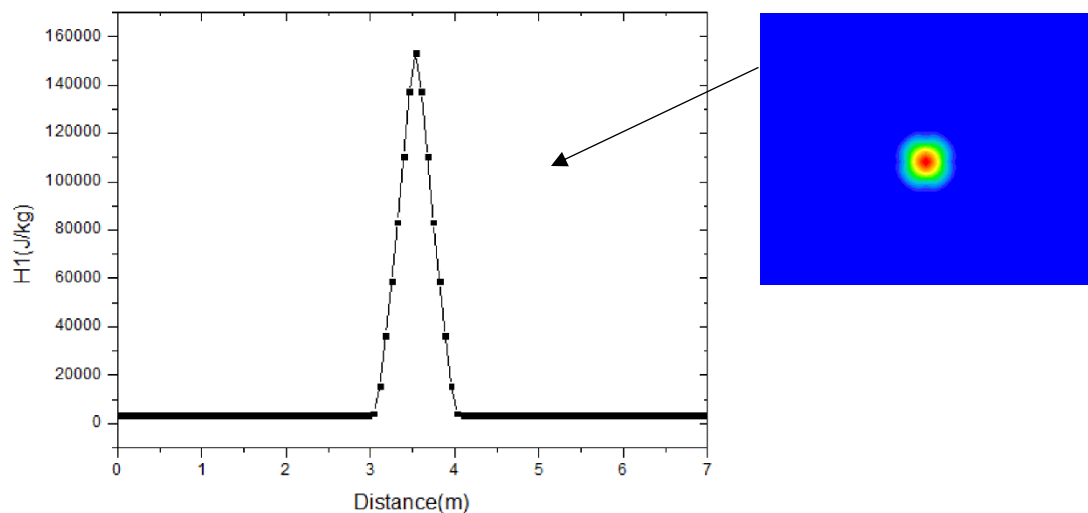
Στο παρόν κεφάλαιο παρουσιάζονται τα αποτελέσματα της υπολογιστικής προσομοίωσης του φαινομένου της έκρηξης σκόνης που αναπτύχθηκε στο λογισμικό PHOENICS. Οι κατανομές της πίεσης, της ενθαλπίας και της ταχύτητας της αέριας και της στερεής φάσης του ανεπτυγμένου υπολογιστικού μοντέλου συγκρίνονται με αντίστοιχο μοντέλο που είναι διαθέσιμο στη βιβλιογραφία.

ΠΕΡΙΕΧΟΜΕΝΑ		
3-1	Κατανομή των εξαρτημένων μεταβλητών στο υπολογιστικό χωρίο.	57
3-2	Σύγκριση των μοντέλων τύρβης	60
3-3	Σύγκριση των αποτελεσμάτων του με βιβλιογραφικά δεδομένα	62

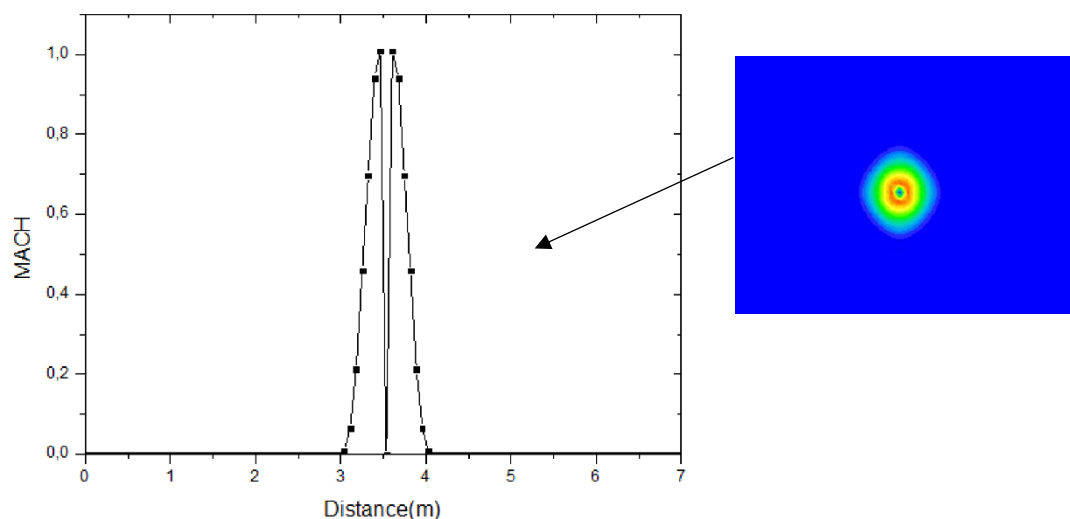


### 3-1 Κατανομή των Εξαρτημένων Μεταβλητών στον Υπολογιστικό Χωρίο

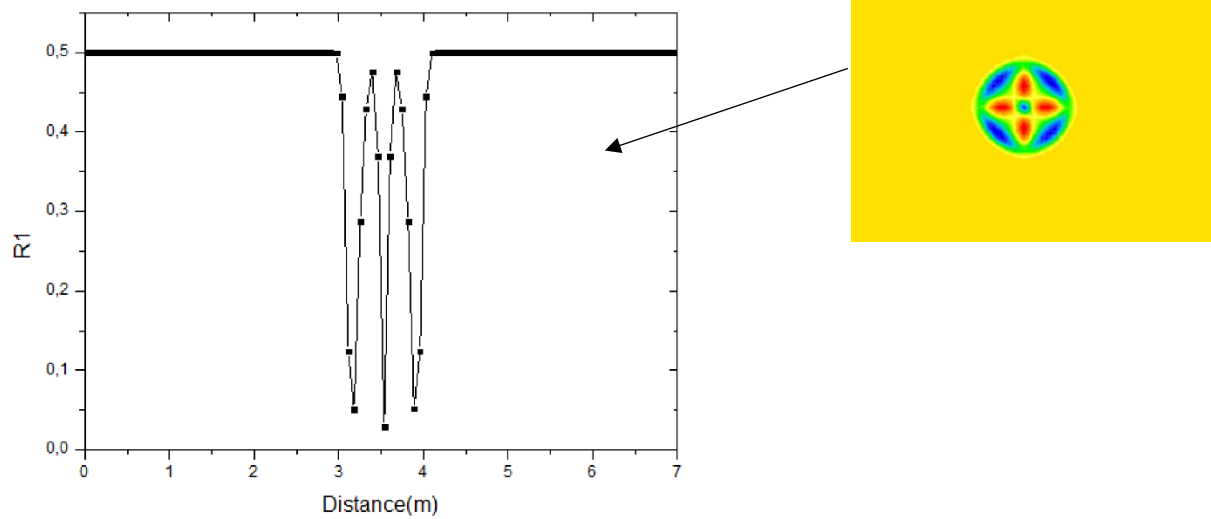
Στην παράγραφο αυτή παρουσιάζονται οι κατανομές των εξαρτημένων μεταβλητών του φαινομένου έκρηξης σκόνης επί της διαγωνίου που εκτείνεται σε όλο το μήκος του υπολογιστικού χωρίου. Η θερμοκρασία του πεδίου παριστάνεται με τον όρο της ενθαλπίας, ορίζοντας τη θερμοκρασία έναυσης της έκρηξης 2000 K και την πίεση έναρξης της έκρηξης 3,6 bar. Η διάμετρος του σωματιδίου ορίστηκε στα 2,5  $\mu\text{m}$  και το μοντέλο τύρβης, που εφαρμόστηκε για την εξαγωγή των τιμών των εξαρτημένων μεταβλητών του φαινομένου, είναι το πρότυπο k- $\epsilon$ .



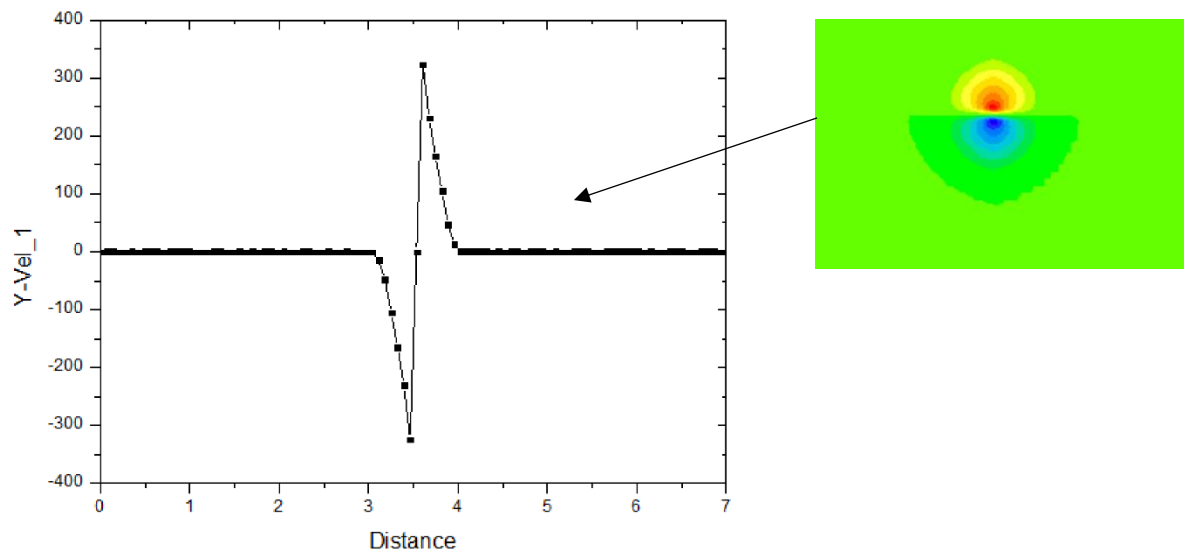
Σχήμα 3-1 Κατανομή της ενθαλπίας της αέριας φάσης κατά μήκος της διαγωνίου του υπολογιστικού χωρίου.



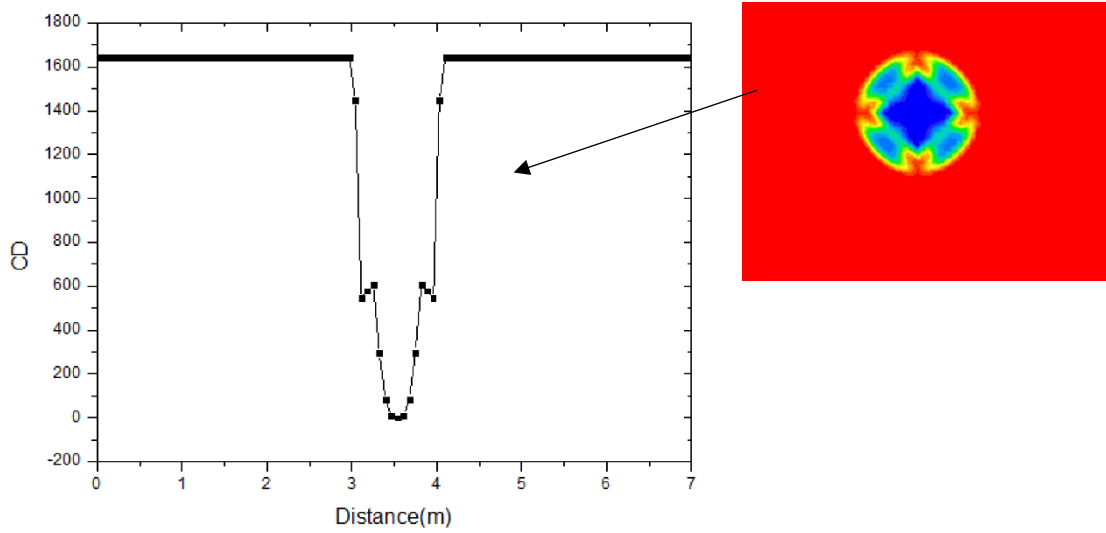
Σχήμα 3-2 Κατανομή του αριθμού Mach κατά μήκος της διαγωνίου του υπολογιστικού χωρίου.



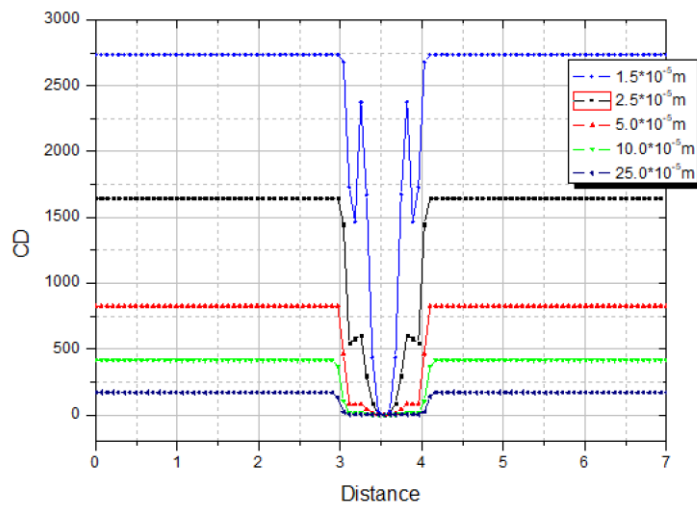
Σχήμα 3-3 Κατανομή του κλάσματος όγκου της αέριας φάσης κατά μήκος της διαγωνίου του υπολογιστικού χωρίου.



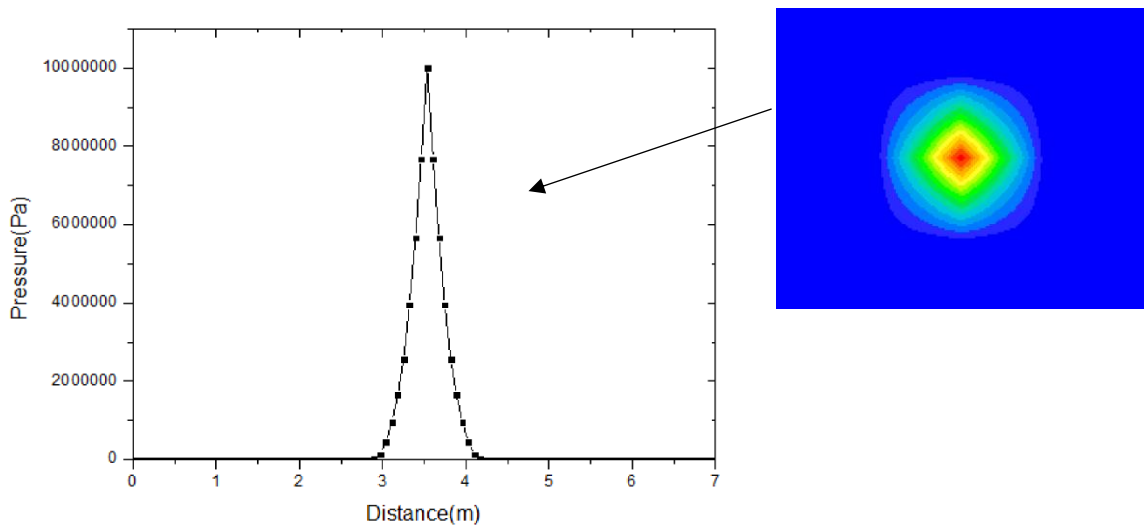
Σχήμα 3-4 Κατανομή της κατακόρυφης συνιστώσας της ταχύτητας της αέριας φάσης κατά μήκος της διαγωνίου του υπολογιστικού χωρίου.



Σχήμα 3-5 Κατανομή του συντελεστή οπισθέλκουσας κατά μήκος της διαγωνίου του υπολογιστικού χωρίου.



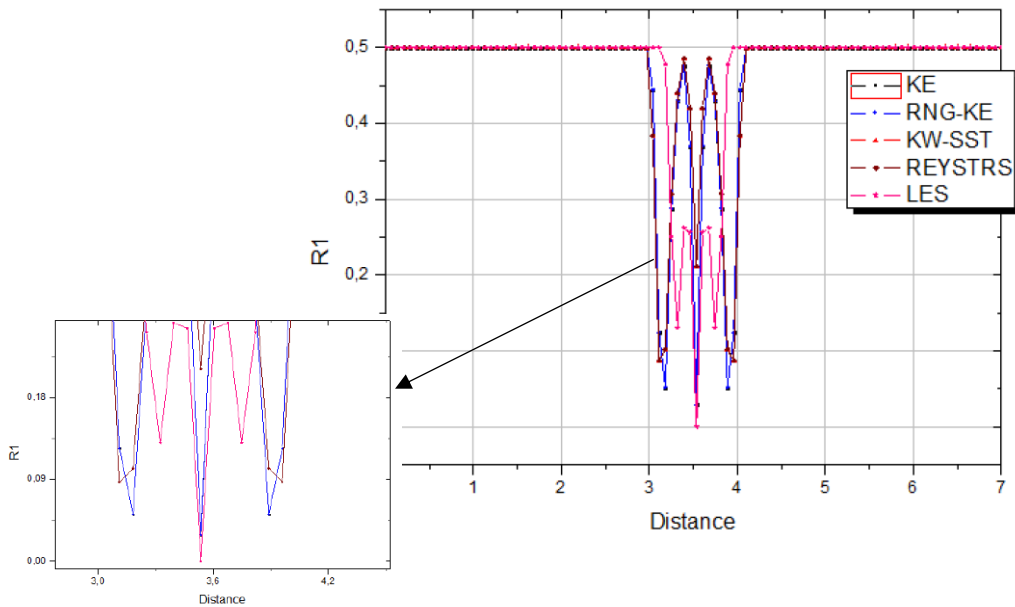
Σχήμα 3-6 Κατανομή του συντελεστή οπισθέλκουσας για διαφορετικές διαμέτρους σωματιδίων σκόνης κατά μήκος της διαγωνίου του υπολογιστικού χωρίου.



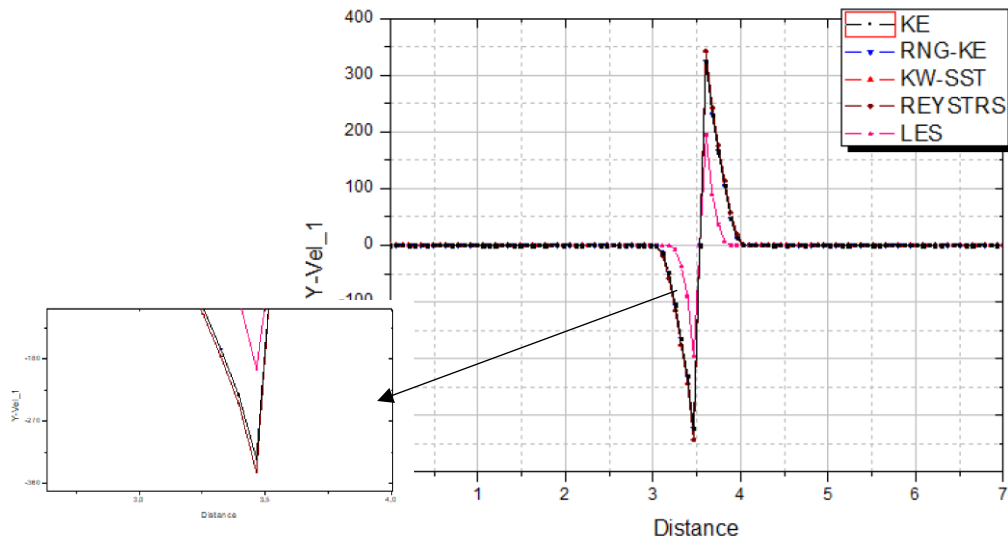
Σχήμα 3-7 Κατανομή της πίεσης έκρηξης κατά μήκος της διαγωνίου του υπολογιστικού χωρίου

### 3-2 Σύγκριση των Μοντέλων Τύρβης

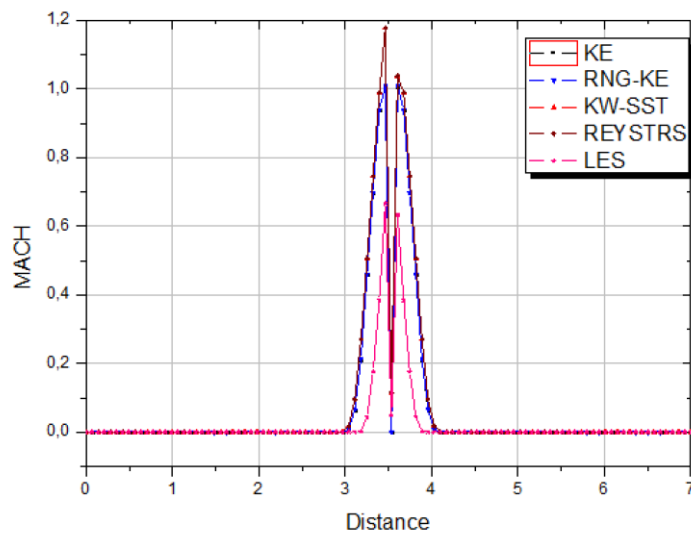
Η εξέλιξη του φαινομένου της έκρηξης σκόνης, απουσίας του μοντέλου καύσης, εξαρτάται κυρίως από το εφαρμοζόμενο τυρβώδες μοντέλο. Στην παρούσα παράγραφο γίνεται η σύγκριση των αποτελεσμάτων των κύριων εξαρτημένων μεταβλητών του φαινομένου τα οποία προέκυψαν από την χρήση πέντε διαφορετικών μοντέλων τύρβης.



Σχήμα 3-8 Συγκριτική μελέτη των τυρβωδών μοντέλων για το κλάσμα όγκου της αέριας φάσης σε πλέγμα 100x100 και χρόνο έκρηξης 0.8ms.

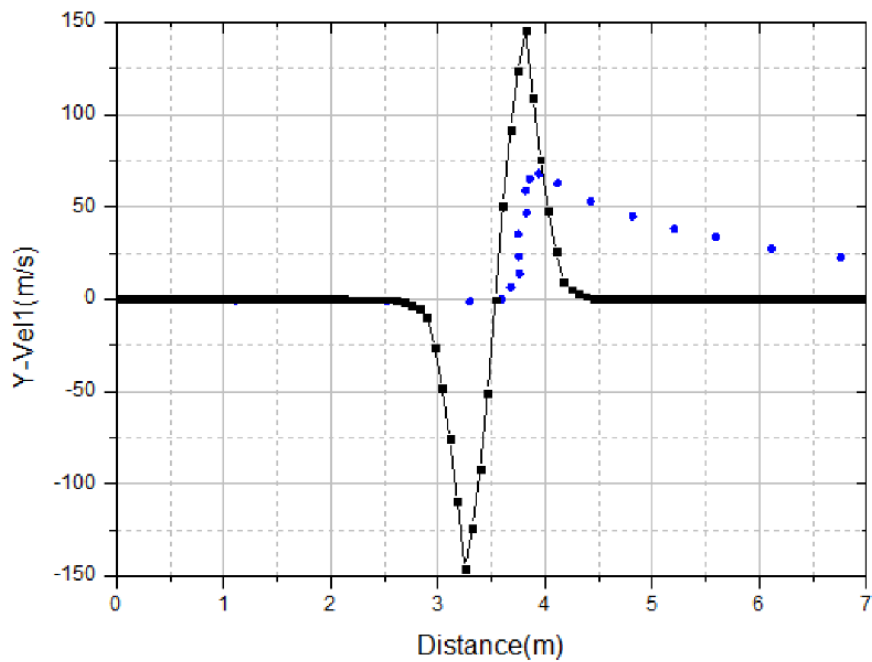


Σχήμα 3-9 Συγκριτική μελέτη των τυρβωδών μοντέλων για το κλάσμα όγκου της αέριας (κύριας) φάσης σε πλέγμα 100x100 και χρόνο έκρηξης 0.8ms.

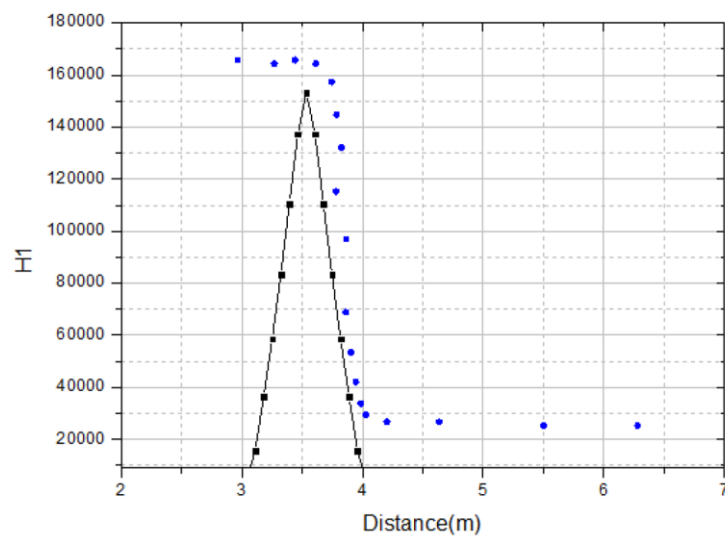


Σχήμα 3-20 Συγκριτική μελέτη των τυρβωδών μοντέλων για το κλάσμα όγκου της αέριας (κύριας) φάσης σε πλέγμα 100x100 και χρόνο έκρηξης 0.8ms.

### 3-3 Σύγκριση των Αποτελεσμάτων του ΥΜ με Βιβλιογραφικά Δεδομένα



Σχήμα 3-31 Σύγκριση των κατανομών των κατακόρυφων συνιστωσών των ταχυτήτων του ΥΜ και των βιβλιογραφικών δεδομένων τη χρονική στιγμή 0.8ms.



Σχήμα 3-42 Σύγκριση των κατανομών των κατακόρυφων συνιστωσών των ταχυτήτων του ΥΜ και των βιβλιογραφικών δεδομένων τη χρονική στιγμή 0.8ms.

## Κεφάλαιο Τέταρτο

### Σχολιασμός και Συμπεράσματα

Στο παρόν κεφάλαιο σχολιάζονται συνοπτικά τα αποτελέσματα του υπολογιστικού μοντέλου που αναπτύχθηκε στα πλαίσια της παρούσας εργασίας, με σκοπό την εξαγωγή συμπερασμάτων, χρήσιμων για περαιτέρω ερευνητική μελέτη του φαινομένου έκρηξης σκόνης. Ιδιαίτερη έμφαση δίνεται στις κατανομές της ταχύτητας και της ενθαλπίας της στερεής και αέριας φάσης, καθώς και στη σύγκριση των αποτελεσμάτων που προέκυψαν μεταξύ των μοντέλων τύρβης. Τέλος, η σύγκριση των αποτελεσμάτων του υπολογιστικού μοντέλου με το υπολογιστικό μοντέλο των Li Qiao και Jian Xu [44] είναι ικανοποιητική, παρά τις μεγάλες διαφορές που εντοπίζονται μεταξύ των δύο μοντέλων.

ΠΕΡΙΕΧΟΜΕΝΑ		
4-1	Σχολιασμός των αποτελεσμάτων των εξαρτημένων μεταβλητών.	64
4-2	Συμπεράσματα από την σύγκριση των μοντέλων τύρβης	64
4-3	Συμπεράσματα από την σύγκριση του υπολογιστικού μοντέλου με τα αποτελέσματα αντίστοιχου μοντέλου από την βιβλιογραφία	65

#### 4-1 Σχολιασμός Αποτελεσμάτων των Εξαρτημένων Μεταβλητών

Το υπολογιστικό μοντέλο που αναπτύχθηκε στην παρούσα εργασία προσομοιώνει το φαινόμενο της έκρηξης σκόνης με βάση τις θερμοδυναμικές μεταβλητές, πίεσης και θερμοκρασίας, που είναι ικανές να δημιουργήσουν την απαιτούμενη διάχυση της αέριας και της στερεής φάσης στο υπολογιστικό χωρίο. Επομένως, η απουσία του μοντέλου καύσης και των μηχανισμών μεταφοράς θερμότητας από το ανεπτυγμένο υπολογιστικό μοντέλο δεν αφήνει περιθώρια εξαγωγής συμπερασμάτων ως προς την καύση των σωματιδίων και των αερίων που εκλύονται. Άμεση συνέπεια αυτού είναι ο σχολιασμός των αποτελεσμάτων βάσει της τυρβώδους διαταραχής που επιτυγχάνεται από την έναρξη του φαινομένου, καθώς και πως αυτή επηρεάζει συνολικά το αποτέλεσμα της έκρηξης.

Η ενθαλπία και, συνεπώς, η θερμοκρασία της αέριας και της στερεής φάσης παρουσιάζει απότομη αύξηση κοντά στο κέντρο του αναφλεκτήρα ως αποτέλεσμα των οριακών συνθηκών που επιβλήθηκαν σε αυτόν (πίεση 100 bar και θερμοκρασία 2000 K). Η αύξηση που παρατηρείται στην πλησιέστερη ακτίνα γύρω από τον αναφλεκτήρα δε διατηρείται, επειδή στα ανοιχτά όρια του υπολογιστικού χωρίου επικρατούν οι συνθήκες περιβάλλοντος.

Πολλές αριθμητικές μελέτες υποθέτουν ότι τα σωματίδια και τα αέρια έχουν την ίδια ταχύτητα. Ωστόσο, επειδή τα σωματίδια έχουν πολύ μεγαλύτερη αδράνεια από τα αέρια, οι ταχύτητες αυτών μπορεί να είναι πολύ διαφορετικές. Η κατανομή της κατακόρυφης συνιστώσας της ταχύτητας της αέριας και της στερεής φάσης σε συνάρτηση με τη θέση στο υπολογιστικό χωρίο είναι περίπου ίδιο. Αυτό συμβαίνει επειδή η διάμετρος των σωματιδίων (2,5  $\mu\text{m}$ ) είναι αρκετά μικρή και, κατά συνέπεια, η ταχύτητα ολίσθησης που είναι αποτέλεσμα της διαφορετικής αδράνειας μεταξύ των σωματιδίων σκόνης και αέρα είναι αμελητέα. Γενικά, έντονη διαφορά μεταξύ των ταχυτήτων της στερεής και της αέριας φάσης εντοπίζεται μπροστά στο μέτωπο της φλόγας, με αποτέλεσμα η σχετική ταχύτητα μεταξύ των δύο φάσεων να μεταβάλλεται περιοδικά. Επίσης, παρατηρείται ότι η κατεύθυνση των ταχυτήτων του μείγματος σκόνης-αέρα είναι ακτινική με την απότομη αύξηση του μέτρου στο κέντρο του αναφλεκτήρα.

#### 4-2 Συμπεράσματα από την Σύγκριση των Μοντέλων Τύρβης

Τα μοντέλα standard k- $\epsilon$  και RNG k- $\epsilon$  αποτελούν τη συνήθη επιλογή μοντελοποίησης της τύρβης σε φαινόμενα όπως η καύση και η έκρηξη δίνοντας ικανοποιητικά αποτελέσματα. Το μοντέλο k-w SST επιλέχτηκε κυρίως για την επίδοσή του κοντά στα όρια του υπολογιστικού χωρίου, παρόλο που σε αυτά δεν εφαρμόζεται η οριακή συνθήκη τοίχου.



Το τελευταίο αποτελεί τον λόγο που δεν παρουσιάζεται καμία διαφορά στα αποτελέσματα με το μοντέλο k-ε και την παραλλαγή αυτού (την k-ε RNG). Η μικρή απόκλιση που παρουσιάζουν τα αποτελέσματα του τυρβώδους μοντέλου Reynolds Stress σε σχέση με τα μοντέλα που αναφέρθηκαν επιβεβαιώνει τον τρόπο που επιδρά η τύρβη στην εξέλιξη του φαινομένου, καθώς το συγκεκριμένο μοντέλο δεν λαμβάνει υπ' όψιν την ισοτροπική θεώρηση της τύρβης. Σημαντικές διαφορές στα αποτελέσματα προκύπτουν με την προσομοίωση της τύρβης από το μοντέλο LES. Συγκεκριμένα, το μοντέλο LES φαίνεται να «υποεκτιμά» την ταχύτητα που αποκτά η κύρια φάση (η μέγιστη ταχύτητα μειωμένη κατά 100 m/s), ενώ να «υπερεκτιμά» το θερμοκρασιακό πεδίο που αναπτύσσεται στο υπολογιστικό χωρίο (60 φορές μεγαλύτερη η μέγιστη θερμοκρασία) σε σύγκριση με τα αποτελέσματα των υπολοίπων μοντέλων τύρβης.

#### **4-3 Συμπεράσματα από τη Σύγκριση των Αποτελεσμάτων του Υπολογιστικού Μοντέλου με τα Εκείνοι του Αντίστοιχου Μοντέλου των Li Qiao και Jian Xu**

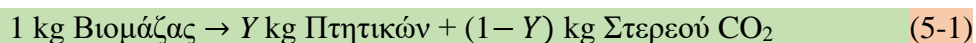
Επειδή στη διαθέσιμη βιβλιογραφία δε βρέθηκαν πειραματικά δεδομένα αντίστοιχα με εκείνα της προσομοίωσης του φαινομένου της έκρηξης σκόνης εντός υπολογιστικού χωρίου με ανοιχτά όρια, δεν είναι εφικτή η σχετική σύγκριση. Επομένως, στο πλαίσιο της παρούσας εργασίας έγινε προσεγγιστική σύγκριση των αποτελεσμάτων του υπολογιστικού μοντέλου με εκείνα που προέκυψαν από το αντίστοιχο μοντέλο που ανέπτυξαν οι Li Qiao και Jian Xu [44]. Η σύγκριση αυτή περιορίστηκε στην ενθαλία και την ταχύτητα της αέριας φάσης καθώς το υπολογιστικό μοντέλο που παρουσίασαν οι Li Qiao και Jian Xu, περιλάμβανε το μοντέλο καύσης και το μοντέλο ακτινοβολίας της ενέργειας εκπομπής και απορρόφησης μεταξύ της στερεής και της αέριας φάσης, δίνοντας ιδιαίτερη έμφαση στην ταχύτητα διάδοσης της φλόγας και στη συσχέτιση αυτής με την πυκνότητα του αριθμού των σωματιδίων σκόνης. Αξίζει να σημειωθεί ότι υπό τις δεδομένες αρχικές και οριακές συνθήκες, τα αποτελέσματα των κατανομών των εξαρτημένων μεταβλητών του φαινομένου της έκρηξης σκόνης, που παρουσιάστηκαν στο προηγούμενο κεφάλαιο, είναι ικανοποιητικά ως προς την εξέλιξη τους στο υπολογιστικό χωρίο με βάση το υπολογιστικό μοντέλο των Li Qiao και Jian Xu.

## Κεφάλαιο Πέμπτο

### Προτάσεις για Μελλοντική Έρευνα

Στην παρούσα εργασία πραγματοποιήθηκε η προσομοίωση του φαινομένου της έκρηξης σκόνης. Το υπολογιστικό μοντέλο που αναπτύχθηκε έδωσε ικανοποιητικά αποτελέσματα βάσει των παραδοχών που τέθηκαν για τις αρχικές και οριακές συνθήκες. Ωστόσο, για την ακριβέστερη προσέγγιση του υπό μελέτη φαινομένου, υπάρχει δυνατότητα βελτίωσης του συγκεκριμένου υπολογιστικού μοντέλου, στις ίδιες συνθήκες, με τις εξής παρεμβάσεις:

- **Ενσωμάτωση της αντίδρασης πυρόλυσης:** Τα πιο απλά μοντέλα είναι τα «σφαιρικά» ενός βήματος, στα οποία λαμβάνονται υπ' όψιν μόνο οι κύριες αντιδράσεις έτσι ώστε η τύρφη (που μελετάται εδώ) να αποσυντίθεται μόνο σε πτητικά αέρια και άνθρακα, δηλαδή αμελείται η παραγωγή πίσσας. Η αντίδραση πυρόλυσης περιγράφεται από τον παρακάτω μηχανισμό:



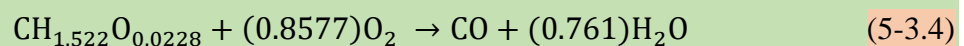
Ο ρυθμός της αντίδρασης πυρόλυσης,  $k$ , εκφράζεται με τον νόμο Arrhenius:

$$k = -A\rho y^{biomass} e^{-\frac{E}{RT}} \quad (5-2)$$

όπου  $\rho$  είναι η πυκνότητα της βιομάζας,  $y^{biomass}$  το ποσοστό της βιομάζας σε στερεή φάση και  $T$  η θερμοκρασία της στερεής φάσης.

Αξίζει να επισημανθεί ότι το 35% της βιομάζας μετατρέπεται σε αέρια προϊόντα ( $\text{CO}$ ,  $\text{H}_2$ ,  $\text{CO}_2$ ) στην «βραδεία» πυρόλυση, αν η θερμοκρασία ανάφλεξης είναι μικρότερη από  $500\text{ }^\circ\text{C}$  και ο χρόνος επαφής (των αρχικών σωματιδίων τύρφης και των προϊόντων) μεγαλύτερος από 2 s. Σε στάδια της διεργασίας πυρόλυσης μικρότερου χρόνου επαφής, ο μικρότερος ρυθμός θέρμανσης προκαλεί μείωση των πτητικών αερίων, συνεπώς, αυξάνεται η περιεκτικότητα των προϊόντων σε στερεό άνθρακα.

- **Ενσωμάτωση του μοντέλου καύσης:** Με βάση την παραδοχή ότι η πτητική ύλη είναι με τη μορφή μεθανίου ( $\text{CH}_4$ ), η αέρια φάση αποτελείται από επτά χημικά στοιχεία, τα εξής:  $y^{\text{O}_2}$ ,  $y^{\text{H}_2\text{O}}$ ,  $y^{\text{CO}}$ ,  $y^{\text{CO}_2}$ ,  $y^{\text{CH}_4}$  και  $y^{\text{N}_2}$ . Η ομοιογενής αντίδραση καύσης των αερίων προϊόντων και του κύριου αερίου, που επικρατεί στον χώρο, μπορεί να προσομοιωθεί με τις παρακάτω έξι χημικές αντιδράσεις:



Οι ρυθμοί των παραπάνω χημικών αντιδράσεων υπολογίζονται από τη σχέση:

$$k = \min(k_{Ar}, k_{EBU}) \quad (5-4)$$

όπου  $k_{Ar}$  είναι ο ρυθμός αντίδρασης και  $k_{EBU}$  ο αντίστοιχος ρυθμός που υπολογίζονται από τον νόμο Arrhenius και μοντέλο διάσπασης δινών, αντίστοιχα

Η ετερογενής αντίδραση μεταξύ των σωματιδίων στερεού άνθρακα και των αερίων που τα περιβάλλουν μπορεί να ενσωματωθεί στις εξής τρεις πιο σημαντικές αντιδράσεις επιφάνειας:



- **Ενσωμάτωση της μεταφοράς θερμότητας.** Η θερμότητα μεταφέρεται με ακτινοβολία μεταξύ των αερίων και με συναγωγή μεταξύ της στερεής και της αέριας φάσης. Για την

επίλυση της εξίσωσης μεταφοράς θερμότητας με τη μορφή ακτινοβολίας προτείνεται η μέθοδος *DOM* (discrete ordinate).

- **Προσέγγιση Euler–Lagrange.** Σύμφωνα με αυτήν, η σωματιδιακή φάση (σκόνη) θεωρείται διακριτή και διασκορπισμένη στην αέρια φάση (αέρας περιβάλλοντος). Συνεπώς, η συγκεκριμένη προσέγγιση είναι εξ' ορισμού πιο ακριβής για αραιά μείγματα από την προσέγγιση που εφαρμόστηκε στο ανεπτυγμένο μοντέλο, Euler–Euler. Η προσέγγιση αυτή υποστηρίζεται από το λογισμικό PHOENICS μέσω του αλγόριθμου GENTRA (*GENeral TRAcker*).

Από την σύγκριση των αποτελεσμάτων που θα προκύψουν από την ενσωμάτωση των μοντέλων καύσης και των μηχανισμών μεταφοράς θερμότητας στο υπολογιστικό μοντέλο, με αυτό που αναπτύχθηκε στην παρούσα εργασία, θα εξαχθούν χρήσιμα συμπεράσματα για τον βαθμό και τον τρόπο που επιδρά η κλίμακα της τύρβης κατά την έκρηξη σκόνης.

Παρά τις μεγάλες δυνατότητες της Υπολογιστικής Ρευστοδυναμικής, η ανάπτυξη απλουστευμένων μεθόδων εξακολουθεί να είναι χρήσιμη, δεδομένου ότι οι εκτιμήσεις είναι γρήγορες και χαμηλού υπολογιστικού κόστους. Συνεπώς, το ροϊκό και το θερμοκρασιακό πεδίο της έκρηξης σκόνης μπορεί να προσομοιωθούν από συνδυασμό των εμπειρικών μαθηματικών συσχετίσεων που δίνονται στο 1<sup>ο</sup> Κεφάλαιο υπό την προϋπόθεση ότι βασίστηκαν στις ίδιες παραδοχές με εκείνες του ανεπτυγμένου υπολογιστικού μοντέλου. Επειδή τα μοντέλα των χημικών αντιδράσεων δεν είναι δυνατόν να συμπεριληφθούν σε μια απλουστευμένη μέθοδο, προτείνεται η παρακάτω εξίσωση για τον ρυθμό της καιόμενης μάζας των σωματιδίων:

$$b = \varepsilon \left( \frac{p}{p_{atm}} \right)^n \quad (5-6)$$

όπου  $\varepsilon$  και  $n$  είναι σταθερές. Βάσει της εξίσωσης αυτής, ο ρυθμός παραγωγής αερίων από τα σωματίδια δίνεται από την σχέση:

$$\dot{m}_{gp} = \dot{b} A_s \quad (5-7)$$

όπου  $A_s$  είναι η ολική επιφάνεια των σωματιδίων που περιέχονται σε στοιχειώδη όγκο ελέγχου. Για σφαιρικά σωματίδια, η επιφάνεια  $A_s$  δίνεται από τη σχέση:

$$A_s = 6R_p V / [D_o (R_p/R_p^*)^{1/3}] \quad (5-8)$$

Όπου ο όρος  $R_p$  είναι το κλάσμα όγκου της στερεής φάσης και ο όρος  $R_p^*$  το κλάσμα όγκου της στερεής φάσης που έχει προκύψει από τη «μέθοδο σκιάς».

Από την σύγκριση των αποτελεσμάτων του υπολογιστικού μοντέλου και της προτεινόμενης απλουστευμένης μεθόδου θα προκύψουν χρήσιμα συμπεράσματα τόσο για το αν οι εμπειρικές συσχετίσεις προσομοιώνουν ικανοποιητικά το ροϊκό και το θερμοκρασιακό πεδίο της έκρηξης, όσο και για το αν η απλουστευμένη μέθοδος μπορεί να προσομοιώσει ικανοποιητικά μια μη μόνιμη αντιδρώσα ροή, όπως είναι αυτή της έκρηξης σκόνης.

*“There remains much to be done  
before dust explosions are  
adequately understood”*

*Bardon & Fletcher*

## Παράρτημα

ΕΝΟΤΗΤΕΣ		
E-1	<i>Βιβλιογραφία</i> .....	71
E-2	<i>Ορολογία</i> .....	75

**Ενότητα Πρώτη****Βιβλιογραφία**

- [1] R. Eckoff, *Dust Explosions in the Process Industries*, 3rd ed., USA: Gulf Professional Publishing, 2003.
- [2] S. A. Tasneem Abbasi, «Dust explosions - Cases, causes, consequences, and control,» *Journal of Hazardous Materials*, τόμ. 140, pp. 7 - 44, 2007.
- [3] R. Shoeff, «[http://www.oznet.ksu.edu/pr\\_hitspubs/Dust\\_Exp.htm](http://www.oznet.ksu.edu/pr_hitspubs/Dust_Exp.htm),» 2006. [Ηλεκτρονικό].
- [4] J. M. T. & B. Q. Geng, «Blast wave clearing behavior for positive and negative phases.,» *Journal of Loss Prevention in the Process Industries*, τόμ. 37, p. 143–151, 2015.
- [5] G. & D. S. Ciccarelli, «Flame acceleration and transition to detonation in ducts.,» *Progress in Energy and Combustion Science*, τόμ. 34, αρ. 4, pp. 449 - 550, 2008.
- [6] K. Palmer, *Dust explosions and Fires*, Springer US, 1976.
- [7] L. Medard, «Accidental Explosions: Physical and chemical properties,» *Halsted Press*, τόμ. 1, 1989.
- [8] C. a. F. V. Gomez, «Ignition and combustion of single coal and char particles: A,» *Fuel*, τόμ. 64, αρ. 4, pp. 558-563, 1985.
- [9] V. A. D. B. a. G. R. Di Sarli, «The Role of the Combustion Submodel for,» *CHEMICAL ENGINEERING*, τόμ. 26, 2012.

- [10] G. v. E. B. Lewis, «Combustion, Flames and Explosions of Gases,» *Academic Press, New York*, pp. 367 - 381, 1961.
- [11] K. C. M. Hertzberg, «Introduction of dust explosions, in: Proceedings of the Industrial Dust Explosions,» West Conshohocken, American Society of Testing and Materials, 1987, pp. 5 - 32.
- [12] K. L. Cashdollar, «Overview of dust explosibility characteristics,» *Journal of Loss Prevention in the process industries*, τόμ. 13, pp. 183 - 199, 2000.
- [13] G. L. W. Zhen, «Determination of Dust Dispersion Induced Turbulence and its Influence on Dust Explosions,» *Combustion Science and Technology*, pp. 113-114, 1996.
- [14] W. Bartknecht, «Brenngas-und Staubexplosionen,» *Koblenz Bundesinstitut für Arbeitsschutz, Forschungsbericht F45, Federal Republic of Germany,*, 1987.
- [15] W. Bartknecht, «Explosionen, Ablauf und Schutzmassnahmen,» *Springer-Verlag*, 1981.
- [16] N. 68, Guide for Venting of Daflagrations, National Fire Protection Association, 1998.
- [17] W. Bartknecht, «Dust Explosions: Course, Prevention, Protection,» *Springer, Berlin*, 1989.
- [18] W. Wiemann, «Influence of temperature and pressure on the explosion characteristics of dust/air and dust/air/inert gas mixtures,» σε *Proceedings of the Industrial Dust Explosions, STP 958*, West Conshohocken, PA, American Society for Testing and Materials, 1987, pp. 33 - 44.
- [19] I. Z. K. C. M. Hertzberg, «Volatility model for coal dust flame propagation and extinguishment,» σε *Proceedings of the 21st Symposium (International) on Combustion*, Pittsburgh, The Combustion Institute, 1988, pp. 325 - 333.
- [20] H. L. C.J. Lea, «A Review of the State-of-the-Art in Gas Explosion Modelling,» *Health and Safety Laboratory, HSL/02*, 2002.
- [21] G. L. J. Gummer, «Ignitions of explosive dust clouds by smouldering and flaming agglomerates,» *J. Loss Prevent, Process Ind.*, τόμ. 16, pp. 27 - 32, 2003.
- [22] P. A. a. H. Hottel, *Ind. Chem. Eng.*, τόμ. 44, 1952.



- [23] T. Tanaka, «Theoretical Approach to Dust Explosion,» *KONA*, 1983.
- [24] T. Skjold, «Review of the DESC project,» *Journal of Loss Prevention in the Process Industries*, τόμ. 20, αρ. 4-6, pp. 291-302, 2007.
- [25] T. v. W. K. H. O. & E. R. Skjold, «Modelling of vented dust explosions – empirical foundation and prospects for future validation of CFD codes,» 23–25 November 2004, pp. 838-850.
- [26] C. G., «A two-zone model and a distributed-parameters model of dust explosions in closed vessels,» *Archivum Combustionis*, τόμ. 9, pp. 79-94.
- [27] K. L. T. D. P. L. D. O. Callé S., «Influence of the size distribution and concentration on wood dust explosion: Experiments and reaction modeling,» *Powder Technology*, τόμ. 157, pp. 144-148, 2005.
- [28] R. P. Di Benedetto A., «Thermo-kinetic modelling of dust explosions,» *Journal of Loss Prevention in the Process Industries*, τόμ. 20, αρ. 4-6, pp. 303-309, 2007a.
- [29] Θ. Ξενίδου, «Το λογισμικό Phoenics, υποστηρικτικό υλικό του μαθήματος "Μέθοδος πεπερασμένων διαφροών και όγκων ελέγχου",» ΕΜΠ, Αθήνα, 2010.
- [30] M. N.C., «Modelling of two phase flow and combustion of granular propellants,» *International Journal of Multiphase Flow*, τόμ. 12, αρ. 6, pp. 913 - 933, 1986.
- [31] S. D.B., «Numerical Computation of Multi - Phase Fluid Flow and Heat Transfer,» σε C. Taylor (Ed.), *Recent Advances in Numerical methods in Fluids*, Pineridge Press, 1980, pp. 139 - 168.
- [32] M. N.C., «Computer simulation of turbulent fluid flow in chemical reactors,» *Adv. Eng. Software*, τόμ. 5, αρ. 1, pp. 32 - 38, 1983.
- [33] PHOENICS, POLIS Encyclopaedia Index: Convergence Monitoring and Control, London, UK: CHAM, 2008.
- [34] L. B. a. S. D.B., «The numerical computation of turbulent flows,» *Computer methods in Applied Mechanics and Engineering*, τόμ. 3, αρ. 2, pp. 269 - 289, 1974.

- [35] V. Yakhot, «Propagation Velocity of Premixed Turbulent Flames,» *Combustion Science and Technology*, τόμ. 60, αρ. 1-3, pp. 191-214, 1988.
- [36] V. & O. S. Yakhot, «Renormalization group analysis of turbulence. I. Basic theory.,» *Journal of Scientific Computing*, τόμ. 1, αρ. 1, pp. 3 - 51, 1986.
- [37] F. Menter, «Two-equation eddy-viscosity turbulence models for engineering applications.,» *AIAA Journal*, τόμ. 32, αρ. 8, pp. 1598-1605, 1994.
- [38] D. Wilcox, «Formulation of the k- $\omega$  Turbulence Model Revisited.,» *AIAA Journal*, τόμ. 46, αρ. 11, pp. 2823-2838, 2008.
- [39] B. R. G. & R. W. Launder, «Progress in the development of a Reynolds-stress turbulence closure,» *Journal of Fluid Mechanics*, τόμ. 68, αρ. 3, p. 537, 1975.
- [40] K. Petersen, Etude experimentale et numerique des ecoulements diphasiques dans les reacteurs chimiques, PhD thesis, Lyon: L'Universite Claude Bernard, 1992.
- [41] P. S.B., Turbulent flows, Cambridge University Press, 2000.
- [42] G. H. M. S. C. & Z. T. Erlebacher, «Toward the large eddy simulation of compressible turbulent flows,» *Jouranl of Fluid Mechanics*, τόμ. 238, αρ. 1, p. 155, 1992.
- [43] S. D.B., IPSA, London: Imperial College, 1981.
- [44] L. Q. & J. Xu, «Detailed numerical simulations of flame propagations coal - dust clouds,» σε *Combustion Theory and Modelling* , West Lafayette, Taylor & Francis, 2012, pp. 747 - 773.

## Ενότητα Δεύτερη

### Ορολογία

Ανάφλεξη .....	Ignition
Έκρηξη «ελεύθερου» περιβάλλοντος .....	Unconfined explosion
Επιταχυνόμενη έκρηξη .....	Deflagration
Κλάσμα όγκου .....	Volume fraction
Κλειστή επιφάνεια νέφους σκόνης .....	Confinement
Κυβικός νόμος .....	Cubic law
Λάμψη φωτιάς .....	Flash fire
Μοντέλο προσομοίωσης μεγάλων δινών .....	Large eddy simulation
Μοντέλο τάσεων Reynolds .....	Reynolds stress model
Παράγοντας σχήματος .....	View factor
Πρότυπη καμπύλη οπισθέλκουσας .....	Standard drag curve
Πρότυπο μοντέλο $k-\varepsilon$ .....	Standard model $k-\varepsilon$
Συντελεστή επέκτασης .....	Expansion factor
Σύνθετο μοντέλο $k-\omega$ .....	Shear stress transport model
Τυρβώδες μοντέλο .....	Turbulent model
Υπερηχητική έκρηξη .....	Detonation